

R. 12,396

T.S.-208

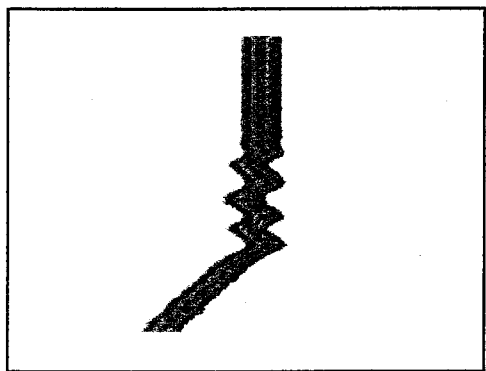
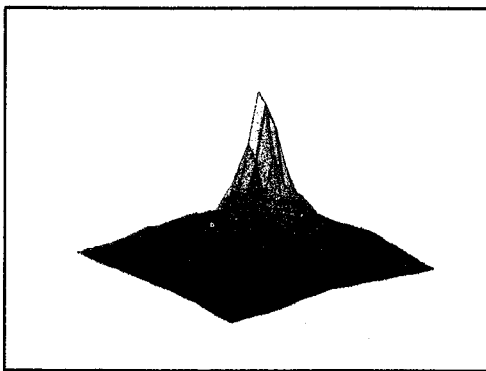


**Universidad de Sevilla**

*Facultad de Física*

Departamento de Física de la  
Materia Condensada

# Localización y Transferencia de Energía en Redes Anarmónicas No Homogéneas



## Tesis Doctoral



UNIVERSIDAD DE SEVILLA



600066034

*Jesús Cuevas Maraver*

Sevilla, Febrero de 2003

129374082



T.S.- 208

Queda registrada esta Tesis Doctoral  
el folio 024 número 451 del libro  
correspondiente.  
Sevilla, 16-OCT-2002.

El Jefe del Negociado de Tesis,

*Rosa María*

Tesis doctoral **Localización y transferencia de energía en redes anar-  
mónicas no homogéneas**, presentada por **Jesús Cuevas Maraver**, y corres-  
pondiente al programa de doctorado **Física**.

Esta tesis ha sido dirigida por:

**Prof. Dr. D. Juan Francisco Rodríguez Archilla**, Catedrático de Escuela  
Universitaria del Área de Física Aplicada, Departamento de Física Aplicada  
I de la Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática de la Universidad  
de Sevilla.

**Prof. Dr. D. Francisco Romero Romero**, Profesor Titular del Área de Física  
Teórica, Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Facul-  
tad de Física de la Universidad de Sevilla.

Sevilla, 10 de Octubre de 2002

Fdo.:

*J. Archilla*

Fdo.:

*Jesús Cuevas Maraver*

Los directores:  
Juan Francisco Rodríguez Archilla.  
Francisco Romero Romero.

El doctorando:  
Jesús Cuevas Maraver

*A Conchi*

## *Agradecimientos*

Desde estas líneas quisiera mostrar mi agradecimiento a todas aquellas personas que han hecho posible la presente tesis, haciendo mención especial a los directores de la misma, los profesores Juan Francisco Rodríguez Archilla y Francisco Romero Romero, por haberme introducido en el mundo de la física no lineal y los breathers, y por sus horas de dedicación a la hora de transmitirme sus conocimientos y a revisar el manuscrito de la tesis.

Quisiera también mostrar mi más sincera gratitud al Departamento de Física de la Materia Condensada de la Universidad de Sevilla, y en especial al profesor D. Arturo Domínguez Rodríguez, por haberse ofrecido para ser tutor de mi tesis, y al director del departamento D. Manuel Jiménez Melendo, por la ayuda y el interés prestado para la realización de los trámites para la presentación de la presente tesis.

También quisiera agradecer al resto de mis compañeros en el Grupo de Física No Lineal (Faustino Palmero, Bernardo Sánchez, Niurka Rodríguez y Azucena Álvarez) los ratos agradables que me ha proporcionado su compañía, así como su apoyo y colaboración a la hora de redactar los artículos que constituyen la base de la presente tesis. Aprovecho para agradecer a Fabián Frutos Rayego, director del Departamento de Física Aplicada I, las facilidades para la investigación que me ha proporcionado en la Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática.

No debería olvidar en estas líneas a personas externas a mi entorno que me han ayudado en ciertos aspectos de la presente tesis. Ellos son Antonio Márquez, Peter Christiansen, George Tsironis, Jacques-Alexandre Sepulchre, Michael Hörnquist, Magnus Johansson y Panayotis Kevrekidis. También quisiera agradecer a Yuri Gaididei y Robert MacKay su estímulo para estudiar, respectivamente, la interacción dipolar en el ADN y los sistemas desordenados.

Pero el mayor agradecimiento de todos se lo debo a mi familia, en especial a mis padres, y a mi novia. Gracias de verdad por todo el apoyo que me habéis dado durante estos años y, sobre todo, a ti, Conchi, por el amor que nos une. Sin él y sin tu insistencia, nunca podría haber realizado esta tesis.

Finalmente, quisiera agradecer a la Junta de Andalucía la concesión de una beca de Formación de Personal Docente e Investigador.

# Índice general

1.. <i>Introducción general</i> . . . . .	1
2.. <i>Breathers discretos. Existencia</i> . . . . .	7
2.1. <i>Introducción</i> . . . . .	7
2.2. <i>Redes anarmónicas</i> . . . . .	7
2.3. <i>Teorema de existencia de MacKay–Aubry</i> . . . . .	9
2.4. <i>Caracterización de los modos intrínsecos localizados</i> . . . . .	10
2.5. <i>Análisis de colas</i> . . . . .	10
2.5.1. <i>Relación de dispersión de los fonones</i> . . . . .	11
2.5.2. <i>Decaimiento de las colas y patrones de vibración</i> . . . . .	12
2.6. <i>Breve comentario sobre breathers en redes FPU</i> . . . . .	13
3.. <i>Breathers discretos. Métodos de cálculo</i> . . . . .	15
3.1. <i>Introducción</i> . . . . .	15
3.2. <i>El método de Newton</i> . . . . .	16
3.3. <i>El método en el espacio de Fourier</i> . . . . .	17
3.3.1. <i>Potencial de interacción armónico</i> . . . . .	17
3.3.2. <i>Potencial de interacción no armónico</i> . . . . .	20
3.4. <i>Sistemas disipativos</i> . . . . .	20
3.4.1. <i>Introducción</i> . . . . .	20
3.4.2. <i>Ecuaciones de movimiento en el espacio de Fourier</i> . . . . .	21
3.5. <i>Ejemplos de breathers</i> . . . . .	22
3.5.1. <i>Breathers en sistemas hamiltonianos</i> . . . . .	22
3.5.2. <i>Breathers en sistemas disipativos</i> . . . . .	23
4.. <i>Estabilidad</i> . . . . .	29
4.1. <i>Introducción</i> . . . . .	29
4.2. <i>Ecuaciones dinámicas perturbadas. Operador de Newton</i> . . . . .	30
4.3. <i>Análisis de Floquet</i> . . . . .	32
4.3.1. <i>El operador de Floquet. Autovalores y autofunciones</i> . . . . .	32
4.3.2. <i>Signatura de Krein</i> . . . . .	32

4.3.3.	Bifurcaciones . . . . .	34
4.4.	Estabilidad lineal de los breathers . . . . .	35
4.4.1.	Análisis de estabilidad lineal en el límite anti-continuo . . . . .	35
4.4.2.	Efecto del acoplamiento en la estabilidad . . . . .	38
4.5.	Teoría de bandas de Aubry . . . . .	51
4.5.1.	Introducción . . . . .	51
4.5.2.	Estructura de bandas de un breather . . . . .	52
4.5.3.	Relación entre las bandas de Aubry y los autovalores del jacobiano . . . . .	54
4.6.	Teorema de Estabilidad de Multibreathers . . . . .	56
4.6.1.	Formulación del Teorema . . . . .	56
4.6.2.	Aplicación del Teorema . . . . .	58
4.7.	Estabilidad en sistemas disipativos . . . . .	62
5..	<i>Estabilidad de dark breathers</i> . . . . .	65
5.1.	Introducción . . . . .	65
5.2.	Estabilidad de dark breathers en sistemas hamiltonianos . . . . .	65
5.2.1.	Presentación de las ecuaciones . . . . .	65
5.2.2.	Análisis de estabilidad . . . . .	66
5.3.	Aplicación del Teorema de Estabilidad de Multibreathers . . . . .	70
5.3.1.	Phonobreathers . . . . .	70
5.3.2.	Dark breathers . . . . .	72
5.4.	Efectos de tamaño finito en la estabilidad de dark breathers . . . . .	75
5.5.	Estabilidad de dark breathers en sistemas disipativos . . . . .	76
5.6.	Conclusiones . . . . .	79
5.6.1.	Sistemas hamiltonianos . . . . .	79
5.6.2.	Predicciones del Teorema de Estabilidad de Multibreathers . . . . .	79
5.6.3.	Sistemas disipativos . . . . .	80
6..	<i>Sistemas armónicos desordenados. Localización Anderson</i> . . . . .	81
6.1.	Localización Anderson electrónica . . . . .	81
6.2.	Espectro de un operador hermítico . . . . .	82
6.3.	Localización Anderson electrónica en sistemas discretos . . . . .	83
6.4.	Localización Anderson en redes de osciladores . . . . .	83
6.5.	Algunos ejemplos de modos Anderson . . . . .	84
6.5.1.	Desorden y localización. Definición cuantitativa . . . . .	85
6.5.2.	Distribución aleatoria discreta . . . . .	86
6.5.3.	Distribución aleatoria uniforme . . . . .	86
6.5.4.	Distribución aleatoria gaussiana . . . . .	86

---

7.. <i>Redes anarmónicas desordenadas</i> . . . . .	95
7.1. Introducción . . . . .	95
7.2. Aproximaciones KA y AMM . . . . .	96
7.2.1. Aproximación KA . . . . .	96
7.2.2. Aproximación AMM . . . . .	97
7.2.3. Algunos comentarios . . . . .	98
7.3. Continuación de los modos localizados a acción constante . . . . .	99
7.4. Aplicación de la aproximación AMM a sistemas monodimensionales . . . . .	100
7.5. Aplicación de la aproximación AMM a sistemas bidimensionales . . . . .	101
7.6. Breve comentario sobre la estabilidad de las ramas . . . . .	102
7.7. Discusión . . . . .	102
7.8. Conclusiones . . . . .	103
8.. <i>Breathers móviles</i> . . . . .	111
8.1. Una definición y antecedentes históricos . . . . .	111
8.1.1. Sistemas continuos . . . . .	111
8.1.2. Sistemas discretos . . . . .	111
8.1.3. Concepto de breather móvil . . . . .	112
8.2. El método del modo marginal . . . . .	113
8.2.1. Conceptos previos . . . . .	113
8.2.2. El modo de pinning . . . . .	114
8.2.3. El gradiente discreto . . . . .	115
8.2.4. El breather intermediario . . . . .	117
8.2.5. Breathers móviles exactos . . . . .	117
8.3. Aplicación del método del modo marginal . . . . .	118
8.3.1. Conceptos útiles: centro de energía y masa efectiva . . . . .	119
8.3.2. Ejemplos de breathers móviles . . . . .	120
8.4. Dark breathers móviles . . . . .	121
8.5. Breathers móviles en sistemas disipativos . . . . .	124
9.. <i>Interacción de breathers móviles con impurezas</i> . . . . .	127
9.1. Introducción . . . . .	127
9.2. Inhomogeneidad en el pozo de potencial. Potencial de Morse . . . . .	128
9.2.1. El modelo . . . . .	128
9.2.2. Breathers móviles . . . . .	128
9.2.3. Barrera de potencial . . . . .	129
9.2.4. Soluciones estacionarias . . . . .	134
9.3. Hipótesis de Atrapamiento . . . . .	137

9.4. Inhomogeneidad en el pozo de potencial. Potencial $\phi^4$ duro . . . . .	139
9.5. Inhomogeneidad en la masa . . . . .	139
9.6. Inhomogeneidad en los acoplamientos . . . . .	143
9.7. Comparación con el caso continuo y el discreto con baja no linealidad	146
9.7.1. Caso continuo . . . . .	146
9.7.2. Caso discreto con baja no linealidad . . . . .	146
9.8. Interacción con la impureza en sistemas disipativos . . . . .	147
9.9. Conclusiones . . . . .	148
10. <i>Breathers</i> y ADN . . . . .	153
10.1. Introducción . . . . .	153
10.2. El ADN. Estructura y funcionamiento . . . . .	153
10.2.1. La estructura del ADN . . . . .	153
10.2.2. Funcionamiento del ADN. Transcripción . . . . .	155
10.3. Modelos dinámicos de ADN . . . . .	156
10.3.1. Introducción . . . . .	156
10.3.2. El modelo de Peyrard–Bishop . . . . .	157
10.3.3. Otros modelos . . . . .	159
10.4. Localización en ADN . . . . .	160
10.4.1. Introducción . . . . .	160
10.4.2. <i>Breathers</i> en el modelo de Peyrard–Bishop . . . . .	160
10.4.3. Valores de los parámetros . . . . .	161
11. <i>El modelo de ADN con interacción dipolar</i> . . . . .	163
11.1. Introducción: la interacción dipolar en el ADN . . . . .	163
11.2. El modelo con interacción dipolar en cadenas planas. . . . .	164
11.2.1. El hamiltoniano dipolar . . . . .	164
11.2.2. Valores numéricos . . . . .	166
11.3. Modelo con interacción dipolar en cadenas curvadas . . . . .	167
12. <i>Breathers</i> en el modelo de ADN con interacción dipolar . . . . .	169
12.1. Introducción. Ecuaciones dinámicas . . . . .	169
12.2. <i>Breathers</i> estacionarios . . . . .	170
12.2.1. Modos lineales . . . . .	170
12.2.2. Decaimiento de <i>breathers</i> con $C = 0$ . Función de Green re-	
reticular . . . . .	170
12.2.3. Patrones de vibración . . . . .	173
12.2.4. Algunos comentarios acerca del caso $C \neq 0$ . . . . .	176
12.3. Existencia de <i>breathers</i> estacionarios y móviles. Bifurcaciones . . . . .	177



12.3.1. Tipos de bifurcaciones . . . . .	177
12.3.2. Bifurcaciones con sólo interacción atractiva de primeros vecinos ( $J = 0$ ) . . . . .	178
12.3.3. Bifurcaciones con sólo interacción repulsiva de largo alcance ( $C = 0$ ) . . . . .	178
12.3.4. Caso general . . . . .	179
12.3.5. Discusión . . . . .	180
12.4. Breathers móviles . . . . .	181
12.5. Aplicación al ADN . . . . .	183
12.6. Breathers en ADN curvado . . . . .	185
12.7. Modelos curvados de hélices $\alpha$ en proteínas . . . . .	187
12.8. Conclusiones . . . . .	189
13. Conclusiones . . . . .	193
Apéndice . . . . .	195
A.. Algunas demostraciones necesarias para el estudio de la estabilidad lineal . . . . .	197
A.1. Propiedades del operador de Newton . . . . .	197
A.1.1. Propiedades de conmutación . . . . .	197
A.1.2. Hermiticidad del operador de Newton . . . . .	199
A.2. El operador de Floquet . . . . .	204
A.2.1. Definición . . . . .	204
A.2.2. El operador de Floquet es simpléctico. Consecuencias . . . . .	204
A.3. Forma de las autofunciones con $\theta$ real . . . . .	206
A.4. Modos de fase y crecimiento . . . . .	208
A.4.1. El modo de fase . . . . .	208
A.4.2. El modo de crecimiento . . . . .	209
A.5. Autofunciones y autovalores en $\theta = 0$ . . . . .	210
A.5.1. Autofunciones para cualquier valor de $\theta$ . . . . .	210
A.5.2. Límite cuando $\theta \rightarrow 0$ ( $\omega \rightarrow 0$ ) . . . . .	211
A.5.3. Modos marginales . . . . .	215
A.5.4. Pendiente de las bandas en $\theta = 0$ . . . . .	215
A.6. Signatura de Krein en el límite anti-continuo . . . . .	216
B.. Demostración del Teorema de Estabilidad de Multibreathers (TEM) . . . . .	219
B.1. Introducción a la teoría de perturbaciones degenerada. Notación de Dirac . . . . .	219
B.2. Ecuaciones en el límite anti-continuo . . . . .	220

B.3. Efecto del acoplamiento . . . . .	221
B.3.1. Osciladores en fase . . . . .	221
B.3.2. Osciladores en fase y anti-fase . . . . .	223
B.4. Cálculo del parámetro de simetría $\gamma$ para un potencial de Morse . . . . .	225
B.5. Algunas consideraciones . . . . .	226
B.5.1. Elementos diagonales . . . . .	226
B.5.2. Modo de fase global . . . . .	226

# 1. Introducción general

Aunque a finales del siglo XIX, Poincaré, junto con otros científicos, sentó las bases teóricas de la física no lineal, no fue hasta la mitad del siglo XX cuando la comunidad científica prestó más atención a esta nueva rama de la física. Este cambio fue posible debido al desarrollo de nuevos métodos analíticos y topológicos, junto con la aparición de los computadores, los cuales permiten integrar numéricamente ecuaciones que no tienen solución analítica y realizar de manera eficiente simulaciones de las ecuaciones dinámicas, bajo diferentes condiciones de contorno.

Entre los sistemas que pueden describirse mediante ecuaciones no lineales están las redes de osciladores. El estudio de éstas tiene una gran trascendencia pues existen una gran cantidad de sistemas microscópicos que pueden modelarse como redes. Ejemplos de ellos son los cristales y las biomoléculas. Éstas redes también pueden corresponderse con sistemas macroscópicos, como, por ejemplo, los dispositivos formados por uniones Josephson acopladas, los cuales se piensa que pueden ser un medio para el desarrollo de hipercomputadores.

Un estudio significativo en redes de osciladores no lineales fue el realizado por Fermi, Pasta y Ulam en los años cincuenta. Se observó que la relajación al equilibrio en estos sistemas sigue un comportamiento anómalo [79]. A finales de los ochenta, Takěno y Sievers [179] descubrieron la existencia de modos de vibración localizados, actualmente llamados *breathers*, cuya existencia permite la localización de energía. Hay que hacer énfasis en el hecho de que los modos localizados aparecen en estos sistemas debido a la conjunción de dos factores: la no linealidad de las interacciones y la naturaleza discreta de la red de osciladores.

Con anterioridad al estudio de la dinámica no lineal, Lifshitz estudió el efecto de las impurezas en redes armónicas [128], concluyendo que pueden existir modos de vibración localizados, llamados *modos locales*, debidos a la existencia de inhomogeneidades. En 1958, Anderson descubrió la ausencia de difusión en sistemas desordenados [9], cuyo origen radica en la localización de los modos de vibración, llamados en este *modos Anderson*.

Durante la pasada década se han realizado un gran número de trabajos que tratan de establecer los fundamentos de la localización en redes no lineales, tanto homogéneas como no homogéneas. Un punto clave en este desarrollo es el teorema de MacKay–Aubry, que establece las condiciones necesarias para la existencia de *breathers* [132]. También habría que destacar el descubrimiento a principios de los noventa, por Takeno y Hori [182], de modos localizados que se mueven a lo largo de una red. Estos modos, llamados *breathers móviles*, se han propuesto como

mecanismo para la transferencia de energía vibracional en muchos sistemas como, por ejemplo, las biomoléculas.

Hasta la fecha se conoce poco sobre las aplicaciones experimentales de los breathers. Muy recientemente, se han observado breathers en un material llamado PtCl [181] y en cadenas de péndulos magnéticos acoplados [167]. También se han generado breathers en redes de uniones Josephson por grupos de Zaragoza (en colaboración con el MIT) y de Erlangen [34, 188, 88, 89]. También se han propuesto los breathers móviles como una explicación de trazas que aparecen en la mica moscovita [140, 144] y como posible mecanismo de la superconductividad a alta temperatura [146]. Basándose en los estudios de breathers en sistemas térmicos se ha propuesto un nuevo dispositivo: el *rectificador térmico* [185], el cual permite, mediante el ajuste de parámetros del sistema, inducir una transición entre aislante y conductor térmico. También se ha propuesto un mecanismo para la transferencia dirigida de electrones, el cual está basado en la posibilidad de que un breather móvil oscile periódicamente entre dos sitios [23, 124]. Este mecanismo podría jugar un papel crucial en la fotosíntesis.

### ***Desarrollo y resultados de la tesis***

La presente tesis puede considerarse constituida por cuatro bloques diferenciados. El primero trata sobre la localización de energía en redes anarmónicas homogéneas. Se exponen los fundamentos teóricos para la existencia de breathers estacionarios junto con los métodos de cálculo. También se aborda el problema de la estabilidad lineal, y se realiza una recopilación de los resultados más importantes, que se encuentran dispersos por la literatura. Algunos de ellos, aunque se suponen conocidos, no han sido encontrados por el autor y han sido deducidos por él de forma independiente, por lo que pueden considerarse también como una aportación de la tesis. Como resultado de los estudios de estabilidad, se ha formulado un nuevo teorema referente a la estabilidad de multibreathers. El contenido de este análisis se aplica al estudio de las propiedades de estabilidad de los denominados dark breathers, tanto en sistemas hamiltonianos como disipativos.

El segundo bloque se refiere a los fenómenos de localización de energía en redes anarmónicas no homogéneas. El estudio se realiza mediante un análisis de los modos de vibración de sistemas desordenados. En concreto, se analizan los efectos que se producen cuando se varía el tipo de desorden, el modo de acoplamiento de las partículas y la dimensión en la localización de los modos de vibración en redes armónicas desordenadas. Utilizando algunos de estos resultados, se estudia la localización en sistemas anarmónicos desordenados. Este estudio tiene dos vertientes distintas: la primera consiste en una ampliación de los resultados ya existentes para redes monodimensionales obtenidos por Archilla, MacKay y Marín [14], enfocándolo en la conexión de los modos Anderson de máxima y mínima frecuencia, y se obtiene que estos modos están conectados entre sí y con un dark breather. La segunda vertiente consiste en el estudio de redes bidimensionales con

objeto de comprobar si los tipos de bifurcaciones que surgen en la conexión entre breathers y modos Anderson es la misma que en los sistemas monodimensionales, obteniéndose un resultado afirmativo. Éste no es trivial, pues la localización en redes desordenadas depende de la dimensión del sistema [92].

La transferencia de energía vibracional a lo largo de una red con impurezas es el objeto de estudio del tercer bloque. Para ello, se hace una introducción sobre el concepto de breather móvil en sistemas homogéneos, sus métodos de obtención y sus propiedades, comprobándose la eficiencia de los distintos métodos y los efectos que producen al variar los diversos parámetros sobre la movilidad de breathers. Estos resultados se aplican para el estudio de la interacción de breathers móviles con impurezas tanto en sistemas hamiltonianos como disipativos. Este estudio consiste básicamente en la observación numérica de los diferentes comportamientos que surgen al variar la forma de dicha interacción entre los breathers móviles y las impurezas, tratando de explicarlo mediante un análisis de las soluciones estáticas lineales y no lineales. Como resultado de este estudio se formula una hipótesis sobre el atrapamiento de breathers móviles cuando interactúan con impurezas, esto es, se establecen las condiciones necesarias para que un breather móvil pueda ser atrapado por una impureza. Esta hipótesis se ha comprobado con múltiples implementaciones de la impureza y distintos potenciales.

Todos los resultados anteriores se pueden aplicar al estudio de modelos dinámicos del ADN, y, en particular, para determinar las propiedades de localización y transferencia de energía en esta molécula. El último bloque se dedica a estudios sobre el ADN. Para ello, se exponen una serie de conceptos previos sobre la estructura y funcionamiento del ADN, describiendo a continuación distintos modelos dinámicos de la molécula. Dentro de ellos, se hace especial énfasis al modelo de Peyrard y Bishop [158], el cual sirve para explicar, mediante la presencia de breathers, fenómenos de desnaturalización y transferencia de energía. Este modelo sólo incluye interacciones de próximos vecinos debidas al apilamiento de los nucleótidos. Existe, además, otro tipo de interacción muy fácil de modelar. Ésta es debida al momento dipolar finito de los puentes de hidrógeno que mantienen unidos los pares de bases. La interacción, que es de largo alcance, está afectada por la geometría de la molécula, de forma que ésta se introduce como una no homogeneidad del sistema. En base a ello, se propone un nuevo modelo para la dinámica del ADN, el cual incluye dos nuevas características: interacción dipolar y geometría. Una vez obtenidas las ecuaciones del modelo, se estudian las propiedades tanto de los breathers estacionarios como móviles, haciendo especial énfasis en el efecto de la interacción dipolar en cadenas rectas, obteniéndose que esta interacción es un obstáculo para la transferencia de energía. Usando los resultados de este análisis, se estudia el efecto de la curvatura de la molécula en la movilidad de los breathers, obteniéndose que existe un valor umbral de la curvatura a partir del cual el breather móvil es reflejado cuando alcanza la región de máxima curvatura, de forma que éste se comporta como una partícula libre que interactúa con una barrera de potencial en la región curvada. Además, se observa la no existencia de atrapamiento, un resultado que está de acuerdo con los resultados de la hipótesis

formulada para la interacción entre un breather móvil y una impureza. Finalmente, se comprueba que estos resultados son cualitativamente similares a los que se obtienen en modelos curvados de hélices  $\alpha$  de proteínas.

---

**Artículos publicados por el autor relacionados con la tesis**

[I] J Cuevas, JFR Archilla, F Palmero y F Romero. Numerical study of two-dimensional disordered Klein–Gordon lattices with cubic soft anharmonicity. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34:L1–L10, 2001.

[II] J Cuevas, JFR Archilla, YuB Gaididei y FR Romero. Moving breathers in a DNA model with competing short- and long-range dispersive interactions. *Physica D*, 163:106, 2002.

[III] J Cuevas, F Palmero, JFR Archilla y FR Romero. Moving breathers in a bent DNA model. *Physics Letters A*, 299:221, 2002.

[IV] A Álvarez, JFR Archilla, J Cuevas y FR Romero. Dark breathers in Klein–Gordon lattices. Band analysis of their stability properties. *New Journal of Physics*, 4:72, 2002.

[V] JFR Archilla, YuB Gaididei, PL Christiansen y J Cuevas. Stationary and moving breathers in a simplified model of curved alpha–helix proteins. Pendiente de publicación en *Journal of Physics A: Mathematical and General*. (ArXiv:nlin.PS/0206050).

[VI] J Cuevas, F Palmero, JFR Archilla y FR Romero. Moving discrete breathers in a Klein–Gordon chain with an impurity. Pendiente de publicación en *Journal of Physics A: Mathematical and General*. (ArXiv:nlin.PS/0203026).

[VII] JFR Archilla, J Cuevas, B Sánchez-Rey y A Álvarez. Demonstration of the stability or instability of multibreathers at low coupling. Enviado a *Physica D*. (ArXiv:nlin.PS/0208014).

## 2. Breathers discretos. Existencia

### 2.1. Introducción

Previamente al estudio de la localización de energía en sistemas anarmónicos no homogéneos es necesario considerar las condiciones para las cuales aparece la localización intrínseca en sistemas homogéneos. Para ello, describiremos, en primer lugar, las propiedades vibracionales de las redes armónicas para, y, posteriormente, se hará una comparación con las propiedades de redes anarmónicas.

Toda perturbación en una red armónica se puede expresar como suma de modos normales de vibración [16, 115, 163]. Estos modos, también llamados *fonones*<sup>1</sup>, están extendidos por toda la red. Por ello, cuando se introduce una perturbación, ésta es una combinación lineal de los fonones y, por lo tanto, se dispersa, es decir, no se localiza.

Sin embargo, cuando la red es anarmónica y discreta, ocurren fenómenos totalmente distintos. En concreto, existen modos de vibración localizados junto con los fonones (siempre que se cumplan ciertas condiciones de existencia que expondremos posteriormente en este capítulo). Los modos localizados reciben el nombre de *modos intrínsecos localizados* o *breathers*. Pues bien, una perturbación en la red estará compuesta de breathers y fonones. Si la forma de la perturbación y los valores de los parámetros son adecuados, la energía permanece localizada en la red. El mecanismo responsable de esta forma de localización es diferente a aquellos cuyo origen radica en la existencia de impurezas o desorden [69].

### 2.2. Redes anarmónicas

En el desarrollo de esta tesis se consideren tanto redes hamiltonianas como disipativas. Para redes no disipativas, el hamiltoniano viene dado por:

$$H = \sum_{\vec{n}} \left( \frac{1}{2} \dot{u}_{\vec{n}}^2 + V(u_{\vec{n}}) + C \sum_{\vec{i}} W(u_{\vec{n}}, u_{\vec{n}+\vec{i}}) \right), \quad (2.1)$$

---

<sup>1</sup> En realidad, los fonones son cuasi-partículas que aparecen cuando se hace un estudio cuántico de la dinámica reticular. Sin embargo, durante esta tesis utilizaremos el término *fonón* para referirnos a los modos de vibración lineales por abuso del lenguaje.



donde  $W$  es el potencial de acoplo entre pares de partículas,  $V$  es el llamado *potencial on-site* y representa un posible potencial externo o potenciales internos de las partículas, y  $C$  es un parámetro que da cuenta del grado de acoplamiento entre las mismas. Las coordenadas  $u_{\bar{n}}$  pueden representar diferentes magnitudes, pero nos referiremos a ellas como las posiciones de las partículas.  $\dot{u}_{\bar{n}}$  son los momentos generalizados en un sistema adimensionalizado.

Haciendo uso de las ecuaciones de Hamilton, podemos obtener las ecuaciones dinámicas de la red:

$$\ddot{u}_{\bar{n}} + V'(u_{\bar{n}}) + C \sum_{\bar{i}} W'(u_{\bar{n}}, u_{\bar{n}+\bar{i}}) = 0. \quad (2.2)$$

Se suelen distinguir dos tipos de redes: las denominadas de Fermi-Pasta-Ulam (FPU), que son aquéllas que no poseen potencial on-site, y las de Klein-Gordon (KG), que sí lo poseen. Las primeras deben su nombre a los primeros científicos que las estudiaron [78, 79], mientras que la segunda denominación es debida a que en el límite continuo las ecuaciones dinámicas se convierten en una ecuación de Klein-Gordon no lineal. Todos los resultados de esta tesis han sido obtenidos para redes de tipo Klein-Gordon, así que salvo que se indique lo contrario, nos referiremos a redes de este tipo.

Como comentamos anteriormente, las redes de tipo (2.1) tienen soluciones localizadas (*modos intrínsecos localizados* o *ILMs*<sup>2</sup>). Éstas cuales fueron encontradas en 1988 por Takeno, Sievers y Kisoda [179, 184]. Sin embargo, ya en 1974 Kosevich y Kovalev habían encontrado estos tipos de soluciones en el límite continuo [125] y en 1986 Dolgov [72] había extendido estos resultados hasta el caso discreto. Sin embargo, estos trabajos no recibieron excesiva atención.

Tras la publicación de los trabajos de Takeno *et al*, los ILMs se observaron numéricamente en muchos sistemas tanto de tipo Klein-Gordon como FPU [39, 40, 61, 67, 114, 157, 173, 172, 183]. Una visión histórica sobre el tema se puede encontrar en [87, 137] y una visión actual en [130, 131]. Querriamos destacar, además, el trabajo de Campbell y Peyrard [42], en el cual se muestra que la dinámica de los ILMs es muy parecida a la de los solitones tipo breather del modelo sine-Gordon continuo, de ahí que los ILMs reciban también el nombre de *breathers discretos* o simplemente *breathers*, pues estas soluciones son más genéricas en sistemas discretos que en continuos.

En todos los trabajos mencionados se obtienen soluciones localizadas mediante simulaciones numéricas. Sin embargo, no se sabía si estas soluciones eran exactas. El primer teorema de existencia es debido a Flach en 1994 [81], pero está restringido a redes de tipo FPU con potenciales homogéneos. Ese mismo año aparece la prueba de existencia para redes de tipo Klein-Gordon, formulada por MacKay y Aubry [132], que exponemos a continuación.

<sup>2</sup> Del inglés *Intrinsic Localized Modes*.

### 2.3. Teorema de existencia de MacKay–Aubry

La prueba de existencia de breathers de MacKay–Aubry se basa en el concepto de anti-integrabilidad desarrollado anteriormente por Aubry dentro del modelo de Frenkel–Kontorova [17, 18, 20]. En el caso de redes, la anti-integrabilidad tiene sentido en redes de tipo Klein–Gordon y se plasma en el concepto de *límite anti-continuo* o límite desacoplado. El nombre de límite anti-continuo es debido a que se refiere al caso  $C \rightarrow 0$  en la ecuación (2.1), en contraposición al límite continuo  $C \rightarrow \infty$ .

La demostración de este teorema se encuentra publicada en [132] y demostrada de manera alternativa en [19]. Es esta tesis, vamos a exponer algunas líneas generales del teorema que proporcionan las condiciones necesarias para la existencia de breathers y, además, establecen el fundamento para el cálculo numérico exacto de los mismos, tal como veremos en el Capítulo 3.

Pasemos, por tanto, a exponer el teorema de MacKay–Aubry. Supongamos que la red (2.1) se encuentra en el límite desacoplado, es decir,  $C = 0$ . En ese caso, la red se descompone en una serie de osciladores aislados sometidos a un potencial  $V(x)$ . Consideremos una órbita con frecuencia  $\omega_b$  y sea  $\omega_o$  la frecuencia de pequeñas oscilaciones. El teorema asegura que la solución desacoplada es continuable en la solución acoplada, en virtud del teorema de la función implícita, siempre que se cumplan las siguientes condiciones:

**Condición de anarmonicidad:** Las órbitas de los osciladores aislados sometidos al potencial  $V$  deben cumplir que  $\partial\omega_b/\partial I \neq 0$ , donde  $I = \oint p dq$  es la acción del oscilador.

**Condición de no resonancia:** Las frecuencias de las órbitas de los osciladores aislados ( $\omega_b$ ) deben ser tales que  $n\omega_b \neq \omega_o$  para  $n = 0, 1, 2, \dots$

En resumen, para poder obtener un breather es necesario que el potencial on-site  $V$  sea anarmónico y que ningún múltiplo entero de la frecuencia de la solución coincida con la de algún modo lineal.

El teorema proporciona un método simple para obtener breathers o multibreathers (es decir, soluciones con más de un oscilador excitado). Este método consiste en escoger una órbita con frecuencia  $\omega_b$  para un único oscilador sometido a un potencial anarmónico ( $\omega_b$  se denomina *frecuencia del breather*). A continuación se elige una configuración de osciladores en reposo o vibrando con frecuencia  $\omega_b$ . En el caso de sistemas hamiltonianos y reversibles en el tiempo, se eligen los osciladores excitados de forma que sus fases absolutas sean  $0$  ó  $\pi$ . Entonces, la configuración es continuable como una solución periódica de toda la red con frecuencia  $\omega_b$ .

## 2.4. Caracterización de los modos intrínsecos localizados

Para distinguir entre las distintas soluciones localizadas (es decir, multibreathers), se utiliza un código. Este código se especifica de la forma  $\sigma \equiv \{\sigma_n\}$ , donde  $\sigma_n$  caracteriza el estado inicial de cada oscilador aislado. Así,

- $\sigma_n = 0$  si el  $n$ -ésimo oscilador está en reposo.
- $\sigma_n = 1$  si el  $n$ -ésimo oscilador vibra con fase cero para  $t = 0$ .
- $\sigma_n = -1$  si el  $n$ -ésimo oscilador vibra con fase  $\pi$  para  $t = 0$ .
- $\sigma_n = \pm k$  si el  $n$ -ésimo oscilador vibra con frecuencia  $k\omega_b$ .

El concepto de código se ilustra con los siguientes ejemplos:

- $\sigma = \{\dots 0001000 \dots\}$ : Representa un ILM con un sólo sitio excitado. Es lo que se suele conocer como *1-site breather* (1sB) o breather centrado en un sitio.
- $\sigma = \{\dots, 0001 \pm 100 \dots\}$ : Representa un ILM con un dos sitios adyacentes excitados. Es lo que se suele conocer como *2-site breather* (2sB). Si los osciladores excitados vibran en fase, se conoce a este tipo de multibreather como breather centrado en un enlace.
- $\sigma = \{\dots 111111 \dots\}$ ,  $\sigma = \{\dots 2 \pm 22 \pm 21 \pm 22 \pm 22 \dots\}$  o alguna variante en la que no haya ceros: Representa un ILM con todos los sitios excitados. Se conoce como *phonobreather*. Estos tipo de soluciones se consideran fonones anarmónicos.
- $\sigma = \{\dots, 1110111 \dots\}$ : Representa un ILM con todos los sitios excitados menos uno. Es un ejemplo de lo que se conoce como *dark breather* o breather oscuro.

Si el potencial on-site tiene más de un mínimo, se puede construir un código análogo.

A partir de ahora, cuando utilicemos el término breather nos referiremos a todos los casos, salvo phonobreathers y dark breathers, excepto que se diga lo contrario.

## 2.5. Análisis de colas

Sin necesidad de realizar el cálculo explícito de breathers, se pueden extraer conclusiones sobre ciertas propiedades de los mismos. De momento, vamos a restringir nuestro estudio a sistemas homogéneos monodimensionales con interacción de próximos vecinos y atractiva, es decir:

$$H = \sum_n \left( \frac{1}{2} \dot{u}_n^2 + V(u_n) + C W(u_n - u_{n+1}) \right), \quad (2.3)$$

y las ecuaciones dinámicas son:

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C [W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n-1} - u_n)] = 0. \quad (2.4)$$

En este caso, se demuestra que la amplitud de las coordenadas  $u_n$  disminuye exponencialmente al alejarse del centro del breather <sup>3</sup> [19, 25, 132]. Con esta premisa, un análisis de colas puede servir para calcular aproximadamente la longitud de localización y el patrón de vibración de un breather.

Así, el  $k$ -ésimo coeficiente de Fourier de un breather decaerá aproximadamente de la misma forma que lo hacen sus colas para una frecuencia  $k\omega_b$ . El decaimiento del breather estará dominado por el armónico que lo hace más lentamente, el cual suele corresponderse con  $k = 1$ .

### 2.5.1. Relación de dispersión de los fonones

Las colas del breather oscilan con pequeña amplitud por lo que se pueden suponer que se encuentran en un régimen lineal. En consecuencia, se puede hacer un desarrollo en serie de los potenciales, quedándonos hasta el término de segundo orden (pues se supone que  $V(0) = V'(0) = 0$ ). Así,

$$V(u_n) = \frac{1}{2} \omega_0^2 u_n^2, \quad W(u_n - u_{n+1}) = \frac{1}{2} C (u_n - u_{n+1})^2. \quad (2.5)$$

Con ello, las ecuaciones de movimiento (2.2) se transforman en:

$$\ddot{u}_n + \omega_0^2 u_n + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0. \quad (2.6)$$

La solución a esta ecuación son ondas planas (fonones) de la forma:

$$u_n(t) = u_0 e^{i(qn - \omega_{ph}t)}, \quad (2.7)$$

donde  $\omega_{ph}$  son las frecuencias de vibración de los fonones y  $q$  es el vector de ondas, que será dependiente de las condiciones de contorno de la red. En concreto, si  $N$  es el número de partículas de la red, el vector de ondas toma los valores:

$$q = \begin{cases} \frac{m\pi}{N} & \text{c.c. extremos libres} \\ \frac{2m\pi}{N} & \text{c.c. periódicas} \end{cases}, \quad (2.8)$$

con  $m = 0, \dots, N - 1$ .

<sup>3</sup> Este hecho se observa también en el caso de multibreathers [3].

Introduciendo la expresión (2.7) en las ecuaciones dinámicas linealizadas (2.6) se obtiene la relación de dispersión para los fonones:

$$\omega_{\text{ph}}^2 = \omega_o^2 + 4C \sin^2 \frac{q}{2}. \quad (2.9)$$

Como podemos apreciar, la banda de fonones es óptica (es decir, tiene su límite inferior distinto de cero) y está acotada superiormente, a diferencia de lo que ocurre en sistemas continuos. Es por este motivo por el cual los breathers no son soluciones genéricas en sistemas continuos.

Si  $\omega_o = 0$ , que corresponde a la linealización de una red FPU, la banda es acústica pues  $\omega_{\text{ph}}(q = 0) = 0$ .

### 2.5.2. *Decaimiento de las colas y patrones de vibración*

La relación de dispersión puede prolongarse analíticamente a vectores de ondas complejos,  $q \rightarrow q + i\xi$ , donde  $\xi$  es la inversa de la longitud de localización [81]. Así, los fonones vibrarán de la forma:

$$u_n(t) = u_0 e^{i((q+i\xi)|n| - \omega_{\text{ph}} t)}, \quad (2.10)$$

si suponemos el breather centrado en el sitio  $n = 0$ . Introduciendo esta ecuación en (2.6) obtenemos:

$$-\omega_{\text{ph}}^2 + \omega_o^2 + C(2 - e^{-(-\xi+iq)} - e^{-\xi+iq}) = 0. \quad (2.11)$$

Tomando parte real e imaginaria se tiene:

$$\begin{cases} \omega_{\text{ph}}^2 = \omega_o^2 + 2C(1 - \cos q \cosh \xi) \\ \sin q \sinh \xi = 0 \end{cases} \quad (2.12)$$

De la segunda ecuación se obtiene que una solución localizada ( $\xi \neq 0$ ) tiene vector de ondas  $q = 0$  ó  $q = \pi$ . Esto concuerda con el hecho de que un breather deriva de un fonón de la parte inferior ( $q = 0$ ) o superior ( $q = \pi$ ) de la banda si el sistema es reversible en el tiempo [82]. De la ecuación (2.10) se puede inferir que, si  $q = 0$ , todas las partículas vibran en fase, mientras que si  $q = \pi$ , lo hacen en oposición de fase respecto a su vecino más inmediato. A estos patrones de vibración se les denominarán a partir de ahora *patrón en fase* y *patrón en zigzag*, respectivamente.

En consecuencia, el parámetro de localización  $\xi$ , dependerá del valor de  $q$ . Así,

$$\begin{cases} \cosh \xi = \frac{\omega_o^2 - \omega_{\text{ph}}^2 + 2C}{2C} & \text{si } q = 0, \\ \cosh \xi = \frac{\omega_{\text{ph}}^2 - \omega_o^2 - 2C}{2C} & \text{si } q = \pi \end{cases} \quad (2.13)$$

Como se puede comprobar fácilmente a partir de estas ecuaciones, no se puede tener soluciones con  $\xi \neq 0$  dentro de la banda. Además, si  $q = 0$ ,  $\omega_{\text{ph}} < \omega_0$  y si  $q = \pi$ ,  $\omega_{\text{ph}} > \sqrt{\omega_0^2 + 4C}$ . Como consecuencia de ello, si un breather tiene su frecuencia menor que la armónica ( $\omega_0$ ), es decir, los potenciales son blandos, vibrará siguiendo un patrón en fase. Si, por el contrario, los potenciales son duros, la frecuencia estará por encima de la banda y tendrá un patrón en zigzag. Esto es válido si la constante de acoplo  $C$  es positiva. Si  $C < 0$ , se invierte este comportamiento. Recordemos que un potencial es blando (duro) si la energía disminuye (aumenta) al aumentar la frecuencia.

Como podemos observar, el análisis de colas demuestra que, para que existan soluciones localizadas, ninguno de los armónicos de la frecuencia del breather debe resonar con la banda de fonones, tal como enunciaba el teorema de MacKay–Aubry. Sin embargo, pueden encontrarse casos en los que existan soluciones dentro de la banda si el sistema es finito, pues aparecen huecos dentro de ella [152].

## 2.6. Breve comentario sobre breathers en redes FPU

El teorema de MacKay–Aubry es válido para redes de tipo Klein–Gordon. Por tanto, no puede aplicarse a redes FPU pues, al no poseer éstas potencial on-site, no existe el límite anti-continuo. No obstante, Marín y Aubry [139] proponen dos formas de cálculo de breathers en redes FPU transformándola en una red Klein–Gordon: una de ellas se basa en la introducción de un potencial on-site ficticio que posteriormente se anula; la otra consiste en hacer un cambio de variable (aunque este método sólo es válido en redes monodimensionales).

Posteriormente, Livi, Spicci y MacKay [129] demuestran la existencia de breathers introduciendo una forma alternativa del límite anti-continuo, la cual consiste en tomar una cadena diatómica siendo una de las masas infinitas. Para pasar a la cadena monoatómica se varía de manera cuasi-continua la masa inicialmente infinita hasta que todas las masas se hacen iguales. En [53] se ponen en práctica estas ideas para calcular breathers.

Más recientemente, James [109] por un lado, y Aubry, Kopidakis y Kadelburg [22] por otro, han demostrado la existencia de breathers en cadenas FPU con potenciales duros sin necesidad de recurrir a cadenas diatómicas. En el primer caso, la prueba de existencia se basa en el estudio de la variedad central, mientras que la segunda es de tipo variacional.

En resumen, todos los métodos de cálculos desarrollados hasta ahora para el cálculo de breathers en redes FPU se basan en el límite anticontinuo. Sin embargo, se han desarrollado ciertos métodos que permiten o pueden permitir el cálculo de breathers FPU sin necesidad de modificar las ecuaciones. Estos son el método algebraico desarrollado por Tsironis [189] y otro método basado en órbitas homoclinas de Bergamin *et al* [33]. Además, la prueba de existencia de James proporciona un método de cálculo basado en la variedad central [108], pero que sólo es válido para breathers de pequeña amplitud.

## 3. Breathers discretos. Métodos de cálculo

### 3.1. *Introducción*

Una vez expuestas las condiciones para la existencia de breathers, pasamos a mostrar la forma de calcularlos. Los primeros métodos de cálculo, introducidos por Marín y Aubry [138, 139], se basan en el concepto de límite anti-continuo expuesto en el capítulo anterior. En otras palabras, se calcula la órbita de un oscilador aislado (o de varios, si se trata de un multibreather) y se utiliza como semilla para resolver la ecuación completa para un valor pequeño del acoplo, incrementando éste progresivamente. El método de resolución de ecuaciones no lineales más sencillo (aunque no por eso menos potente) es el de Newton-Raphson [162]. Utilizando estos métodos se obtienen soluciones exactas (hasta la precisión de máquina) <sup>1</sup>.

Un breather es una solución periódica. Por ello, los métodos de cálculo deben buscar estos tipos de soluciones. Así, la implementación del método de Newton se puede realizar en el espacio real o en el espacio de Fourier [137, 138, 139]. En el primer caso, se buscan puntos fijos en las secciones de Poincaré. En el segundo, las ecuaciones dinámicas se transforman en ecuaciones algebraicas. A lo largo de esta tesis, hemos realizados los cálculos en el espacio de Fourier, que, en combinación con el uso de la transformada de Fourier discreta, son, en nuestra opinión, más rápidos, más exactos y más fáciles de implementar.

En este capítulo se exponen brevemente las características del método de Newton para resolución de sistemas de ecuaciones no lineales y se profundiza en el estudio del cálculo de soluciones reversibles en el tiempo, usando el método de Newton en el espacio de Fourier. Para ello, se desarrollan las ecuaciones dinámicas en el espacio de Fourier, tanto en sistemas hamiltonianos como disipativos. Un esbozo de estos métodos se encuentran en la tesis de José Luis Marín [137], aunque en esta tesis se exponen dichos métodos con mayor extensión y detalle.

La aplicación de estos métodos permiten el cálculo de breathers. Al final del capítulo se recopilan varios ejemplos.

---

<sup>1</sup> Cuando decimos soluciones exactas nos estamos refiriendo a que los resultados no son simulaciones sino valores de las soluciones tan exactos como la evaluación de cualquier función matemática en un ordenador.

### 3.2. *El método de Newton*

Supongamos que tenemos una función escalar de una sola variable,  $f(x)$ , y queremos calcular una raíz de la ecuación  $f(x) = 0$ . El método de Newton consiste en tomar una solución de prueba (o semilla) y a partir de ahí aproximarse a la solución real del sistema. Supongamos que  $x_1$  es la semilla y  $x_o$  es la solución real; si efectuamos el desarrollo en serie de Taylor de  $f$  alrededor de la semilla, obtenemos:

$$0 = f(x_o) \approx f(x_1) + f'(x_1)(x_o - x_1) + \dots \quad (3.1)$$

Así, la diferencia entre la solución real y la solución de prueba,  $x_o - x_1 \approx \delta_1$ , será:

$$\delta_1 = -\frac{f(x_1)}{f'(x_1)}. \quad (3.2)$$

Por tanto, si sumamos  $\delta_1$  a la semilla, obtenemos un valor de  $x = x_2$  más próximo a la solución real del sistema:

$$x_2 \equiv x_1 + \delta_1 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}. \quad (3.3)$$

El proceso se repite hasta que  $|\delta_n|$  (o  $|f(x_n)|$ ) sea menor que la precisión que buscamos. Se puede demostrar fácilmente que el método converge cuadráticamente si la solución de prueba está lo suficientemente cerca de la solución real.

Examinando la fórmula (3.3) se observa que si la derivada de la función en  $x_o$  es cero, la solución diverge. Por este motivo, el método de Newton deja de ser válido en un punto de bifurcación.

El método de Newton puede generalizarse de manera inmediata a más dimensiones, es decir, a sistemas de ecuaciones  $\vec{F}(\vec{x}) = \vec{0}$ . En lugar de la derivada  $f'$ , se utiliza la matriz jacobiana del sistema,  $J$  ( $J_{ij} = \partial F_i / \partial x_j$ ), que, en un espacio de dimensión infinita, se denomina también operador de Newton o *jacobiano*. Así, la ecuación (3.3) se convierte en:

$$\vec{x}_2 = \vec{x}_1 - J^{-1} \cdot \vec{F}. \quad (3.4)$$

Sin embargo, el método de Newton en problemas de más de una dimensión adolece de una pobre convergencia global. Es decir, se debe partir de una semilla muy próxima a la solución real porque, en caso contrario, la solución se aleja rápidamente de la verdadera.

No obstante, podemos aplicar perfectamente el método de Newton si se parte de una solución conocida y se varía un parámetro del sistema en pequeños pasos, es decir, se asume la continuidad de las ecuaciones con el parámetro que cambia: por esta razón se dice que el método de Newton es un *método de continuación*.



Pese a todo, no se puede evitar el problema de la aparición de soluciones múltiples (o, en nuestro contexto, bifurcaciones). Cuando esto ocurre, la matriz jacobiana se vuelve no invertible ya que uno o más autovectores corresponden a autovalores nulos. Sin embargo, gracias a que se está siguiendo una rama de soluciones en función de un parámetro, se pueden observar los autovalores de la matriz jacobiana y anticipar la aparición de una bifurcación. Además, nuestro método de continuación "avisa" de la cercanía de una bifurcación, ya que en esos puntos la convergencia es más lenta, al ser la matriz jacobiana casi singular. De todos modos, como es casi imposible obtener el punto exacto donde aparece la bifurcación, se pueden obtener, con frecuencia, soluciones más allá de éste aumentando el paso. Un estudio detallado de esta nueva rama, incluyendo su prolongación en sentido inverso, así como el estudio de otras ramas que puedan aparecer, permite determinar el tipo de bifurcación y las soluciones bifurcantes.

### 3.3. El método en el espacio de Fourier

El cálculo de soluciones se ha realizado en el espacio de Fourier, ya que el método es más rápido y preciso que en el espacio real; la rapidez se debe a que en el caso del espacio real la matriz jacobiana debe calcularse numéricamente, mientras que en el caso del espacio de Fourier, se puede obtener una expresión analítica de la matriz, lo cual hace el cálculo de ésta casi inmediato; la precisión se debe a que los métodos de cálculo en el espacio real están condicionados por la eficiencia del integrador, mientras que en el espacio de Fourier dependerá del punto donde trunquemos la serie, lo cual es más controlable.

Nuestro espacio de trabajo va a ser el de las soluciones periódicas con frecuencia  $\omega_b$ , reversibles en el tiempo y con segunda derivada continua, representado por  $\mathcal{E}_s^2(\omega_b)$ . Por tanto, la solución del sistema puede expresarse mediante una serie de Fourier coseno (que necesariamente estará truncada):

$$u_n(t) = z_n^o + 2 \sum_{k=1}^{k_m} z_n^k \cos(k\omega_b t). \quad (3.5)$$

Notemos que estamos suponiendo un sistema monodimensional. Sin embargo, este método es generalizable a un número cualquiera de dimensiones.

#### 3.3.1. Potencial de interacción armónico

Supongamos que el potencial de interacción es armónico y de próximos vecinos (aunque la generalización a interacciones de mayor alcance es inmediata). En este caso, el hamiltoniano de nuestro sistema de  $N$  osciladores, es:

$$H = \sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{2} p_n^2 + V(u_n) + \frac{1}{2} C(u_n - u_{n+1})^2 \right), \quad (3.6)$$

Las ecuaciones dinámicas, que se obtienen a partir de las ecuaciones de Hamilton  $\ddot{u}_n \equiv \dot{p}_n = -\partial H/\partial u_n$ , son:

$$F_n \equiv \ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0. \quad (3.7)$$

Estas ecuaciones se pueden expresar en el espacio de Fourier separando los coeficientes correspondientes al  $k$ -ésimo armónico, de forma que se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas:

$$F_n^k \equiv -k^2 \omega_b^2 z_n^k + V_n'^k + C(2z_n^k - z_{n+1}^k - z_{n-1}^k) = 0, \quad (3.8)$$

donde  $V_n'^k$  es el  $k$ -ésimo coeficiente de Fourier de  $V'(u_n(t))$ . Esta función también es periódica y reversible en el tiempo.

El principal problema para implementar este método es el cálculo de  $V_n'^k$  conociendo  $z_n^k$ . Para un potencial de tipo polinómico de bajo orden es fácil de obtener, pues  $V_n'^k$  consistiría en una especie de convolución de los coeficientes  $z_n^k$ . Por ejemplo, para el potencial cúbico,  $V(x) = \frac{1}{2}\omega_o^2 x^2 - sx^3$ , tendremos:

$$V_n'^k = \omega_o^2 z_n^k - 3s \sum_{k'} z_n^{|k-k'|} z_n^{k'}. \quad (3.9)$$

Este método resulta poco práctico para polinomios de orden mayor que cuatro y no se puede aplicar para otros tipos de potenciales. Sin embargo, se puede calcular  $V_n'^k$  usando otra técnica, en concreto, la basada en la transformada discreta de Fourier (DFT). Para ello se procede de la siguiente forma: a partir de los valores de  $z_n^k$  obtenemos  $u_n(t)$  como una secuencia de  $k_m + 1$  muestras obtenidas usando la DFT-coseno inversa:

$$u_n(t_i) = z_n^o + 2 \sum_{k=1}^{k_m} z_n^k \cos(k\omega_b t_i), \quad (3.10)$$

donde  $t_i$  son los puntos de muestra que deben elegirse regularmente espaciados, es decir,

$$t_i = \frac{2\pi i}{\omega_b(2k_m + 1)}, \quad \text{para } i = 0, 1, \dots, k_m. \quad (3.11)$$

Una vez conocido  $u_n(t_i)$  podemos evaluar  $V'(u_n(t_i))$  en el dominio temporal y aplicar la DFT-coseno directa para obtener  $V_n'^k$ :

$$V_n'^k = \frac{1}{2k_m + 1} [V'(u_n(0)) + 2 \sum_{i=1}^{k_m} V'(u_n(t_i)) \cos(k\omega_b t_i)]. \quad (3.12)$$

Para aplicar el método de Newton es necesario el cálculo de la matriz jacobiana  $J$ :

$$J \equiv \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{z}}, \quad (3.13)$$

donde  $\vec{z}$  es un vector columna de elementos  $z_n^k$ , con el índice  $k$  variando más rápidamente, es decir,  $\vec{z} = \{z_1^0, z_1^1, \dots, z_1^{k_m}, \dots, z_n^0, \dots, z_n^{k_n}\}^T$  y  $\vec{F} = \{F_n^k\}$  se define análogamente. Es decir, las componentes de  $J$  vienen dadas por:

$$J_{n,n'}^{k,k'} \equiv \frac{\partial F_n^k}{\partial z_{n'}^{k'}}. \quad (3.14)$$

El jacobiano tendrá una estructura de bloques de tamaño  $k_m + 1 \times k_m + 1$ . En el caso de un potencial de interacción armónico y de primeros vecinos, todos los bloques son iguales a la matriz nula, salvo los diagonales, sus adyacentes y los correspondientes a las condiciones de contorno. Así, si dividimos el jacobiano en sus contribuciones diagonales y no diagonales, podemos expresarlo como:

$$J = J_D + J_{ND}, \quad (3.15)$$

donde

$$\begin{cases} J_D = \left\{ \left[ (-k^2 \omega_b^2 + 2C) \delta_{k,k'} + \frac{\partial V_n^{ik}}{\partial z_n^{k'}} \right] \delta_{n,n'} \right\} \\ J_{ND} = \{ -C(\delta_{n+1,n'} - \delta_{n-1,n'}) \delta_{k,k'} \} \end{cases} \quad (3.16)$$

Como se puede observar, los bloques no diagonales son iguales a  $CI$ , donde  $I$  es la matriz unidad. La mayor dificultad del cálculo del jacobiano radica en conocer el valor de la derivada de  $V_n^{ik}$  respecto a las componentes de Fourier de la solución. Este cálculo se lleva a efecto derivando la expresión (3.12). Tras posteriores manipulaciones algebraicas se obtiene, para un  $n$  determinado:

$$\frac{\partial V^{ik}}{\partial z^{k'}} = \frac{1}{1 + \delta_{k',0}} (V''^{|k-k'|} + V''^{(k+k')}), \quad (3.17)$$

donde  $V''^k$  son las componentes de la transformada de Fourier discreta de  $V''(u(t))$ , que se calculan de manera similar a  $V^{ik}$ .

A la luz de la expresión anterior surge pensar qué ocurre cuando  $k + k' > k_m$ . A primera vista se podría pensar que en esos casos  $V''$  es nulo. Pero si hacemos eso estaríamos dejando atrás términos que nos pueden falsear los resultados. Por ello, la técnica que hemos utilizado es, al principio de los cálculos, tomar un vector de componentes de Fourier  $\{z^k\}$  con  $2k_m + 1$  componentes, de forma que las primeras  $k_m + 1$  componentes son las de la solución mientras que el resto son nulas. Así, tendremos que, como  $k + k'$  nunca es mayor de  $2k_m + 1$ , se puede calcular  $V''^{(k+k')}$  sin problemas, y además, no se anulan cuando  $k + k' > k_m$ .

### 3.3.2. Potencial de interacción no armónico

En el caso de un potencial de interacción anarmónico, el hamiltoniano puede escribirse de la forma:

$$H = \sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{2} p_n^2 + V(u_n) + \frac{1}{2} C W(u_n - u_{n+1}) \right), \quad (3.18)$$

Las ecuaciones dinámicas serán:

$$F_n \equiv \ddot{u}_n + V'(u_n) + C [W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n-1} - u_n)] = 0. \quad (3.19)$$

La expresión de estas ecuaciones en el espacio de Fourier, es algo más complicada que en el caso armónico. Si definimos

$$W_{m,n}^{ik} = \frac{1}{2k_m + 1} [W'(u_m(0) - u_n(0)) + 2 \sum_{i=1}^{k_m} W'(u_m(t_i) - u_n(t_i)) \cos(k\omega_b t_i)], \quad (3.20)$$

tenemos:

$$F_n^k \equiv -k^2 \omega_b^2 z_n^k + V_n^{ik} + C(W_{n+1,n}^{ik} - W_{n-1,n}^{ik}) = 0. \quad (3.21)$$

El jacobiano se puede expresar de la forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} J_D = \left\{ \left( -k^2 \omega_b^2 \delta_{k,k'} + \frac{\partial V_n^{ik}}{\partial z_n^{k'}} + 2C \frac{\partial (W_{n+1,n}^{ik} + W_{n-1,n}^{ik})}{\partial z_n^{k'}} \right) \delta_{n,n'} \right\} \\ J_{ND} = \left\{ -C \left( \frac{\partial W_{n+1,n}^{ik}}{\partial z_n^{k'}} \delta_{n+1,n'} - \frac{\partial W_{n-1,n}^{ik}}{\partial z_n^{k'}} \delta_{n-1,n'} \right) \right\} \end{array} \right. , \quad (3.22)$$

donde los coeficientes de la DFT de la derivada de  $W'$  se calculan de manera análoga a las de las derivadas de  $V'$ .

## 3.4. Sistemas disipativos

### 3.4.1. Introducción

Todos los métodos de cálculo que se han explicado hasta ahora se refieren a sistemas hamiltonianos. Cuando se aplican a sistemas disipativos aparecen ligeras diferencias.

Supongamos una cadena de osciladores acoplados, cada uno de ellos forzado y amortiguado, es decir:

$$F_n \equiv \ddot{u}_n + \gamma \dot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = F \text{ sen } \omega_b t, \quad (3.23)$$

donde  $\gamma$  es un coeficiente de fricción y  $F$  es la amplitud de la fuerza externa. En este tipo de sistemas se han encontrado soluciones localizadas, cuya existencia se demuestra en [19, 176]. En [139] se explica el método de cálculo que posteriormente ha sido extensivamente utilizado en [145].

Este método básicamente consistió en buscar dos atractores del sistema desacoplado. El atractor mayor se utiliza en el límite anti-continuo para el (los) oscilador (osciladores) en movimiento, mientras que el atractor menor se corresponde con los osciladores en reposo. Esta solución se utiliza como semilla del método de Newton como explicamos al principio del capítulo. Sin embargo, como los breathers son atractores del sistema, el cálculo se puede reducir a una simple simulación utilizando como condición inicial la solución en el límite anti-continuo. Este último método tiene como ventaja la velocidad de cálculo, aunque tiene como inconveniente que no se pueden obtener soluciones inestables. Para obtener estas últimas, se debe recurrir a métodos de continuación.

Expondremos a continuación cómo se expresan las ecuaciones de movimiento en el espacio de Fourier:

### 3.4.2. Ecuaciones de movimiento en el espacio de Fourier

La mayor dificultad en este caso estriba en el cálculo de las contribuciones diagonales del jacobiano. Por ello, vamos a restringir el estudio a sistemas de una partícula.

Ahora, nuestro espacio de soluciones será simplemente el de las funciones periódicas con frecuencia  $\omega_b$  y con segunda derivada continua,  $\mathcal{E}^2(\omega_b)$ . En consecuencia, la solución del sistema puede expresarse mediante una serie de Fourier completa:

$$u(t) = a^o + 2 \sum_{k=1}^{k_m} a^k \cos(k\omega_b t) + 2 \sum_{k=1}^{k_m} b^k \text{sen}(k\omega_b t). \quad (3.24)$$

El número de ecuaciones dinámicas en el espacio de Fourier es  $2k_m + 1$ , de forma que se expresan de la forma:

$$\begin{cases} F_C^k \equiv -k^2 \omega_b^2 a^k + \gamma k \omega_b b^k + V_C'^k = 0 \\ F_S^k \equiv -k^2 \omega_b^2 b^k - \gamma k \omega_b a^k + V_S'^k - F/2 = 0 \end{cases} \quad (3.25)$$

donde  $V_C'$  y  $V_S'$  son, respectivamente, las transformadas de Fourier coseno y seno de la derivada del potencial. Esta última viene dada por:

$$V_S'^k = \frac{1}{2k_m + 1} \left[ 2 \sum_{i=1}^{k_m} V'(u_n(t_i)) \text{sen}(k\omega_b t_i) \right]. \quad (3.26)$$

El jacobiano se divide en cuatro bloques:

$$J \equiv \begin{bmatrix} J_{CC} & J_{CS} \\ J_{SC} & J_{SS} \end{bmatrix}, \quad (3.27)$$

donde

$$J_{CC}^{k,k'} = \frac{\partial F_C^k}{\partial a^{k'}}; \quad J_{CS}^{k,k'} = \frac{\partial F_C^k}{\partial b^{k'}}; \quad J_{SC}^{k,k'} = \frac{\partial F_S^k}{\partial a^{k'}}; \quad J_{SS}^{k,k'} = \frac{\partial F_S^k}{\partial b^{k'}}. \quad (3.28)$$

Tras un sencillo cálculo se llega a la expresión del jacobiano:

$$\left\{ \begin{array}{l} J_{CC}^{k,k'} = \left\{ -k^2 \omega_b \delta_{k,k'} + \frac{1}{1 + \delta_{k',0}} (V_C''^{(k+k')} + V_C''^{|k-k'|}) \right\} \\ J_{CS}^{k,k'} = \left\{ \gamma k \omega_b \delta_{k,k'} + \text{sgn}(k' - k) V_S''^{|k-k'|} + V_S''^{(k+k')} \right\} \\ J_{SC}^{k,k'} = \left\{ \gamma k \omega_b \delta_{k,k'} + \frac{1}{1 + \delta_{k',0}} (\text{sgn}(k - k') V_S''^{|k-k'|} + V_S''^{(k+k')}) \right\} \\ J_{SS}^{k,k'} = \left\{ \frac{1}{1 + \delta_{k',0}} + V_C''^{(k+k')} + V_C''^{|k-k'|} \right\} \end{array} \right\}, \quad (3.29)$$

con  $V_S''^0 = 0$ .

Finalmente, cabe mencionar que en el caso de soluciones no reversibles en el tiempo, siempre hay un autovalor cero en el jacobiano. Por ello, debe hacerse una descomposición en valores singulares para poderlo invertir, tal como se explica en [50, 51, 52].

### 3.5. Ejemplos de breathers

Una vez explicados los métodos de cálculo, pasamos a mostrar algunos resultados.

#### 3.5.1. Breathers en sistemas hamiltonianos

En la figura 3.1 se muestra el perfil (es decir,  $\{u_n\}$  en  $t = 0$ ), el espacio de las fases y la evolución temporal de un breather en una cadena Klein-Gordon cuyo potencial on-site es de tipo Morse y el potencial de interacción es armónico, de primeros vecinos y atractivo, esto es, las ecuaciones de movimiento serán (3.19) con  $V(u) = (e^{-u} - 1)^2/2$ . Este tipo de sistemas corresponde a un modelo utilizado en el estudio de la desnaturalización del ADN propuesto por Peyrard y Bishop en 1989 [158] y que ha sido usado extensivamente desde entonces. Este modelo se analizará con profundidad en sucesivos capítulos. Como se puede observar en la figura, las partículas vibran en fase, como corresponde a un potencial blando

con interacción atractiva. La figura 3.2 muestra el perfil y la evolución de dos 2sB en el caso anterior. Uno de ellos corresponde al código  $\{\dots 0110\dots\}$  y otro a  $\{\dots 01 - 10\dots\}$ . El primero de ellos es un breather centrado en el enlace.

La figura 3.3 es similar a la figura 3.1, salvo que el potencial on-site es ahora de tipo sine-Gordon normalizado, es decir,  $V'(u) = \text{sen}(2\pi u)/(2\pi)$ . Este tipo de sistema, también conocido como modelo de Frenkel-Kontorova [38], se corresponde con una cadena de péndulos acoplados. Puede ocurrir, bajo ciertas condiciones, que los péndulos ejecuten movimientos de rotación, en cuyo caso los modos localizados se denominan *rotobreathers*.

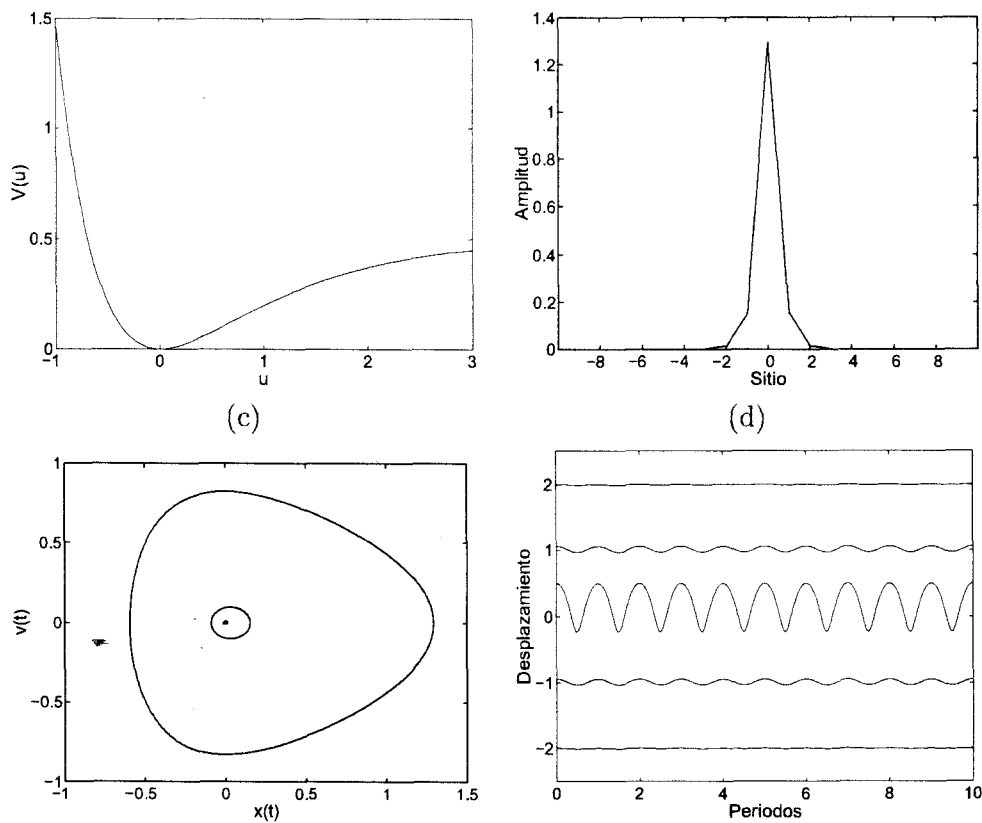
Finalmente, la figura 3.4 muestra las características de un breather con potencial on-site  $\phi^4$  duro, es decir,  $V(u) = x^2/2 + x^4/4$ . Como se puede observar, las partículas vibran en zigzag.

### 3.5.2. *Breathers en sistemas disipativos*

La figura 3.5 muestra el espacio de las fases y la evolución temporal en dos tipos de sistemas disipativos. El primero de ellos corresponde al modelo de Frenkel-Kontorova. Este tipo de sistemas se ha utilizado para modelar la dinámica de fluxones en una red de uniones Josephson [191] y de promotores en el ADN [168, 171].

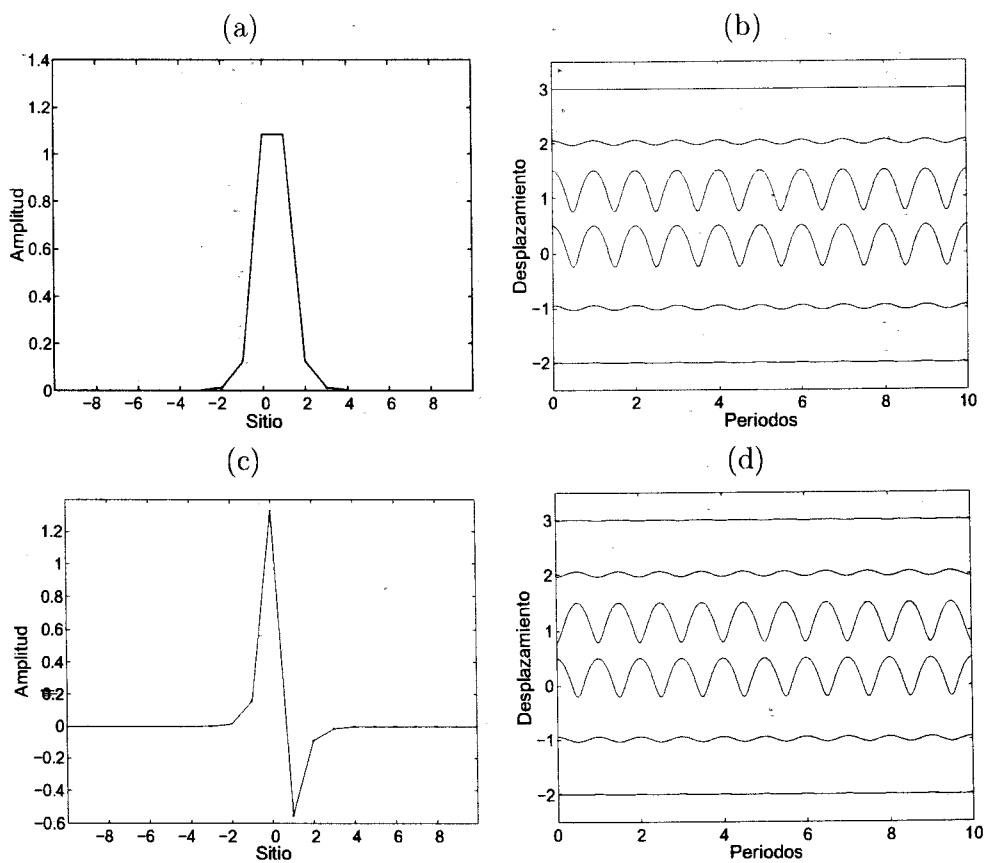
El segundo ejemplo corresponde a un potencial de Morse. Este tipo de sistema ha sido estudiado por Sataric y describe la interacción de campos endógenos con el ADN [175].



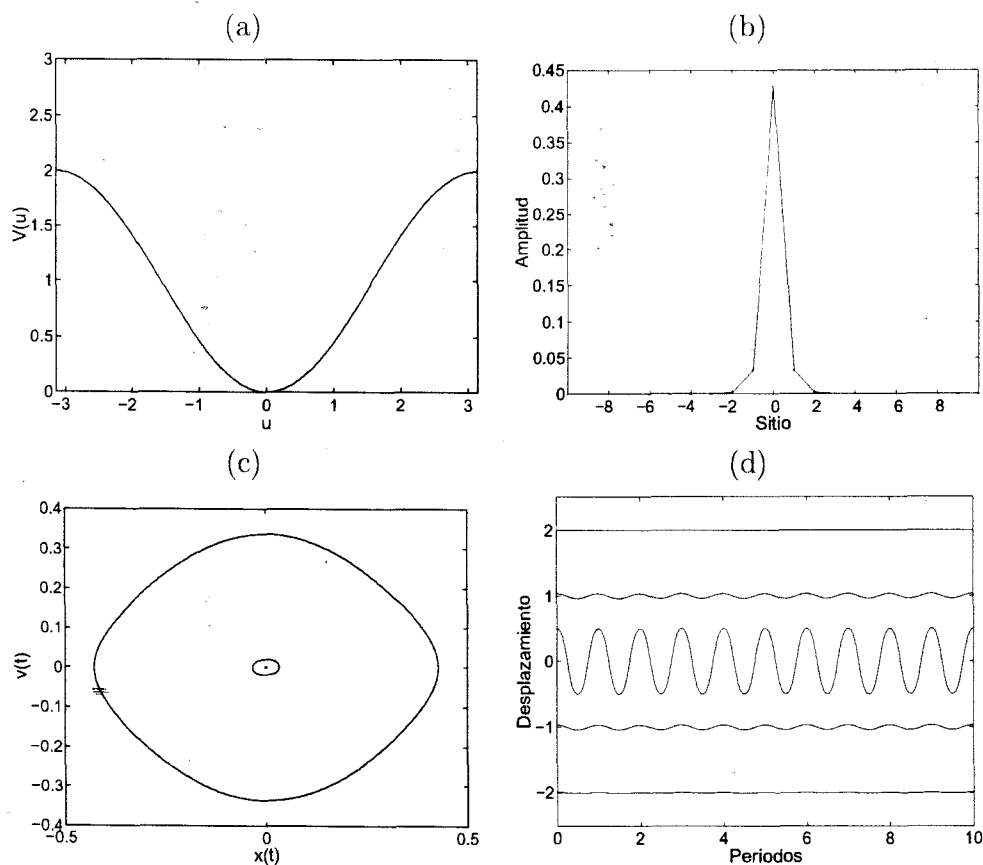


**Fig. 3.1:** (a) Dependencia funcional del potencial de Morse:  $V(u) = \frac{1}{2}(e^{-u} - 1)^2$ ; (b) Perfil de un breather con dicho potencial on-site; (c) Espacio de las fases; (d) Evolución temporal de la partícula central y de sus próximos vecinos. Los parámetros del sistema son  $\omega_b = 0,8$  y  $C = 0,05$

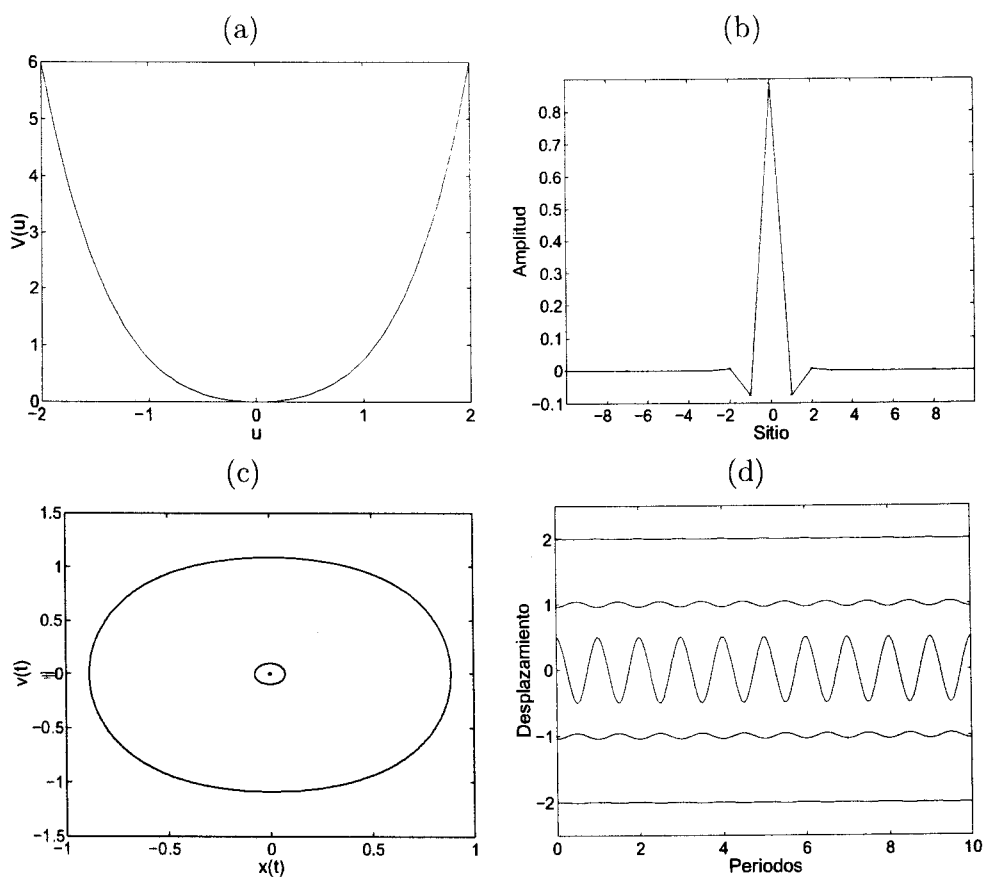




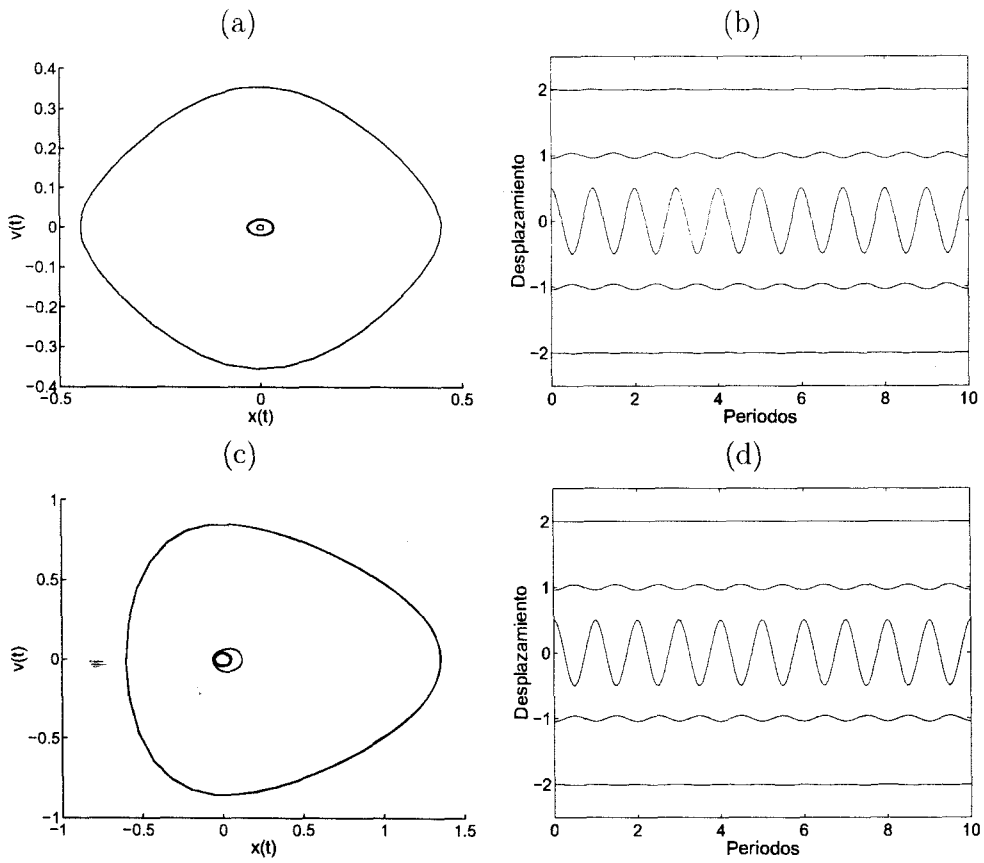
**Fig. 3.2:** Diferentes ejemplos de 2-site breathers con el potencial de Morse. (a) y (c) representan los perfiles de los breathers mientras que (b) y (d) muestran la dependencia temporal. (a) y (b) corresponden a un 2-site breathers con dos vecinos excitados en fase, mientras que en (c) y (d) los dos vecinos están en anti-fase.



**Fig. 3.3:** (a) Dependencia funcional del potencial de sine-Gordon:  $V'(u) = \text{sen}(2\pi u)/(2\pi)$ ; (b) Perfil de un breather con dicho potencial on-site; (c) Espacio de las fases del breather; (d) Evolución temporal de la partícula central y de sus próximos vecinos. Los parámetros del sistema son  $\omega_b = 0,2\pi$  y  $C = 0,05$ .



**Fig. 3.4:** (a) Dependencia funcional del potencial  $\phi^4$  duro:  $V(u) = \frac{1}{2}u^2 + \frac{1}{4}u^4$ ; (b) Perfil de un breather con dicho potencial on-site; (c) Espacio de las fases; (d) Evolución temporal de la partícula central y de sus próximos vecinos. Los parámetros del sistema son  $\omega_b = 1,3$  y  $C = 0,05$



**Fig. 3.5:** (a) y (c) Espacios de las fases; (b) y (d) Dependencia temporal de un breather en redes disipativas con potenciales on-site sine-Gordon y Morse, respectivamente. Los parámetros del sistema son  $\omega_b = 0,2\pi$  y  $C = 0,05$  en el primer caso y  $\omega_b = 0,8$  y  $C = 0,05$  en el segundo

## 4. Estabilidad

### 4.1. *Introducción*

Una vez obtenidas las soluciones tipo breather en una red de osciladores, cabe preguntarse si son estables, es decir, si persisten bajo perturbaciones.

Ya en su prueba de existencia, MacKay y Aubry [132] apuntaron que era muy probable que los breathers con un sitio excitado (1-site breathers ó 1sB para abreviar) fueran linealmente estables, es decir, que una perturbación aplicada sobre ellos crezca, como mucho, linealmente en el tiempo. Estos resultados fueron posteriormente demostrados por Marín y Aubry [19, 142] y extendidos para sistemas infinitos por MacKay y Sepulchre [133].

Para el análisis de estabilidad de las soluciones periódicas se utiliza la teoría de Floquet y las propiedades de la ecuación de Hill. En este capítulo se recopilan algunos resultados que son importantes para el desarrollo de esta tesis. Para mayor claridad, las demostraciones de la mayoría de los resultados se encuentran en el apéndice A de este trabajo. Para una explicación más completa de ciertos resultados, el lector puede referirse a la tesis doctoral de José Luis Marín en la que se encuentra una magnífica recopilación de las bases de la teoría de estabilidad en redes anarmónicas. Además, en este capítulo y en los Apéndices A y B exponemos algunos resultados, que, al menos, no han podido ser encontrados por el autor. Estos se pueden resumir en:

- Demostración de la hermiticidad y simplecticidad del operador de Newton.
- Estructura de los autovectores del operador de Floquet cuando no existe degeneración.
- Estructura de los autovectores del operador de Floquet en el caso degenerado.

También se exponen resultados recientemente publicados por el autor, tales como:

- Relación entre los autovalores del operador de Floquet y los del jacobiano.
- Demostración de la estabilidad de multibreathers para acoplos pequeños basándose en la teoría de perturbaciones degenerada.

Todos la teoría que se expone en esta tesis se refiere a estabilidad lineal. Existe, además, un estudio de estabilidad en el sentido de Nekhoroshev (es decir, estabilidad exponencial) realizado por Bambusi [27], según el cual, para acoplamientos débiles, los breathers linealmente estables conservan la energía localizada durante tiempos exponencialmente largos.

#### 4.2. Ecuaciones dinámicas perturbadas. Operador de Newton

Recordemos las ecuaciones dinámicas de una red hamiltoniana de osciladores acoplados:

$$F_n(u) \equiv \ddot{u}_n + V'(u_n) + C \sum_i W'(u_n - u_{n+i}) = 0, \quad (4.1)$$

donde  $u_n$  se considera una función d-dimensional y  $n \in \mathbb{Z}^d$ . Si se introduce una perturbación en la red, es decir,  $u \rightarrow u + \xi$ , ésta cumplirá la ecuación:

$$\begin{aligned} \ddot{\xi}_n(t) + V''(u_n(t))\xi_n(t) - C \sum_i W''(u_{n+i}(t) - u_n(t))(\xi_{n+i}(t) - \xi_n(t)) + \\ + C \sum_i W''(u_n(t) - u_{n-i}(t))(\xi_n(t) - \xi_{n-i}(t)) = 0. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Esta ecuación describe además los modos lineales del sistema cerca de la solución  $u = \{u_n(t)\}$  de las ecuaciones dinámicas de la red (4.1). Si restringimos la interacción al caso de potencial de acoplo lineal y de próximos vecinos, nos queda una expresión más simplificada:

$$\ddot{\xi}_n(t) + V''(u_n(t))\xi_n(t) + C(2\xi_n(t) - \xi_{n+1}(t) - \xi_{n-1}(t)) = 0. \quad (4.3)$$

La ecuación (4.2) se puede expresar de manera más compacta:

$$\mathcal{N}(u(t))\xi = 0, \quad (4.4)$$

donde  $\xi \equiv \{\xi_n(t)\}$  y

$$\mathcal{N}(u(t))\xi \equiv \frac{d^2\xi}{dt^2} + V''(u(t))\xi + C\hat{J}(u(t))\xi, \quad (4.5)$$

con  $[V''(u)]_{nm} = \delta_{nm}V''(u_n)$ , siendo  $\hat{J}$  la matriz de acopló. El operador  $\mathcal{N}$  recibe el nombre de *operador de Newton*. Si  $\xi \in \mathcal{C}^2$ , el estudio del espectro del operador de Newton nos ofrece información sobre la estabilidad. Si, además,  $\xi \in \mathcal{E}_s^2(\omega_b)$ , el operador de Newton es el *jacobiano* (o derivada de Fréchet) de la ecuación de movimiento del sistema (4.1), es decir,  $\partial_u F = \mathcal{N}(u(t))$ .

La ecuación de autovalores del operador de Newton es, lógicamente,

$$\mathcal{N}(u(t))\xi = E\xi, \quad (4.6)$$

por lo que la ecuación de las perturbaciones (4.2) se corresponde con el caso particular  $E = 0$ . Sin embargo, el estudio completo del espectro de  $\mathcal{N}$  ofrece información adicional de gran interés. En él se basa la *teoría de bandas de Aubry* [19] y el *teorema de estabilidad de multibreathers* [12].

El operador de Newton posee una serie de propiedades, que se demuestran Apéndice A. Estas propiedades tienen consecuencias importantes sobre sus autovalores y autofunciones, y, en consecuencia, sobre la estabilidad de las soluciones. Pasemos a enumerarlas:

1.  **$\mathcal{N}$  conmuta con el operador de inversión temporal.** Esto implica que las autofunciones de  $\mathcal{N}$  pueden ser escogidas como simétricas o antisimétricas en el tiempo, es decir,

$$\xi(-t) = \pm\xi(t). \quad (4.7)$$

2.  **$\mathcal{N}$  conmuta con el operador de traslación de un periodo.** Según el *teorema de Bloch*, las autofunciones de  $\mathcal{N}$  se pueden expresar de la forma denominada *función de Bloch*:

$$\xi(t) = e^{j\theta t/T} v(t), \quad (4.8)$$

donde  $v(t)$  es una función periódica de periodo  $T = 2\pi/\omega_b$  con  $\theta \in \mathbb{C}$ .

3.  **$\mathcal{N}$  es real.** Esto implica que dos autofunciones conjugadas tienen sus autovalores conjugados, es decir,

$$\mathcal{N}\xi^* = E^*\xi^*. \quad (4.9)$$

4.  **$\mathcal{N}$  es hermítico.** Esta propiedad se basa en el hecho de que  $\mathcal{N}$  es simpléctico, es decir, el producto simpléctico de dos autofunciones cualesquiera se mantiene constante en el tiempo. Si llamamos:

$$\Omega(t) = \begin{bmatrix} \xi(t) \\ \pi(t) \end{bmatrix}, \quad \text{donde } \pi(t) \equiv \dot{\xi}(t), \quad (4.10)$$

el producto simpléctico se define como la suma de las áreas de los subespacios definidos por cada par de variables conjugadas, o, dicho en términos matemáticos:

$$[\Omega_1(t), \Omega_2(t)] = \sum_n (\xi_{1n}(t)\pi_{2n}(t) - \xi_{2n}(t)\pi_{1n}(t)). \quad (4.11)$$

Esta propiedad implica que los autovalores de  $\mathcal{N}$  son reales.

### 4.3. Análisis de Floquet

#### 4.3.1. El operador de Floquet. Autovalores y autofunciones

Cuando la solución del sistema  $u(t)$  es periódica, el análisis de estabilidad requiere la integración a lo largo de un solo periodo. Este modo de estudiar la estabilidad se denomina *análisis de Floquet* [97]. Para ello, se considera el siguiente mapa:

$$\begin{bmatrix} \xi(T) \\ \pi(T) \end{bmatrix} = \mathcal{F}_o \begin{bmatrix} \xi(0) \\ \pi(0) \end{bmatrix}, \quad (4.12)$$

o, en distinta notación:

$$\Omega(T) = \mathcal{F}_o \Omega(0). \quad (4.13)$$

Toda la información sobre la estabilidad se encuentra en el operador  $\mathcal{F}_o$ , también llamado *operador de Floquet*. A su representación se le llama *matriz monodromía* o, simplemente, *monodromía*<sup>1</sup>.

Si el sistema tiene  $N$  partículas, la monodromía tendrá  $2N$  autovectores. Estos serán los correspondientes al operador de Newton con  $E = 0$  y  $t = 0$  ó  $t = \pi$ . Por la propiedad 2 del operador de Newton (teorema de Bloch) se tiene, trivialmente, que:

$$\Omega(T) = e^{j\theta} \Omega(0), \quad (4.14)$$

es decir, que los autovalores de la monodromía son de la forma  $\lambda = e^{j\theta}$ , ( $\theta \in \mathbb{C}$ ). A  $\lambda$  se le conoce con el nombre de *multiplicador de Floquet*, mientras que  $j\theta$  recibe el nombre de *exponente de Floquet*, siendo  $\theta$  el *argumento de Floquet*.

Como se demuestra en el apéndice A, el operador de Floquet es real y simplectico. Esto implica que si  $\lambda$  es autovalor, también lo serán  $\lambda^*$ ,  $1/\lambda$  y  $1/\lambda^*$ . Pero este hecho tiene aun otra consecuencia importante: como, según la teoría de Floquet, una órbita  $u(t)$  es estable si ninguno de los multiplicadores de Floquet tiene módulo mayor que uno, una condición necesaria y suficiente para la estabilidad lineal de nuestro sistema es que todos los multiplicadores de Floquet estén sobre la circunferencia unidad. En otras palabras, los argumentos de Floquet  $\theta$  deben ser reales para que el sistema sea linealmente estable.

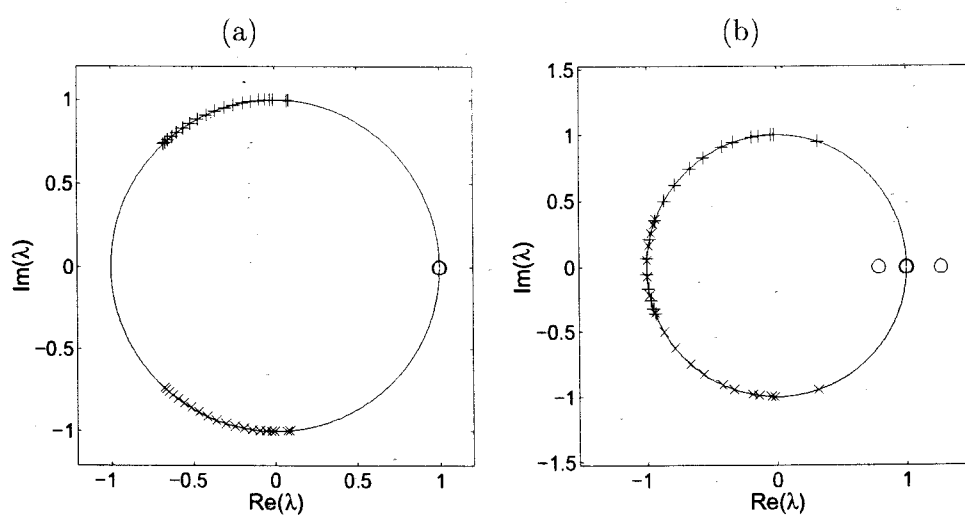
En la figura 4.1 se ilustra este hecho con un ejemplo de breather estable y otro de breather inestable.

#### 4.3.2. Signatura de Krein

Un concepto muy útil para el estudio de la estabilidad lineal es el de *signatura de Krein*, la cual se define para cada argumento de Floquet  $\theta$  de la siguiente forma

<sup>1</sup> Del griego  $\mu\omicron\nu\omicron\sigma$ : uno,  $\delta\rho\mu\omicron\sigma$ : ciclo.





**Fig. 4.1:** Multiplicadores de Floquet para un breather en un potencial de Morse con frecuencia  $\omega_b = 0,8$  y acoplamiento (a)  $C = 0,05$  y (b)  $C = 0,14$ . El primer caso corresponde a un breather estable (todos los autovalores están en la circunferencia), mientras que el segundo corresponde a un breather inestable (existen dos autovalores con módulo distinto de uno). Las cruces (+) indican signatura de Krein positiva, las aspas (x) signatura de Krein negativa y los círculos (o) signatura de Krein nula (ver Sección 4.3.2).

[15]:

$$\kappa(\theta) = \text{sgn}([\text{Re}(\Omega(t)), \text{Im}(\Omega(t))]) = \text{sgn} \left[ j \sum_i (\xi_i(t)\pi_i^*(t) - \xi_i^*(t)\pi_i(t)) \right], \quad (4.15)$$

donde  $\Omega(t)$  es la autofunción correspondiente a  $\theta$ . Como el sistema es simpléctico, la signatura de Krein se conserva y está bien definida. Si  $\theta = 0$  ó  $\pi$ , las autofunciones son reales (pues el multiplicador correspondiente también lo es) y la signatura de Krein es cero. Definimos la signatura de Krein de un conjunto de puntos, interior a una curva cerrada, como la suma de la signatura de Krein de los puntos de dentro de la misma, es decir,  $K = \sum \kappa(\theta)$ . Este valor se conserva siempre que ningún punto cruce la curva contorno.

Cuando los parámetros del sistema varían, la única manera de que un sistema se desestabilice es que colisione y se salga del círculo unidad un cuadruplete de autovalores (si  $\theta \neq 0$  y  $\theta \neq \pi$ ) o una pareja (si  $\theta = 0$  ó  $\theta = \pi$ ). En ese caso, antes de una inestabilidad deben coincidir los autovalores implicados. Sin embargo, no siempre que coincidan dos autovalores se produce una inestabilidad. Para saber cuándo se produce una colisión se introduce el *criterio de Krein* [15], según el cual sólo es posible una inestabilidad si la signatura de Krein de los autovalores que coinciden son distintas. Este criterio es crucial para obtener que los breathers con un sólo sitio excitado (1SB) son estables, siempre que la constante de acoplo sea lo suficientemente pequeña, tal como veremos en secciones posteriores.

### 4.3.3. Bifurcaciones

Cuando un breather se perturba, la solución inicial,  $u(t)$ , que era de periodo  $T = 2\pi/\omega_b$ , se transforma en la nueva solución  $u'(t) = u(t) + \xi(t)$ , que no tiene porqué ser periódica, ya que la perturbación  $\xi(t)$  no lo es. Recordemos que por el teorema de Bloch (4.8), la perturbación puede expresarse como  $\xi(t) = \exp(j\theta t/T)v(t)$ , donde  $v(t)$  tiene la misma periodicidad del breather. Así, la solución perturbada se puede expresar de la forma:

$$\tilde{u}(t) = u(t) + e^{j\omega_b \theta t/2\pi} v(t), \quad (4.16)$$

es decir, la solución perturbada oscilará con dos frecuencias, una de ellas será la del breather,  $\omega_b$ , mientras que la segunda será  $\tilde{\omega}_b = (\theta/2\pi)\omega_b \text{ mod } \omega_b$ .

Cuando se produce una colisión de los autovalores, la solución original  $u(t)$  puede volverse inestable y, en un entorno infinitamente cercano a la bifurcación, la solución estable emergente será igual a la perturbada. Por ello, existen tres tipos distintos de bifurcaciones debidas a cambios de estabilidad:

1. **Bifurcación armónica.** Se produce cuando una pareja de autovalores colisiona en  $\theta = 0$ . En ese caso,  $\tilde{\omega}_b = 0$ , por lo que  $\tilde{u}(t) = u(t) + v(t)$  y las soluciones emergentes tienen la misma frecuencia.

2. **Bifurcación subarmónica.** Se produce cuando una pareja de autovalores colisiona en  $\theta = \pi$ . En ese caso,  $\tilde{\omega}_b = (2k + 1)\omega_b/2$  con  $k \in \mathbb{N}$ , por lo que  $\tilde{u}(t)$  oscilará con periodo  $2T$ . En otras palabras, se produce una duplicación de periodo.
3. **Bifurcación oscilatoria o de Hopf.** Se produce cuando un cuadruplete de autovalores se sale del círculo, es decir, dos parejas conjugadas de autovalores se salen en  $\theta \neq 0$  ó  $\theta \neq \pi$ . A este tipo de colisiones también se les conoce como *Krein crunches* (o “colisiones de Krein”). Si el ángulo en el que se produce la colisión es distinto de  $\pi p/q$  con  $p, q \in \mathbb{Z}$ , la frecuencia de la solución emergente  $\tilde{\omega}_b$  es inconmensurable con la frecuencia de la solución original  $\omega_b$ , por lo que la soluciones emergentes serán cuasi-periódicas. En otras palabras, se produce una bifurcación oscilatoria, lo cual implica que la solución emergente oscila respecto a la inicial.

Las soluciones cuasi-periódicas en sistemas hamiltonianos no se pueden calcular con los métodos desarrollados en el capítulo 3. Es más, el teorema de existencia las prohíbe, pues siempre hay una combinación lineal de las dos frecuencias que resuena con algún múltiplo entero de las frecuencias de los fonones. Sin embargo, este tipo de soluciones sí existen en el contexto de la ecuación DNLS [111, 112] y del modelo de Holstein adiabático [19]. Recientemente, Bambusi y Vella [28] han demostrado la existencia de breathers cuasi-periódicos, basándose en el concepto de límite anti-continuo. Esta prueba de existencia es válida siempre que el sistema tenga una integral de movimiento distinta del hamiltoniano.

En sistemas disipativos se pueden obtener fácilmente soluciones cuasi-periódicas [145], ya que las resonancias con los fonones no producen la desaparición del breather.

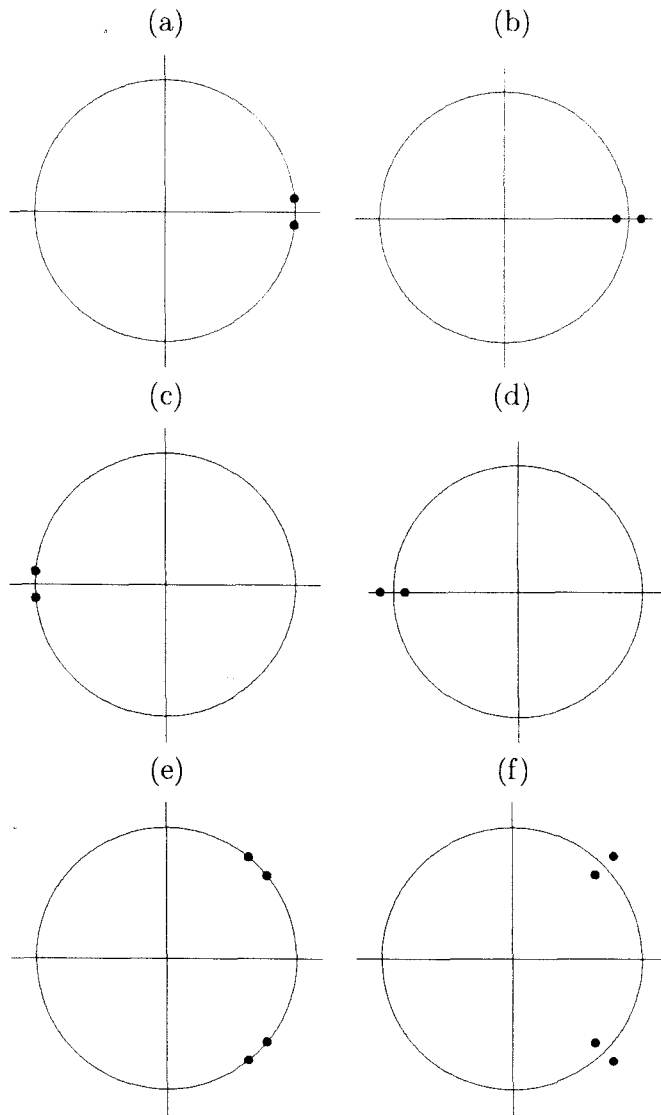
Un esquema de cómo se visualizan estas bifurcaciones en el círculo unidad se encuentra en la figura 4.2.

#### 4.4. Estabilidad lineal de los breathers

Una vez vistas las herramientas para el análisis de la estabilidad lineal, se puede proceder al estudio de la estabilidad de las soluciones tipo breather. Para ello, se parte de la forma del espectro del operador de Floquet en el límite anti-continuo y se verá cómo varía cuando se introduce el acoplamiento entre las partículas.

##### 4.4.1. Análisis de estabilidad lineal en el límite anti-continuo

Supongamos una red finita de  $N$  osciladores en la que se induce un breather tal que en el límite anti-continuo posea un solo sitio excitado. En esta situación, los osciladores se desacoplan de forma que el excitado se describe mediante una ecuación de Hill:



**Fig. 4.2:** Esquemas para bifurcación armónica, (a) y (b), subarmónica, (c) y (d), y de Hopf, (e) y (f). Las figuras de la izquierda muestran los autovalores antes de colisionar y las de la derecha muestran los autovalores después de la colisión, es decir, en una situación de inestabilidad.

$$\xi_o(t) + V''(u_o(t))\xi_o(t) = 0, \quad (4.17)$$

mientras que los osciladores en reposo se describen por:

$$\xi_n(t) + \omega_o^2 \xi_n(t) = 0, \quad (4.18)$$

donde  $\omega_o$  es la frecuencia de las oscilaciones de pequeña amplitud.

La ecuación (4.17) tiene como solución  $\xi_o(t) = \dot{u}(t)$  y  $\xi_o(t) = u_\omega \equiv \partial u / \partial \omega_b$ , como se puede comprobar derivando las ecuaciones dinámicas respecto al tiempo y respecto a la frecuencia. Estas soluciones se denominan *modo de fase* y *modo de crecimiento*, respectivamente. El primer modo aparece debido a que el sistema es invariante bajo traslación temporal. El segundo, en cambio, debe su nombre a que una perturbación en su dirección hace saltar la órbita del oscilador a otra de distinta frecuencia. Como se puede ver en el apéndice A, el modo de crecimiento tiene la forma  $u_\omega = \gamma(t) + t\dot{u}(t)$ , donde  $\gamma(t)$  es una función periódica. Por tanto, el modo de crecimiento diverge de manera lineal. Por este motivo, se dice que el modo de crecimiento es un *modo marginal*, pues una perturbación en su dirección sólo diverge linealmente, lo cual es estable en sentido físico (pero no en sentido matemático), ya que en el sistema completo da lugar a otra solución próxima estable.

Como se demuestra en el apéndice A, ambos modos se corresponden con un bloque de Jordan en el operador de Floquet con un multiplicador doblemente degenerado cuyo valor es +1. Este bloque de Jordan no es diagonalizable, por lo que el modo de crecimiento no es autovector y no se puede obtener mediante las rutinas numéricas usuales de diagonalización de matrices.

En el caso de la ecuación (4.18), tenemos el autovector  $\xi_n(t) = e^{\pm j\omega_o T} \xi_n(0)$ , que estará  $N - 1$  veces degenerado. El argumento de Floquet correspondiente será  $\theta = \pm\omega_o T \bmod 2\pi$ . Estos modos  $\xi_n(t)$  se corresponden con las oscilaciones lineales.

En el caso de un multibreather con  $p$  sitios excitados, tendremos que el modo de fase y de crecimiento estarán  $p$  veces degenerados, mientras que los modos lineales lo estarán  $N - p$  veces.

Teniendo en cuenta estos resultados, se puede calcular la signatura de Krein de los autovalores. Los autovalores en +1 tienen signatura de Krein nula, mientras que los autovalores en  $\theta = \pm\omega_o T$  tienen signatura  $\kappa = +1$  si  $\theta \in (0, \pi)$  y  $\kappa = -1$  si  $\theta \in (-\pi, 0)$  (ver apéndice A). Recordemos que la signatura de Krein es nula en  $\theta = 0$  y  $\theta = \pi$ . Esto implica que, para que un breather sea estable, debe cumplirse la siguiente condición de resonancia:

$$\frac{n}{2}\omega_b \neq \omega_o, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.19)$$

Si  $n$  es par, se reobtienen las condiciones de no resonancia impuestas por el teorema de MacKay–Aubry (resonancias armónicas). Si  $n$  es impar, este tipo de resonancia se llaman subarmónicas, las cuales son equivalentes a las resonancias

paramétricas de la ecuación de Hill [137]. En resumen, siempre que se cumpla la condición de no resonancia (4.19), la solución próxima al límite anti-continuo es estable.

#### 4.4.2. Efecto del acoplamiento en la estabilidad

##### 1-site breathers

Cuando las partículas del sistema se acoplan, el autovalor doble en  $+1$  se mantiene, pues  $\dot{u}(t)$  sigue siendo solución del problema de autovalores. El resto de los modos seguirán correspondiendo a oscilaciones de pequeña amplitud, siempre que el acoplo sea bajo. Por ello, los autovalores situados en  $\theta \neq 0$  para  $C = 0$  se expandirán formando una banda: *la banda de fonones*. En el caso de un acoplamiento de próximos vecinos, la banda viene dada por la relación de dispersión:

$$\omega_{\text{ph}} = \sqrt{\omega_0^2 + 4C \sin^2(q/2)}, \quad -\pi < q < \pi. \quad (4.20)$$

En sistemas infinitos estas bandas forman un conjunto denso [133]. La signatura de Krein de la banda del semiplano superior es distinta de la del semiplano inferior. Por ello, en principio, sólo hay dos modos de que el sistema se desestabilice <sup>2</sup>:

- Las bandas se solapan en  $+1$ . Esto haría que el breather dejara de existir ya que no se cumpliría la condición de no resonancia del teorema de MacKay-Aubry (la frecuencia del breather resonaría con la de los fonones).
- Las bandas se solapan en  $-1$ . En este caso, se tendría una resonancia subarmónica, la cual daría lugar a una bifurcación de duplicación de periodo, tal como vimos en la sección anterior.

Sin embargo, pueden ocurrir dos fenómenos que modifican este panorama. El primero se debe al hecho de que la condición de no resonancia subarmónica es necesaria pero no suficiente para la desestabilización del breather. Esto ocurre, por ejemplo, cuando se considera una red con un potencial de Morse on-site y un acoplamiento armónico y atractivo.

El otro fenómeno, el cual es de importancia capital para la posible movilidad de los breathers, consiste en que, tal como muestran Baesens *et al* [24], existen ciertos tipos de redes en las cuales, a partir de un valor umbral del acoplamiento, aparecen modos exponencialmente localizados. Si un modo se aísla del conjunto denso de valores que forma la banda de fonones, el modo estará localizado. Este hecho puede entenderse a partir del análisis de colas del breather (Sección 2.5.2). No obstante, pueden existir también modos localizadas dentro de la banda de fonones.

El origen físico de estos modos localizados radica en el hecho de que al aumentar el acoplamiento del sistema, el número de partículas que se excitan va aumentando,

<sup>2</sup> Este hecho es independiente de que la constante de acoplo sea positiva o negativa.

lo cual produce una disminución de los grados de libertad correspondientes a las oscilaciones de pequeña amplitud.

Pues bien, estos modos localizados pueden colisionar en  $\theta = 0$  produciendo bifurcaciones armónicas. Estas bifurcaciones no destruyen al breather pues la condición de no resonancia del teorema de existencia se sigue cumpliendo. También pueden hacerlo para otros valores de  $\theta$  dando lugar al escenario de bifurcaciones expuesto con anterioridad.

El valor en el que se localizan los modos depende del modelo y, por el momento, no es posible predecirlo. Además, existen casos en los que estos modos localizados ni siquiera aparecen.

En la figura 4.3 se pueden encontrar ejemplos de estos efectos.

#### *Evolución de los autovalores*

A partir de la relación de dispersión de los fonones se puede conocer de manera cualitativa la evolución con el acoplo de los multiplicadores de Floquet, teniendo en cuenta la frecuencia del breather y el signo de la constante de acoplamiento.

La banda de fonones se expande entre los valores  $\theta_o$  y  $\theta_1$ , que vienen dados por:

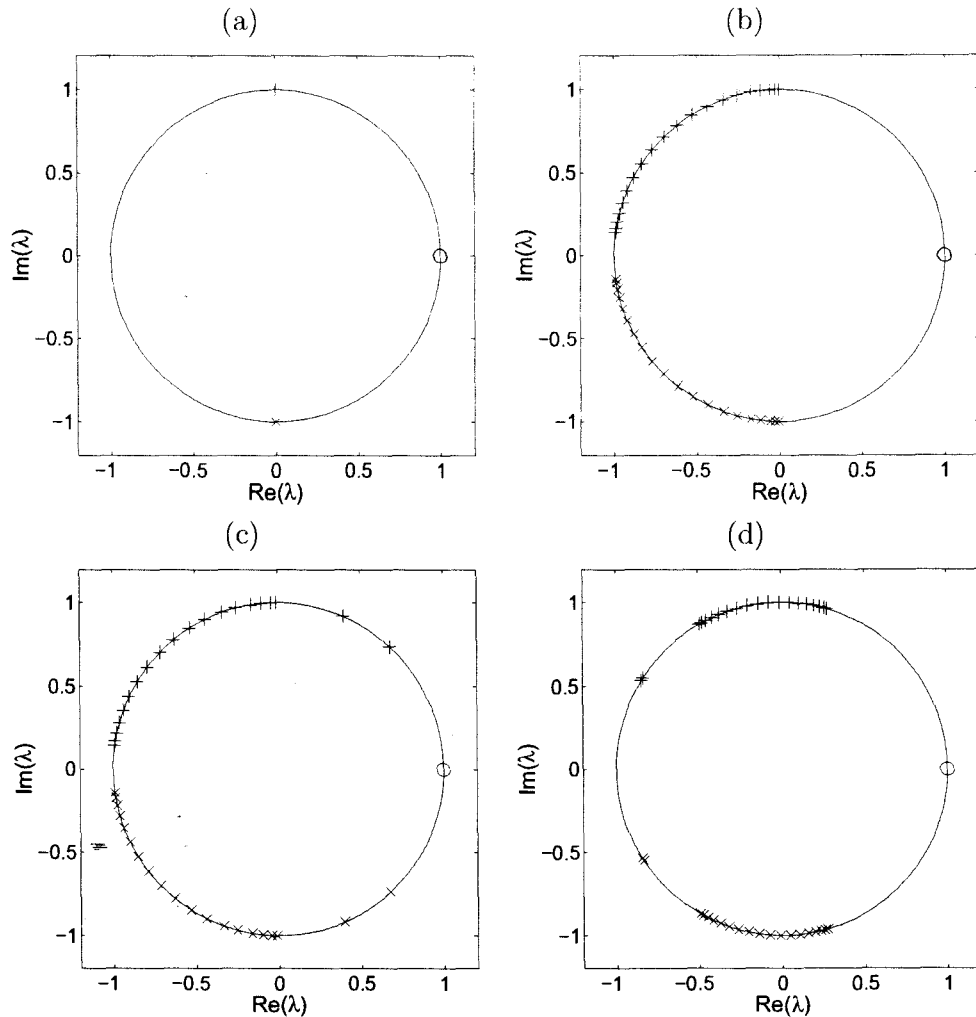
$$\theta_o = \frac{2\pi\omega_o}{\omega_b} \pmod{2\pi}; \quad \theta_1 = \frac{2\pi\omega_o}{\omega_b} \sqrt{1 + \frac{4C}{\omega_o^2}} \pmod{2\pi}. \quad (4.21)$$

Como se puede observar,  $\theta_1 > \theta_o$  si  $C > 0$  y  $\theta_1 < \theta_o$  si  $C < 0$ . Supongamos un potencial duro y un acoplamiento positivo. En ese caso, habrá dos comportamientos diferentes dependiendo de la frecuencia. Así, si  $\omega_b > 2\omega_o$ ,  $\theta_o < \pi$ , lo cual implica que el borde inferior de la banda está "a la derecha" del borde superior. Si  $\omega_o < \omega_b < 2\omega_b$ ,  $\theta_o > \pi$ , y el borde inferior estará "a la izquierda". En consecuencia, cuando se localiza un modo, tendrá un patrón de vibración similar al del breather. En el caso de un potencial duro, la localización provendrá entonces del borde superior de la banda. Así, en el primer caso, los modos localizados colisionarían en  $-1$ , mientras que en el segundo, lo harían en  $+1$ .

En el caso de un potencial blando (con acoplamiento positivo), el comportamiento es similar. Si  $\omega_b/\omega_o \in (2/2k+1, 1/k)$  con  $k = 1, 2, 3, \dots$ , entonces  $\theta_o < \pi$ . Si  $\omega_b/\omega_o \in (1/k+1, 2/2k+1)$ , entonces  $\theta_o > \pi$ . Ahora, los modos localizados saldrán del borde inferior de la banda, por lo que, en el primer caso, las colisiones tienen lugar en  $+1$ , mientras que en el segundo, las colisiones ocurren en  $-1$ .

En el caso de acoplamiento negativo, la posición relativa de  $\theta_1$  y  $\theta_o$  se invierte con respecto al caso  $C > 0$ . Esto implica que la expansión de la banda sea contraria al caso anterior. Además, los autovalores que se localizan lo hacen por el borde superior de la banda si el potencial es blando y por el borde inferior, si es duro. Esto se debe a que los patrones de vibración se intercambian cuando varía el signo del acoplamiento.

En las figuras 4.4 a la 4.7 se ilustran los diferentes casos con diversos ejemplos.



**Fig. 4.3:** Multiplicadores de Floquet en distintos casos. (a) Breather con frecuencia  $\omega_b = 0,8$  en el límite anti-continuo. (b) Breather con la misma frecuencia, potencial de sine-Gordon y acoplamiento  $C = 0,10$ . Se puede observar la expansión de la banda de fonones hacia  $-1$ . (c) Breather con los mismos parámetros que en el caso anterior pero con potencial de Morse. Se puede observar, además de la expansión de la banda de fonones, la existencia de modos localizados que se mueven hacia  $+1$ . (d) Breather con potencial de Morse, frecuencia  $\omega_b = 0,6$  y acoplamiento  $C = 0,04$ . Se observa ahora una expansión de la banda hacia  $+1$  y la existencia de modos localizados que se mueven hacia  $-1$ .



### Multibreathers

Recordemos que en el caso de los multibreathers en el límite anti-continuo, existen  $p$  parejas de autovalores en  $+1$ , mientras que hay  $N - p$  parejas conjugadas en  $\theta \neq 0$ . Cuando el sistema se acopla, el efecto sobre los autovalores correspondientes a oscilaciones de pequeña amplitud es similar al caso de los 1sB, de forma que la banda de fonones evoluciona de manera similar.

Sin embargo, las  $p$  parejas de autovalores en  $+1$  tienen un comportamiento distinto. De entrada, sabemos que hay una pareja (la correspondiente a los modos de fase y crecimiento) que siempre permanecerá en ese punto. La incógnita es saber qué ocurre con las  $p - 1$  parejas restantes, ya que cuando el sistema se acopla, se rompe la degeneración. Obviamente, se pueden presentar dos casos:

- Que los autovalores se salgan del círculo, volviéndose el sistema inestable.
- Que los autovalores se queden en el círculo, y se comporten de manera parecida a los modos localizados que mostramos en el caso de los 1sB. Además, los modos localizados pueden colisionar con los modos extendidos de la banda de fonones (o con otros modos localizados que hayan partido de ésta) y producir bifurcaciones oscilatorias debidas a colisiones de Krein (es decir, en  $\theta \neq 0$  ó  $\theta \neq \pi$ ).

Este comportamiento se puede predecir mediante el Teorema de Estabilidad de Multibreathers (TEM), que se encuentra explicado en la Sección 4.6 y demostrado en el Apéndice B. Este teorema puede aplicarse fácilmente siempre que el potencial de acoplamiento sea armónico y los sitios excitados en el multibreather sean adyacentes, siendo los resultados independientes del tipo del potencial on-site.

A continuación, se exponen los resultados obtenidos mediante la aplicación del TEM para 2-site breathers (2sB), es decir, breathers con dos sitios adyacentes excitados en el límite anti-continuo. Los resultados coinciden con los predichos por un teorema de Aubry<sup>3</sup>. Así, existen varios casos cuando se introduce el acoplamiento en la red, dependiendo de que el potencial sea blando o duro, que el 2sB esté en fase ( $\sigma = \{\dots, 1, 1, \dots\}$ ) o en anti-fase ( $\sigma = \{\dots, 1, -1, \dots\}$ ), o que el acoplamiento sea atractivo ( $C > 0$ ) o repulsivo ( $C < 0$ ).

Los resultados para acoplamiento atractivo se resumen en la siguiente tabla (el caso de acoplamiento repulsivo es el opuesto):

Código	Potencial blando	Potencial duro
1 1	<i>Inestable</i>	<i>Estable</i>
1 -1	<i>Estable</i>	<i>Inestable</i>

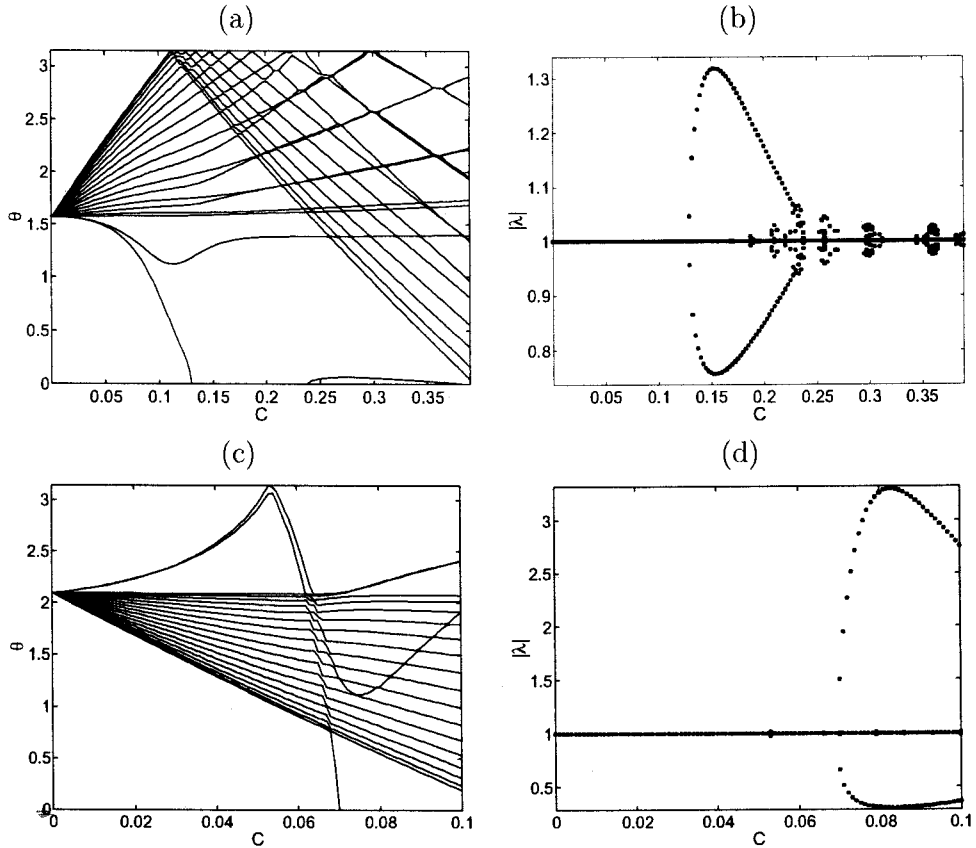
Estos hechos se pueden verificar en las figuras 4.8–4.11.

<sup>3</sup> Este teorema no está publicado pero sí está enunciado y demostrado para acoplamientos armónicos en la tesis de José Luis Marín [137]

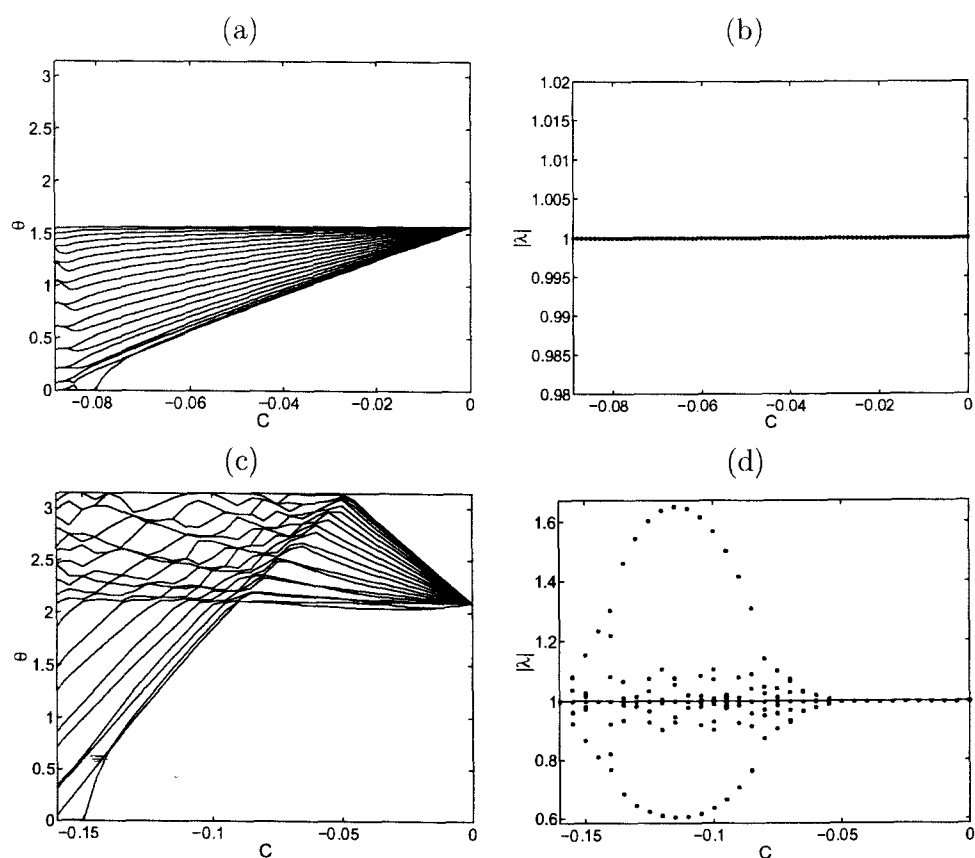
El TEM también se puede aplicar para predecir el comportamiento de 3-site breathers, es decir, breathers con tres sitios adyacentes excitados en el límite anti-continuo. La siguiente tabla muestra el comportamiento para  $C > 0$ :

Código	Potencial blando	Potencial duro
1 1 1	<i>Inestable</i>	<i>Estable</i>
1 -1 1	<i>Estable</i>	<i>Inestable</i>
1 1 -1	<i>Inestable</i>	<i>Inestable</i>

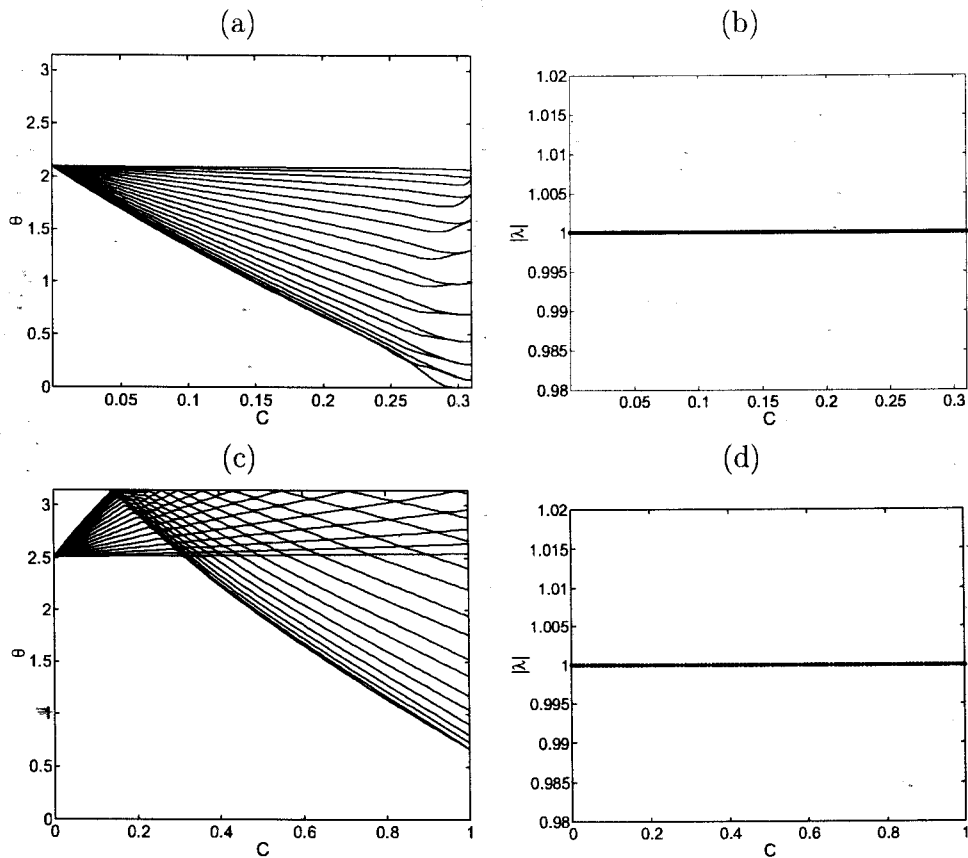
Se puede establecer, en general, que si en un  $n$ -site breather (es decir, un multibreather con  $n$  sitios adyacentes excitados), todos los valores del código distintos de cero son iguales a  $+1$ , el comportamiento es idéntico al del 2sB con código  $\sigma = \{\dots, 1, 1, \dots\}$ , mientras que si existe una alternancia entre  $1$  y  $-1$ , el comportamiento será equivalente al 2sB con  $\sigma = \{\dots, 1, -1, \dots\}$ . En cualquier otro caso, el multibreather es inestable para cualquier tipo de potencial y signo de la constante de acoplo.



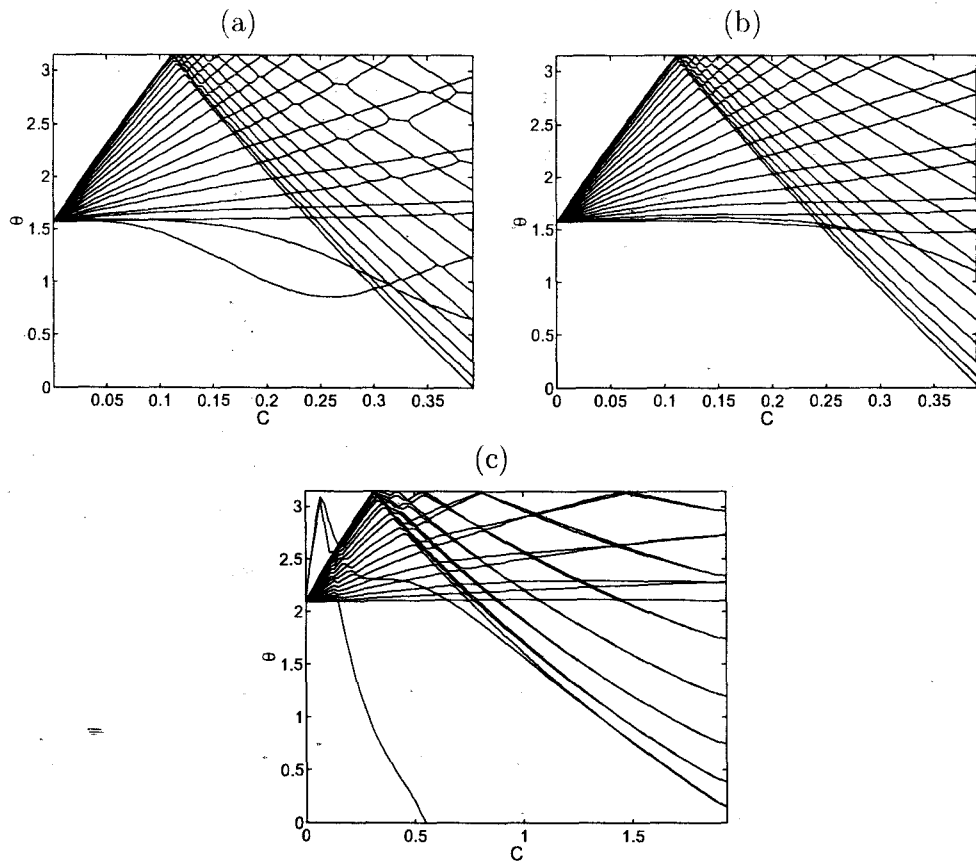
**Fig. 4.4:** Evolución con el acoplo de los argumentos de Floquet (izquierda) y del módulo de los autovalores (derecha) para un breather con potencial de Morse y acoplamiento positivo. Las figuras superiores corresponden a una frecuencia  $\omega_b = 0,8$  y las inferiores a  $\omega_b = 0,6$ . Como se puede comprobar, el breather con frecuencia  $\omega_b = 0,8$  es estable hasta  $C \approx 0,13$ , momento en el que un modo localizado experimenta una bifurcación armónica. Sin embargo, para  $C \approx 0,24$ , el breather recupera su estabilidad. Además, se observa a partir de  $C \approx 0,17$  la formación de “burbujas de inestabilidad” vía bifurcaciones oscilatorias y subarmónicas. Estas últimas tienen su origen en el tamaño finito del sistema. En el caso  $\omega_b = 0,6$ , dos modos se localizan y evolucionan hacia  $\theta = \pi$ . Se produce una pequeña colisión en  $C \approx 0,053$  y el sistema sigue siendo estable hasta que dos modos localizados colisionan en  $\theta = 0$  para  $C \approx 0,07$ .



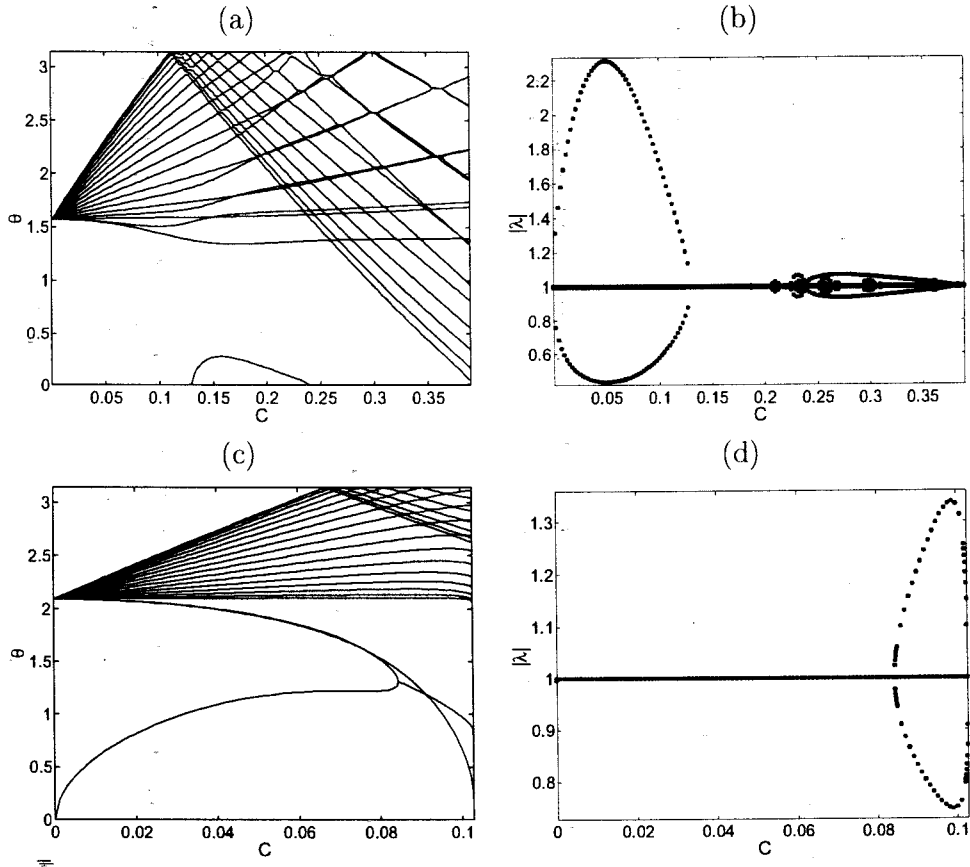
**Fig. 4.5:** Evolución con el acoplo de los argumentos de Floquet (izquierda) y del módulo de los autovalores (derecha) para un breather con potencial de Morse y acoplamiento negativo. Las figuras superiores corresponden a una frecuencia  $\omega_b = 0,8$  y las inferiores a  $\omega_b = 0,6$ . El breather con frecuencia  $\omega_b = 0,8$  es siempre estable hasta  $C \approx -0,08$  y la banda de fonones se expande hacia  $\theta = 0$ . En el caso  $\omega_b = 0,6$ , el breather es estable hasta que las bandas se solapan en  $C \approx -0,055$ . En ambos casos, sólo se observan modos localizados cuando el acoplamiento es alto y ya está cerca de producirse la resonancia con los fonones.



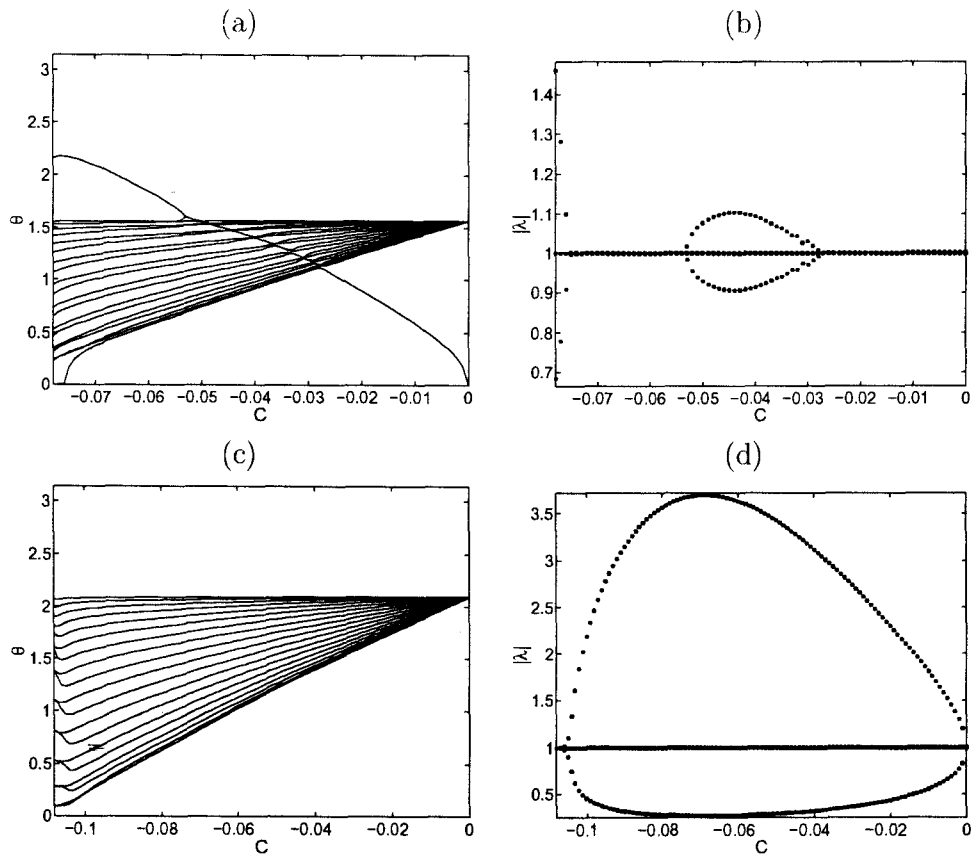
**Fig. 4.6:** Evolución con el acoplo de los argumentos de Floquet (izquierda) y del módulo de los autovalores (derecha) para un breather con potencial  $\phi^4$  duro y acoplamiento positivo. Las figuras superiores corresponden a una frecuencia  $\omega_b = 1,5$  y las inferiores a  $\omega_b = 2,5$ . Las dos familias de breathers son siempre estables. Se puede observar que en el caso  $\omega_b = 1,5$  la banda de fonones evoluciona hacia  $\theta = 0$ , mientras que para  $\omega_b = 2,5$  lo hace hacia  $\theta = \pi$ .



**Fig. 4.7:** Evolución con el acoplo de los argumentos de Floquet para un breather (a) con potencial  $\phi^3$  y  $\omega_b = 0,8$ , (b) con potencial de sine-Gordon y  $\omega_b = 0,8$  y (c) con potencial  $\phi^4$  duro on-site y de acoplo y  $\omega_b = 3$ . En el primer caso, se observa la existencia de dos modos localizados que se salen de la banda de fonones pero que posteriormente vuelven a entrar en ella. En el segundo caso, no existen modos localizados. En el tercer caso, existe un modo localizado que bifurca en  $\theta = 0$  produciendo una inestabilidad.

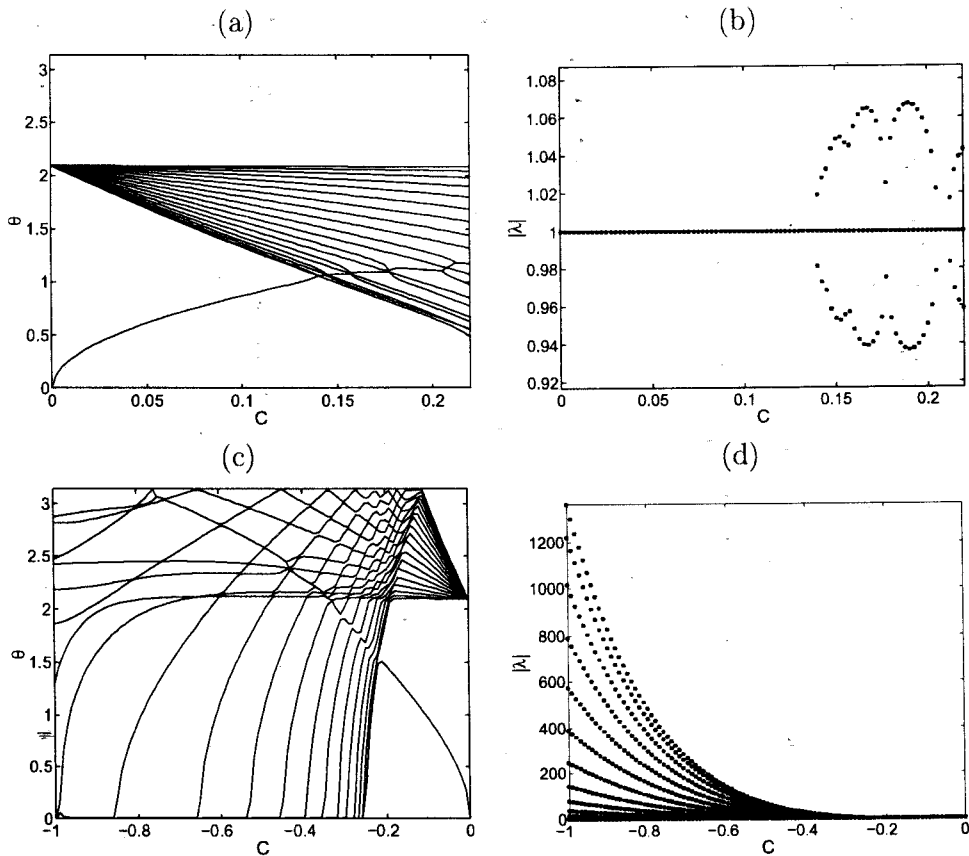


**Fig. 4.8:** Evolución con el acoplo de los argumentos de Floquet (izquierda) y del módulo de los autovalores (derecha) para dos 2sB con potencial de Morse y acoplamiento positivo. Las figuras superiores corresponden a un 2sB en fase con frecuencia  $\omega_b = 0,8$ , mientras que las inferiores lo hacen con un 2sB en anti-fase de frecuencia  $\omega_b = 0,75$ . Como se puede comprobar, el 2sB en fase es inestable hasta  $C \approx 0,13$ , momento en el que entra en el círculo unidad un autovalor que estaba antes fuera de él. Sin embargo, para  $C \approx 0,24$ , el 2sB recupera su estabilidad. Como vemos, este comportamiento es el opuesto al caso del 1sB con las mismas características (Figura 4.4a). Este hecho, denominado *intercambio de estabilidad* es muy importante a la hora de producir un breather móvil. El 2sB en anti-fase es estable hasta  $C \approx 0,0885$ , momento en el que experimenta una bifurcación oscilatoria. Los dos modos que colisionan tienen su origen en un modo que se localiza de la banda de fonones y en uno de los modos que estaban en  $\theta = 0$  en el límite anti-continuo.

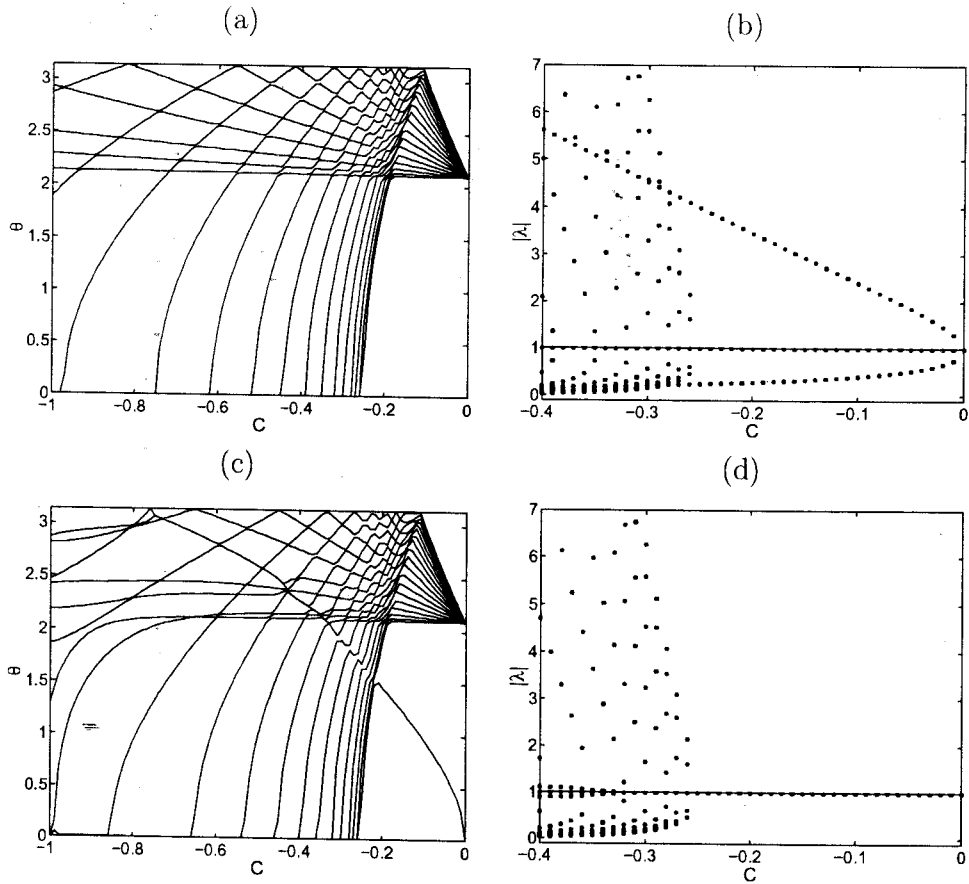


**Fig. 4.9:** Evolución con el acoplo de los argumentos de Floquet (izquierda) y del módulo de los autovalores (derecha) para dos 2sB con potencial de Morse y acoplamiento negativo. Las figuras superiores corresponden a un 2sB en fase con frecuencia  $\omega_b = 0,8$ , mientras que las inferiores lo hacen con un 2sB en anti-fase de frecuencia  $\omega_b = 0,75$ . El 2sB en fase es estable hasta que un modo localizado, cuyo autovalor estaba inicialmente en  $-1$ , colisiona con la banda de fonones en  $C \approx -0,028$ , produciéndose una bifurcación oscilatoria, recuperando su estabilidad en  $C \approx -0,054$ . El 2sB en anti-fase, en cambio, es siempre inestable.





**Fig. 4.10:** Evolución con el acoplo de los argumentos de Floquet (izquierda) y del módulo de los autovalores (derecha) para dos 2sB con potencial  $\phi^4$  duro, acoplamiento positivo y frecuencia  $\omega_b = 1,5$ . Las figuras superiores corresponden a un 2sB en fase, mientras que las inferiores lo hacen con un 2sB en anti-fase. Como se puede comprobar, el 2sB en fase es estable hasta que un modo localizado colisiona con la banda de fonones en  $C \approx 0,14$ , produciéndose una bifurcación oscilatoria. En cambio, el 2sB en anti-fase es inestable para todo valor de  $C$ .



**Fig. 4.11:** Evolución con el acoplo de los argumentos de Floquet (izquierda) y del módulo de los autovalores (derecha) para dos 2sB con potencial  $\phi^4$  duro, acoplamiento negativo y frecuencia  $\omega_b = 1,5$ . Las figuras superiores corresponden a un 2sB en fase, mientras que las inferiores lo hacen con un 2sB en anti-fase. Como se puede comprobar, el 2sB en fase es siempre inestable. En cambio, el 2sB en anti-fase es estable hasta que para  $C \approx -0,26$  comienza una cascada de bifurcaciones armónicas.

## 4.5. Teoría de bandas de Aubry

### 4.5.1. Introducción

Hemos visto que el análisis de Floquet nos permite conocer la estabilidad de un breather e incluso predecir algunos fenómenos. Sin embargo, existen otros hechos de los que no puede dar cuenta. Además, hay ciertas situaciones en las que no se puede saber con exactitud si un breather es estable o no porque pueden aparecer errores numéricos cuando hay varios autovalores con valores similares. Por ello, Aubry [19] introdujo un análisis más completo de la estabilidad, basándose en el hecho de que la ecuación dinámica de la perturbación (4.2) es equivalente a una red de osciladores paramétricos. Estos osciladores están descritos por ecuaciones de Hill, las cuales son equivalentes a la ecuación de Schrödinger para un electrón en un potencial periódico, salvo que la periodicidad en la ecuación de Hill es en el tiempo. Es bien sabido que las soluciones para la ecuación de Schrödinger en el caso anteriormente mencionado tienen una estructura de bandas, la cual aparecerá también en la ecuación de Hill.

Como vimos en la sección 4.2, la ecuación de autovalores del operador de Newton es:

$$\mathcal{N}(u(t))\xi = E\xi. \quad (4.22)$$

El teorema de Bloch implica que los autovalores forman un conjunto de bandas  $E_\nu(\theta)$ , las cuales no se solapan. Además,  $E_\nu(\theta)$  es una función continua, no constante y de periodo  $2\pi$ . Debido a que las autofunciones del operador de Newton se pueden elegir como funciones de Bloch (ecuación (4.8)), el parámetro  $\theta$ , también llamado parámetro de fase, cumplirá la ecuación:

$$\xi(\theta, T) = e^{j\theta_\nu(E)}\xi(\theta, 0), \quad (4.23)$$

El parámetro  $\theta$  se elige de forma que esté en la primera zona de Brioullin, es decir,  $\theta \in (-\pi, \pi]$ . Así, al conjunto de autovalores  $E_\nu(\theta)$  tal que  $\theta$  pertenezca a la primera zona de Brioullin, se le denomina banda  $\nu$ .

Las bandas estarán asociadas a soluciones estables si  $\theta_\nu \in \mathbb{R}$ . Además, como a una autofunción  $\xi(t)$  le corresponde otra  $\xi^*(t)$  con el mismo autovalor  $E$  y argumento de Floquet  $-\theta_\nu(E)$ , las bandas serán simétricas respecto a  $\theta_\nu = 0$  (ver Apéndice A).

Los valores  $\theta(E)$  se obtienen diagonalizando la matriz  $\mathcal{F}_E$ , que se obtiene integrando las ecuaciones (4.6):

$$\begin{bmatrix} \xi(T) \\ \pi(T) \end{bmatrix} = \mathcal{F}_E \begin{bmatrix} \xi(0) \\ \pi(0) \end{bmatrix}. \quad (4.24)$$

La monodromía se corresponderá, lógicamente, con  $\mathcal{F}_o$ . Esto quiere decir que los argumentos de Floquet serán  $\theta_\nu(0)$ . Es decir, para que una solución sea estable,

deben existir  $2N$  bandas (contando la degeneración) que corten o sean tangentes al eje  $E = 0$ .

Este análisis de bandas permite mejorar el criterio de la signatura de Krein para prever si cuando dos autovalores coinciden en el círculo unidad se salen o no del círculo unidad. Se sabe, por lo visto en secciones anteriores, que el criterio es una condición necesaria pero no suficiente para que se produzca una colisión. Aubry [19] demuestra que la signatura de Krein es el opuesto del signo de la pendiente de la banda que corresponde a cada autovalor en  $E = 0$ , es decir,

$$\kappa(\theta_\nu) = -\text{sgn} \left( \left. \frac{dE_\nu(\theta)}{d\theta} \right|_{\theta=\theta_\nu} \right). \quad (4.25)$$

Como se muestra en [19], la condición necesaria y suficiente para que se produzca la colisión es que los autovalores pertenezcan a la misma banda, ya que en ese caso las pendientes en los puntos de bifurcación tendrán distinto signo. Este hecho se ve ilustrado en la figura 4.12, en la cual se muestra de manera esquemática la forma de las bandas en los distintos escenarios de bifurcaciones.

La teoría de bandas de Aubry se ha utilizado para entender cómo el tamaño finito de la red afecta a la estabilidad de las soluciones [141] y es la base para el estudio de la estabilidad de multibreathers.

#### 4.5.2. Estructura de bandas de un breather

Supongamos una red en la que se induce un multibreather con  $p$  sitios excitados. En el límite anti-continuo, la ecuación de autovalores del operador de Newton se desacopla de forma que quedan  $p$  ecuaciones de Hill:

$$\ddot{\xi}_o(t) + V''(u(t))\xi_o(t) = E\xi_o(t), \quad (4.26)$$

que se corresponden con los osciladores excitados. Por otro lado, los osciladores en reposo se describen mediante las  $N - p$  ecuaciones:

$$\ddot{\xi}_n(t) + \omega_o^2 \xi_n(t) = E\xi_n(t). \quad (4.27)$$

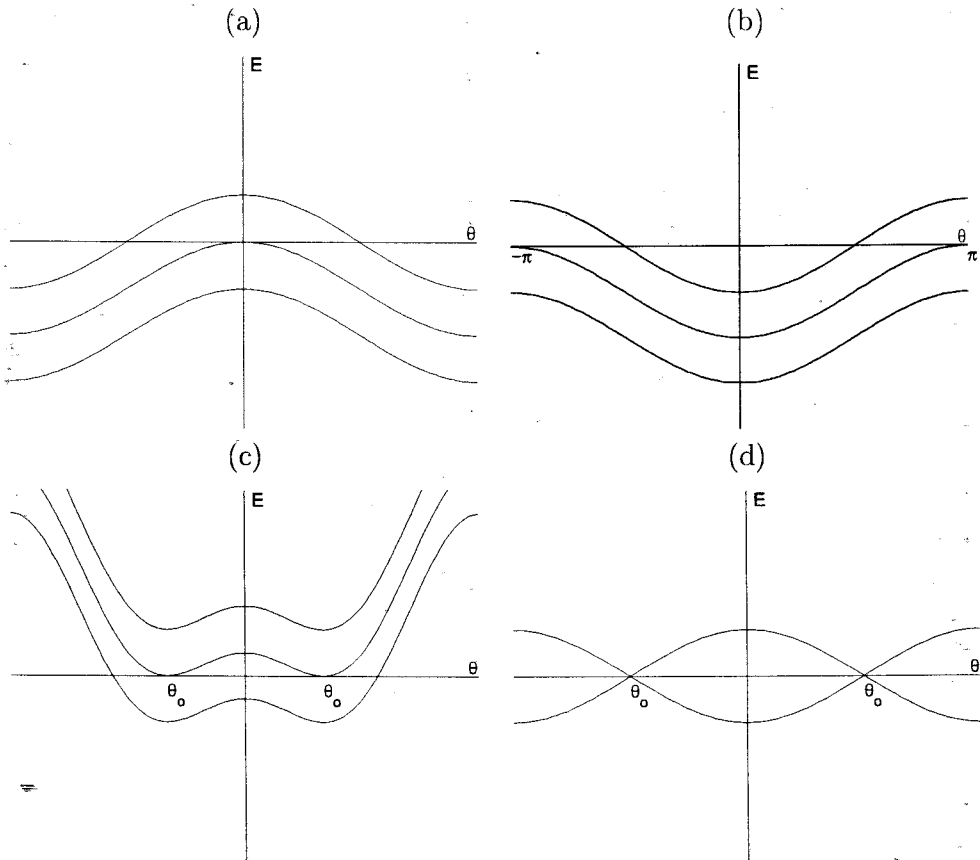
Estas últimas ecuaciones tienen por solución:

$$\xi_n(t) = e^{j\sqrt{\omega_o^2 - E}t} \xi_n(0), \quad (4.28)$$

por lo que, teniendo en cuenta la ecuación (4.23), el parámetro de fase se define de la forma:

$$\theta_\nu(E) = \frac{2\pi}{\omega_b} \sqrt{\omega_o^2 - E}, \quad (4.29)$$

de forma que  $\theta$  esté restringido a la primera zona de Brioullin. Así, las bandas que describen los osciladores en reposo vienen dadas por:



**Fig. 4.12:** Comportamiento de las bandas en diferentes tipos de bifurcaciones. La evolución del sistema es tal que cuando cambian los parámetros, el valor de  $E$  disminuye. (a) corresponde a una bifurcación armónica (se pierde la intersección en  $\theta = 0$ ); (b) lo hace con una bifurcación subarmónica (se pierde la intersección en  $\theta = \pi$ ); (c) y (d) muestran dos casos en los que dos autovalores de la monodromía coinciden en  $\theta_0$ . El primer caso se corresponde con una colisión de Krein pues los modos que coinciden pertenecen a la misma banda. El segundo caso representa a un cruce de los autovalores: no hay bifurcación pues los modos pertenecen a distintas bandas.

$$E_\nu(\theta) = \omega_o^2 - \omega_b^2 \left( \frac{\theta}{2\pi} \right)^2 \quad (4.30)$$

En el caso de los osciladores excitados, las bandas se obtienen integrando numéricamente las ecuaciones (4.26). Sin necesidad de realizar la integración se puede deducir que existe una banda tangente al eje  $E = 0$  debido a que  $\dot{u}(t)$  es solución de (4.26), de forma que el punto de tangencia es  $(E, \theta) = (0, 0)$  (ver Apéndice A). Esta banda tiene curvatura positiva si el potencial es blando, y negativa si es duro [121, 50].

La estructura de bandas está acotada para  $E > 0$  y no lo está para  $E < 0$ . Este hecho es válido tanto para los osciladores en reposo como excitados.

Cuando el sistema se acopla, las bandas pierden su degeneración. De todas las bandas correspondientes a los osciladores excitados, habrá una que permanezca tangente al eje  $E = 0$  debido a la existencia de un modo de fase global.

La figura 4.13 muestra, con un ejemplo concreto, la estructura de bandas tanto en el límite anti-continuo como para un valor determinado de la constante de acoplo.

Puede ocurrir que cuando varíe el acoplo, varias bandas se “mezclen”. Esto puede tener lugar entre bandas correspondientes a fonones o entre una banda correspondiente a un modo localizado y las bandas de los fonones. En ambos casos, se pueden abrir huecos que originan burbujas de inestabilidad [137, 141].

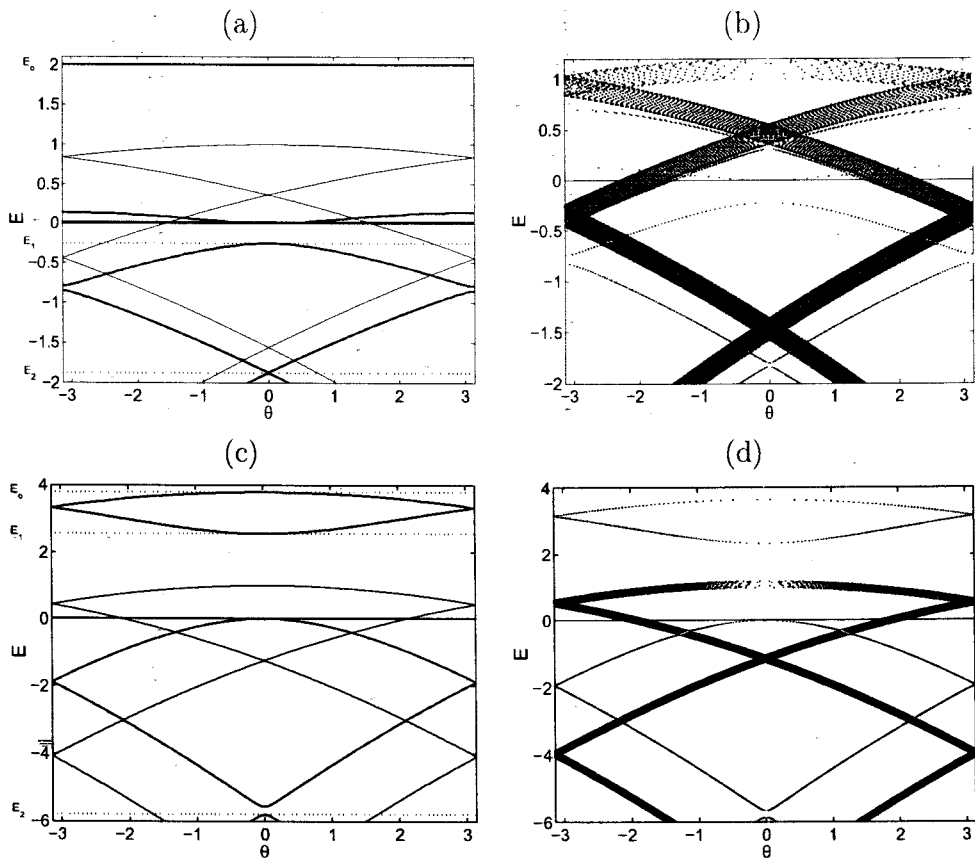
### 4.5.3. Relación entre las bandas de Aubry y los autovalores del jacobiano

Como vimos en la sección 4.2, el operador de Newton coincide con el jacobiano si las autofunciones  $\xi$  son periódicas reversibles y en el tiempo, es decir, si  $\xi \in \mathcal{E}_s^2(\omega_b)$ . Sin embargo, las teorías de Floquet y de Aubry exigen simplemente que  $\xi$  tenga segunda derivada continua, es decir,  $\xi \in \mathcal{C}^2$ . Esto indica que existen ciertas condiciones en las que las autofunciones del operador de Floquet  $\mathcal{F}_E$  coinciden con las autofunciones del jacobiano, ya que  $\mathcal{C}^2 \subset \mathcal{E}_s^2(\omega_b)$ .

¿Cuándo se dan estas condiciones? Pues bien, los autovectores del operador de Newton, según el teorema de Bloch, pueden ser expresados por la ecuación (4.8), es decir:

$$\xi(t) = e^{j\theta_\nu(E)t/T} v(t), \quad (4.31)$$

donde  $v(t)$  es una función periódica de periodo  $T$  y reversible en el tiempo. Por tanto, si  $\theta_\nu(E) = 0$ ,  $\xi(t)$  será periódica y reversible en el tiempo, es decir,  $\xi \in \mathcal{E}_s^2(\omega_b)$ . En otras palabras, *los autovalores del jacobiano coinciden con los cortes de las bandas con el eje  $\theta = 0$ , siempre que éstas correspondan a modos periódicos y reversibles en el tiempo*. Debido a ello, el modo de fase y el de crecimiento no aparecen en el espectro del jacobiano (ver Apéndice A).



**Fig. 4.13:** Diagramas de bandas en el límite anti-continuo (izquierda) y para un acoplo  $C = 0,05$  (derecha) correspondientes a un breather con potencial de Morse y frecuencia  $\omega_b = 0,8$  (arriba) y potencial  $\phi^4$  duro y frecuencia  $\omega_b = 1,5$  (abajo). Los valores  $E_0$ ,  $E_1$  y  $E_2$  indican los cortes con el eje  $E$  que se corresponden con autovalores del jacobiano (por claridad, sólo se han especificado en el límite anti-continuo). Obsérvese que el corte con el eje  $E$  para  $E = 0$  no aparece en el jacobiano, tal como se predice en el Apéndice A).

Este resultado ha sido expuesto por primera vez en [55]. Recordemos que el jacobiano se puede calcular mediante las derivadas de las ecuaciones de movimiento respecto a los coeficientes de Fourier de la solución,  $\partial F_n^k / \partial z_n^{k'}$  (ecuación (3.13)). Veamos que también estos resultados coinciden con los esperados según la teoría estándar de bifurcaciones.

Para que ocurra una bifurcación se debe anular un autovalor del jacobiano. Esto está de acuerdo con la teoría de bandas, pues según ésta, se debe perder una intersección con el eje  $E = 0$  para que haya un cambio de estabilidad. Según la teoría de bandas, las bifurcaciones oscilatorias debidas a colisiones de Krein y las bifurcaciones subarmónicas se deben a pérdidas de intersección con el eje  $E = 0$  para valores de  $\theta \neq 0$ , mientras que las bifurcaciones armónicas se deben a pérdidas de intersección en  $\theta = 0$ . Esto implica que, mediante el estudio del espectro del jacobiano, sólo pueden detectarse las bifurcaciones armónicas. Este hecho también se confirma por los resultados de las teorías de bifurcaciones. En efecto, cuando un autovalor del jacobiano se anula, es porque se deja de cumplir el teorema de la función implícita, es decir, el sistema deja de tener solución única en el espacio de trabajo. En el caso de una bifurcación armónica, las soluciones emergentes siguen perteneciendo a  $\mathcal{E}_s^2(\omega_b)$ . Sin embargo, cuando el bifurcación es subarmónica, las nuevas soluciones pertenecen a  $\mathcal{E}_s^2((2k + 1)\omega_b/2) \not\subseteq \mathcal{E}_s^2(\omega_b)$ ,  $k \in \mathbb{N}$  y cuando la bifurcación es oscilatoria, las soluciones dejan de ser periódicas.

## 4.6. Teorema de Estabilidad de Multibreathers

### 4.6.1. Formulación del Teorema

Como se ha comentado anteriormente, existe un teorema, en virtud del cual, se puede predecir la estabilidad o inestabilidad de un multibreather cuando se acopla el sistema. Este teorema, el cual conjuga la teoría de bandas de Aubry con la teoría de perturbaciones degeneradas, ha sido formulado recientemente por JFR Archilla y se encuentra en la referencia [12], aplicándose a potenciales asimétricos exclusivamente en la presente tesis. En esta sección nos limitaremos a exponer el teorema y la aplicación del mismo, de modo que la demostración se encuentra en el Apéndice B.

El sistema considerado es una red homogénea de tipo Klein–Gordon con acoplamiento armónico, aunque el teorema puede extenderse fácilmente a otro tipo de acoplamientos. Así, se pueden expresar las ecuaciones dinámicas de la forma:

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C \sum_{m=1}^N J_{nm} u_n = 0 \quad n = 1, \dots, N, \quad (4.32)$$

donde  $C$  es la constante de acoplo y  $J$  es una matriz de acoplo, la cual es constante e incluye las condiciones de contorno.

Recordemos que para un multibreather con  $p$  sitios excitados en el límite anti-continuo, existen  $p$  bandas degeneradas tangentes al eje  $E = 0$  en el punto  $(0, 0)$ .



Pues bien, el Teorema de Estabilidad de Multibreathers permite conocer los autovalores  $E_m$  del operador de Newton (4.6) cuando se rompe la degeneración debido a la introducción del acoplamiento. Estos autovalores vendrán dados por:

$$E_m = C\lambda_m, \quad m = 0, \dots, p-1, \quad (4.33)$$

siendo  $\lambda_m$  los autovalores de la matriz de la perturbación  $Q$ , la cual se construye siguiendo los siguientes pasos:

1. Se calcula el coeficiente de simetría  $\gamma$ , el cual viene dado por:

$$\gamma = -\frac{\sum_{k \geq 1} (-1)^k k^2 z_k^2}{\sum_{k \geq 1} k^2 z_k^2} > 0, \quad (4.34)$$

donde  $z_k$  son los coeficientes de Fourier de la solución de la ecuación dinámica de un oscilador aislado sometido al potencial on-site  $V$ . Nótese que este coeficiente es igual a la unidad si  $V$  es simétrico. En el caso del potencial de Morse,  $\gamma = \omega_b$ , tal como se demuestra en el Apéndice B.

2. Se construye la matriz  $\tilde{J}'$  de orden  $N$  cuyas componentes son iguales a:

$$\tilde{J}'_{nm} = \frac{1}{2} J_{nm} [(\sigma_n \sigma_m + 1) + \gamma(\sigma_n \sigma_m - 1)], \quad (4.35)$$

donde  $\sigma_n$  es la  $n$ -ésima componente del código del multibreather. Es decir,

$$\tilde{J}'_{nm} = \begin{cases} J_{nm} & \text{si } \sigma_n = \sigma_m \\ -\gamma J_{nm} & \text{si } \sigma_n \neq \sigma_m \end{cases} \quad (4.36)$$

3. Se considera la matriz  $\tilde{J}$ , de orden  $p$ , que será igual a  $\tilde{J}'$ , salvo que se han eliminado las filas y columnas correspondientes a osciladores en reposo en el límite anti-continuo.
4. La matriz de la perturbación  $Q$  será vendrá dada por:

$$Q_{nm} = \begin{cases} \tilde{J}_{nm} & \text{si } n \neq m \\ -\sum_{m \neq n} \tilde{J}_{nm} & \text{si } n = m \end{cases} \quad (4.37)$$

Debido a que la curvatura de las bandas consideradas es positiva si el potencial es blando y negativa si es duro, para que el multibreather sea estable se necesita que los autovalores  $E_m$  sean negativos (positivos) si el potencial es blando (duro).

Un hecho a destacar es que siempre existe un autovalor  $E_m$  nulo debido a la existencia del modo de fase global. Sin embargo, si existe más de un autovalor nulo, la teoría de perturbaciones de primer orden no se puede aplicar, siendo indefinida la predicción del TEM.

### 4.6.2. Aplicación del Teorema

En este apartado, generalizamos para potenciales asimétricos la aplicación del TEM para  $p$ -site breathers expuesta en [12]. Nótese la sencillez de la demostración de las propiedades de estabilidad de 2-site breathers, comparada con la que aparece en [137].

#### 2-site breathers

Tal como se vio en la sección 4.4.2, existen dos casos posibles. Estos vendrán dados por el código  $\sigma = \{0, \dots, 0, 1, \sigma_1, 0, \dots, 0\}$ , donde  $\sigma_1 = 1$  si los sitios excitados del 2-site breather están en fase y  $\sigma_1 = -1$  si están en oposición de fase.

La matriz de la perturbación  $Q$  vendrá dada por:

$$Q = \frac{1}{2}[(1 + \sigma_1) - \gamma(1 - \sigma_1)] \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (4.38)$$

Los autovalores de esta matriz serán  $\lambda_0 = 0$  y:

$$\lambda_1 = \begin{cases} -2 & \text{si } \sigma_1 = 1 \\ 2\gamma & \text{si } \sigma_1 = -1 \end{cases}. \quad (4.39)$$

Esto implica que el signo del autovalor  $E$  no nulo será opuesto al de la constante de acoplo  $C$  si el 2-site breather está en fase, mientras que ambos signos serán iguales si el 2-site breather está en anti-fase. Estos resultados están de acuerdo con los obtenidos en la Sección 4.4.2.

#### 3-site breathers

En este caso, consideraremos los multibreathers dados por el código  $\sigma = \{0, \dots, 0, \sigma_1, 1, \sigma_3, 0, \dots, 0\}$ . Habrá entonces tres casos diferentes:  $\sigma_1 = \sigma_3 = \pm 1$  y  $\sigma_1 \sigma_3 = -1$ .

Si la interacción es de primeros vecinos, la matriz  $Q$  es de la forma:

$$Q = \begin{bmatrix} \alpha_1 & -\alpha_1 & 0 \\ -\alpha_1 & \alpha_1 + \alpha_3 & -\alpha_3 \\ 0 & -\alpha_3 & \alpha_3 \end{bmatrix}, \quad (4.40)$$

donde:

$$\alpha_n = \frac{1}{2}[(1 + \sigma_n) - \gamma(1 - \sigma_n)]. \quad (4.41)$$

Así, la ecuación característica de la matriz  $Q$  es:

$$\lambda^3 - 2(\alpha_1 + \alpha_3)\lambda^2 + 3\alpha_1\alpha_3\lambda = 0. \quad (4.42)$$

Como cabría esperar, un autovalor ( $\lambda_0$ ) es cero. Sin necesidad de resolver la ecuación característica se puede saber cuándo los dos autovalores restantes tienen distinto signo, es decir,  $\lambda_1\lambda_2 < 0$ . Este hecho implicaría que el multibreather sería inestable, independientemente del tipo del potencial y del signo de la constante de acoplo, pues una banda subiría y otra bajaría. El valor de este producto es:

$$\lambda_1\lambda_2 = 3\alpha_1\alpha_3 = \begin{cases} 3 & \text{si } \sigma_1 = \sigma_2 = 1 \\ 3\gamma^2 & \text{si } \sigma_1 = \sigma_2 = -1 \\ -3\gamma & \text{si } \sigma_1\sigma_2 = -1 \end{cases} \quad (4.43)$$

Como podemos apreciar, siempre que  $\sigma_1$  y  $\sigma_3$  tengan distinto signo, el multibreather será inestable. En caso de que  $\sigma_1$  y  $\sigma_3$  fueran iguales, la estabilidad dependerá del tipo de potencial y del valor de la constante de acoplo.

El valor de los autovalores  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  se encuentra en la siguiente tabla:

Caso	$\lambda_1$	$\lambda_2$
$\sigma_1 = \sigma_3 = 1$	1	3
$\sigma_1 = \sigma_3 = -1$	$-\gamma$	$-3\gamma$
$\sigma_1\sigma_3 = -1$	$1 - \gamma - \sqrt{\gamma^2 + \gamma + 1}$	$1 - \gamma + \sqrt{\gamma^2 + \gamma + 1}$

Estos resultados implican los expuestos en la Sección 4.4.2. Las figuras 4.14 y 4.15 muestran los autovalores de la matriz  $Q$  con potenciales  $\phi^4$  blando y Morse, respectivamente, para 3-site breathers. En esas figuras pueden observarse también el rango de validez de la teoría de perturbaciones.

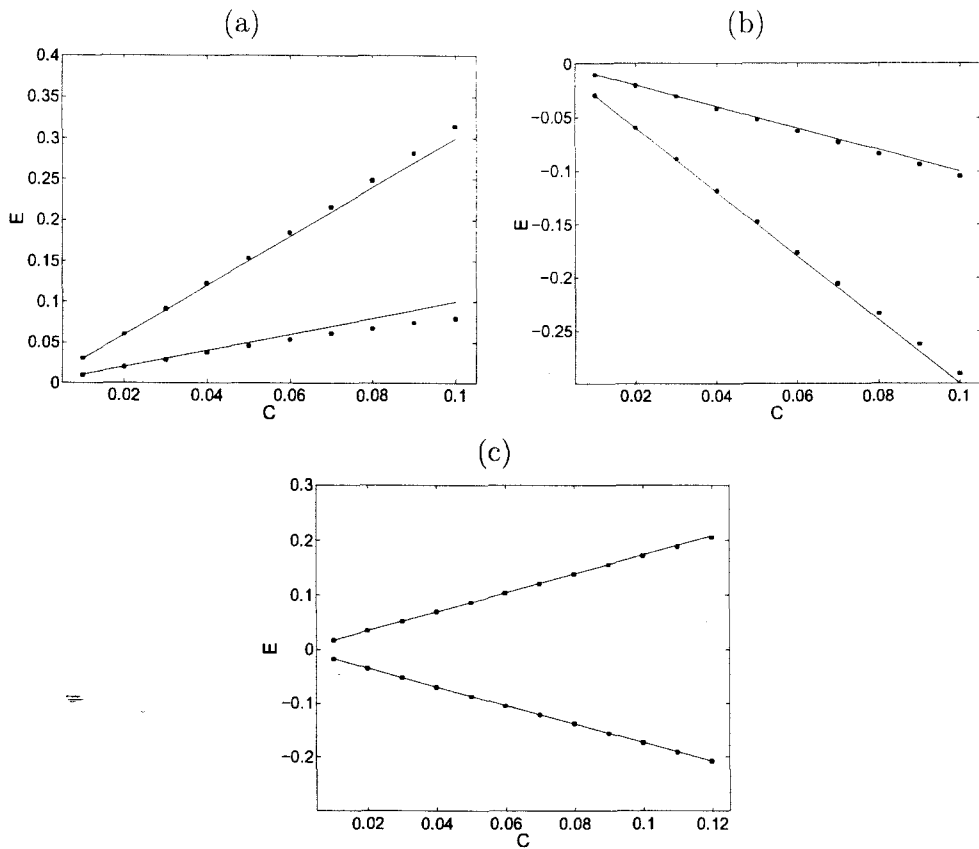
#### Multibreathers con un numero arbitrario de sitios

Supongamos que tenemos un multibreather con  $p$  sitios adyacentes excitados (es decir, un  $p$ -site breather) y que la interacción es de primeros vecinos. El TEM permite determinar fácilmente la estabilidad de aquellas soluciones en las que los sitios excitados vibran en fase o en zigzag.

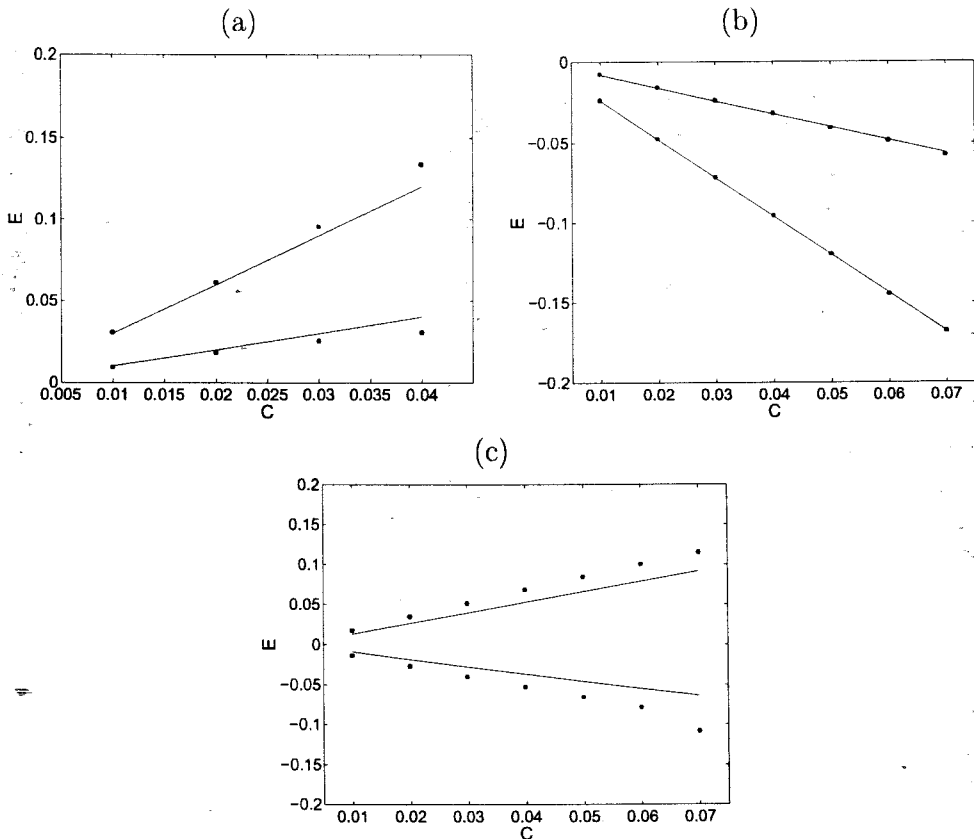
Si todos los osciladores están en fase, la matriz  $Q = Q_f$ , de orden  $p$ , será de la forma:

$$Q_f = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.44)$$

La diagonalización de esta matriz no es trivial a simple vista. Sin embargo, si se escribe la ecuación característica  $Qx = \lambda x$  en función de las componentes de los autovectores  $x = \{x_n\}$ ,



**Fig. 4.14:** Autovalores de la matriz de perturbación para distintos 3-site breathers con potencial  $\phi^4$ . (a) corresponde al código  $\{1, 1, 1\}$ , (b) a  $\{-1, 1, -1\}$  y (c) a  $\{-1, 1, 1\}$ . Los puntos representan los valores calculados mediante la teoría de bandas, mientras que las líneas corresponden a las predicciones del TEM.



**Fig. 4.15:** Autovalores de la matriz de perturbación para distintos 3-site breathers con potencial de Morse. (a) corresponde al código  $\{1, 1, 1\}$ , (b) a  $\{-1, 1, -1\}$  y (c) a  $\{-1, 1, 1\}$ . Los puntos representan los valores calculados mediante la teoría de bandas, mientras que las líneas corresponden a las predicciones del TEM.

$$\begin{cases} x_1 - x_2 = \lambda x_1 \\ 2x_n - x_{n+1} - x_{n-1} = \lambda x_n, \quad \forall n \neq 1, p \\ x_p - x_{p-1} = \lambda x_p \end{cases} \quad (4.45)$$

se pueden calcular los autovalores partiendo del hecho que que la ecuación central es similar a la ecuación de dispersión de los fonones en una red FPU. Así, teniendo en cuenta (2.8) se llega a que los autovalores son de la forma:

$$\lambda_m^f = 4 \operatorname{sen}^2 \frac{m\pi}{2p} \quad m = 0, \dots, p-1, \quad (4.46)$$

es decir, son positivos, coincidiendo el resultado con el obtenido para 2-site y 3-site breathers con códigos  $\sigma = \{\dots, 1, 1, \dots\}$  y  $\sigma = \{\dots, 1, 1, 1, \dots\}$ , respectivamente.

En el caso de que los sitios excitados vibraran en zigzag, la matriz de la perturbación sería  $Q_z = -\gamma Q_f$ , por lo que los autovalores serían los opuestos al caso de un multibreather en fase:

$$\lambda_m^f = -4\gamma \operatorname{sen}^2 \frac{m\pi}{2p} \quad m = 0, \dots, p-1, \quad (4.47)$$

es decir, los autovalores serían negativos. En consecuencia, se reobtienen los resultados para los 2-site y 3-site breathers con códigos  $\sigma = \{\dots, 1, -1, \dots\}$  y  $\sigma = \{\dots, -1, 1, -1, \dots\}$ , respectivamente.

En el caso de que no se siguiera ninguno de los dos patrones anteriores, se puede ver numéricamente que algunos autovalores son positivos y otros negativos, lo cual implica que el multibreather es inestable con independencia del potencial on-site y del signo de la constante de acoplo.

En caso de que existiera un cero en el código entre regiones con valores no nulos, la matriz  $Q$  se dividiría en bloques. Si quedara en el código algún valor distinto de cero entre dos ceros, no sería válida la teoría de perturbaciones de primer orden y el TEM no podría predecir la estabilidad o inestabilidad.

#### 4.7. Estabilidad en sistemas disipativos

En esta sección se exponen brevemente ciertos aspectos relativos a la estabilidad de sistemas disipativos. La evolución de los autovalores del operador de Floquet con el acoplamiento es bastante más complicada que en el caso de los sistemas hamiltonianos y su estudio está fuera del alcance de esta tesis. Lo que se exponen en este apartado son resultados básicos que son de utilidad en el desarrollo posterior de la tesis, los cuales están basados en el trabajo de Marín *et al* [145]. Supongamos una red de osciladores forzada y amortiguada, tal como la describimos en el capítulo 3 (ecuación (3.23)):

$$\ddot{u}_n + \gamma \dot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = F \sin \omega_b t. \quad (4.48)$$

La ecuación de la perturbación será, por tanto:

$$\ddot{\xi}_n + \gamma \dot{\xi}_n + V''(u_n)\xi_n + C(2\xi_n - \xi_{n+1} - \xi_{n-1}) = 0. \quad (4.49)$$

Como podemos observar, esta ecuación es independiente del valor de la fuerza externa  $F$ . Sin embargo, los resultados sobre la estabilidad variarán dependiendo de que el sistema esté o no forzado.

La ecuación (4.49) se puede transformar en otra equivalente a la ecuación de una perturbación en sistemas hamiltonianos (4.2) si hacemos un cambio de variables de la forma [192]:

$$\eta_n(t) = e^{\gamma t/2} \xi_n(t). \quad (4.50)$$

Con este cambio, la ecuación (4.49) se transforma en:

$$\ddot{\eta}_n + (V''(u_n) - \gamma^2/4)\eta_n + C(2\eta_n - \eta_{n+1} - \eta_{n-1}) = 0. \quad (4.51)$$

Esta ecuación tiene las propiedades vistas para sistemas hamiltonianos. Sin embargo, las autofunciones del operador de Floquet de las ecuaciones originales tendrán otras propiedades pues hay que deshacer el cambio (4.50). Así, los autovalores deberán multiplicarse por el factor  $e^{-\gamma T/2}$ .

Así, cuando el acoplamiento es pequeño, los multiplicadores de Floquet, en lugar de estar en la circunferencia unidad, se situarán en otra concéntrica de radio  $r < 1$ . Este radio es, obviamente,  $r = e^{-\gamma T/2}$ . Además, si  $\lambda$  es autovalor, también lo serán  $r/\lambda$ ,  $\lambda^*$  y  $r/\lambda^*$ .

El hecho de que un autovalor abandone el círculo de radio  $r$  no implica inestabilidad. El sistema será inestable cuando alguno de los autovalores se salga del círculo unidad.

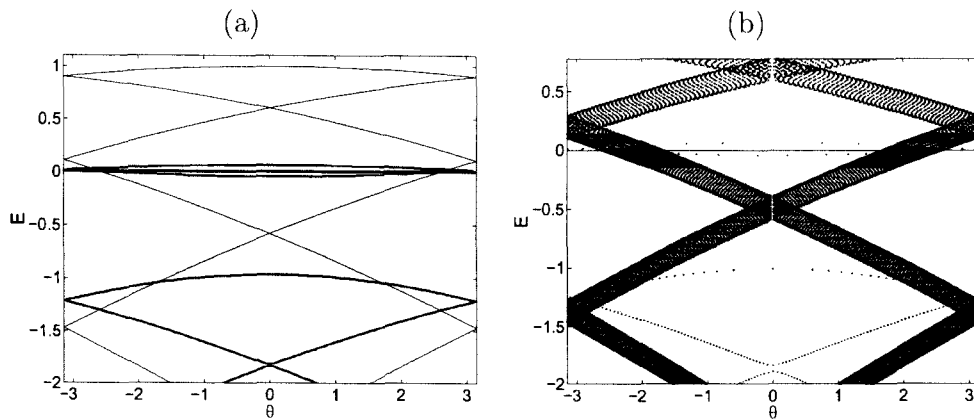
En el caso de un sistema forzado, no existen los modos de fase y crecimiento. Esto se puede observar derivando la ecuación dinámica (3.23). Físicamente, este hecho se debe a que tanto la frecuencia del breather como el origen de tiempos están fijados por la fuerza externa. En el caso de que el sistema no estuviera forzado, los modos de fase y crecimiento seguirían existiendo.

Respecto al diagrama de bandas, la ecuación es equivalente al caso hamiltoniano. No obstante, si el sistema está forzado, la banda tangente al eje  $E = 0$  deja de existir, pues el modo de fase  $\dot{u}(t)$  deja de ser solución de la ecuación (4.49). Esto se comprueba derivando respecto al tiempo las ecuaciones dinámicas (4.48).

En el límite anti-continuo, pueden calcularse las bandas de los osciladores en reposo, que vendrán dadas por:

$$E_\nu(\theta) = \omega_o^2 - \frac{\gamma^2}{4} - \omega_b^2 \left( \frac{\theta}{2\pi} \right)^2. \quad (4.52)$$

La figura 4.16 muestra un ejemplo de la estructura de bandas de un breather con disipación y fuerza externa.



**Fig. 4.16:** Diagramas de bandas en el límite anti-continuo (a) y para un acoplamiento  $C = 0,05$  (b) para un breather disipativo con un potencial de sine-Gordon. La constante de amortiguamiento es  $\gamma = 0,02$ , la fuerza externa tiene amplitud  $F = 0,02$  y la frecuencia es  $\omega_b = 0,2\pi$ . Como se puede observar, no existe banda tangente al eje  $E = 0$ . Señalar que los cortes con el eje  $\theta = 0$  aparecen en el jacobiano ya el espacio de trabajo no está restringido a soluciones reversibles en el tiempo.



## 5. Estabilidad de dark breathers

### 5.1. Introducción

Hasta ahora, hemos considerados breathers en los que la localización consiste en unos pocas partículas vibrando con gran amplitud mientras que la mayoría de las restantes lo hace con poca amplitud. Puede darse también el caso contrario, es decir, la mayoría de los osciladores de la red vibra con gran amplitud, excepto unos pocos que lo hacen con pequeña amplitud. A este tipo de multibreather lo podemos denominar *dark breather* o breather oscuro [8]. Este nombre tiene su origen en la analogía con los solitones oscuros que aparecen en sistemas continuos [195, 196] y discretos gobernados por la ecuación DNLS [110, 118, 120]. El estudio de dark breathers en redes Klein–Gordon se ha abordado dos maneras. La primera, llevada a cabo por Morgante *et al* [151, 150], los considera como desestabilizaciones de ondas estacionarias no lineales. El segundo punto de vista [8] estudia las propiedades de estabilidad de los dark breathers a partir del análisis de bandas (Capítulo 4) aplicado a multibreathers.

En este capítulo vamos a centrarnos en el análisis de la estabilidad de dark breathers basándonos en la teoría de bandas de Aubry y en el Teorema de Estabilidad de Multibreathers. Los sistemas que se consideran son tanto hamiltonianos como disipativos.

Por último, quisiéramos señalar que a los breathers en los que la mayoría de las partículas vibran con pequeña amplitud reciben en este capítulo el nombre de *bright breathers* (breathers brillantes) en analogía con la terminología empleada en solitones.

### 5.2. Estabilidad de dark breathers en sistemas hamiltonianos

#### 5.2.1. Presentación de las ecuaciones

En esta sección se estudia numéricamente la estabilidad de los dark breathers en sistemas hamiltonianos con acoplamiento armónico y atractivo, cuyas ecuaciones dinámicas vienen dadas por:

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0, \quad (5.1)$$

con  $C > 0$  y condiciones de contorno periódicas. También se consideran sistemas con acoplamiento repulsivo. Para darle un significado físico a este tipo de acoplamiento, vamos a suponer que la interacción es del tipo que aparece en el estudio del modelo con acoplamiento dipolar del ADN de los Capítulos 11 y 12, pero restringida al primer vecino. Así, las ecuaciones dinámicas vienen dadas por:

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C(u_{n+1} + u_{n-1}) = 0, \quad (5.2)$$

con  $C > 0$ , igualmente. El perfil de varios dark breathers se encuentra en la figura 5.1

Las ecuaciones linealizadas para el estudio de la estabilidad, en el caso atractivo, son:

$$\ddot{\xi}_n + V''(u_n)\xi_n + C(2\xi_n - \xi_{n+1} - \xi_{n-1}) = 0, \quad (5.3)$$

mientras en el caso repulsivo son:

$$\ddot{\xi}_n + V''(u_n)\xi_n + C(\xi_{n+1} + \xi_{n-1}) = 0. \quad (5.4)$$

Señalemos que las soluciones que vamos a estudiar en esta sección vendrán dadas por el código  $\{\dots 111101111 \dots\}$ , es decir, 1-site dark breathers en fase. Al conjunto de osciladores excitados se le conoce también con el nombre de *fondo*.

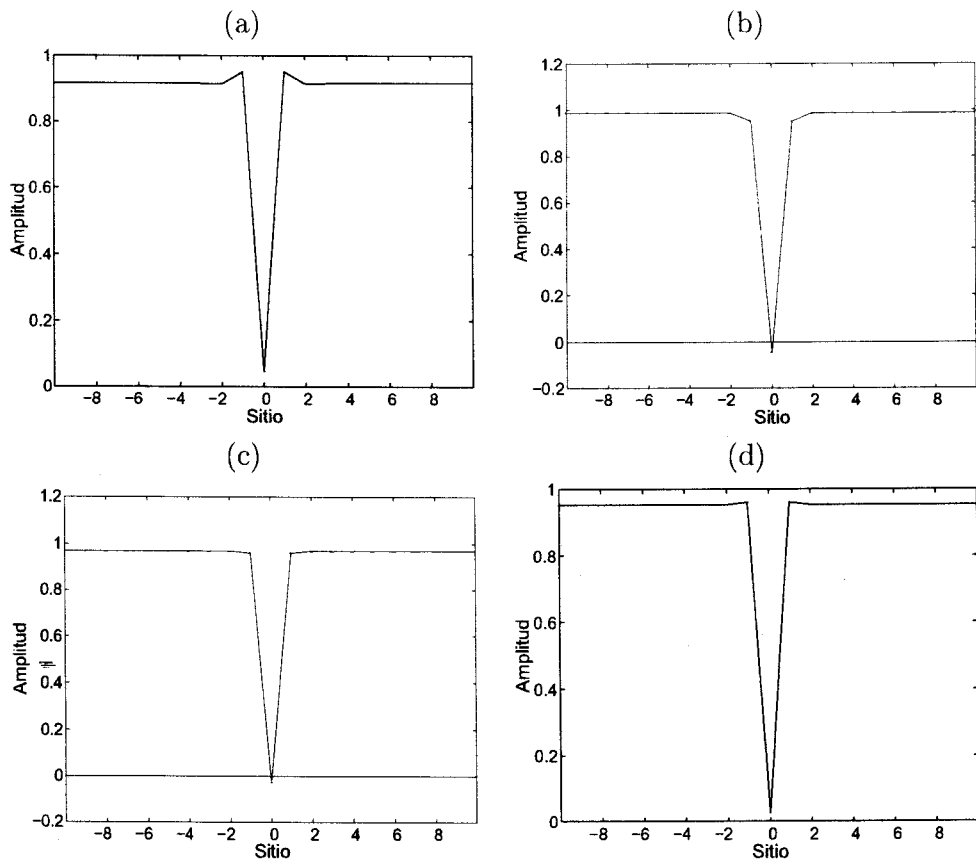
### 5.2.2: Análisis de estabilidad

Análogamente al caso de un bright breather, el operador de Floquet tiene  $p$  parejas de autovalores correspondientes a los osciladores excitados (fondo) cuyo valor es  $\pm 1$ , mientras que  $N - p$  corresponden a los osciladores en reposo. La diferencia con el caso de un dark breather, es que en éste la mayoría de los osciladores están excitados. Como señalamos anteriormente, vamos a considerar 1-site dark breathers, por lo que  $p = N - 1$ .

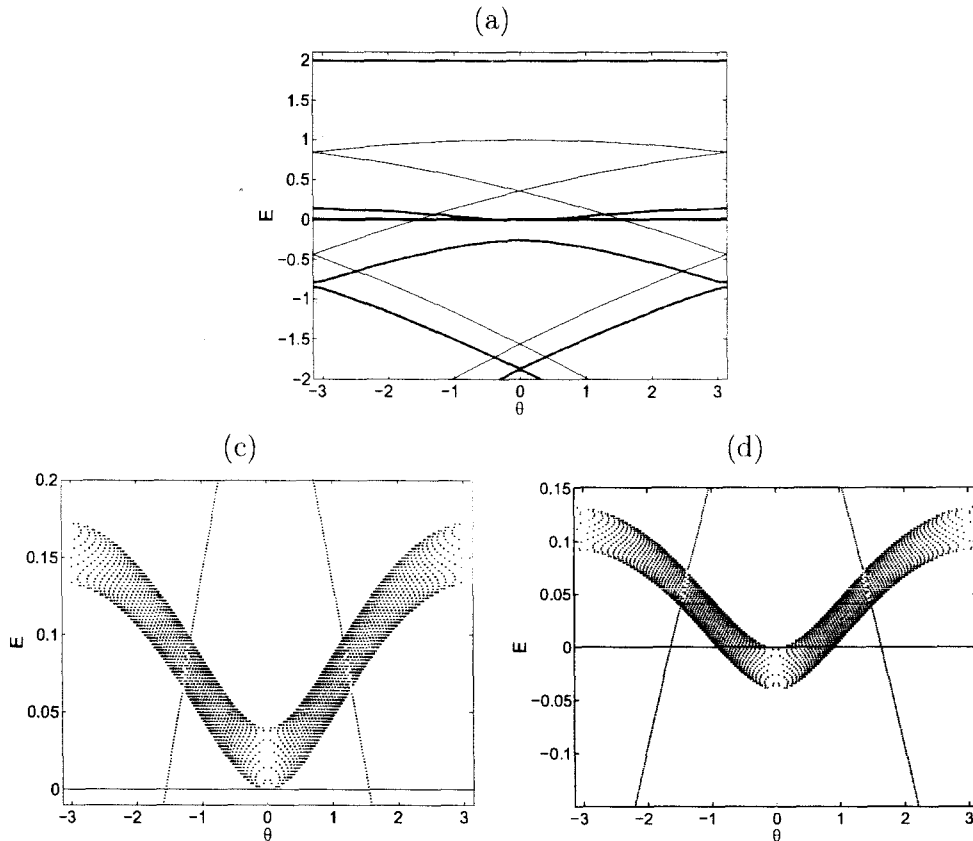
Este hecho se traslada al análisis de bandas de forma que existen  $N - 1$  bandas degeneradas tangentes al eje  $E = 0$  en el punto  $(\theta, E) = (0, 0)$  correspondientes al fondo, mientras que existe otra banda que corta al eje y se corresponde al oscilador en reposo. Es decir, el esquema es el mismo que el de las figuras 4.13a y 4.13c. La curvatura de las bandas del fondo es positiva si el potencial es blando, siendo negativa si el potencial es duro.

Cuando se introduce el acoplo, se rompe la degeneración de las bandas correspondientes al fondo, de forma que  $N - 2$  pierden la tangencia con el eje, y otra, la que se corresponde con el modo de fase, permanece fija. Como se observa numéricamente, la pérdida de tangencia de las bandas se produce porque éstas suben cuando el acoplo es atractivo o bajan cuando éste es repulsivo. Así, cuando se introduce el acoplo, se pueden dar los siguientes casos:

- Si el potencial es blando, el dark breather es estable para acoplo repulsivo e inestable para acoplo atractivo.



**Fig. 5.1:** Perfil de dark breathers. (a) y (b) corresponden a breathers con potencial de Morse on-site y acoplo atractivo y repulsivo, respectivamente ( $\omega_b = 0,8$  y  $C = 0,01$ ). (c) y (d) son análogas a las figuras anteriores, salvo que el potencial on-site es  $\phi^4$  duro ( $\omega_b = 1,3$  y  $C = 0,01$ ).



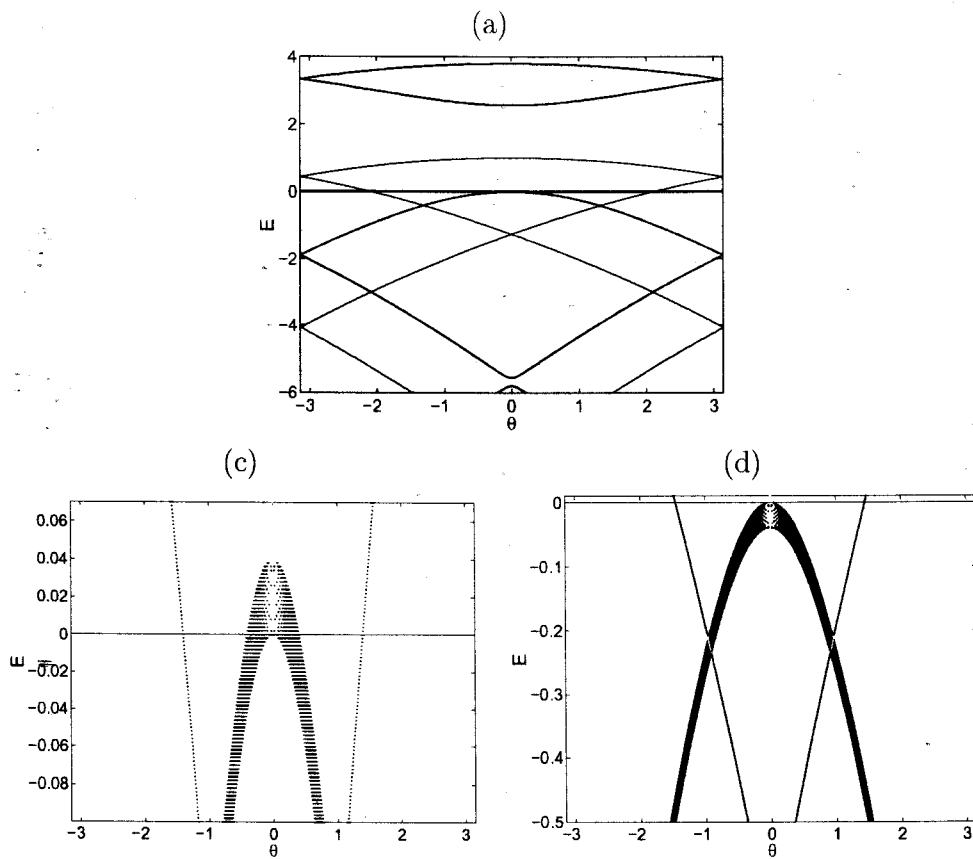
**Fig. 5.2:** Diagramas de bandas en el límite anti-continuo (arriba) y para un acoplo  $C = 0,01$  (abajo) para un dark breather con potencial de Morse y frecuencia  $\omega_b = 0,8$ . (b) corresponde a un potencial de interacción atractivo, mientras que (c) lo hace con un potencial de interacción repulsivo.

- Si el potencial es duro, el dark breather es estable para acoplo atractivo e inestable para acoplo repulsivo.

Otro fenómeno que aparece cuando se introduce el acoplo es la hibridación de las bandas correspondientes al fondo y al oscilador en reposo, con la consiguiente aparición de huecos. Esto hace que, al aumentar el acoplo, se produzcan colisiones de Krein.

Además de estas bifurcaciones, existen otras de tipo subarmónico cuando el potencial on-site no es simétrico. Esto se debe a que la banda finaliza en  $\theta = \pi$ , por lo que, cuando éstas bajan lo suficiente debido al acoplo, perderán su intersección en ese punto, y aparecen bifurcaciones. En el caso de potenciales simétricos, las soluciones también tienen periodo  $T/2$ , por lo que las bandas no finalizan en  $\pi$ , sino en  $2\pi$ . Por esta razón no aparecen este tipo de bifurcaciones en el caso de potenciales on-site simétricos.

Estos fenómenos se ilustran en las figuras 5.2 y 5.3.



**Fig. 5.3:** Diagramas de bandas en el límite anti-continuo (arriba), y para un acoplamiento  $C = 0,01$  (abajo), para un dark breather con potencial  $\phi^4$  duro y frecuencia  $\omega_b = 1,3$ . (b) corresponde a un potencial de interacción atractivo, mientras que (c) lo hace con un potencial repulsivo.

### 5.3. Aplicación del Teorema de Estabilidad de Multibreathers

En este apartado veremos cómo los resultados anteriores pueden predecirse mediante la aplicación del Teorema de Estabilidad de Multibreathers expuesto en la Sección 4.6. Para ello, aplicaremos el TEM a phonobreaters, cuyo conocimiento permite establecer trivialmente los resultados para dark breathers.

#### 5.3.1. Phonobreaters

##### Condiciones de contorno de extremos libres

Recordemos que un phonobreather es un multibreather con todos sus sitios excitados. Tal como se vio en la Sección 4.6, para que un  $n$ -site breather sea estable es necesario que sus sitios excitados vibren en fase o en zigzag. Un phonobreather es un caso particular de  $n$ -site breather en el que  $n = N$ , siendo  $N$  el número de partículas de la red. Esto es, para que un phonobreather sea estable, debe derivar del fonón con  $q = 0$  (vibración en fase) ó  $q = \pi$  (vibración en zigzag).

La matriz de la perturbación, en el caso de un phonobreather con condiciones de contorno de extremos libres es la misma que un  $N$ -site breather. Así, los autovalores son positivos para  $q = 0$  y negativos para  $q = \pi$ . Las consecuencias de este hecho se resumen en la siguiente tabla:

	Interacción atractiva		Interacción repulsiva	
$q$	Potencial blando	Potencial duro	Potencial blando	Potencial duro
0	<i>Inestable</i>	<i>Estable</i>	<i>Estable</i>	<i>Inestable</i>
$\pi$	<i>Estable</i>	<i>Inestable</i>	<i>Inestable</i>	<i>Estable</i>

Existe un total acuerdo entre estos resultados y los obtenidos como consecuencia del estudio de la inestabilidad modulacional [60] y de la ecuación DNLS [151].

Si las condiciones de contorno son de extremos fijos, la matriz de la perturbación es la misma que si los extremos estuvieran libres, de forma que los resultados son idénticos.

##### Condiciones de contorno periódicas. Inestabilidades de paridad

Si las condiciones de contorno son periódicas, la matriz  $Q$  es de la forma:

$$Q_f = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad (5.5)$$

siempre que el phonobreather vibre en fase. En este caso, la ecuación de autovalores se puede escribir como:

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 - x_N = \lambda x_1 \\ 2x_n - x_{n+1} - x_{n-1} = \lambda x_n, \quad \forall n \neq 1, N \\ 2x_N - x_{N-1} - x_1 = \lambda x_N \end{cases} \quad (5.6)$$

Esta expresión es idéntica a la ecuación de dispersión para los fonones en una cadena FPU con condiciones de contorno periódicas, cuya solución es:

$$\lambda_m^f = 4 \operatorname{sen}^2 \frac{m\pi}{N}, \quad m = 0, \dots, N-1. \quad (5.7)$$

En este caso, todos los autovalores son positivos, tal como ocurre con el phonobreather con condiciones de contorno de extremos libres.

En el caso de que el phonobreather vibre en zigzag, aparecen nuevos fenómenos. La matriz  $Q$  tiene la forma:

$$Q_z = \gamma \begin{bmatrix} (\beta - 1) & 1 & 0 & \dots & 0 & -\beta \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ -\beta & 0 & \dots & 0 & 1 & (\beta - 1) \end{bmatrix}, \quad (5.8)$$

con  $\beta = \frac{1}{2\gamma}[(\sigma_1\sigma_N + 1) + \gamma(\sigma_1\sigma_N - 1)]$ .

Si el número de partículas ( $N$ ) es par, el código del phonobreather es de la forma  $\sigma = \pm\{-1, 1, -1, \dots, 1, -1, 1\}$ , por lo que  $\beta = -1$  y  $Q_z = -\gamma Q_f$ , obteniéndose que  $\lambda_m^z = -\gamma\lambda_m^f$ .

Sin embargo, si  $N$  es impar,  $\sigma = \pm\{-1, 1, -1, \dots, -1, 1, -1\}$ , por lo que  $\beta = 1/\gamma$  y  $Q_z \neq -\gamma Q_f$ . Se encuentra que hay un autovalor positivo  $\lambda_+$  (cuyo valor es  $4/(\gamma + 2)$  si  $N$  es lo suficientemente grande, tal como se demuestra a continuación), mientras que el resto son negativos. Esto implica que el phonobreather es siempre inestable si el número de partículas del sistema es impar, produciéndose el fenómeno que denominamos *inestabilidad de paridad*. El origen físico de estas inestabilidades radica en el hecho de que el patrón de vibración del sistema se rompe al "unir" las partículas de los extremos.

Para calcular el valor del autovalor  $\lambda_+$  responsable de la inestabilidad de paridad, renumeramos las partículas del sistema de forma que la central sea  $n = 0$  y las partículas en los extremos derecho e izquierdo sean, respectivamente,  $n = N$  y  $n = -N$ . Así, la ecuación de autovalores se puede escribir de la forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} 2x_n - x_{n-1} - x_{n+1} = -(\lambda_+/\gamma) x_1 \quad \forall n \neq 1, N \\ (1 - \gamma)x_N + \gamma x_{N-1} - x_{-N} = \lambda_+ x_N \\ (1 - \gamma)x_{-N} + \gamma x_{1-N} - x_N = \lambda_+ x_{-N} \end{array} \right. \quad (5.9)$$

Como se ha explicado anteriormente, la inestabilidad que aparece es debida a la rotura del patrón de vibración. Si se observa la forma del autovector correspondiente al autovalor  $\lambda_+$  (ver figura 5.4), se puede ver que es similar al producido por un modo de impureza centrado en los extremos de una cadena de osciladores (ver Capítulo 9). Así, se puede suponer que las soluciones del sistema (5.9) cumplen las propiedades siguientes:

$$x_n = -x_{-n}, \quad (5.10)$$

$$x_n = r x_{n-1} \quad \text{si } n \gg 0; \quad x_n = r x_{n+1} \quad \text{si } n \ll 0. \quad (5.11)$$

A partir de la segunda propiedad, se obtiene que las ecuaciones segunda y tercera del sistema (5.9) son equivalentes. En consecuencia, si se introducen las ecuaciones (5.10) y (5.11) en (5.9), se obtiene:

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 - r - 1/r = -\lambda_+/\gamma \\ \lambda_+ = 2 + \gamma(1/r - 1) \end{array} \right. \quad (5.12)$$

Resolviendo el sistema anterior se llega al resultado:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_+ = \frac{4}{\gamma + 2} \\ r = 1 + \frac{2}{\gamma} \end{array} \right. \quad (5.13)$$

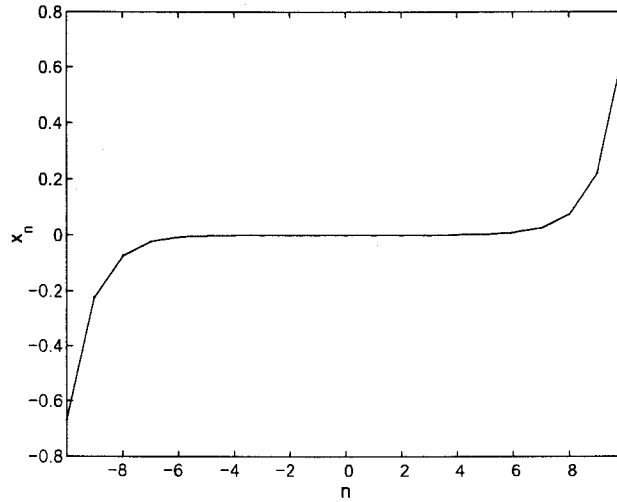
Nótese que estos valores son válidos siempre que el número de partículas sea lo suficientemente grande (aproximadamente, mayor que 9). Sin embargo, aunque el número de partículas fuera menor, el signo de  $\lambda_+$  no cambiaría.

### 5.3.2. Dark breathers

En este caso, los sitios en reposo se corresponden con ceros en el código. En la aplicación del TEM aparecen nuevos fenómenos dependiendo de las condiciones de contorno del sistema.

Utilizaremos una notación que ayude a presentar los resultados. Así, a la matriz de la perturbación de un phonobreather la denominaremos  $P_b^v(n)$ , donde  $n$  es el número de partículas del phonobreather,  $b$  se corresponde con las condiciones de contorno del sistema ( $P$  si son periódicas, y  $L$  si son de extremos libres) y  $v$  indica





**Fig. 5.4:** Autovector de la matriz de perturbación  $Q$  dada en la ecuación (5.8) para un sistema con un número impar de partículas. Este autovector es responsable de la inestabilidad de paridad.

el patrón de vibración del phonobreather, es decir,  $v \equiv f$  si deriva del fonón con  $q = 0$  (vibración en fase) y  $v \equiv z$  si lo hace del fonón con  $q = \pi$  (vibración en zigzag). En el caso de dark breathers, utilizaremos la notación  $Q_b^v(n')$ , donde  $n'$  es el número de ceros adyacentes en el código. Con estos preliminares, se puede proceder al estudio de la estabilidad de dark breathers.

#### Condiciones de contorno periódicas

Supongamos un  $p$ -site dark breather que deriva del fonón con  $q = 0$ . En este caso, la matriz de la perturbación es de la forma:

$$Q_P^f(p) = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

Se puede ver que, utilizando las propiedades de simetría de determinantes bajo intercambio de filas y columnas, el polinomio característico de  $Q_P^f(p)$  es igual que el de  $P_L^f(N - p)$ . Es decir, los autovalores de  $Q_P^f(p)$  son de la forma:

$$\lambda_m = 4 \operatorname{sen}^2 \frac{m\pi}{2N}, \quad m = 0, \dots, N - p - 1, \quad (5.15)$$

es decir, son todos positivos con independencia de  $p$ . Estos resultados están de acuerdo con los obtenidos numéricamente en la Sección 5.2.2. Si el dark breather deriva del fonón con  $q = \pi$ , tendremos dos casos. Si  $\sigma_1 \neq \sigma_N$ , se obtiene que  $Q_p^z(p) = -\gamma Q_p^f(p)$ , de forma que:

$$\lambda_m = -4\gamma \sin^2 \frac{m\pi}{2N}, \quad m = 0, \dots, N - p - 1. \quad (5.16)$$

En consecuencia, todos los autovalores son negativos. En cambio, si  $\sigma_1 = \sigma_N$ , tenemos un caso similar al de un phonobreather con un número de partículas impar, apareciendo de nuevo las inestabilidades de paridad.

#### Condiciones de contorno de extremos libres

En el caso de un dark breather que derive de un fonón con  $q = 0$ , la matriz de la perturbación es de la forma:

$$Q_L^f(p) = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (5.17)$$

es decir, la matriz  $Q$  es diagonal por bloques. Esta matriz puede escribirse utilizando una notación más abreviada:

$$Q_L^f(p) = \left[ \begin{array}{c|c} P_L^f(n_1) & 0 \\ \hline 0 & P_L^f(n_2) \end{array} \right], \quad (5.18)$$

donde  $n_1$  y  $n_2$  son el número de valores del código distintos de cero, a un lado y al otro de los ceros correspondientes al dark breather. Por tanto,

$$\text{spec } Q_L^f(p) = \text{spec } P_L^f(n_1) \cup \text{spec } P_L^f(n_2). \quad (5.19)$$

Como, por otro lado,

$$0 \in \text{spec } P_L^f(n_1) \cap \text{spec } P_L^f(n_2), \quad (5.20)$$

resulta que el autovalor cero es doblemente degenerado en el espectro de  $Q_L^f(p)$ , por lo que el TEM no puede predecir la estabilidad del dark breather en este caso. El origen físico de este hecho se debe a la existencia de dos modos de fase globales. En concreto, el dark breather divide a la matriz  $Q$  en dos bloques, de forma que

la ecuación de autovalores correspondería a una red de osciladores formada por dos fragmentos desacoplados. Así, existen dos modos de fase: uno correspondería a todas las componentes del primer fragmento iguales (y distintas de cero), mientras que las del segundo fragmento serían todas iguales a cero; el otro modo de fase lo haría con el caso complementario. Este fenómeno no ocurre cuando las condiciones de contorno son periódicas, pues en este caso, los dos fragmentos se encuentran acoplados por los extremos, obligando de esta forma a que todas las componentes del modo de fase global sean iguales (y distintas de cero).

Sin embargo, el hecho de que no se rompa la degeneración del autovalor cero no impide que se pueda predecir la inestabilidad de ciertas soluciones. Éstas corresponden a los casos en los que alguno de los fragmentos son inestables por sí solos. Es decir, el TEM predice que un dark breather con potencial blando y acoplo atractivo o potencial duro y acoplo repulsivo es inestable.

Si el dark breather deriva del fonón  $q = \pi$ , la matriz de la perturbación es  $Q_L^z(p) = -\gamma Q_L^f(p)$ , de forma que se vuelve a tener el autovalor cero degenerado.

Señalemos, finalmente, que al igual que en el caso de phonobreathers, los resultados para extremos fijos son los mismos que para extremos libres.

En resumen, *el Teorema de Estabilidad de Multibreathers no siempre puede predecir la estabilidad de un dark breather con condiciones de contorno de extremos libres o fijos.*

#### 5.4. Efectos de tamaño finito en la estabilidad de dark breathers

¶al como muestran Marín y Aubry para bright breathersn [141], existen dos tipos de bifurcaciones en el que el tamaño de la red puede tener un papel importante. Estas son las bifurcaciones oscilatorias (debidas a colisiones de Krein) y las subarmónicas, ya que ambos tipos de bifurcaciones implican a modos extendidos, los cuales se corresponden con oscilaciones de pequeña amplitud. En concreto, el primer tipo implica la colisión de un modo localizado con un modo extendido, mientras que en el segundo, ambos modos son extendidos. El estudio arroja los siguientes resultados:

- Las bifurcaciones subarmónicas desaparecen cuando el sistema es infinito.
- Las bifurcaciones oscilatorias no desaparecen cuando el sistema es infinito.

Además, ambos tipos de bifurcaciones se producen por hibridación de las bandas, lo que se traduce en la apertura de huecos y en la formación de burbujas de inestabilidad.

En el caso de dark breathers el escenario es algo distinto. En primer lugar, las bifurcaciones subarmónicas se deben a la pérdida de intersección en  $\theta = \pi$  de una banda correspondiente al fondo. Esta banda está incluida totalmente en la primera

zona de Brioullin, mientras que en el caso del bright breather, la banda ocupa todas las zonas de Brioullin, por lo que las únicas pérdidas de intersección se deben a hibridaciones. Es por ello que, en el caso de dark breathers, las bifurcaciones subarmónicas no desaparecen cuando el tamaño del sistema es infinito, ya que no proceden de la hibridación de dos bandas distintas.

El caso de las bifurcaciones de Krein es similar a lo que ocurre con bright breathers, es decir, se producen hibridaciones de bandas que no desaparecen cuando aumenta el tamaño del sistema. Es más, cuando el tamaño del sistema es pequeño, existen burbujas de inestabilidad que se transforman en una inestabilidad persistente cuando aumenta el tamaño del sistema. Esto se puede comprobar en la figura 5.5.

En resumen, para un dark breather:

- Las bifurcaciones subarmónicas no desaparecen cuando el sistema es infinito.
- Las bifurcaciones oscilatorias no desaparecen cuando el sistema es infinito.

### **5.5. Estabilidad de dark breathers en sistemas disipativos**

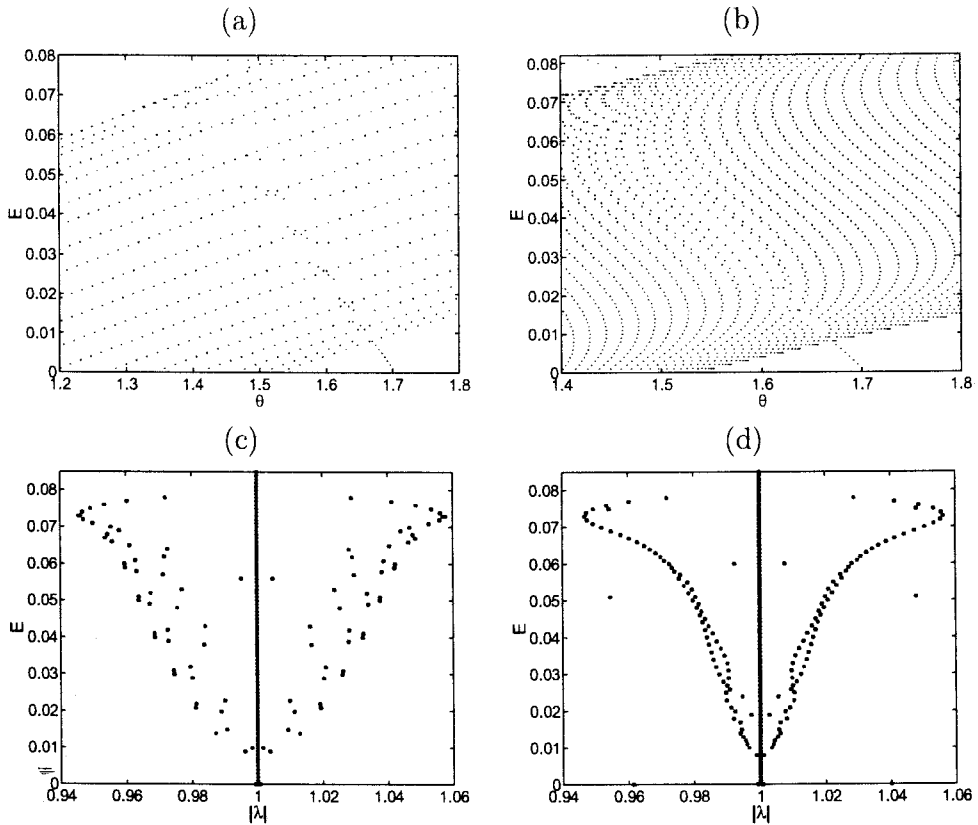
En el estudio de la estabilidad de dark breathers en sistemas disipativos aparecen ciertas diferencias sustanciales con respecto al caso hamiltoniano.

Para realizar este estudio partimos del modelo de Frenkel–Kontorova:

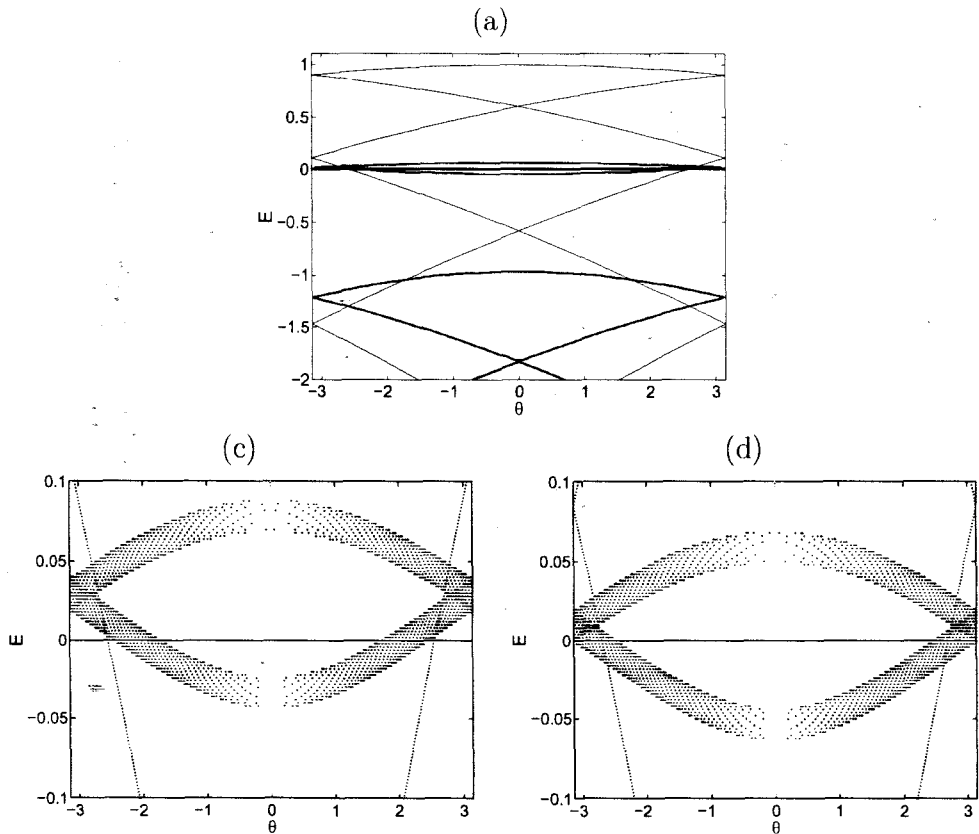
$$\ddot{u}_n + \gamma \dot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = F \sin \omega_b t. \quad (5.21)$$

La estructura de bandas de este sistema (ver Sección 4.7) muestra que no existen bandas tangentes al eje  $E = 0$  en el límite anti-continuo (figura 4.16a). Por ello, cuando se introduce el acoplamiento, el dark breather será estable tanto si la interacción es atractiva como si es repulsiva. Por otro lado, se observa que no existe hibridación entre las bandas correspondientes a los modos extendidos, por lo que las únicas bifurcaciones que pueden aparecer son de tipo armónico, que no dependen del tamaño del sistema (Esta afirmación es válida en el modelo considerado por nosotros, cuyo potencial on-site es simétrico; el caso de un potencial asimétrico, en el que podrían aparecer bifurcaciones subarmónicas, no ha sido estudiado).

Estos hechos se ilustran en la figura 5.6.



**Fig. 5.5:** Las figuras superiores muestran una ampliación de la zona de hibridación de las bandas correspondientes al oscilador en reposo y al fondo, mientras que las inferiores muestran la dependencia  $(E, |\lambda|)$ , siendo  $\lambda$  el autovalor del operador de Newton correspondiente al modo que bifurca en la colisión de Krein. Las figuras de la izquierda corresponden a un sistema de 21 partículas, mientras que el de la derecha lo hace con uno de 101. Como se puede observar, cuando aumenta el tamaño del sistema, las burbujas de inestabilidad existentes para tamaños pequeños se transforman en inestabilidades que persisten cuando aumenta el acoplo. Las figuras corresponden a un potencial on-site de Morse e interacción repulsiva con  $C = 0,02$  y  $\omega_b = 0,8$ .



**Fig. 5.6:** Diagramas de bandas en el límite anti-continuo (arriba) y para un acoplo  $C = \pm 0,005$  (abajo) para un dark breather en el modelo de Frenkel-Kontorova cuyos parámetros son:  $\omega_b = 0,2\pi$ ,  $\gamma = 0,02$  y  $F = 0,02$ . (b) corresponde a un potencial de interacción atractivo, mientras que (c) lo hace con un potencial repulsivo. Se observa que el dark breather es estable en ambos casos.

## 5.6. Conclusiones

### 5.6.1. Sistemas hamiltonianos

**Conclusión 5.1:** Al introducir el acoplamiento entre las partículas, el dark breather es estable para acoplo repulsivo e inestable para acoplo atractivo si el potencial es blando, mientras que la tendencia es la inversa si el potencial es duro.

**Conclusión 5.2:** Cuando el acoplo aumenta, el dark breather estable puede dejar de serlo mediante bifurcaciones oscilatorias, armónicas y subarmónicas. Estas últimas no ocurren si el potencial on-site es simétrico.

**Conclusión 5.3:** Las bifurcaciones oscilatorias tienen un comportamiento reentrante, es decir, se producen burbujas de inestabilidad cuando aumenta el acoplo.

**Conclusión 5.4:** Un dark breather con condiciones de contorno periódicas es inestable siempre que derive de un fonón con vector de ondas  $\pi$  y las partículas de los extremos vibren en fase. Este fenómeno lo denominamos inestabilidad de paridad

**Conclusión 5.5:** Cuando el tamaño del sistema es infinito, las bifurcaciones oscilatorias persisten (dejan de ser reentrantes) cuando aumenta el acoplo y las bifurcaciones subarmónicas siguen existiendo.

### 5.6.2. Predicciones del Teorema de Estabilidad de Multibreathers

**Conclusión 5.6:** El TEM puede predecir la estabilidad de phonobreathers en sistemas hamiltonianos. En la siguiente tabla se resumen los resultados para phonobreathers que derivan de fonones con vector de onda  $q = 0$  y  $q = \pi$ , de forma que el acoplo es atractivo (si fuera repulsivo, los resultados se invierten salvo en las inestabilidades de paridad, las cuales no dependen del tipo de acoplo y están señaladas con un asterisco):

q	Extremos libres / fijos		C.c. periódicas	
	Potencial blando	Potencial duro	Potencial blando	Potencial duro
0	Inestable	Estable	Inestable	Estable
$\pi$ (N par)	Estable	Inestable	Estable	Inestable
$\pi$ (N impar)	Estable	Inestable	Inestable(*)	Inestable(*)

**Conclusión 5.7:** El TEM puede predecir la estabilidad de dark multibreathers en sistemas hamiltonianos, siempre que las condiciones de contorno sean periódicas. Si los extremos estuvieran libres o fijos, sólo puede predecir los casos en los que los fragmentos en los que se divide la cadena sean inestables de por sí. En la siguiente tabla se resumen los resultados para p-site dark breathers los cuales provienen de

fonones con vector de onda  $q = 0$  y  $q = \pi$ , de forma que el acoplo es atractivo (si fuera repulsivo, los resultados se invierten salvo en las inestabilidades de paridad, las cuales no dependen del tipo de acoplo y están señaladas con un asterisco). Los casos que no pueden ser predichos por el TEM se señalan con un signo de interrogación.

q	Extremos libres / fijos		C.c. periódicas	
	Potencial blando	Potencial duro	Potencial blando	Potencial duro
0	<i>Inestable</i>	?	<i>Inestable</i>	<i>Estable</i>
$\pi (\sigma_1 \neq \sigma_N)$	?	<i>Inestable</i>	<i>Estable</i>	<i>Inestable</i>
$\pi (\sigma_1 = \sigma_N)$	?	<i>Inestable</i>	<i>Inestable(*)</i>	<i>Inestable(*)</i>

### 5.6.3. Sistemas disipativos

**Conclusión 5.8:** Al introducirse el acoplo, el dark breather es estable con independencia del tipo de potencial on-site y del signo de la constante de acoplo.

**Conclusión 5.9:** Si el potencial on-site es de tipo sine-Gordon, no aparecen bifurcaciones oscilatorias.



## 6. Sistemas armónicos desordenados.

### Localización Anderson

En una red armónica no homogénea, existen condiciones bajo las cuales aparecen fenómenos de localización. Así, cuando existen impurezas en la red, aparecen modos locales de vibración. Este caso se estudia con más detalle en el Capítulo 9. En este capítulo y en el siguiente nos centraremos en la localización debida al desorden también conocida como *localización Anderson*.

#### 6.1. Localización Anderson electrónica

En 1958, Anderson [9] estudió la difusión de un electrón en presencia de un potencial aleatorio. El hamiltoniano de estos sistemas viene dado por:

$$H = -\nabla^2 + V_n, \quad (6.1)$$

donde  $V_n$  es el potencial aleatorio. Anderson descubrió que si el desorden es mayor que un valor crítico, la función de onda que describe a un electrón está localizada, en el sentido de que su envolvente decae exponencialmente desde algún punto del espacio, es decir, el comportamiento es de la forma:

$$|\psi(\vec{r})| \sim \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_o|/\xi), \quad (6.2)$$

donde  $\xi$  es la longitud de localización. Se ha demostrado [36, 154] que en el caso monodimensional todos los estados están localizados, sin importar la magnitud del desorden.

Supongamos ahora un sistema multidimensional cuyo desorden sea menor que el valor crítico. En ese caso, los estados en los extremos de las bandas están localizados, mientras que los estados en el centro tienen una mayor probabilidad de permanecer extendidos (no localizados). Así, en función de la energía, los estados cambian de estar localizados a estar extendidos. Este cambio aparece para un valor crítico de la energía que se conoce como *límite de movilidad* o *mobility edge* [153]. Si la energía de Fermi está en una región de estados localizados, la conductividad a temperatura cero se anula, mientras que si se encuentra en una región de estados extendidos, esta conductividad es finita. Por tanto, el límite de movilidad marca la transición entre un metal y un aislante.

Todo estos resultados se han obtenido llevando a cabo un tratamiento estadístico-cuántico (para una mayor información, se puede consultar [127], que posee además una extensa bibliografía). Además, este problema se puede abordar desde el punto de vista de la teoría espectral.

## 6.2. Espectro de un operador hermítico

Para hacer un análisis espectral de nuestro sistema, necesitamos algunos conceptos previos sobre teoría espectral [119, 165].

Sea  $A$  un operador lineal en el espacio complejo  $n$ -dimensional  $\mathbb{C}^n$ . El número  $\lambda$  es un *autovalor* de  $A$  cuando la ecuación

$$Ax = \lambda x, \quad (6.3)$$

tiene soluciones no nulas. El conjunto de todos los autovalores de  $A$  se llama *espectro de  $A$*  ( $\sigma$ ) y el resto de valores de  $\lambda$  se denominan *regulares*. Dicho de otro modo,  $\lambda$  es regular si el operador  $R_\lambda = A - \lambda I$  es invertible. Además, el operador  $R_\lambda$ , como todo operador lineal en un espacio de dimensión finita, está acotado. El operador  $R_\lambda$  se denomina *resolvente de  $A$* .

Si el espacio es de dimensión finita existen, por tanto, dos posibilidades:

1.  $\lambda$  es autovalor de  $A$ , en cuyo caso el operador  $R_\lambda$  no es invertible.
2. El operador  $R_\lambda$  es invertible, es decir,  $\lambda$  es un punto regular.

Si el espacio es de dimensión infinita podría existir además una tercera posibilidad:

3. El operador  $R_\lambda$  es invertible pero no está acotado.

O sea, en un espacio de dimensión infinita, un número  $\lambda$  será regular cuando el resolvente esté acotado y definido en todo el espacio (caso 2). El conjunto de todos los valores de  $\lambda$  no regulares constituye el espectro de  $A$ . A la parte del espectro formada por los autovalores de  $A$  (caso 1) se le llama *espectro puntual* ( $\sigma_p$ ), mientras que al resto del espectro (caso 3) se le llama *espectro continuo* ( $\sigma_c$ ).

Supongamos que el operador  $A$  es hermítico, como lo es el hamiltoniano  $H$ . Si el espectro del operador es puntual, los autoestados estarán localizados, mientras que si el espectro es continuo, los autoestados estarán extendidos [126]. Puede ocurrir que el espectro tenga partes puntuales y partes continuas. El autovalor que separa ambas partes se corresponde con el límite de movilidad.

### 6.3. Localización Anderson electrónica en sistemas discretos

Hasta ahora, todos los fenómenos mostrados se refieren a sistemas electrónicos. Sin embargo, estos resultados pueden ser trasladables al estudio de la dinámica reticular si el operador  $H$  definido en (6.1) se expresa en forma discreta [104]. Para ello, partimos de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en un sistema discreto monodimensional, dentro del contexto de la aproximación de electrones fuertemente ligados:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (6.4)$$

En segunda cuantización, el hamiltoniano  $\hat{H}$  se puede escribir de la forma:

$$H = \sum_n V_n a_n^+ + \sum_n \sum_{m \neq n} t_{m,n} a_m^+ a_n \quad m, n \in \mathbb{Z}, \quad (6.5)$$

donde  $V_n$  es el potencial on-site y  $t_{m,n}$  es la integral de solapamiento entre los orbitales centrados en  $m$  y  $n$ .

El estado  $|\Psi\rangle$  se puede desarrollar en términos del estado de vacío de la forma:

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k a_k^+ |0\rangle. \quad (6.6)$$

Introduciendo todo esto en la ecuación de Schrödinger, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$V_n c_n + \sum_m s_{m,n} c_m = E c_n, \quad (6.7)$$

que, si suponemos sólo interacciones con los próximos vecinos, esto es  $s_{n\pm 1, n} \equiv -s$ , se transforma en:

$$V_n c_n - s(c_{n+1} + c_{n-1}) = E c_n, \quad (6.8)$$

por lo que la expresión del hamiltoniano en la base  $\{a_k^+ |0\rangle\}$  viene expresada como:

$$(H)_{n,m} = \begin{cases} -s & \text{si } |n-m| = 1 \\ V_n & \text{si } n = m \\ 0 & \text{en cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (6.9)$$

Este operador se puede extender a un número  $d$  de dimensiones con sólo sustituir  $m$  y  $n$  por un vector en  $\mathbb{Z}^d$ .

### 6.4. Localización Anderson en redes de osciladores

Una vez obtenida la forma de la ecuación de Schrödinger correspondiente al modelo de electrones fuertemente ligados, vamos a compararla con la ecuación de

autovalores para una red armónica de osciladores acoplados. Esta ecuación es de la forma [93]:

$$\ddot{u}_{\vec{n}} + \omega_{o,\vec{n}}^2 + C \nabla_d^2 u_{\vec{n}} = 0, \quad (6.10)$$

donde  $\omega_{o,\vec{n}}$  son las frecuencias de vibración naturales del sistema (que serán aleatorias),  $C$  es la constante de acoplo (que suponemos homogénea) y  $\nabla_d^2$  es el laplaciano discreto, que en el caso monodimensional se define de la forma  $\nabla_d^2 u_n \equiv 2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}$ . Además, el número de partículas del sistema es infinito. Esta ecuación se puede escribir de forma compacta como:

$$\ddot{u} = -\Omega^2 u, \quad (6.11)$$

donde la matriz  $\Omega^2$  viene dada por:

$$(\Omega^2)_{\vec{n},\vec{m}} = \begin{cases} -C & \text{si } |\vec{n} - \vec{m}| = 1 \\ \omega_{o,\vec{n}}^2 + 2^d C & \text{si } \vec{n} = \vec{m} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (6.12)$$

siendo  $d$  la dimensión del sistema.

Si definimos  $V_n$  como

$$V_n = \omega_{o,\vec{n}}^2 + 2^d C, \quad (6.13)$$

nos queda que  $\Omega^2$  es equivalente a  $H$  (6.9) con la integral de solapamiento igual a  $C$ .

Las soluciones de la ecuación (6.11) son modos de vibración que reciben el nombre de *modos Anderson*. Su cálculo en sistemas finitos es inmediato pues serán simplemente las autofunciones de la matriz  $\Omega^2$  mientras que los autovalores de la matriz serán los cuadrados de las frecuencias de los modos.

La puesta en práctica de las ideas anteriores conlleva la aparición de varios problemas:

- El estudio numérico de estos sistemas requiere que sean finitos. La teoría espectral predice que en este caso todos los autoestados estarán localizados; sin embargo, se observa en la práctica la existencia de estados extendidos cuando el desorden es gaussiano.
- No existe una definición estricta de desorden, por lo que no se pueden conocer con exactitud los valores umbrales de los parámetros para que, o bien todos los estados estén localizados, o bien existan los límites de movilidad.

### 6.5. Algunos ejemplos de modos Anderson

En esta sección mostraremos, a través de diversos ejemplos, algunas propiedades de los modos Anderson cuando se consideran distintas implementaciones del desorden.

Pero antes debe establecerse una definición cuantitativa del desorden y de la localización.

### 6.5.1. Desorden y localización. Definición cuantitativa

#### Desorden

El desorden  $\delta$  lo definimos de la manera indicada en [92], es decir, como la anchura de la distribución del parámetro desordenado, en nuestro caso, la frecuencia de los osciladores aislados,  $\omega_{o,\bar{n}}$ . Así,

$$\delta = (\sup g(\omega))^{-1}, \quad (6.14)$$

donde  $g(\omega)$  es la distribución de probabilidad relativa a las variables aleatorias. Si  $g(\omega)$  es una distribución gaussiana,

$$g(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\gamma}} \exp(-\omega^2/2\gamma), \quad (6.15)$$

el desorden será  $\delta = \sqrt{2\pi\gamma}$ . Sin embargo, se observa numéricamente que la localización disminuye con el acoplo. Esto se debe a que el desorden depende de  $C$ . Para hacer patente esta dependencia, se realiza un cambio de escala de tiempos,  $\tau = t/C$ , en las ecuaciones dinámicas (6.10), de forma que se elimina la constante  $C$ , apareciendo en la distribución de probabilidad. Así, se obtiene:

$$\frac{d^2 u_{\bar{n}}}{d\tau^2} + \kappa_{o,\bar{n}}^2 + \nabla^2 u_{\bar{n}} = 0, \quad (6.16)$$

donde  $\kappa_{o,\bar{n}}^2 = \omega_{o,\bar{n}}'^2/C$ .

De esta forma, la distribución de probabilidad (6.15) se transforma en:

$$g(\kappa) = \sqrt{\frac{C}{2\pi\gamma}} \exp(-C\kappa^2/2\gamma), \quad (6.17)$$

de manera que el desorden es  $\delta = \sqrt{\frac{2\pi\gamma}{C}}$ . En consecuencia, *el desorden disminuye con el acoplo*.

#### Localización

Definimos la localización de un modo dado como:

$$L(\omega) = \frac{\sum_n |x_n(\omega)|^2}{(\sum_n |x_n(\omega)|)^2}, \quad (6.18)$$

donde  $x_n$  son las amplitudes de vibración de cada una de las partículas del modo en  $t = 0$ . Así,  $L = 1/n$  cuando hay  $n$  partículas excitadas en el modo, de manera

que en un sistema de  $N$  partículas  $L \in [1/N, 1]$ .  $L$  puede considerarse como la inversa de un *número de participación*. Por ello, podemos definir la *participación* del modo de la forma:

$$P(\omega) = \frac{1}{NL(\omega)}. \quad (6.19)$$

A continuación analizaremos cadenas de 501 osciladores y redes de  $21 \times 21$  partículas con constante de acoplo  $C = 0,05$ . Utilizaremos distintas formas de  $g(\omega)$ , las cuales pueden corresponder a una distribución discreta (son posibles dos valores de  $\omega_{o,\bar{n}}$ ), a una distribución uniforme y a una distribución gaussiana. Se mostrarán en las figuras un histograma para  $g(\omega)$ , una gráfica de los autovalores  $\omega$  frente a la localización  $L$  y los modos con mayor y menor localización.

### 6.5.2. Distribución aleatoria discreta

Este tipo de desorden se utiliza para modelar una aleación binaria o una cadena de ADN aperiódica.

Las figuras 6.1 y 6.2, muestran los resultados para una cadena monodimensional y una red bidimensional, respectivamente. Las frecuencias de los osciladores aislados son o bien  $1/2$  o bien  $3/2$ . Según nuestra definición de desorden, éste valdría cero pues  $g(\omega) = \delta(\omega - 1/2) + \delta(\omega - 3/2)$ .

Se puede observar que todos los modos están localizados <sup>1</sup>.

### 6.5.3. Distribución aleatoria uniforme

Las frecuencias de los osciladores aislados están comprendidas entre  $\omega_1 = 1/2$  y  $\omega_2 = 3/2$ . En este caso,  $g(\omega) = 1/(\omega_2 - \omega_1) = 1$  y, por tanto,  $\delta = \omega_2 - \omega_1 = 1$ .

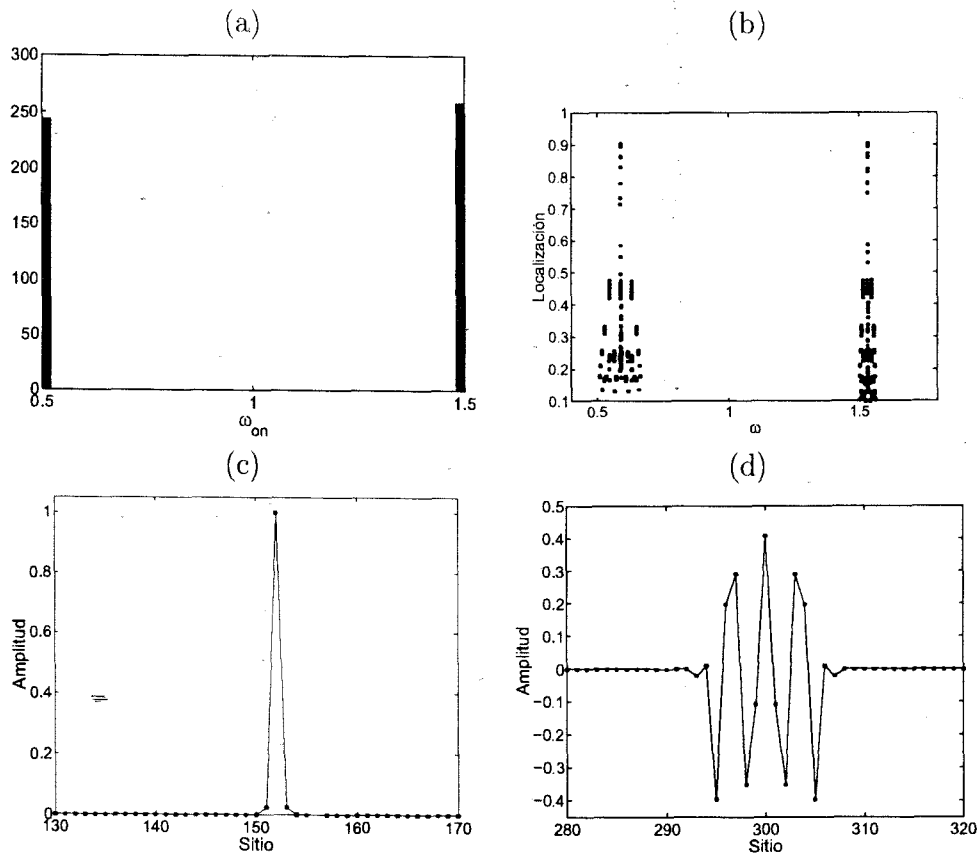
Los resultados mostrados en las figuras 6.3 y 6.4 son análogos al caso discreto.

### 6.5.4. Distribución aleatoria gaussiana

Este caso es más complejo y puede servir para modelar el desorden estructural debido a la temperatura. En las figuras 6.5 y 6.6 se aprecia la aparición de límites de movilidad tanto en el caso monodimensional como en el bidimensional. La anchura de la distribución gaussiana ha tenido que elegirse diferente en ambos casos, de forma que  $\gamma = 0,01$  en una dimensión y  $\gamma = 0,1$  en dos. Si para el caso bidimensional se hubiera tomado  $\gamma = 0,01$ , todos los modos habrían estado deslocalizados. Además, si la anchura de la gaussiana fuera mayor (o el acoplo menor), desaparecerían los límites de movilidad y todos los modos estarían localizados. Estos hechos se ilustran en la figura 6.7 y muestran una clara correlación

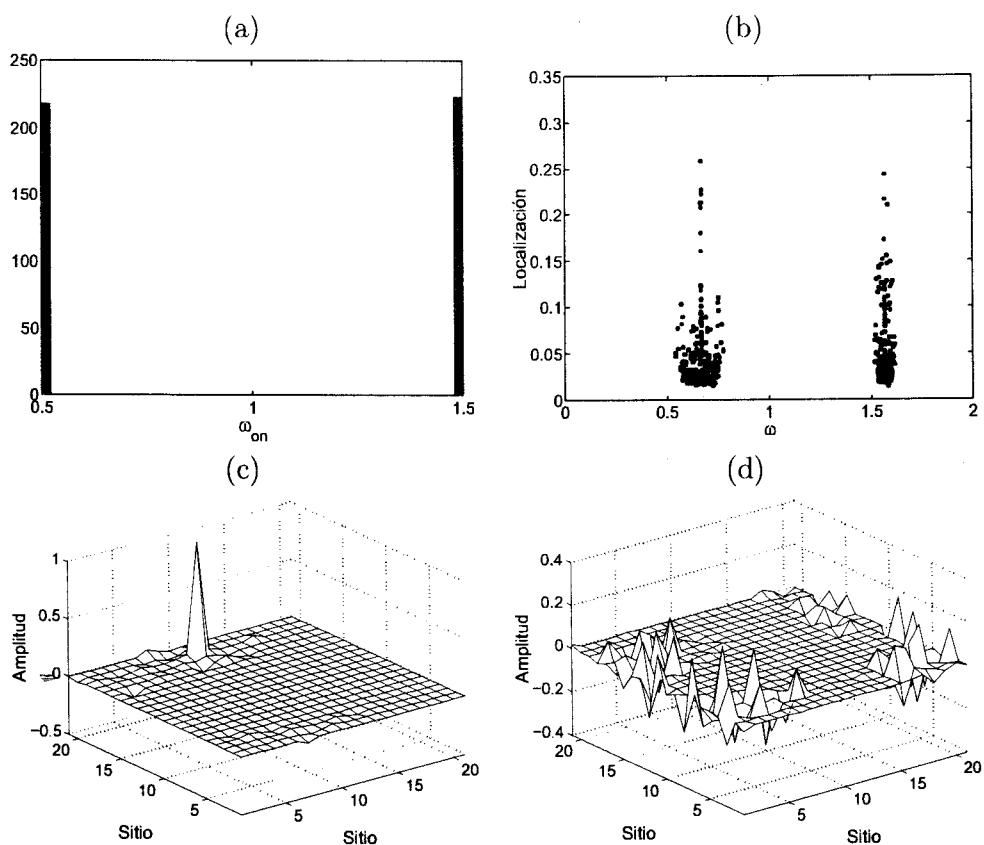
<sup>1</sup> Si el acoplamiento  $C$  fuera mucho mayor, todos los modos estarían extendidos, pero dichos valores no tendrían sentido en redes anarmónicas por lo que obviaremos su estudio.

entre desorden y acoplo, además de la existencia de un valor crítico del desorden a partir del cual todos los estados están localizados, de acuerdo con los resultados originales de Anderson.

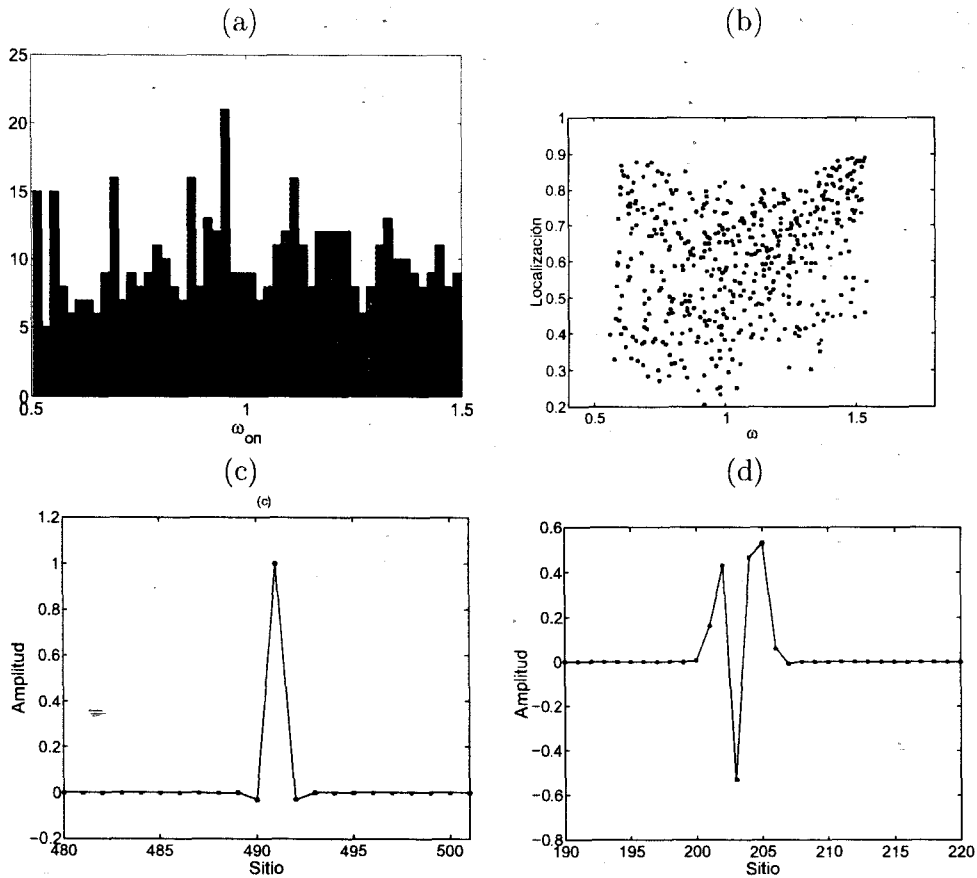


**Fig. 6.1:** Modos Anderson en una cadena monodimensional con distribución aleatoria discreta. (a) Histograma con la distribución de frecuencias de los osciladores aislados; (b) Localización de los modos frente a su frecuencia; (c) Modo de localización máxima ( $P = 0,22\%$ ); (d) Modo de localización mínima ( $P = 1,99\%$ ). Los osciladores no representados en las figuras (c) y (d) están prácticamente en reposo.

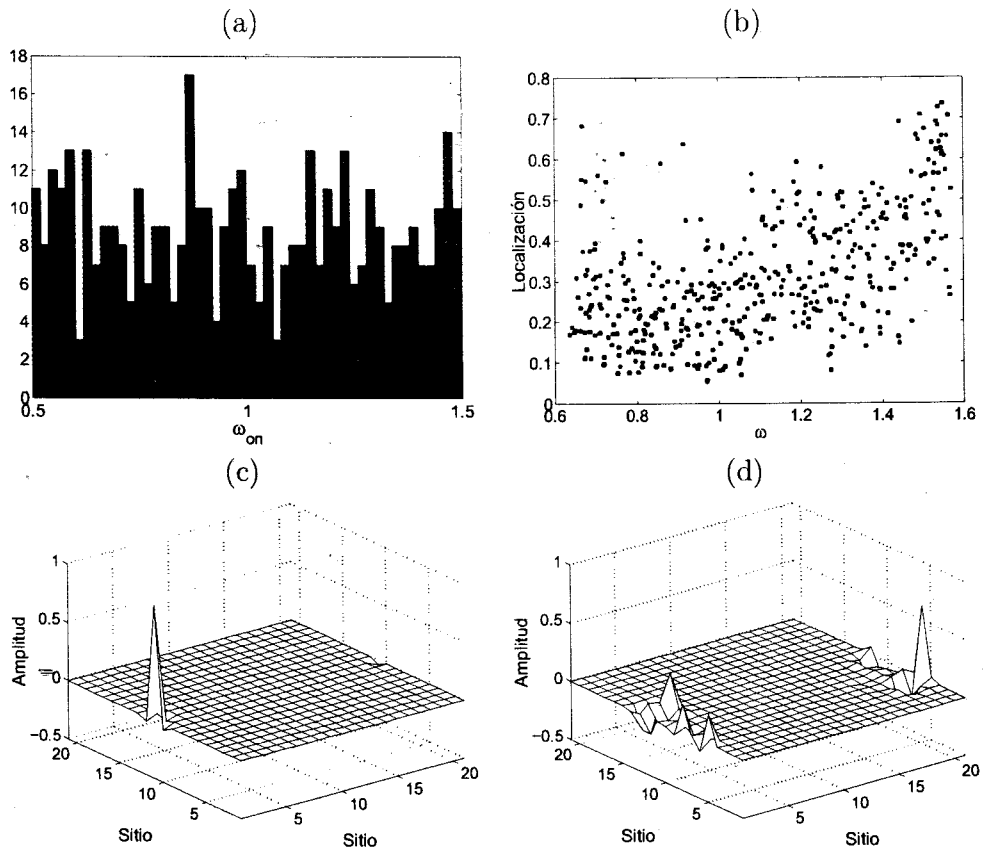




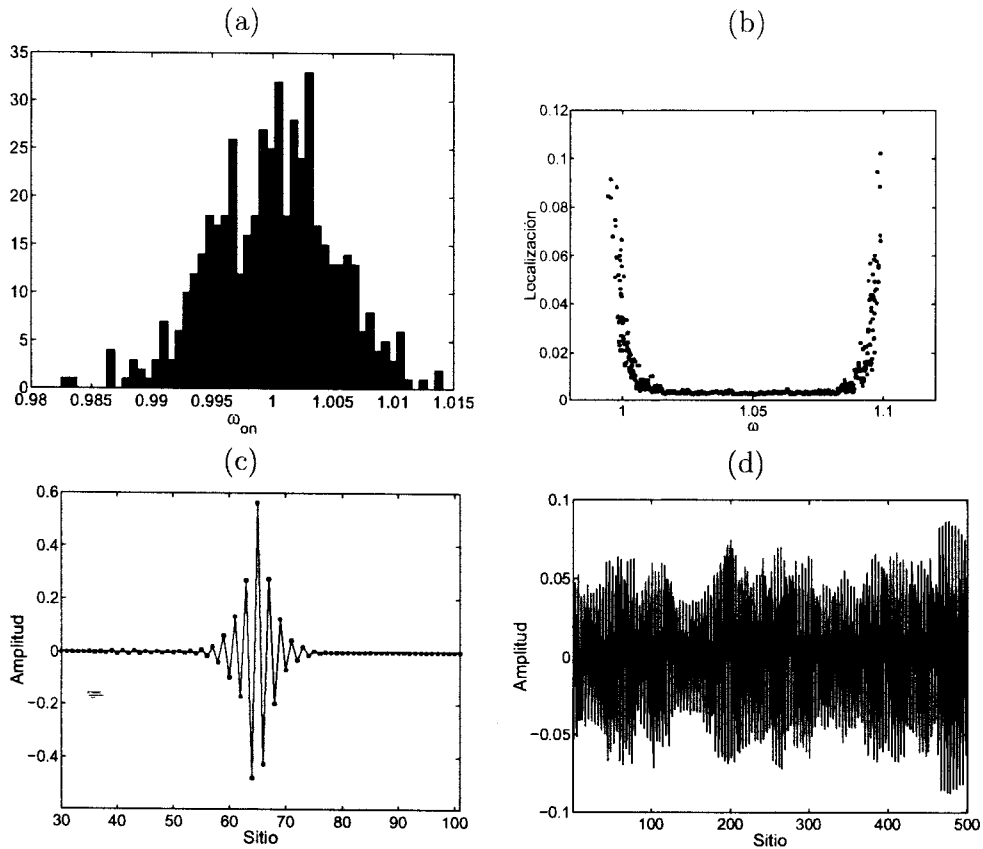
**Fig. 6.2:** Modos Anderson en un red bidimensional con distribución aleatoria discreta. (a) Histograma con la distribución de frecuencias de los osciladores aislados; (b) Localización de los modos frente a su frecuencia; (c) Modo de localización máxima ( $P = 0,77\%$ ); (d) Modo de localización mínima ( $P = 13,37\%$ ).



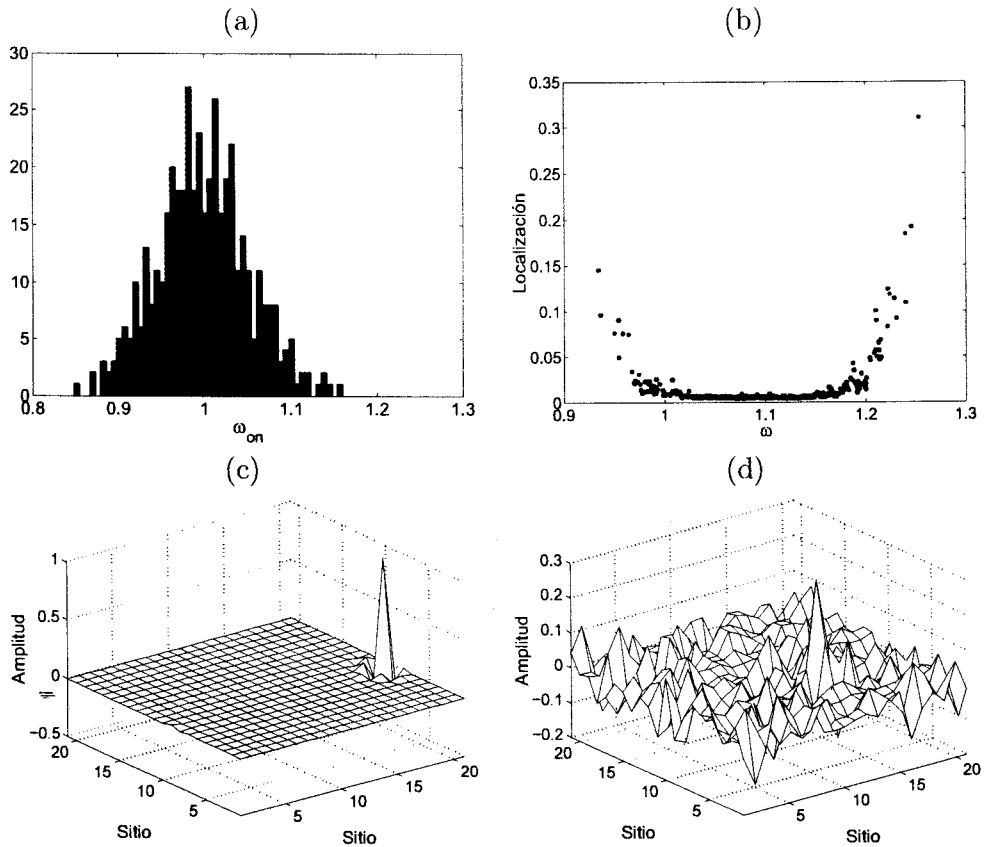
**Fig. 6.3:** Modos Anderson en una cadena monodimensional con distribución aleatoria continua y uniforme. (a) Histograma con la distribución de frecuencias de los osciladores aislados; (b) Localización de los modos frente a su frecuencia; (c) Modo de localización máxima ( $P = 0,22\%$ ); (d) Modo de localización mínima ( $P = 0,96\%$ ). Los osciladores no representados en las figuras (c) y (d) están prácticamente en reposo.



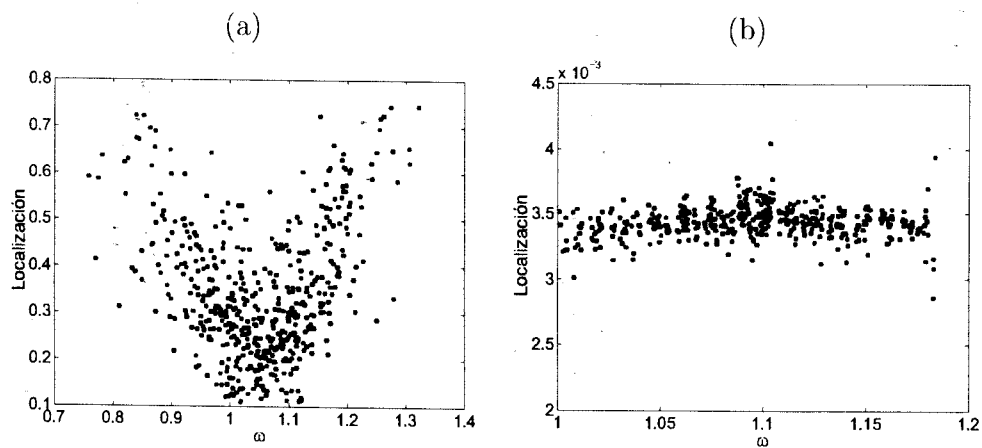
**Fig. 6.4:** Modos Anderson en un red bidimensional con distribución aleatoria continua y uniforme. (a) Histograma con la distribución de frecuencias de los osciladores aislados; (b) Localización de los modos frente a su frecuencia; (c) Modo de localización máxima ( $P = 0,27\%$ ); (d) Modo de localización mínima ( $P = 3,64\%$ ).



**Fig. 6.5:** Modos Anderson en una cadena monodimensional con distribución aleatoria gaussiana. (a) Histograma con la distribución de frecuencias de los osciladores aislados, cuya anchura es  $\gamma = 0,01$ ; (b) Localización de los modos frente a su frecuencia (se observa la existencia de límites de movilidad); (c) Modo de localización máxima ( $P = 1,95\%$ ); (d) Modo de localización mínima ( $P = 79,88\%$ ), el cual está totalmente extendido.



**Fig. 6.6:** Modos Anderson en un red bidimensional con distribución aleatoria gaussiana. (a) Histograma con la distribución de frecuencias de los osciladores aislados, cuya anchura es  $\gamma = 0,1$ ; (b) Localización de los modos frente a su frecuencia (se vuelve a observar la existencia de límites de movilidad); (c) Modo de localización máxima ( $P = 0,64\%$ ); (d) Modo de localización mínima ( $P = 47,52\%$ ).



**Fig. 6.7:** Localización de los modos frente a su frecuencia (a) con anchuras  $\gamma = 0,2$  en una dimensión y (b)  $\gamma = 0,01$  en dos dimensiones. La participación oscila entre  $P = 0,27\%$  y  $P = 1,84\%$  en el primer caso y entre  $P = 49,33\%$  y  $P = 79,90\%$  en el segundo. Comparando con las figuras anteriores se puede observar que al aumentar de la anchura de la campana (es decir, un aumento del desorden) se produce un aumento de la localización.

## 7. Redes anarmónicas desordenadas

### 7.1. Introducción

Es bien sabido que los modelos armónicos de sólidos son solamente una aproximación matemáticamente conveniente y válida únicamente para pequeñas perturbaciones respecto a la configuración de equilibrio. La existencia de términos anarmónicos es necesaria para explicar la dependencia con la temperatura del volumen, y, por lo tanto, de las constantes elásticas isoterma y adiabática. Igualmente, un sólido armónico tendría una conductividad térmica infinita [16]. Las biomoléculas pueden considerarse como un cristal monodimensional, por lo que se les aplica el mismo tipo de razonamiento.

Desde el punto de vista de sistemas desordenados, la introducción de la anarmonicidad es de una importancia extrema. Un sistema armónico desordenado tiene conductividad térmica y eléctrica nula [9], en contra de la evidencia experimental (véanse, por ejemplo, los resultados sobre la conductividad eléctrica en ADN desordenado [80]). La anarmonicidad permite a cada oscilador sintonizar su frecuencia con el resto variando su amplitud, permitiendo el transporte de energía y de carga.

En biomoléculas, como el ADN, la localización de energía es crucial para su funcionamiento biológico. Esto es un ejemplo del interés en entender la relación entre las localizaciones intrínseca (debida a la anarmonicidad) y Anderson (debida al desorden). Según palabras de M Peyrard [62], “es una cuestión importante determinar el mecanismo dominante en un sistema no lineal inhomogeneo. ¿Podrían ambos efectos (localización Anderson e intrínseca) localizar la energía del mismo modo, o los dos efectos competirán y la presencia de no linealidad y desorden no favorecerá la creación de excitaciones localizadas?”.

Los primeros estudios sobre localización en redes anarmónicas desordenadas se abordan desde el punto de vista de teoría de perturbaciones. En [5, 6, 7, 93] se parte del sistema lineal desordenado y se introduce la anarmonicidad como una perturbación.

Existen otro estudios en los que la anarmonicidad no está descrita como una perturbación sino que la red se aproxima por un continuo, por lo que las soluciones obtenidas son solitones o kinks [44, 113, 149].

Sepulchre y MacKay son los primeros en abordar el estudio de sistemas desordenados en redes Klein-Gordon mediante una extensión del teorema de existencia de breathers [177]. Posteriormente, aparecen dos trabajos cruciales para el estudio de breathers en sistemas desordenados. El primero de ellos es realizado por Kopy-

dakis y Aubry [121], mientras que el segundo se debe a Archilla, MacKay y Marín [14]. El enfoque del problema es distinto en ambos trabajos y los estudiaremos con más detalle en la próxima sección. Para abreviar, los llamaremos aproximación KA y AMM, respectivamente. En este capítulo vamos a desarrollar ciertos aspectos de la aproximación AMM, algunos de los cuales se encuentran en el artículo original, mientras que otros han sido realizados exclusivamente para la presente tesis.

Existe otro trabajo más de Kopidakis y Aubry sobre sistemas desordenados [123]. En él se conjugan los resultados de su anterior trabajo [121] con los estudios de Albanese y Fröhlich [7] de teoría de perturbaciones.

Otros estudios relacionados son los realizados por Hörnquist *et al* en los que se estudia la existencia de breathers en cadenas FPU aperiódicas con orden de largo alcance [104, 105, 106].

Los estudios sobre localización en sistemas desordenados comentados anteriormente consideran únicamente los modos de vibración del sistema. Sin embargo, existe un trabajo realizado por Rasmussen *et al* en el que se estudia la localización dinámica usando la ecuación de Schrödinger no lineal discreta (DNLS) [164].

## 7.2. Aproximaciones KA y AMM

Como comentamos en la sección anterior, existen dos maneras distintas de abordar el problema de la localización en sistemas anarmónicos desordenados. Una de ellas es la aproximación de Kopidakis y Aubry (KA), desarrollada en los artículos [121, 122]. La otra es la aproximación de Archilla, MacKay y Marín (AMM) introducida en [14] y ampliada para el caso bidimensional por el autor en [56]. Ambas aproximaciones estudian la posibilidad de existencia de modos localizados en distintos tipos de redes anarmónicas desordenadas, pero no se detienen en estudiar la dinámica completa de la red.

Estas aproximaciones consideran sistemas hamiltonianos con interacción armónica atractiva y de primeros vecinos:

$$H = \sum_n \left( \frac{1}{2} \dot{u}_n^2 + V(u_n) + \frac{1}{2} C(u_n - u_{n+1})^2 \right). \quad (7.1)$$

Este hamiltoniano es válido para un sistema monodimensional, aunque su extensión para más dimensiones es inmediata, con tal de considerar el índice  $n$  como un vector en  $\mathbb{Z}^d$ , siendo  $d$  la dimensión del sistema.

A continuación se describen las aproximaciones seguidas para abordar el problema:

### 7.2.1. Aproximación KA

La aproximación KA consiste en tomar un sistema con un desorden fijo. Éste se implementa en un potencial on-site  $\phi^4$  duro, de forma que las frecuencias de las



oscilaciones de pequeña amplitud ( $\omega_{o,n}$ ) siguen una distribución aleatoria uniforme y continua:

$$V(u_n) = \frac{1}{2}\omega_{o,n}^2 u_n^2 + \frac{1}{4}u_n^4. \quad (7.2)$$

Los parámetros del sistema se eligen de forma que todos los modos lineales del sistema (o sea, los modos Anderson) estén localizados.

Una vez calculado un breather<sup>1</sup>, se varía su frecuencia de forma que se aproxime a la banda de modos Anderson. En el camino pueden suceder dos cosas:

- El breather se aniquila con otro distinto antes de entrar en la banda mediante una bifurcación de tipo silla-nodo.
- El breather entra en la banda hasta que llega a un valor de la frecuencia en el que se convierte en un modo deslocalizado sin sufrir una bifurcación aparente. En realidad lo que ocurre es que se tienen bifurcaciones pitchforks que se han roto debido a la ruptura de simetría que el desorden introduce en el sistema.

### 7.2.2. Aproximación AMM

La implementación de esta aproximación es diferente de la anterior, pues trata de buscar una conexión continua entre breathers y modos Anderson. Para ello se toma un potencial on-site cúbico (blando) de la forma:

$$V(u_n) = \frac{1}{2}\omega_{o,n}^2(s)u_n^2 - \frac{1}{3}su_n^3, \quad (7.3)$$

donde  $s$  es un parámetro que da cuenta de la anarmonicidad y el desorden del sistema. Se busca una conexión entre breathers y modos Anderson, es decir, entre el límite anarmónico ordenado y el límite armónico desordenado. Así,  $s = 1$  en el primer caso y  $s = 0$  en el segundo. Por otro lado, las frecuencias de oscilaciones pequeñas,  $\omega_{on}$ , siguen una distribución aleatoria discreta de forma que pueden tomar dos únicos valores. Estos dependerán de  $s$ , ya que cuando  $s = 1$ , ambos valores deberán ser iguales, y cuando  $s = 0$ , la diferencia entre ellos deberá ser máxima. Así, se define:

$$\omega_{o,n} = \omega_o \left(1 + \rho(s) \frac{r_n}{2}\right), \quad (7.4)$$

donde  $r_n$  es un vector aleatorio y  $\rho(s)$  es una función llamada *camino* que debe cumplir las siguientes propiedades:

- $\rho(s) = 0$  si  $s = 1$ ,

<sup>1</sup> Recordemos que a lo largo de la presente tesis estamos usando el término breather para referirnos tanto a un 1-site breather como a un multibreather.

- $\rho(s) = 1$  si  $s = 0$ .

Una posible implementación del camino es la siguiente:

$$\rho(s) = 1 - s^q, \quad q > 0. \quad (7.5)$$

En este capítulo tomaremos los valores  $q = 1$  (camino lineal) y  $q = 1/4$  (camino  $1/4$ ).

Pues bien, con todos estos preliminares, se calcula un breather para  $s = 1$  y se varía el valor de  $s$  mediante un método de continuación. Sin embargo, para realizar esta continuación no se puede dejar la frecuencia constante pues las frecuencias del breather y de los modos Anderson no tienen porqué coincidir. Por tanto, hay que mantener constante otro parámetro del sistema para permitir que la frecuencia varíe con  $s$ . Así, se elige que este parámetro sea la acción <sup>2</sup>, entendida ésta como la suma de las áreas del espacio de las fases. Esta elección, además, evita que en la continuación se llegue a la solución idénticamente nula. La implementación de los métodos de continuación a acción constante se encuentra en la siguiente sección.

En esta continuación se pueden encontrar dos tipos de bifurcaciones:

- Dos breathers se aniquilan mediante una bifurcación de tipo silla-nodo.
- Tres breathers confluyen en una sola solución mediante una bifurcación pitchfork. Esta pitchfork puede romperse debido a la pérdida de simetrías en la red. Además, puede ir acompañada de una duplicación de frecuencia, en cuyo caso no se rompe pues las ramas externas de la pitchfork son soluciones iguales salvo un desfase temporal de un semi-periodo.

Este tipo de bifurcaciones son previsible pues el número de soluciones para  $s = 1$  (es decir, breathers) es igual a  $n_b = ((3^d)^N - 1)/2$ , mientras que el de modos Anderson es  $n_a = N^d$ , donde  $d$  es la dimensión del sistema. Así, en una cadena de 21 osciladores,  $n_b = 5,2 \times 10^9$ , mientras que  $n_a = 21$ ; en una red bidimensional de tamaño  $21 \times 21$ ,  $n_b = 5,5 \times 10^{19}$  y  $n_a = 441$ .

### 7.2.3. Algunos comentarios

Se puede extraer una consecuencia de ambas aproximaciones: el desorden y la no linealidad pueden entrar en conflicto, desapareciendo la localización, o bien, se produce una especie de sinergia entre ambas y la localización persiste.

Una cuestión importante es cómo afecta la forma del potencial on-site a los resultados. Por ejemplo, en la aproximación KA no se obtienen duplicaciones de frecuencia (o periodo).

Finalmente, queda también como cuestión pendiente saber cómo se comporta la aproximación AMM cuando se toman otras implementaciones del desorden. Los

<sup>2</sup> Aunque también se podía haber elegido la energía.

resultados correspondientes no están publicados y son tratados en exclusiva a lo largo de este capítulo.

### 7.3. Continuación de los modos localizados a acción constante

En esta sección expondremos el método de continuación a acción constante desarrollado en [14].

La acción se define como la suma de las áreas en los subespacios definidos por cada par de variables conjugadas:

$$I = \sum_{n=1}^N \oint p_n dq_n = \sum_{n=1}^N \oint \dot{u}_n du_n. \quad (7.6)$$

Según JA Sepulchre y RS MacKay [176], se puede realizar una continuación con frecuencia variable siempre que estemos en un espacio vectorial con la norma apropiada. Como las funciones periódicas de frecuencia arbitraria no forman un espacio vectorial, pues la suma de dos funciones de distinta frecuencias no es periódica, vamos a cambiar la escala de tiempo:  $t \rightarrow \phi = \omega_b t$ . Si denotamos a la derivada con respecto a  $\phi$  con una prima ( $'$ ), tenemos que  $\ddot{u} = \omega_b^2 u''$  y  $\omega_b$  aparecerá en las ecuaciones dinámicas como otra variable más. Por tanto, nuestro espacio de trabajo será  $\mathcal{E}_s^2(2\pi) \times \mathbb{R}$ , siendo ahora  $\mathcal{E}_s^2(2\pi)$  el espacio de las funciones simétricas en el tiempo, de periodo  $2\pi$  y derivada segunda continua. Así, la acción puede expresarse como:

$$I = \omega_b \sum_{n=1}^N \int_0^{2\pi} (u'_n)^2 d\phi. \quad (7.7)$$

Este cambio de variables no afecta a las ecuaciones dinámicas en el espacio de Fourier (3.8),  $\vec{F}(\vec{z}, \omega_b)$ . Sin embargo, al hacer la continuación a acción constante, tendremos una variable ( $\omega_b$ ) y una ecuación más ( $F_I(\vec{z}, \omega_b)$ ). Haciendo uso del desarrollo en serie de Fourier (3.5), la acción se expresa como:

$$I(\vec{z}, \omega_b) = 4\pi\omega_b \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^{k_n} (kz_n^k)^2. \quad (7.8)$$

Como la acción debe mantenerse constante, añadimos a las ecuaciones dinámicas  $\vec{F}(\vec{z}, \omega_b)$ , la siguiente ecuación:

$$F_I(\vec{z}, \omega_b) \equiv I(\vec{z}, \omega_b) - I_o = 0, \quad (7.9)$$

donde  $I_o$  es el valor de la acción que se mantiene constante durante la continuación.

En resumen, se tiene un sistema de ecuaciones algebraicas  $\vec{F} \equiv (\vec{F}, F_I) = 0$  cuyas incógnitas son los elementos de  $\vec{z} \equiv (\vec{z}, \omega_b)$ .

#### 7.4. Aplicación de la aproximación AMM a sistemas monodimensionales

En esta sección vamos a mostrar varios ejemplos de diagramas de bifurcación para distintas implementaciones del desorden en redes monodimensionales. El potencial on-site es cúbico, al igual que en la ecuación (7.3), el número de partículas es  $N = 21$ , las condiciones de contorno periódicas, y la acción que se mantiene constante es la de un breather con un solo sitio excitado, de frecuencia  $\omega_b = 0,85$  y constante de acoplo  $C = 0,05$ . Con ello, la acción toma el valor  $I_o = 0,1286$ . La obtención de las diferentes ramas es un trabajo “artesanal”, o, en palabras de R. Seydel [178], “un arte”. En la referencia anterior se puede encontrar técnicas para la obtención de ramas de soluciones. Los diagramas de bifurcación se obtienen proyectando las ramas de soluciones sobre el subespacio central, es decir, el autovector correspondiente al autovector del jacobiano que se anula en la bifurcación [97].

Nos vamos a centrar en lo que les ocurre a los modos Anderson de mayor y menor frecuencia cuando  $s$  varía desde 0 a 1. En el caso de una distribución discreta de desorden, tomamos un vector aleatorio en la ecuación (7.4) de la forma:

$$r_n = (+, -, +, -, -, -, -, -, -, +, -, -, +, +, -, -, -, +, -, -, +), \quad (7.10)$$

donde  $+$  representa a  $+1$  y  $-$  a  $-1$ . Con este desorden y en un camino lineal, se obtiene el diagrama de la figura 7.1. Se puede observar que el modo de máxima frecuencia está conectado con un dark multibreather y dos multibreathers con un desfase temporal de un semiperiodo. Estos últimos sufren una duplicación de frecuencia en su conexión con el modo Anderson. Además, están también conectados con el modo de mínima frecuencia. El hecho de que un dark breather esté conectado con un modo Anderson de alta localización es un claro ejemplo de cómo el aumento del desorden y la disminución de la no linealidad produce localización, al impedir la existencia de modos extendidos, quedando sólo los modos localizados, que corresponden a un cambio continuo en la frecuencia.

Este comportamiento también se obtiene para una distribución pseudo-uniforme del desorden. En particular, se puede ver en la figura 7.2 el diagrama de bifurcación para el vector aleatorio:

$$r_n = (-0,43, +0,74, +0,25, -0,52, +0,96, +0,28, -0,54, +0,36, +0,33, -0,73, \\ -0,95, -0,48, -0,77, -0,86, +0,71, -0,64, -0,94, +0,47, +0,07, -0,45, -0,26) \quad (7.11)$$

Si se toma una distribución pseudo-gaussiana<sup>3</sup> con un desorden pequeño, las conexiones se realizan sin bifurcación. Si el desorden aumenta, aparecen conexiones entre modos Anderson y breathers mediante bifurcaciones. Esto indica que

<sup>3</sup> en realidad, lo que se tiene es una no uniforme, pues para que sea gaussiana se necesita un número mucho mayor de partículas

el número de bifurcaciones está relacionado con el número de modos Anderson localizados.

Otro ejemplo de fenómeno que se ha observado es la existencia de isolas, tal como se ilustra en la figura 7.3. En este caso, se ha estudiado el modo Anderson de mayor frecuencia en el camino 1/4 con una distribución discreta de frecuencias.

### 7.5. Aplicación de la aproximación AMM a sistemas bidimensionales

En esta sección estudiamos una red bidimensional con acoplo de primeros vecinos y potencial on-site  $\phi^3$ . Parte de los resultados de esta sección están publicados por el autor en [56] y han sido objeto también de un trabajo de investigación [54].

En este caso, el hamiltoniano es de la forma:

$$H = \sum_{n_1 n_2=1}^N \frac{1}{2} \dot{u}_{n_1 n_2}^2 + \frac{1}{2} \omega_{n_1 n_2}^2 u_{n_1 n_2}^2 - s u_{n_1 n_2}^3 + \frac{1}{2} C \sum_{|n_1 - n'_1|=1} \sum_{|n_2 - n'_2|=1} (u_{n_1 n_2} - u_{n'_1 n'_2})^2. \quad (7.12)$$

La red considerada tiene  $17 \times 17$  partículas, con una constante de acoplo de valor  $C = 0,01$  y un desorden de tipo discreto. El vector aleatorio (que ahora se convierte en una matriz) es de la forma:

$$r_n = \begin{pmatrix} - - + + + - + + - - + + - - - - + \\ + + + + - + - + + + - - + - + + + \\ - - + + + + - + + - - + - - - - - \\ - + + - + + + - + - - - + - + - - \\ + + - + - + + + - - + + + + + + + \\ - - - + + + - + - - + - - - - + + \\ - + - + + + + + - - + - - - - + + \\ + + - + - - + - - - + - - - + - + \\ + + - - - - + - - + - - + - - - - \\ - - - + - - - + + + - + + - + - + \\ + + + - + + - + + + + + - + + - \\ - + + - + + + + + - + + - - + - \\ + + - + + + + - + - - - + + - - \\ + - - + - + + - - + + - - + + - + \\ + + - - + + - - - - + + - - + - + \\ + - - - - - + - + - - + - + - - \end{pmatrix} \quad (7.13)$$

En este caso, optamos por partir de un 1-site breather de frecuencia  $\omega_b = 0,85$  y realizar la prolongación hacia el límite  $s = 0$  siguiendo distintos caminos. La acción vale  $I_o = 0,1035$ . En las figuras 7.4 y 7.5 se muestran, respectivamente, los resultados obtenidos en los caminos lineal y 1/4 para un breather centrado en la partícula (9,9). La figura 7.6 muestra un ejemplo de bifurcación de tipo silla-nodo en la que el breather centrado en (13,13) está conectado con el 3-site breather con los sitios (13,13), (13,14) y (14,14) excitados.

Estos resultados muestran que los tipos de bifurcaciones obtenidas en el sistemas monodimensionales son los mismos que surgen en el caso bidimensional.

### 7.6. Breve comentario sobre la estabilidad de las ramas

Si se realiza un análisis de estabilidad de las ramas de los diagramas de las bifurcaciones tipo pitchfork anteriormente analizadas se observa que todas son estables. Sin embargo, según la teoría estándar de bifurcaciones, debe existir un intercambio de estabilidad entre las ramas de la pitchfork. Esta falta de concordancia podría deberse a que las ecuaciones dinámicas de nuestro modelo son distintas a las de la teoría estándar de bifurcaciones ( $x' = F(x, \mu)$ ) [97].

Es interesante señalar que el modo Anderson de máxima frecuencia en sistemas monodimensionales aparece conectado con un 2-site dark breather. Esto se debe a que éste es estable, si las condiciones de contorno son periódicas y el deriva del fonón con  $q = \pi$ , a diferencia de lo que ocurre con el 1-site dark breather, el cual es inestable con las mismas condiciones.

### 7.7. Discusión

En este capítulo se han mostrado resultados obtenidos en el estudio de redes anarmónicas desordenadas en el contexto de la aproximación AMM. Se han encontrado diversos tipos de diagramas de bifurcación en la conexión de breathers con modos Anderson.

Sin embargo, este estudio no sería de utilidad si no se basara en modelos concretos. Hay que recordar que los estudios de redes suelen basarse en el comportamiento dinámico de las perturbaciones. Éstas, a su vez, son combinaciones de los modos de vibración. Por ello, en una red anarmónica desordenada, deberían obtenerse todos los modos de vibración para un determinado conjunto de valores de los parámetros de la red, si quisiéramos hacer un estudio completo de las propiedades dinámicas del sistema.

Existe un sistema aperiódico en el que el estudio de la interacción entre no linealidad y desorden puede ser especialmente interesante. Nos estamos refiriendo al ADN, cuya aperiodicidad viene determinada por el código genético <sup>4</sup>. Como veremos a lo largo de esta tesis, existe una gran cantidad de modelos de ADN para estudiar sus propiedades dinámicas. Sin embargo, la mayoría de ellos no tienen en cuenta la aperiodicidad de la molécula que es crucial para entender los mecanismos del funcionamiento celular. Por ello, se necesitan realizar estudios que tengan en cuenta las dos fuentes de localización, es decir, la anarmonicidad y la no periodicidad debida al código genético.

<sup>4</sup> No decimos que el ADN sea desordenado, sino que es aperiódico, pues el código genético tiene una secuencia determinada es decir, no es aleatorio.

## 7.8. Conclusiones

En este capítulo hemos expuesto resultados no publicados, los cuales amplían los obtenidos por Archilla, MacKay y Marín en [14]. También se han incluido resultados obtenidos por el autor en sistemas bidimensionales, publicados en [56] y que también han sido objeto de un trabajo de investigación [54]. Estos se pueden resumir en

**Conclusión 7.1:** *Los breathers pueden conectarse con los modos Anderson, pudiendo sufrir bifurcaciones, en cuyo caso serán de tipo pitchfork, con o sin duplicación de frecuencia. En la mayoría de los casos, los breathers se aniquilan entre sí debido a bifurcaciones de silla-nodo, de forma que no pueden conectarse con los modos Anderson.*

**Conclusión 7.2:** *Los modos Anderson de mayor y menor frecuencia se encuentran conectados entre sí. Este fenómeno aparece para distribuciones discretas y continuas del desorden.*

**Conclusión 7.3:** *El modo Anderson de mayor frecuencia está conectado con un 2-site dark breather que vibra en zigzag si las condiciones de contorno son periódicas.*

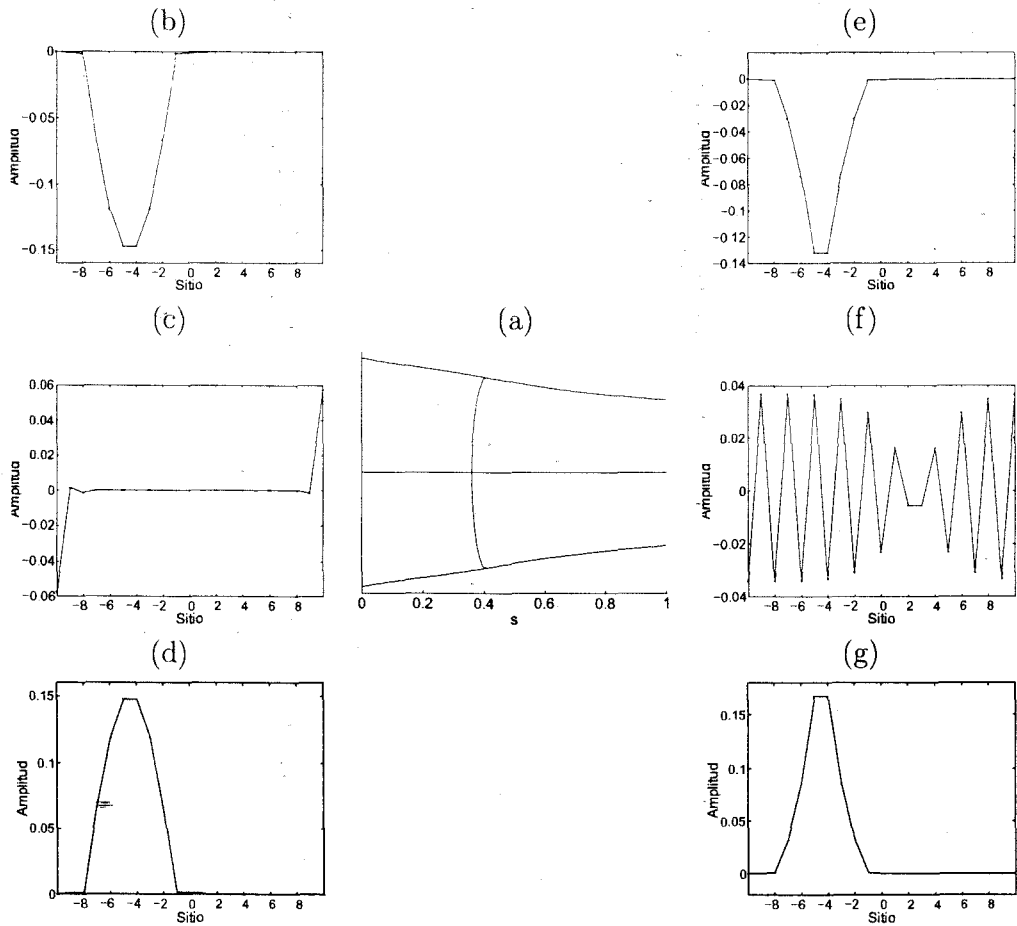
**Conclusión 7.4:** *Para un desorden gaussiano, no existe conexión entre breathers y modos Anderson si ninguno de estos se encuentran localizados. Si aumenta el número de modos Anderson localizados, también lo hace el número de conexiones. Es decir, el número de conexiones breathers-modos Anderson aumenta cuando lo hace el desorden.*

**Conclusión 7.5:** *Además de las bifurcaciones de tipo pitchfork y silla-nodo, pueden aparecer isolas.*

**Conclusión 7.6:** *Los tipos de bifurcaciones que se obtienen en la conexión entre breathers y modos Anderson en redes bidimensionales son los mismos que en el caso monodimensional. En otras palabras, los tipos de bifurcaciones no dependen de la dimensión de la red.*

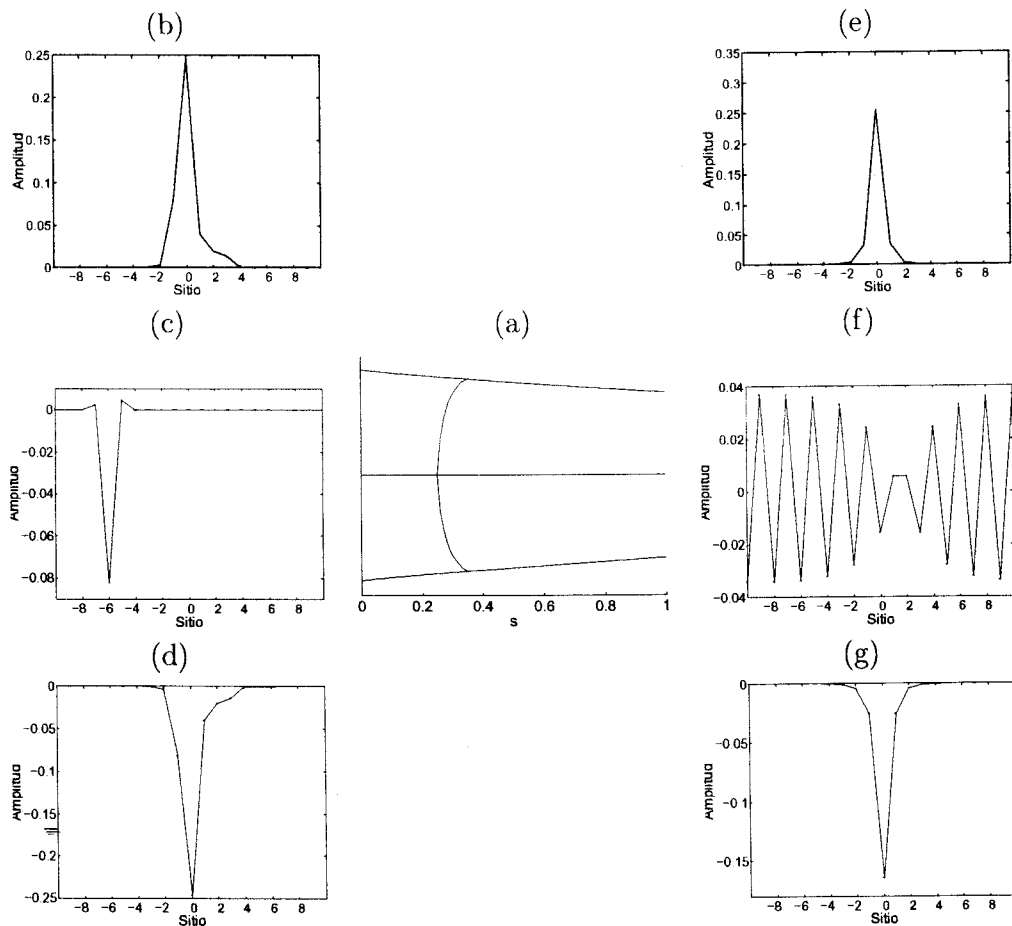
**Conclusión 7.7:** *Tanto en el caso monodimensional como en el bidimensional, no se obtienen bifurcaciones de duplicación de periodo/frecuencia cuando  $q < 1$ .*

**Conclusión 7.8:** *En las bifurcaciones tipo pitchfork, todas las ramas son estables.*

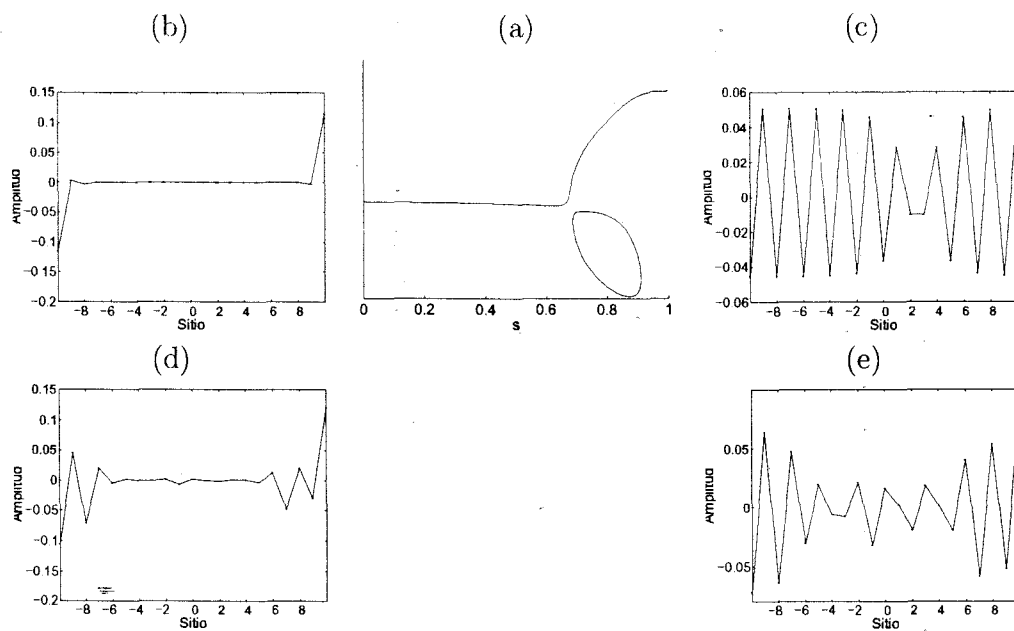


**Fig. 7.1:** Cadena anarmónica desordenada con desorden discreto. Camino lineal. (a) Diagrama de bifurcación: existe una bifurcación de duplicación de frecuencia / periodo en la rama central para  $s \in (0,3604, 0,3605)$  y otra sin cambio de frecuencia en las ramas superior e inferior para  $s \in (0,401, 0,402)$ . (b) y (d) Modos Anderson de frecuencia mínima ( $\omega = 0,5097$ ) en oposición de fase. (c) Modo Anderson de frecuencia máxima ( $\omega = 1,5496$ ). (e) y (g) Breathers en las ramas superior e inferior, respectivamente. (f) Dark breather en la rama central ( $\omega = 1,0909$ ). Se observa cómo los modos Anderson de mayor y menor frecuencia están conectados entre sí.

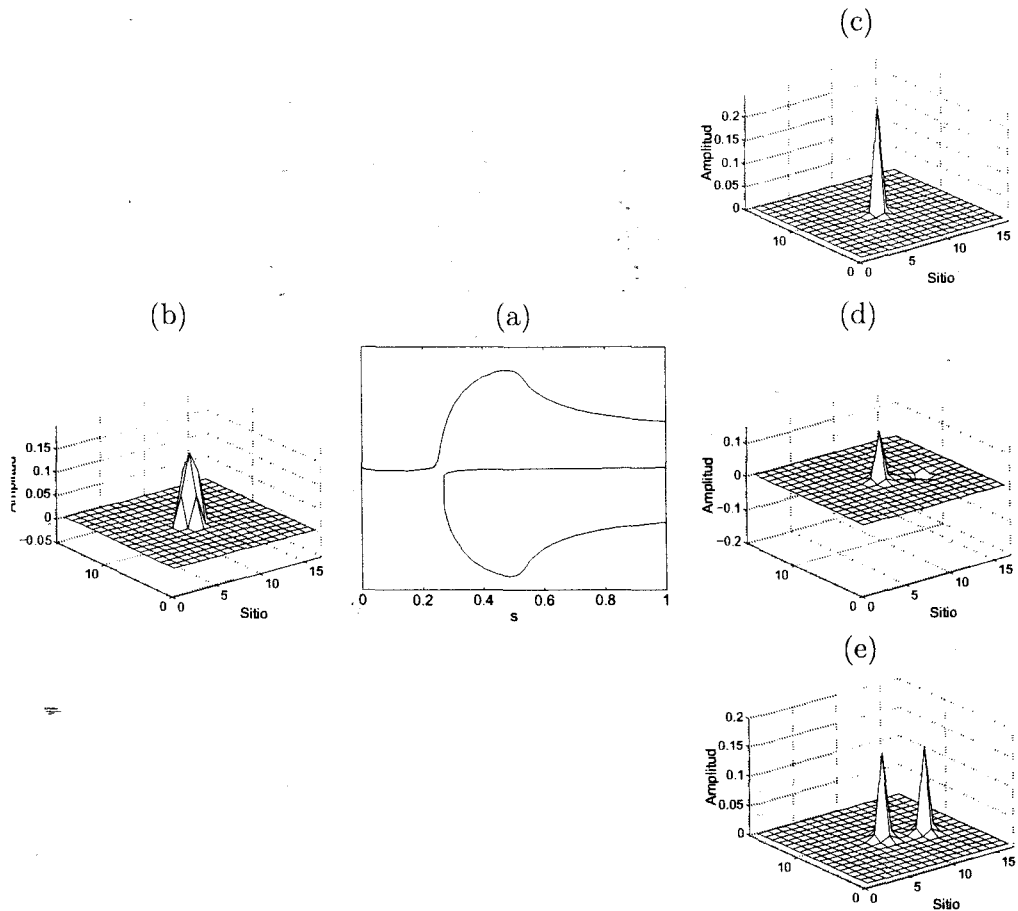




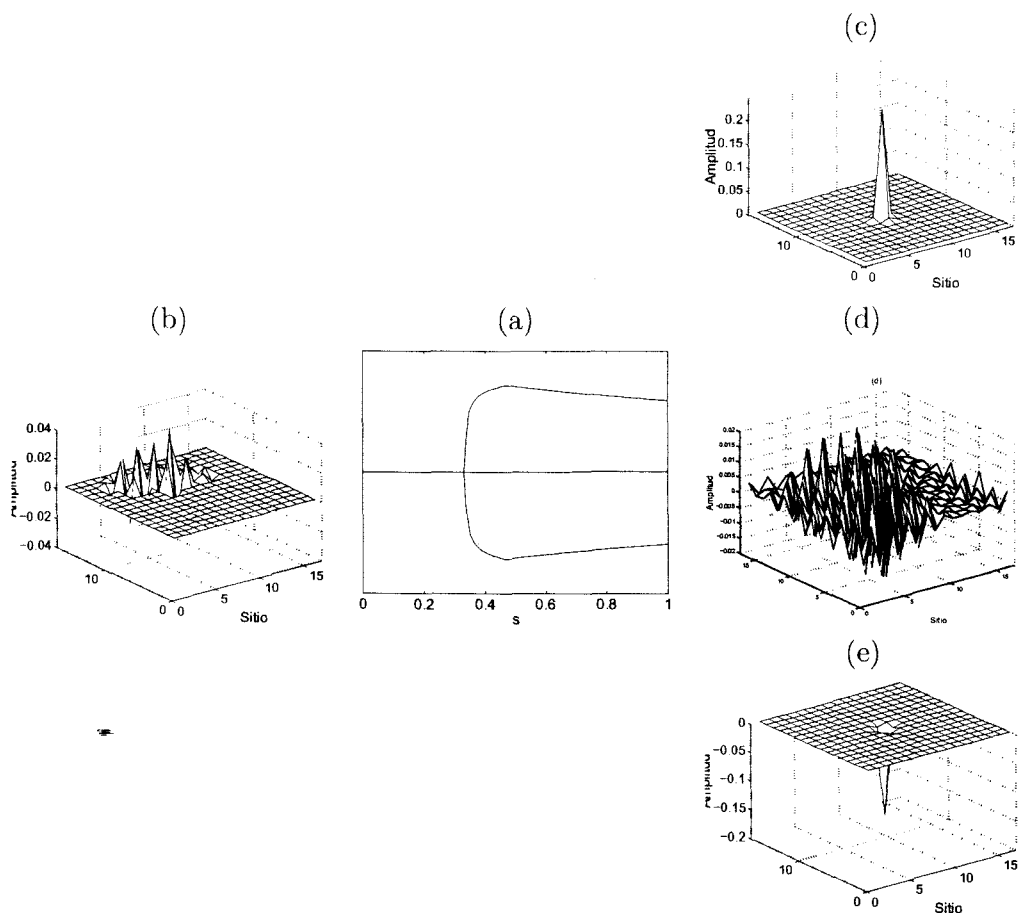
**Fig. 7.2:** Cadena anarmónica desordenada con desorden continuo uniforme. Camino lineal. (a) Diagrama de bifurcación: existe una bifurcación de duplicación de frecuencia / periodo en la rama central para  $s \in (0,2526, 0,2527)$  y otra sin cambio de frecuencia en las ramas superior e inferior para  $s \in (0,344, 0,345)$ . (b) y (d) Modos Anderson de frecuencia mínima ( $\omega = 0,5903$ ) en oposición de fase. (c) Modo Anderson de frecuencia máxima ( $\omega = 1,5130$ ). (e) y (g) Breathers en las ramas superior e inferior, respectivamente. (f) Dark breather en la rama central. Este dark breather tiene la misma frecuencia y acción que en el caso de desorden discreto. Se observa cómo los modos Anderson de mayor y menor frecuencia están conectados entre sí.



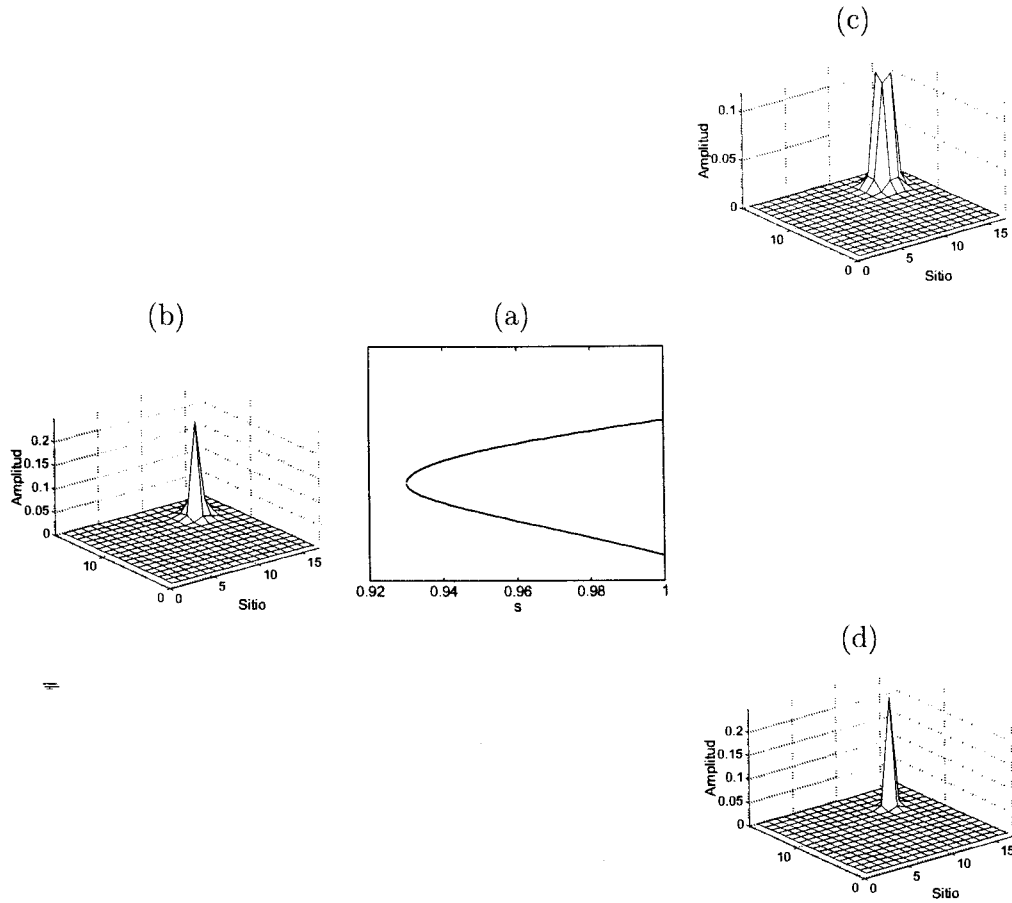
**Fig. 7.3:** Cadena anarmónica desordenada con desorden discreto. Camino 1/4.  
 (a) Diagrama de bifurcación: aparece una isla comprendida entre  $s \approx 0,6861$  y  $s \approx 0,9097$ . (b) Modo Anderson de frecuencia máxima. (c) Dark breather que conecta con el modo Anderson anterior. (d) y (e) Modos localizados en el extremo izquierdo y derecho de la isla, respectivamente.



**Fig. 7.4:** Red anarmónica desordenada con desorden discreto. Camino 1/4. (a) Diagrama de bifurcación tipo pitchfork en  $s \in (0,264, 0,265)$ . (b) Modo Anderson que se conecta tras la bifurcación. Su frecuencia es  $\omega = 0,5167$ . (c), (d) y (e) Breathers en las ramas superior, central e inferior, respectivamente.



**Fig. 7.5:** Red anarmónica desordenada con desorden discreto. Camino lineal. (a) Diagrama de bifurcación tipo pitchfork con duplicación de frecuencia / periodo en  $s \in (0,336, 0,337)$ . (b) Modo Anderson que conecta tras la bifurcación. Su frecuencia es  $\omega = 1,5232$ . (c) y (e) Breathers en las ramas superior e inferior, respectivamente. (d) Dark breather en la rama central.



**Fig. 7.6:** Red anarmónica desordenada con desorden discreto. Camino 1/4. (a) Diagrama de bifurcación tipo silla-nodo en  $s \approx 0,9301$ . (b) Breather en el punto de retorno. (c) y (e) Breathers en las ramas superior e inferior, respectivamente.

## 8. Breathers móviles

### 8.1. Una definición y antecedentes históricos

Hasta ahora, todos los modos de vibración localizados que hemos visto permanecen estacionarios en la red. Es decir, aunque pase un tiempo infinito, el sistema vuelve a las condiciones iniciales siempre que transcurra un número entero de periodos. Dentro de este tipo de soluciones se encuentran los *breathers estacionarios* (BEs), que han sido estudiados en los capítulos precedentes.

Estos modos localizados pueden moverse a lo largo de la red, constituyendo un mecanismo para la transferencia de energía, y reciben el nombre de *breathers móviles* (BMs). Sin embargo, no existe una definición clara de este concepto, lo cual ha dado lugar a muchas controversias, como veremos a continuación.

#### 8.1.1. Sistemas continuos

En primer lugar, debemos señalar que los breathers móviles no son genéricos en sistemas continuos de tipo Klein-Gordon. En ese caso, el hamiltoniano es invariante bajo transformaciones de Lorentz, por lo que si se obtienen soluciones estacionarias localizadas, inmediatamente se infiere la existencia de soluciones móviles localizadas. Sin embargo, no es posible la existencia de soluciones estacionarias tipo breather en modelos continuos porque el espectro de fonones no está acotado por arriba, por lo que siempre habrá un armónico del breather que resuene con la banda de fonones [35, 70]. Pese a todo, existe una excepción: el modelo de sine-Gordon, en el cual se han encontrado soluciones tipo breather, tanto móviles como estacionarias, análogas a las de los sistemas discretos <sup>1</sup>. No obstante, existen breathers en sistemas continuos regidos por la ecuación de Schrödinger no lineal y también existen otro tipo de soluciones en sistemas continuos aparte de los breathers, como pueden ser los solitones o los kinks [71].

#### 8.1.2. Sistemas discretos

En sistemas discretos aparece un panorama muy distinto. En primer lugar, existen los modelos integrables, como la ecuación DNLS [73], o las redes de Toda

---

<sup>1</sup> En realidad, se encontraron breathers en el modelo de sine-Gordon continuo antes que en el discreto. Por ello, a este último tipo de soluciones se les llamó *breathers discretos* por analogía con los "breathers continuos" [42].

[187] y de Ablowitz-Ladik [1], en las cuales se puede pasar de manera continua de soluciones estacionarias a soluciones móviles. Sin embargo, estos modelos representan un caso muy particular del espectro de todos los posibles tipos de redes y no incluyen las de tipo Klein-Gordon. Un paso más allá fue dado por Takeno y Hori [101, 102, 182, 183], quienes encontraron, mediante simulación numérica, *breathers* móviles en redes FPU. En este mismo contexto, Sandusky *et al* [173] muestran que se pueden originar *breathers* móviles a partir de la desestabilización de *breathers* estacionarios. Finalmente, el primer análisis en redes Klein-Gordon lo realizan Bang y Peyrard [29], los cuales suponen que la no linealidad del sistema es baja y obtienen una ecuación para la envolvente del *breather*, eliminando toda vibración interna. Esta envolvente será un solitón solución de la ecuación de Schrödinger no lineal continua (NLS).

Todo este desarrollo numérico y teórico desembocó en el primer método para la obtención de *breathers* móviles en redes Klein-Gordon. Éste fue desarrollado por Chen, Aubry y Tsironis y se le suele conocer con el nombre de *método del modo marginal* [43]. Posteriormente explicaremos con más detalle en qué consiste. Gracias a este descubrimiento surgió un gran número de trabajos en los que se obtenían *breathers* móviles en distintos tipos de [21, 144, 140, 146].

### 8.1.3. *Concepto de breather móvil*

Pes a todo, aún no se ha encontrado una prueba de existencia de *breathers* ni en redes Klein-Gordon, ni en redes FPU. Además, se sabe que los *breathers* móviles no son soluciones exactas de las ecuaciones de movimiento, tal como ocurre con los *breathers* estacionarios. Todo esto da lugar a que no haya un acuerdo sobre la definición de *breather* móvil. En [85], Flach y Kladko definen un *breather* móvil como una solución localizada tal que ha avanzado un sitio en la red una vez que haya pasado un número entero de periodos de vibración externa. Así, los BMs son puntos fijos de un mapa. Usando este método, calculan un BM como solución de la ecuación DNLS. Un método similar es utilizado por Aubry y Cretegny [21] para calcular lo que ellos llaman “*breathers* móviles exactos” en redes Klein-Gordon. Estos BMs no son más que los puntos fijos del mapa de Flach y Kladko. Pero además, según Aubry y Cretegny, no sólo se consideran BMs aquellas soluciones que son puntos fijos, sino que lo son todas aquellas que se propagan por la red “de un modo más o menos uniforme” y con vibración interna.

Nosotros seguiremos la definición de BM dada por Aubry y Cretegny, es decir, una solución localizada que se propaga por la red con una vibración interna. ¿Cómo sabemos que el movimiento es lo suficientemente uniforme? Eso es difícil de determinar, pues el BM, aunque sea “exacto”, no puede evitar que su frecuencia resuene con la de los fonones y se emita radiación. Ésta puede hacer que el *breather* se frene y se “pinche” en la red, o que cambie la dirección de su trayectoria, volviéndose caótica en algunos casos. Por ello, el concepto de “buena movilidad” se irá particularizando para cada caso en concreto.

Recientemente, se ha publicado un trabajo en el que se construye un hamiltono-

niano efectivo para el cálculo de breathers móviles aproximados [134]. Este trabajo, realizado por MacKay y Sepulchre, muestra cómo calcular este hamiltoniano en el modelo de Salerno [170] (el cual es una interpolación entre las redes de Ablowitz-Ladik y la DNLS) y en redes FPU.

## 8.2. El método del modo marginal

Como comentamos en la sección anterior, existe un método sistemático para obtener BMs. Puede que no sea la única forma de obtenerlos, pero hasta el momento es el método más efectivo a la hora de obtener BMs en redes Klein-Gordon.

Antes de explicar en qué consiste este método, expondremos ciertos conceptos previos.

### 8.2.1. Conceptos previos

#### *Kinks móviles*

El estudio de kinks móviles en sistemas discretos puede arrojar luz sobre la forma en la que se puede poner un breather en movimiento. Para realizar ese estudio, el kink suele describirse por una coordenada colectiva. Así, el kink se encuentra inmerso en un potencial periódico llamado potencial de Peierls-Nabarro (PN). Éste tiene al menos un máximo y un mínimo entre dos sitios de la red. La diferencia entre ambos se conoce con el nombre de *barrera de Peierls-Nabarro*. El kink correspondiente al máximo del potencial es inestable, mientras que el que está situado en el mínimo es estable. Si a un kink estático situado en el mínimo del potencial se le suministra una energía mayor que la barrera de PN, el kink superará el potencial creado por la red y podrá moverse.

Otra característica importante de los kinks móviles es la existencia de un modo traslacional (o modo de *pinning*) cuya frecuencia se anula al ponerse en movimiento.

#### *La separatriz de movilidad*

La naturaleza de los breathers es diferente a la de los kinks. Esencialmente, los kinks estáticos se corresponden con los mínimos del potencial reticular, mientras que los breathers estacionarios constituyen una familia monoparamétrica de puntos del espacio de los bucles de periodo fijo [87]. Según Flach y Willis [86], existe una separatriz de movilidad en el espacio de las fases, la cual separa los estados estacionarios de los estados móviles, de forma análoga a la separatriz de un péndulo, la cual separa estados oscilantes de estados rotantes. Así, para poner un breather en movimiento, es necesario superar esta separatriz.

Según se muestra en [86], la energía necesaria para superar la separatriz, puede ser positiva, negativa o nula, lo cual es totalmente contradictorio con el concepto



de barrera de PN. La razón estriba en el hecho de que los grados de libertad internos del breather móvil están “íntimamente conectados” con el grado de libertad traslacional.

Este nuevo concepto contrasta con los trabajos de Dauxois *et al*, en los que consideran la existencia de una barrera de PN cuyo valor es la diferencia entre la energía de un breather centrado en un sitio (estable) y un breather centrado en el enlace (inestable) [61, 68].

#### *La barrera de acción*

Los resultados obtenidos por Aubry y Cretegnny sobre movilidad en breathers [21, 50] les llevó a la conclusión de que el concepto de barrera PN no puede olvidarse del todo. En primer lugar, siempre hay que suministrar energía para mover un breather. Además, los resultados sobre breathers móviles exactos muestran características comunes con los solitones. Esto llevó a los autores a definir una barrera no en energía sino en acción. Este concepto se plasma en un artículo escrito junto a JL Marín [143], pero que nunca llegó a publicarse. Por ello, no profundizaremos mucho en este concepto.

#### *La barrera de Peierls–Nabarro*

Hasta la fecha, la interpretación más plausible sobre la existencia de breathers móviles es la propuesta principalmente por MacKay, Sepulchre y Ahn [4, 134]. En el primero de estos trabajos se define la barrera PN como la diferencia de energía entre un breather estable y otro inestable de la misma acción, comparándose estos resultados con los obtenidos por Cretegnny en su tesis doctoral [50]. El origen físico de esta propuesta se debe a la conservación del área del espacio de las fases durante el movimiento del breather. Esta definición se confirma en los resultados obtenidos posteriormente en [134]. Pese a todo, no vamos a seguir este punto de vista pues aún quedan muchos puntos oscuros.

### 8.2.2. *El modo de pinning*

Como vimos en el Capítulo 4, se pueden producir bifurcaciones que implican cambios de estabilidad. Justo en el punto de bifurcación, uno de los modos desaparece y aparece un *modo marginal* asociado al modo que persiste. Una perturbación en la dirección del modo marginal tiene la característica de que diverge linealmente (ver Apéndice A).

Puede ocurrir que la bifurcación se produzca por una colisión en  $\theta = 0$ . En este caso, como vimos en el capítulo de estabilidad, el origen de la bifurcación radica en la resonancia del breather con los fonones (en cuyo caso, el breather deja de existir y no tiene interés en nuestro contexto), o bien se debe a la colisión de modos localizados. En este último caso, uno de los modos bifurcantes puede tener simetría espacial opuesta a la del breather y recibe el nombre de *modo de pinning*.

Una perturbación en la dirección de este modo crece linealmente, por lo que es adecuada para mover un breather [21, 43].

Por ello, el sistema debe estar cerca de una bifurcación armónica para poderse generar un breather móvil. Además, el breather debe perturbarse de modo que se añada una perturbación colineal al modo de pinning. Esta perturbación debe realizarse en las velocidades, de forma que se supere la separatriz de movilidad [86]. Aquí se ve la importancia de la forma del modo de pinning pues para poner en movimiento al breather es necesario romper su simetría (o antisimetría) especular.

Así, para implementar este método seguiremos las indicaciones dadas en [43, 21]. Es decir, se parte del modo de pinning, el cual tendrá sus componentes de posiciones reales y sus componentes de velocidades imaginarias puras (ver Apéndice A). Sea  $\vec{V}$  el vector normalizado correspondiente a las componentes de velocidad del modo de pinning. Tomemos el breather estacionario en  $t = 0$  (el cual tiene velocidad cero al ser reversible en el tiempo) pero con velocidad  $\lambda\vec{V}$ , donde  $\lambda$  es un parámetro que será igual al módulo de velocidad añadida. Con estas condiciones iniciales, se deja evolucionar el sistema. El cálculo de la simulación correspondiente lo hemos realizado mediante el operador simpléctico de quinto orden desarrollado por María Paz Calvo [174]. A este procedimiento de mover un breather se le suele llamar también “*patear*” un breather.

Es importante indicar que no toda perturbación produce un buen movimiento. Es necesario que  $\lambda$  esté por encima de un valor umbral  $\lambda_c$ , el cual disminuye cuanto más cerca estemos de la bifurcación. Según [21], la energía de la patada mínima para mover el breather,  $1/2\lambda_c^2$ , se puede considerar como análoga a la barrera PN. Por otro lado, si la perturbación es demasiado grande, puede ocurrir que la dinámica del breather móvil sea caótica [103].

Pueden existir además modos marginales en valores  $\theta \neq 0$ . Estos modos pueden corresponderse con la fisión o fusión de multibreathers [21] o con el movimiento de dark breathers [151].

La figura 8.1 muestra la forma del modo de pinning para distintos potenciales.

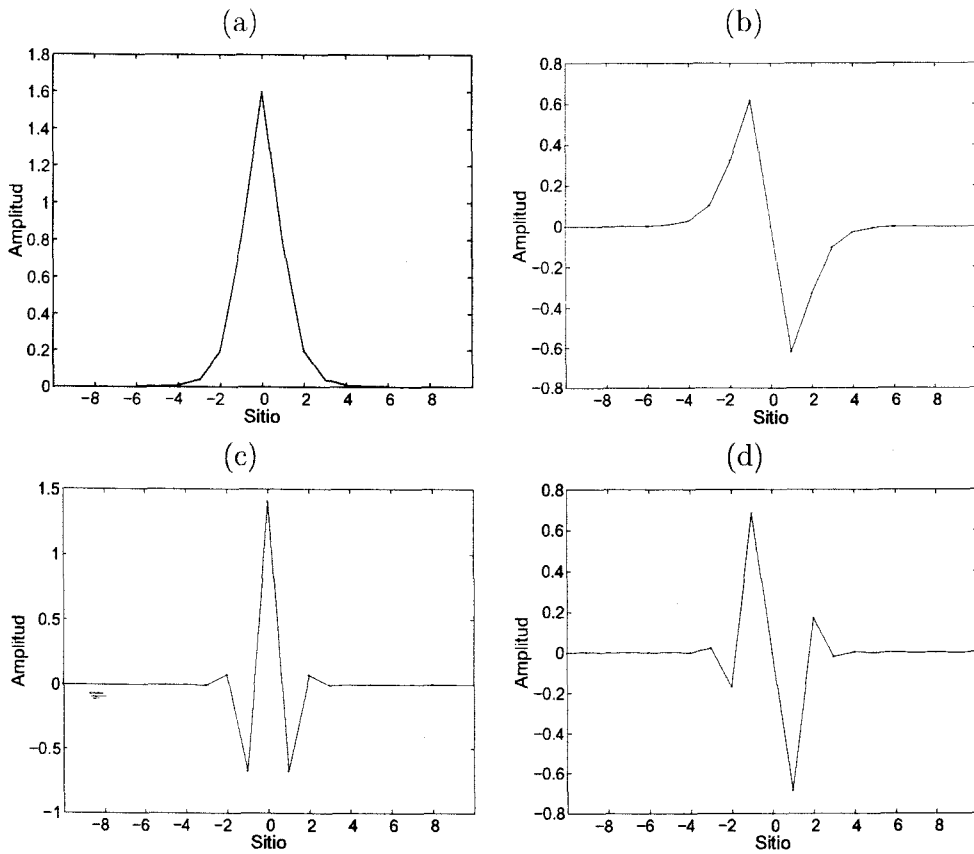
### 8.2.3. El gradiente discreto

Una forma equivalente de mover un breather es perturbar al breather en la dirección del gradiente discreto en lugar de la del modo marginal [190].

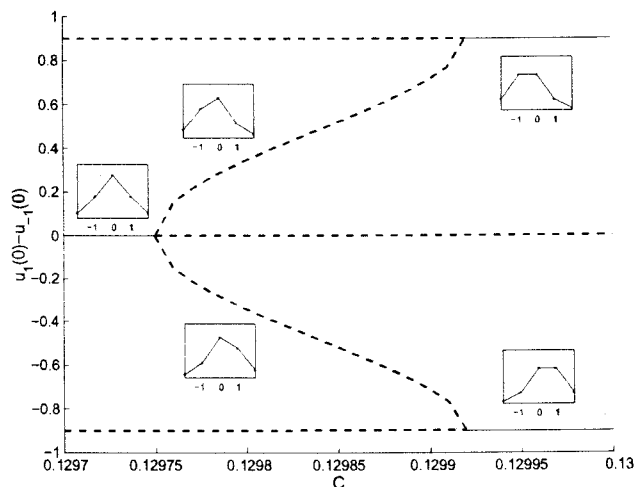
El gradiente discreto de un vector  $\{u_n\}$  se define como:

$$(\nabla u)_n = \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2}. \quad (8.1)$$

En un principio, este método es equivalente al del modo marginal, pues el modo de pinning tiene una forma similar al gradiente discreto en el punto de bifurcación. Sin embargo, cuando nos alejamos de éste, aparecen diferencias cuantitativas que pueden llegar a afectar a la movilidad, como se mostrará posteriormente.



**Fig. 8.1:** Breathers justo en el punto de bifurcación (izquierda) y componentes de velocidad del modo de pinning (derecha). Las figuras de la parte superior se corresponden con un breather con potencial on-site de Morse y acoplamiento armónico con  $C = 0,1297$  y  $\omega_b = 0,8$ . Las figuras inferiores se corresponden con un breather con potencial on-site y de interacción  $\phi^4$  duro con  $C = 0,5352$  y  $\omega_b = 3$ .



**Fig. 8.2:** Diagrama de la bifurcación de intercambio de estabilidad para el caso de un potencial de Morse on-site y acoplamiento de primeros vecinos, armónico y atractivo. Las figuras pequeñas muestran los perfiles del 1sB, los 2sB y los breathers intermedios. Se puede observar que el 1sB deja de ser estable en  $C = 0,12974$ , mientras que el 2sB se hace estable para  $C = 0,12992$ . Ambas bifurcaciones de estabilidad se producen mediante la aparición de un breather intermedio inestable, el cual no tiene la simetría especular del 1sB y del 2sB.

#### 8.2.4. El breather intermedio

Según se señala en [21], es condición necesaria (pero no suficiente) que exista una *bifurcación de intercambio de estabilidad* para que se pueda generar un breather móvil. Esta bifurcación consiste en el hecho que, cuando aumenta el acoplo, un 1sB se hace inestable en un punto  $C_1$ , mientras que un 2sB se vuelve estable en un punto  $C_2$  cercano a  $C_1$ . Este 2sB debe ser inestable para  $C \approx 0$ , por lo que su código será  $\{0 \dots 0110 \dots 0\}$  ó  $\{0 \dots 01 - 10 \dots 0\}$  dependiendo de la dureza del potencial y del signo de la constante de acoplo (ver Sección 4.4).

El hecho de que  $C_2 \neq C_1$  implica la existencia de un estado intermedio que bifurca con el 1sB y el 2sB. Este estado intermedio, el *breather intermedio*, no tiene simetría espacial (la bifurcación armónica es una pitchfork), es inestable y tiene una forma intermedia entre el 1sB y el 2sB, tal como se muestra en la figura 8.2. Todos estos hechos se explican mediante el concepto de barrera de acción [50]. Un diagrama de bifurcación completo, en función de la frecuencia, se encuentra en la figura 4.2 de la misma referencia.

#### 8.2.5. Breathers móviles exactos

Un BM tiene una doble periodicidad, la cual se manifiesta de dos formas:

**Periodicidad en la vibración interna:** El BM tiene una vibración interna de periodo  $T_b = 2\pi/\omega_b$ .

**Periodicidad en el desplazamiento:** El BM recupera su forma cuando ha recorrido un espacio  $s$  en la red. El tiempo que tarda en recorrer ese espacio es  $T_d = s/v$ , donde  $v$  es la velocidad de traslación

Es decir, que después de un tiempo  $T = pT_b = rT_d$ , el breather recupera su posición inicial. Si  $p$  y  $r$  son enteros, se dice que el breather móvil es exacto. Esta definición, dada por Aubry y Cretegny [21] es equivalente a la de BM dada por Flach y Kladko [85] según la cuál estos son puntos fijos de un mapa.

Para obtener un breather móvil exacto se procede mediante el método de Newton usando como semilla un BM calculado usando el método del modo marginal. Así, se busca que, después de un número entero de periodos, la solución sea igual a la inicial pero desplazada un sitio. Es decir:

$$\{u_n(T), \dot{u}_n(T)\} = \{u_{n+1}(0), \dot{u}_{n+1}(0)\}. \quad (8.2)$$

Sin embargo, no se puede evitar la resonancia con fonones, ya que la ecuación anterior la cumplen aquellos cuya relación de dispersión es:

$$\omega(q) = \frac{2m\pi + q}{T}, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (8.3)$$

Además, se puede ver que el breather móvil exacto posee siempre una cola de fonones (o sea, no tiende a cero en los sitios alejados de la excitación).

Una explicación más detallada de los breathers móviles exactos está fuera del alcance de esta tesis. Para mayor información se puede consultar las referencias [21, 50].

Como conclusión importante se puede extraer que es inevitable la radiación fonónica, lo cual implica que el breather móvil tenga una existencia limitada y no pueda obtenerse como solución exacta de las ecuaciones de movimiento, a diferencia de los breathers estacionarios.

### 8.3. *Aplicación del método del modo marginal*

Una vez conocida la forma en la que se puede mover un breather usando el método del modo marginal, el siguiente paso es implementar este método para obtener breathers móviles. Para ello, definiremos dos conceptos fundamentales para cuantificar la movilidad de breathers: el centro de energía y la masa efectiva. Una vez expuesto estos conceptos, mostraremos ejemplos de breathers móviles en distintos tipos de sistemas hamiltonianos.

### 8.3.1. Conceptos útiles: centro de energía y masa efectiva

#### Centro de energía

Sería de gran utilidad poseer una magnitud similar a la coordenada colectiva de los kinks, la cual nos indique la posición en la que se encuentra el breather móvil. Esta magnitud podría ser el centro de energía.

Supongamos un sistema hamiltoniano con interacción de primeros vecinos y definamos el hamiltoniano de la forma:

$$H = \sum_n H_n, \quad (8.4)$$

donde  $H_n$  es la densidad de energía en el sitio  $n$ , definida por:

$$H_n = \frac{1}{2} \dot{u}_n^2 + V(u_n) + \frac{1}{2} C(W(u_n - u_{n+i}) + W(u_{n-1} - u_n)). \quad (8.5)$$

Así, el centro de energía del breather móvil se define de la forma:

$$X_E = \frac{\sum_n n H_n}{H} \quad (8.6)$$

#### Masa efectiva

Como vimos en la sección anterior, para mover un breather es necesario añadirle una energía cinética igual a:

$$K_o = \frac{1}{2} \lambda^2. \quad (8.7)$$

Una vez puesto el movimiento, el breather adquiere una velocidad de traslación  $v$  que será, en principio, constante [43]. Así, la energía cinética de traslación del breather móvil será proporcional al cuadrado de la velocidad de traslación, es decir,

$$K_t = \frac{1}{2} m^* v^2, \quad (8.8)$$

donde  $m^*$  es una constante de proporcionalidad llamada *masa efectiva*, la cual es una medida de la inercia del breather a fuerzas externas. La velocidad de traslación se puede medir para cada instante de tiempo a partir de la evolución del centro de energía:

$$v = \frac{\Delta X_E}{\Delta t}. \quad (8.9)$$

En consecuencia, el breather móvil puede considerarse como una cuasi-partícula de masa  $m^*$ .

Si la energía transmitida al breather mediante la perturbación no es demasiado grande, la energía cinética de traslación será igual a la energía de la perturbación, por lo que  $K_t = K_o$  y se puede definir la masa efectiva como:

$$m^* = \left(\frac{\lambda}{v}\right)^2 \quad (8.10)$$

Si, en cambio, la energía de la perturbación no es pequeña, el breather puede deformarse y/o emitir gran cantidad de radiación fonónica, por lo que la masa del breather no sería constante o no se cumpliría esta relación lineal.

### 8.3.2. *Ejemplos de breathers móviles*

Una vez que se tienen todas las herramientas necesarias, se puede acometer el cálculo de soluciones móviles.

En primer lugar, cabe destacar que no en todos los modelos pueden calcularse BMs mediante los métodos explicados, ya que no siempre aparecen las bifurcaciones de intercambio de estabilidad. Así, modelos donde se pueden calcular breathers móviles son:

- Potencial on-site de Morse y potencial de interacción armónico [21].
- Potencial on-site de doble pozo y potencial de interacción armónico [43].
- Potencial on-site  $\phi^4$  duro y potencial de interacción de Morse [50].
- Potencial on-site  $\phi^4$  duro y potencial de interacción del mismo tipo (ver Capítulo 9).

Además, en todos los casos que consideramos en esta sección, la interacción es de primeros vecinos y la constante de acoplo es positiva.

Hasta la fecha, no se han podido conseguir breathers móviles en redes con potencial on-site  $\phi^3$ ,  $\phi^4$  (duro o blando) y sine-Gordon con acoplamiento armónico, coincidiendo que, en ninguno de estos casos, existen bifurcaciones de intercambio de estabilidad.

La figura 8.3 muestra dos breathers móviles con potencial de Morse. En ambos casos, todos los parámetros del breather son iguales salvo la frecuencia. Se puede observar que el breather de menor frecuencia es más rápido. Teniendo en cuenta que el valor de  $\lambda$  es el mismo en ambos casos, se puede concluir que el breather de menor frecuencia tiene masa menor y, por tanto, es más fácil de mover. Esto haría pensar que la movilidad aumenta cuanto más se aleja la frecuencia de la banda de fonones. Pero esta afirmación no es cierta, tal como se comprueba en la figura 8.4.

También se puede observar en la figura 8.3 que, en el caso de frecuencia  $\omega_b = 0,7$ , el centro de energía experimenta oscilaciones cuando evoluciona. Este fenómeno tiene su origen en el hecho de que el sistema es discreto. En el caso

$\omega_b = 0,8$  no se aprecian debido a que este fenómeno es menos pronunciado y no se ha podido detectar con la precisión a la que hemos trabajado. En consecuencia, podríamos concluir que una mayor localización del breather acentúa el carácter discreto del sistema.

Los breathers móviles no sólo existen en la proximidad de la bifurcación de estabilidad, sino que también existen siempre que el breather sea *cuasi-estable*, es decir, ni demasiado estable ni demasiado inestable. En términos matemáticos, este hecho se manifiesta en que los multiplicadores de Floquet correspondientes al modo de pinning se encuentran próximos a  $+1$ . Esto hace que en el caso del potencial de Morse on-site y acoplamiento armónico (ver figura 4.4), existan BMs para un rango de acoplos que van desde un valor ligeramente inferior al punto en el que aparece la bifurcación hasta el momento en el que el breather resuena con la banda de fonones. Así, como se comprueba en la figura 8.4, la masa del breather móvil disminuye con la constante de acoplo. Este fenómeno podría estar relacionado con el hecho de que la masa de una cuasi-partícula es inversamente proporcional a la integral de solapamiento (en nuestro caso, ésta sería igual a la constante de acoplo, tal como se muestra en la Sección 6.3).

Finalmente, señalar que no nos ha sido posible calcular breathers móviles con potencial de Morse para frecuencias menores que  $\omega_b \lesssim 2/3$ , aunque las condiciones óptimas de movilidad se seguían cumpliendo. Esto puede deberse a que la movilidad disminuye drásticamente, o bien con la energía o bien con el grado de localización del breather. Sin embargo, como se ha explicado en el párrafo anterior, cuando aumenta el acoplo (lo cual implica un aumento de la energía al ser la interacción atractiva), disminuye la masa, por lo que aumenta la movilidad. Por ello, esa opción queda descartada, pudiéndose concluir que existe un umbral de localización por encima del cual el breather no se puede mover (al menos, usando el método del modo marginal).

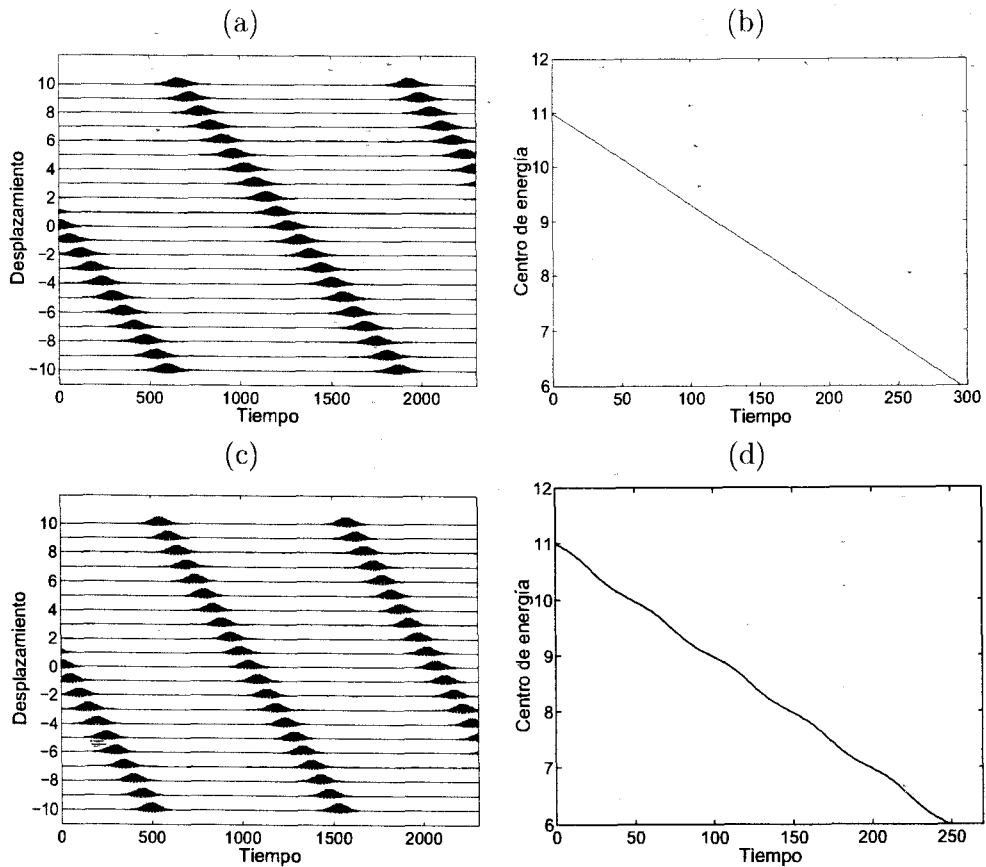
### 8.4. Dark breathers móviles

En esta sección mostramos otro ejemplo de breather móvil que hemos querido resaltar debido a que se trata de un caso peculiar, que hasta ahora está muy poco estudiado. Nos estamos refiriendo a los dark breathers móviles.

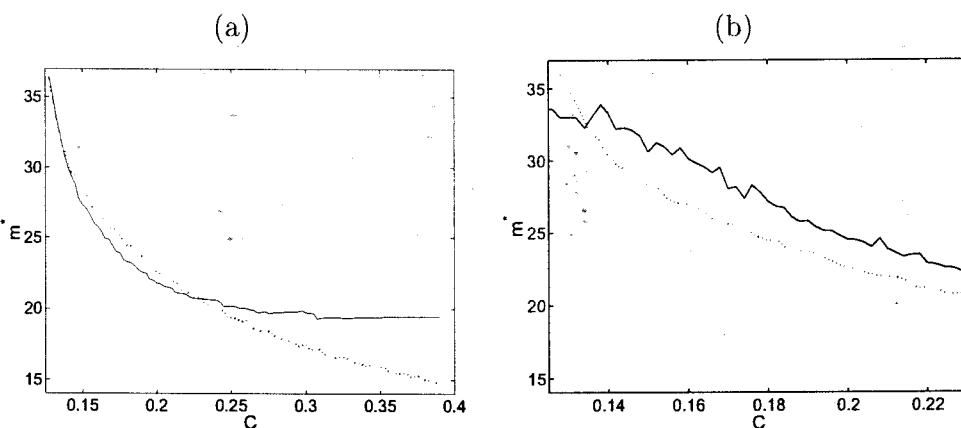
En el caso de bright breathers, la existencia de modos localizados bifurcantes con simetría distinta a la del breather es necesaria para la existencia de breathers móviles. En el caso de los dark breathers cuyo fondo es igual al phonobreather con  $q = 0$ , no aparecen modos con estas características ni en las bifurcaciones de Krein, ni en las subarmónicas.

Sin embargo, en [150, 151] se han obtenido dark breathers móviles en situaciones de inestabilidad debidas a colisiones de Krein. Esto se debe a dos hechos: el primero consiste en que la frecuencia del modo interno que produce la colisión de Krein tiene una frecuencia próxima a la del breather, produciendo una especie de “doble modo de pinning”; el segundo se basa en que el fondo del dark breather es un

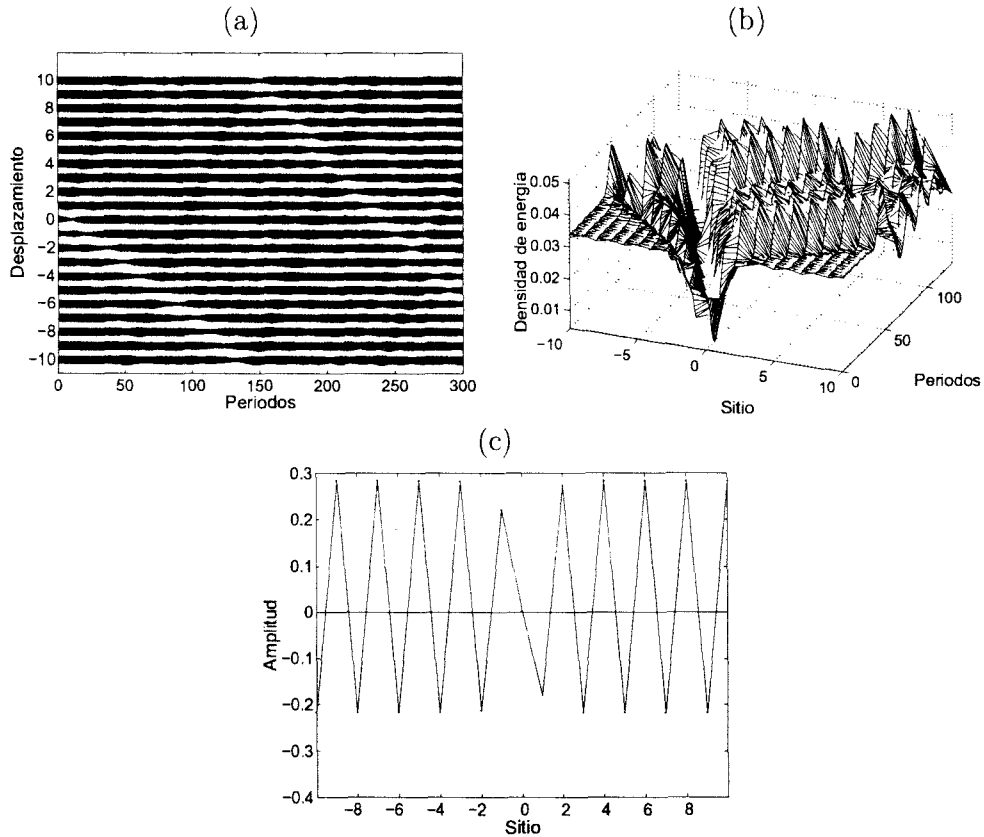




**Fig. 8.3:** Evolución temporal del breather (izquierda) y de su centro de energía (derecha). Ambos casos corresponden a un breather con  $C = 0,13$  en un potencial de Morse con una perturbación de magnitud  $\lambda = 0,1$ . Las figuras superiores se corresponden a  $\omega_b = 0,8$ , mientras que las inferiores lo hacen con  $\omega_b = 0,7$ . La velocidad que adquiere el breather en el primer caso es  $v \approx 0,017$ , mientras que en el segundo,  $v \approx 0,021$ , es decir, que el breather de menor frecuencia tiene mayor movilidad. Obsérvense las ondulaciones en el centro de energía para el segundo caso (ver texto).



**Fig. 8.4:** (a) Dependencia de la masa efectiva del breather con el acoplamiento para un breather móvil en un potencial de Morse con  $\omega_b = 0,8$ . La línea continua se corresponde con breathers móviles obtenidos mediante perturbaciones con el modo de pinning para  $C = 0,1297$ ; la línea discontinua se corresponde con soluciones obtenidas perturbando en la dirección del gradiente discreto de la solución en cada valor de  $C$ . Se puede observar que, en la zona cercana a la bifurcación, la movilidad es mayor para los BM obtenidos usando el primer método, mientras que cuando aumenta el acoplo, la tendencia se invierte. (b) Dependencia de la masa efectiva del breather con el acoplamiento para  $\omega_b = 0,7$  (línea continua) y  $\omega_b = 0,8$  (línea discontinua). En ambos casos, se ha utilizado el gradiente discreto para la puesta en movimiento del breather. Se observa que, para la mayoría de acoplos, la movilidad del breather aumenta con la frecuencia.



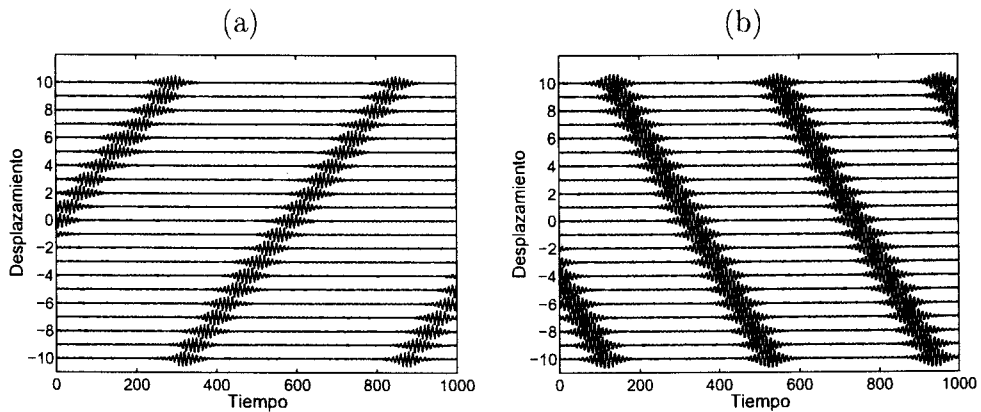
**Fig. 8.5:** Evolución temporal de (a) los desplazamientos y (b) la densidad de energía de un dark breather móvil con un potencial de Morse y acoplamiento atractivo. Los valores de los parámetros son  $\omega_b = 1,028$  y  $C = 0,03$ . (c) muestra el perfil del breather estacionario.

multibreather con  $q = \pi$ , y en este caso sí aparecen modos localizados que rompen la simetría del breather.

Un ejemplo de dark breather móvil se encuentra en la figura 8.5.

### 8.5. *Breathers móviles en sistemas disipativos*

El concepto de BM en sistemas disipativos presenta ligeras diferencias respecto al caso de sistemas hamiltonianos [145]. La más destacable es que en presencia de disipación y fuerza externa, los breathers móviles (al igual que los estacionarios) son atractores de la dinámica. Por ello, una vez obtenido un BM mediante los métodos usuales, se pueden variar los parámetros del sistema y, tras un transitorio, el sistema tenderá a la nueva solución móvil. Este hecho indica que el concepto de masa efectiva no se puede aplicar, pues el sistema tenderá siempre hacia el mismo breather móvil con independencia de la energía que se le inyecte al breather estacionario.



**Fig. 8.6:** Evolución de un breather móvil en un sistema disipativo con potencial de sine-Gordon y parámetros  $\gamma = 0,02$ ,  $F = 0,02$  y  $\omega_b = 0,2\pi$ . (a) Es un BM calculado usando el método del modo marginal.  $C = 0,53$ . (b) Es un BM espontáneo.  $C = 0,89$ .

En el caso disipativo aparecen bifurcaciones de intercambio de estabilidad en potenciales de sine-Gordon, cosa que no ocurría en el caso hamiltoniano. También aparecen en el potencial de Morse. En estas bifurcaciones el breather intermedio es estable, a diferencia de lo que ocurría en el caso hamiltoniano. No se ha encontrado aún una explicación a este fenómeno.

En el caso del potencial de sine-Gordon, pueden aparecer BMs espontáneos. Una descripción en mayor profundidad sobre este fenómeno se puede encontrar en [145].

La figura 8.6 muestra un BM espontáneo y otro calculado usando el método del modo marginal.

## 9. Interacción de breathers móviles con impurezas

### 9.1. Introducción

Como ya se señaló en el Capítulo 6, el estudio de la localización en redes anarmónicas con impurezas presenta aspectos muy interesantes, pues entran en juego dos tipos de modos localizados. Por un lado, están los modos locales creados por las impurezas en redes armónicas [128] y por otro, los breathers existentes en la red anarmónica homogénea. Cuando se tienen en cuenta ambos efectos de anarmonicidad e inhomogeneidad, pueden aparecer nuevos fenómenos, que son objeto de estudio en este capítulo.

El estudio de la localización en nuestro sistema será más sencillo que en el caso desordenado visto en el Capítulo 7 pues la inhomogeneidad consiste sólo en una impureza cuya magnitud podemos controlar fácilmente.

En este capítulo vamos a centrarnos en la interacción entre un breather móvil y una impureza, por lo que los efectos que la impureza crea sobre los breathers estáticos sólo se estudiarán en lo que respecta a su influencia sobre la movilidad de breathers.

Debemos señalar que el estudio de la interacción con impurezas de excitaciones localizadas móviles no es nuevo. Caben destacar los estudios realizados fundamentalmente por Kivshar *et al* sobre la interacción de kinks con impurezas [38, 77, 76, 116, 117]. De gran importancia es el trabajo de Forinash, Peyrard y Malomed [91], en el cual se estudia la interacción de un breather móvil con una impureza. Sin embargo, estos autores consideran breathers en redes con baja no linealidad, por lo que el breather móvil puede calcularse usando la ecuación NLS.

En este capítulo vamos a observar el comportamiento de los breathers móviles al interaccionar con una impureza en sistemas con no linealidad alta y compararemos los resultados con los obtenidos en los trabajos anteriores, ya que se presentan tanto similitudes como grandes diferencias. La impureza se puede modelar como una inhomogeneidad en el pozo de potencial, en la masa de las partículas o en la constante de acoplo [57].

## 9.2. Inhomogeneidad en el pozo de potencial. Potencial de Morse

### 9.2.1. El modelo

El sistema objeto de nuestro estudio es una cadena hamiltoniana de osciladores con una impureza que se implementa como una inhomogeneidad en el pozo de potencial, el cual será de tipo Morse. El acoplamiento es armónico, atractivo y de próximos vecinos. Así, el hamiltoniano es de la forma:

$$H = \sum_n \left( \frac{1}{2} \dot{u}_n^2 + V_n(u_n) + \frac{1}{2} C(u_n - u_{n-1})^2 \right), \quad (9.1)$$

donde  $V_n$  es el potencial de Morse:

$$V_n(u) = D_n(e^{-u} - 1)^2. \quad (9.2)$$

$D_n$  representa la profundidad del pozo de potencial en el  $n$ -ésimo sitio. Si suponemos que existe una impureza en el sitio 0, podemos expresarlo de la forma,

$$D_n = D_o(1 + \alpha\delta_{n,0}), \quad (9.3)$$

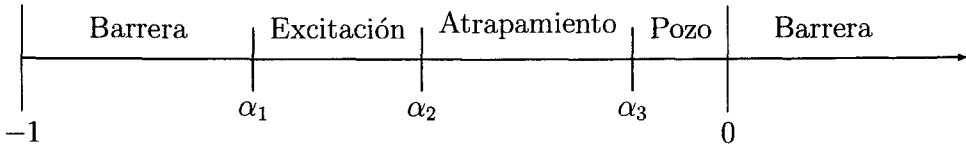
donde  $\alpha$  es un parámetro que da cuenta de la magnitud de la inhomogeneidad y toma valores en el intervalo  $[-1, \infty)$ .

Los valores de los parámetros usados son:  $D_o = 1/2$ ,  $\omega_b = 0,8$  y  $C = 0,13$ . Si se usara un valor mayor del acoplamiento, habría una mayor emisión de fonones, la cual puede enmascarar algunos de los efectos. Los BMs han sido generados de forma que su velocidad de traslación es pequeña, de forma que el efecto de radiación se minimiza.

### 9.2.2. Breathers móviles

A continuación se exponen los resultados obtenidos para el modelo anterior. Como se puede observar en la figura 9.1, existen varios comportamientos bien diferenciados separados por diversos valores críticos del parámetro  $\alpha$  ( $\alpha_1 < \alpha_2 < \alpha_3 < 0$ ). Estos son:

- **Barrera.** La impureza actúa como una barrera de potencial. Esto ocurre para  $\alpha > 0$  y  $\alpha \in (-1, \alpha_1)$  con  $\alpha_1 < 0$ . El breather rebota cuando alcanza la impureza y la deja excitada durante un breve lapso de tiempo (ver figura 9.2). La amplitud de esta excitación decrece cuando aumenta  $|\alpha|$ . Nótese que si  $\alpha \gtrsim 0$ , la barrera de potencial puede observarse siempre que la traslación del breather sea lo suficientemente rápida. Esto último lo analizaremos con más detalle en el próximo apartado.



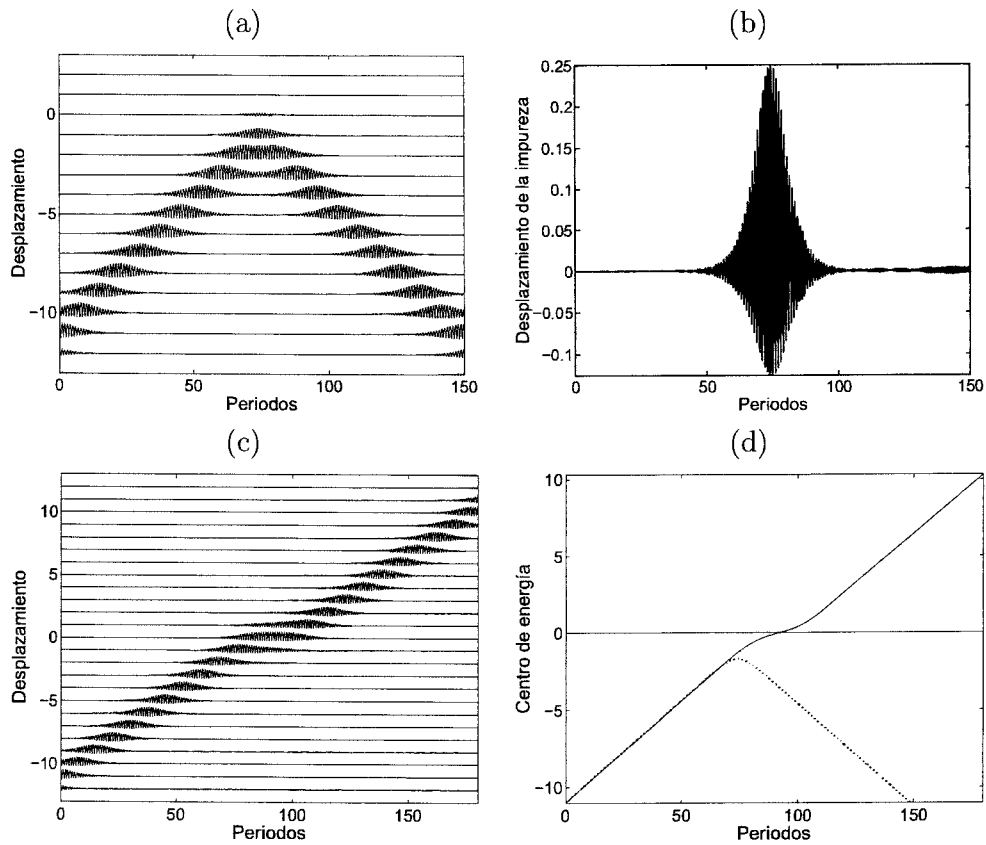
**Fig. 9.1:** Diferentes regímenes en la interacción BM–impureza para un sistema hamiltoniano con potencial de Morse y con una inhomogeneidad en el pozo de potencial. Los valores críticos para  $\omega_b = 0,8$ ,  $C = 0,13$  y  $\lambda = 0,1$  son:  $\alpha_1 \approx -0,54$ ,  $\alpha_2 \approx -0,49$  y  $\alpha_3 \approx -0,02$ .

- **Excitación.** El breather rebota dejando la impureza excitada. Este fenómeno ocurre cuando  $\alpha \in (\alpha_1, \alpha_2)$ . La frecuencia de vibración de la impureza es menor que la del breather móvil incidente, mientras que el breather rebotado vibra con una frecuencia mayor, tal como se muestra en la figura 9.3.
- **Atrapamiento.** El breather es atrapado por la impureza, lo cual ocurre en el intervalo  $\alpha \in (\alpha_2, \alpha_3)$ . Cuando el breather se acerca a la impureza, ésta lo absorbe de forma que el breather se queda atrapado mientras que su centro de energía permanece oscilando entre los sitios adyacentes. El breather atrapado (BA) emite gran cantidad de radiación fonónica y parece ser caótico, como se puede deducir a partir de su espectro de Fourier. Es importante indicar que el atrapamiento se produce independientemente de la velocidad de incidencia.
- **Pozo.** La impureza actúa como un pozo de potencial. Esto ocurre cuando  $\alpha \in (\alpha_3, 0)$  y se manifiesta como una aceleración del breather cuando se acerca a la impureza, y una deceleración cuando se aleja de ella, como se puede observar en la figura 9.6.

Los valores críticos de  $\alpha$  no pueden determinarse con exactitud pues las transiciones entre los diferentes regímenes son bastante difusas. Una estimación de los valores críticos para  $\omega_b = 0,8$ ,  $C = 0,13$  y  $\lambda = 0,1$  es:  $\alpha_1 \approx -0,54$ ,  $\alpha_2 \approx -0,49$  y  $\alpha_3 \approx -0,02$ . Estos regímenes se han encontrado para otros valores de la frecuencia, aunque lo más reseñable es que el valor de  $\alpha_2$ , que es el que delimita las zonas de atrapamiento y excitación, disminuye con la frecuencia del breather. Además, para frecuencia fija se observa que el valor de  $\alpha_3$  depende ligeramente de la velocidad, por lo que en el límite entre las zonas de atrapamiento y aceleración, ocurrirá el primer fenómeno para velocidades bajas, mientras que el segundo lo hará para velocidades altas.

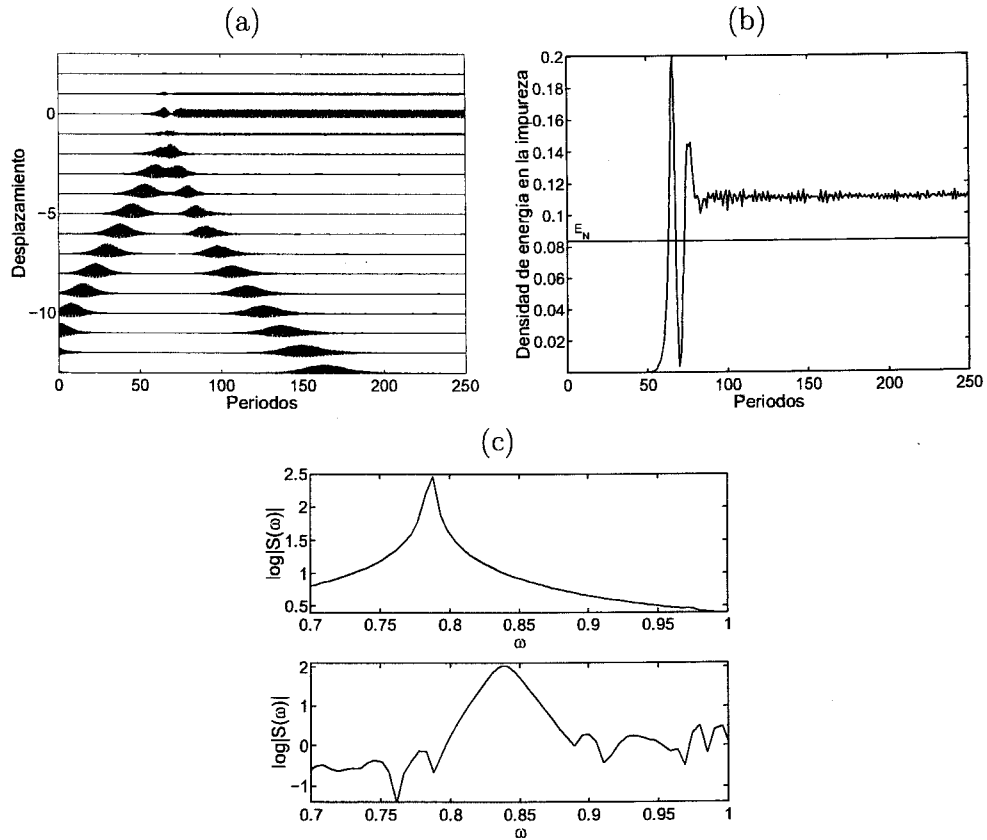
### 9.2.3. Barrera de potencial

Hemos visto en el apartado anterior que, cuando  $\alpha > 0$ , la impureza se comporta como una barrera de potencial. Además, si  $\alpha \approx 0$ , la barrera tiene su máximo

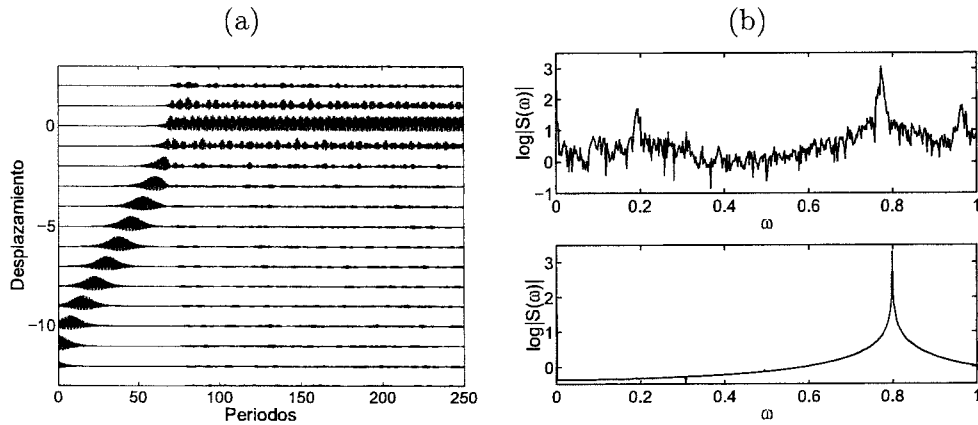


**Fig. 9.2:** Evolución temporal de un breather lanzado con  $\lambda = 0,1$  cuando interacciona con una impureza en el potencial de magnitud  $\alpha = 0,1$  (a) y con otra de magnitud  $\alpha = 0,05$  (c). En el primer caso, se observa que el breather rebota excitando brevemente a la impureza (la figura (b) muestra sólo el sitio de la impureza). Cuando la impureza es pequeña (c) el breather cruza la impureza perdiendo velocidad pero recuperándola después, de manera análoga a una partícula cruzando una barrera de potencial. La figura (d) muestra la evolución del centro de energía en ambos casos. La línea continua corresponde al caso  $\alpha = 0,05$ , mientras que la discontinua lo hace con  $\alpha = 0,1$ .

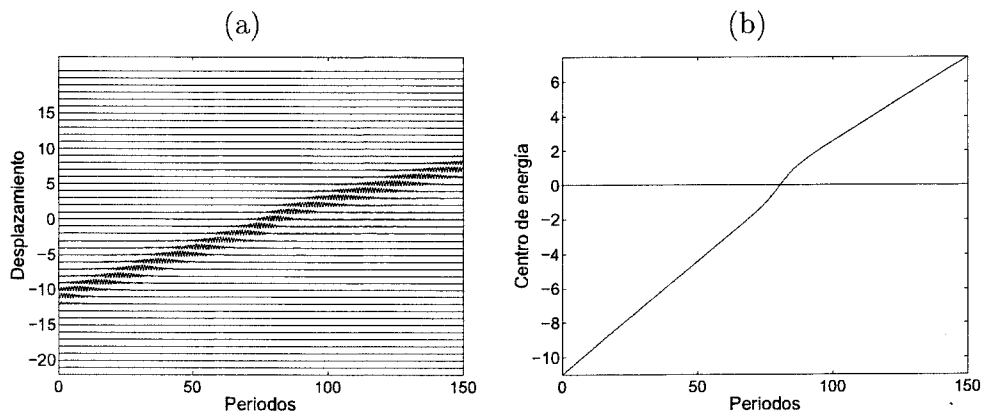




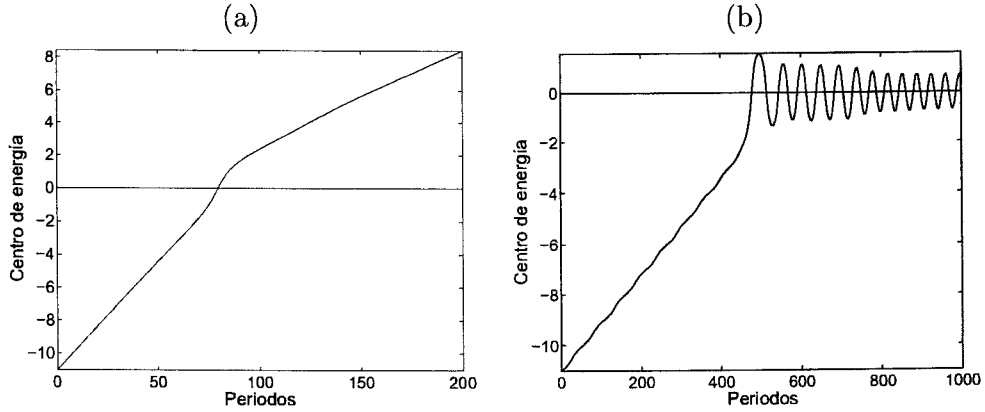
**Fig. 9.3:** (a) Evolución temporal de un breather lanzado con  $\lambda = 0,1$  cuando interactúa con una impureza en el potencial de magnitud  $\alpha = -0,52$ . Se observa que, aunque el breather rebota, la impureza queda excitada. En (b) se muestra la densidad de energía en la impureza ( $E_N$  es la energía del breather de impureza correspondiente; ver sección 9.3). Tras la interacción, tal como se explica en el texto, la impureza vibra con una frecuencia menor que la del breather incidente ( $\omega_b = 0,8$ ), mientras que el breather rebotado lo hace con una frecuencia menor. Este hecho se ilustra en (c), donde se representa el espectro de Fourier de la impureza excitada (figura superior) y el del breather móvil reflejado calculado en una de sus partículas (figura inferior). Los picos secundarios en el segundo caso se deben a la alta radiación fonónica que hace que el breather termine parándose.



**Fig. 9.4:** (a) Evolución temporal de un breather lanzado con  $\lambda = 0,1$  cuando interactúa con una impureza en el potencial de magnitud  $\alpha = -0,3$ . Se observa que el breather es atrapado por la impureza, y, posteriormente, emite gran cantidad de fonones. Este hecho se debe a la naturaleza caótica de la nueva entidad formada: *el breather atrapado*. En (b) se puede comparar el espectro de Fourier del breather atrapado (parte superior) con el correspondiente estacionario (parte inferior). Se observa cómo para el breather atrapado existe una banda de frecuencias, hecho característico de un sistema caótico.



**Fig. 9.5:** (a) Evolución temporal de un breather lanzado con  $\lambda = 0,1$  cuando interactúa con una impureza en el potencial de magnitud  $\alpha = -0,01$ . (b) muestra la evolución del centro de energía. Como se observa, el comportamiento del breather es similar al de una partícula libre atravesando un pozo de potencial: se acelera cuando se acerca a la impureza y se frena cuando la cruza, aunque no se recupera la velocidad inicial.



**Fig. 9.6:** Evolución del centro de energía de un breather con  $\alpha = -0,015$ , es decir, en el borde entre las regiones de atrapamiento y pozo. (a) Representa el caso  $\lambda = 0,1$  en el que el breather atraviesa la impureza acelerándose, mientras que (b) se corresponde al caso  $\lambda = 0,01$ , en el que el breather se atrapa. Como se puede apreciar, el breather cruza la impureza para velocidades grandes, mientras que se atrapa para velocidades pequeñas.

en una energía accesible para el breather y puede atravesarla.

Así, hemos calculado la forma de la barrera de potencial para una impureza de valor  $\alpha = 0,02$  y un breather con las mismas características que el anterior pero con  $C = 0,24$ . La gran diferencia con el acoplamiento usado anteriormente se debe a que la masa efectiva es mucho menor por lo que el tiempo en el que llega el breather a la impureza se reduce apreciablemente, lo cual hace que los cálculos se realicen de manera más rápida. Además, la radiación fonónica en este caso no afectará a nuestros resultados.

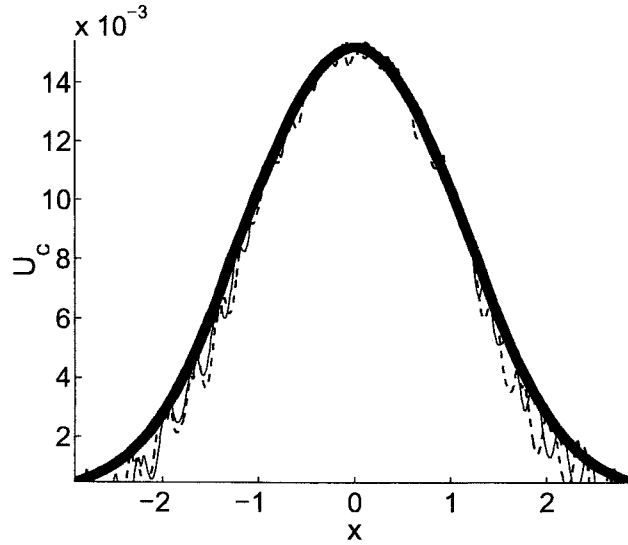
El método de cálculo de la barrera de potencial  $U(x)$  es muy simple. Se toman diferentes valores de  $\lambda$ , los cuales nos proporcionan un rango de valores para la energía traslacional del breather  $E_T = 1/2\lambda^2$ . Si esta energía es menor que el máximo de la barrera  $U_c$ , el breather rebota. Los valores de la energía junto con los puntos de rebote ( $x$ ) (que estarán más lejos de la impureza cuanto menor sea la energía) nos proporcionan los puntos  $(x, U(x))$  de la barrera.

Por otro lado, si se considera el breather móvil como una partícula de masa constante, se puede calcular, para  $E_T > U_c$ , la barrera de potencial usando la fórmula:

$$U(x) = E_T - K(x) = E \left( 1 - \left( \frac{v(x)}{v_o} \right)^2 \right), \quad (9.4)$$

donde  $K(x)$  es la energía de traslación instantánea del breather,  $v(x)$  es la velocidad de traslación instantánea, y  $v_o$  es la velocidad inicial.

La figura 9.7 muestra la forma de la barrera calculada usando los dos métodos. Como se puede observar, si se utiliza la fórmula anterior, la barrera presenta una



**Fig. 9.7:** Barrera de potencial calculada mediante los puntos de rebote (línea continua gruesa) y usando la ecuación (9.4) para  $E = 0,0162$  (línea continua fina) y  $E = 0,0200$  (línea discontinua). La barrera es de la forma  $U(x) = U_c \exp(-bx^2)$  con  $U_c = 0,0152$ ,  $b = 0,4386$ .

serie de ondulaciones. Esto se debe a que, como el sistema es discreto, la velocidad de traslación instantánea no es uniforme. Pese a ello, se encuentra un gran acuerdo entre ambos métodos, lo cual ratifica que el breather móvil puede considerarse como una partícula de masa constante. Además, la barrera se ajusta a una Gaussiana.

#### 9.2.4. Soluciones estacionarias

Algunos aspectos relativos a la influencia de las impurezas en la movilidad de los breathers se pueden explicar mediante las propiedades de las soluciones localizadas estacionarias. Para poder estudiarlas, se parte de las ecuaciones dinámicas:

$$\ddot{u}_n + V'_n(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0. \quad (9.5)$$

Esta ecuación admite dos tipos de soluciones: modos lineales, cuando la amplitud de vibración es pequeña y, breathers, que se corresponden con la solución sin aproximaciones.

##### *Modos lineales*

La ecuación de los modos lineales es de la forma:

$$\ddot{u}_n + \omega_n^2 u_n + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0, \quad (9.6)$$

donde  $\omega_n$  es la frecuencia natural del  $n$ -ésimo oscilador, la cual se relaciona con el pozo del potencial de Morse de la forma  $\omega_n^2 = 2D_n$ . Esto implica que  $\omega_n^2 = \omega_0^2(1 + \alpha\delta_{n,0})$ , con  $\omega_0 = 1$  ya que se escogió  $D = 1/2$ .

Esta ecuación tiene  $N - 1$  soluciones (donde  $N$  es el número de partículas) correspondientes a modos lineales extendidos (MEs) y una solución localizada, la cual se corresponde con un modo de impureza lineal (MI). A partir de ahora, salvo que se diga lo contrario, el término modo se reservará para soluciones lineales.

La relación de dispersión de los modos extendidos es la misma que se calculó en el Capítulo 2 (2.9), es decir,

$$\omega_{\text{ph}} = \sqrt{\omega_0^2 + 4C \sin^2 \frac{q(\alpha)}{2}}, \quad (9.7)$$

donde  $q(\alpha)$  es el vector de ondas, el cual depende de  $\alpha$  de un modo no trivial. La frecuencia del modo de impureza se puede calcular suponiendo que decae exponencialmente de la forma

$$u_n(t) = u_0 e^{i\omega_L t} r^n. \quad (9.8)$$

Así:

$$\omega_L^2 = \omega_0^2 + 2C + \text{sgn}(\alpha) \sqrt{\alpha^2 \omega_0^4 + 4C^2}. \quad (9.9)$$

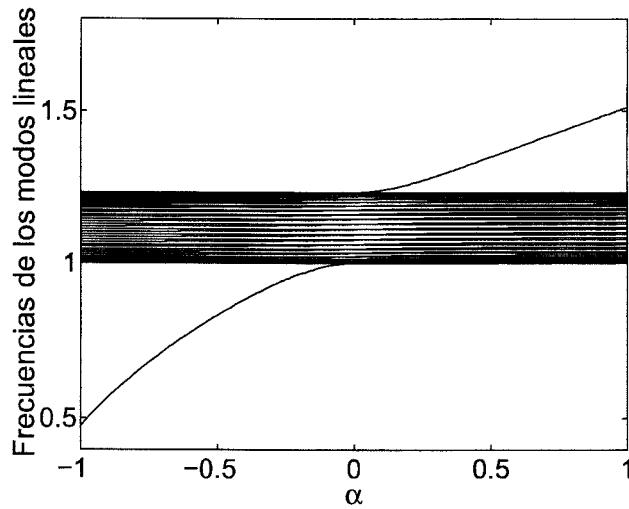
Esta expresión podría haberse obtenido usando la función de Green [37, 74], aunque el desarrollo sería más largo y complejo.

El signo de  $r$  nos indica el patrón de vibración del modo de impureza. Así, si  $r > 0$ , las partículas del modo vibran en fase y éste tendrá vector de ondas  $q = \pi$ . Por el contrario, si  $r < 0$ , el modo tendrá un patrón de vibración en zigzag y vector de ondas  $q = \pi$ . Este parámetro  $r$  viene dado por:

$$r = -\text{sgn}(\alpha) \frac{\alpha \omega_0^2 + \sqrt{4C^2 + \alpha^2 \omega_0^4}}{2C}. \quad (9.10)$$

En consecuencia,  $\alpha$  y  $r$  tienen signos opuestos. Este hecho implica además que, para los modos extendidos,  $q \in (0, \pi]$  si  $\alpha < 0$  y  $q \in [0, \pi)$  si  $\alpha > 0$ .

La figura 9.8 muestra la dependencia de las frecuencias de los fonones con el valor de  $\alpha$  para  $C = 0,13$ . Este cálculo ha podido realizarse numéricamente, pues estamos suponiendo un sistema finito. Si se observara la gráfica con mayor resolución, podría comprobarse que para  $\alpha$  cercano a 0 no se cumple la relación (9.9), pues ésta sólo es válida en sistemas infinitos.



**Fig. 9.8:** Dependencia de la frecuencia de los modos lineales con  $\alpha$  para  $C = 0,13$ . Otros valores de  $C$  dan resultados cualitativamente similares.

#### Modos no lineales

El comportamiento de los modos localizados cuando se introduce la impureza es bastante interesante, pues tanto el breather (modo localizado en el sistema anarmónico homogéneo) como el modo de impureza (modo localizado en el sistema armónico inhomogéneo) están conectados entre sí (ver Capítulo 7).

En este apartado vamos a restringir el estudio a sistemas con hamiltoniano (9.1) con  $C = 0,13$  y  $\omega_b = 0,8$ , de forma que se varía la magnitud de la impureza ( $\alpha$ ), manteniendo constante el resto de parámetros.

Así, cuando  $\alpha \neq 0$ , se rompe la simetría de la cadena y no todos los sitios son equivalentes. Por ejemplo, no existen modos no lineales centrados en los sitios adyacentes a la impureza para  $C = 0,13$ , pero sí si están centrados en ella. Así, le llamaremos *Breather de Impureza* (BI) a este último.

Supongamos un breather con  $\alpha = 0$  y variemos el valor de  $\alpha$ , manteniendo el resto de parámetros constantes. Tal como se observa en la figura 9.9, pueden ocurrir dos tipos de bifurcación:

- Para  $\alpha = \alpha_c > 0$ , el breather de impureza deja de existir debido a la colisión de un par de multiplicadores de Floquet en  $+1$ , los cuales corresponden a autovectores localizados.
- Para  $\alpha = \alpha_{res} < 0$ , el breather de impureza se convierte en la solución idénticamente nula. Esta bifurcación es una pitchfork, como se muestra en la figura 9.9c.

De estas dos bifurcaciones, la más importante es la segunda, ya que tiene su

origen en la resonancia del breather de impureza con el modo de impureza y tendrá consecuencias en el comportamiento del breather móvil cuando interactúa con la impureza. Así,  $\alpha_{\text{res}}$  será el valor de  $\alpha$  para el que la frecuencia del breather de impureza coincide con la del modo de impureza. Este valor puede obtenerse despejando en la ecuación (9.9):

$$\alpha_{\text{res}} = \text{sgn}(\omega_b - \omega_o) \frac{\sqrt{(\omega_b^2 - \omega_o^2)(\omega_b^2 - \omega_o^2 - 4C)}}{\omega_o^2}. \quad (9.11)$$

También es importante tener en cuenta el siguiente hecho: el potencial on-site es blando, por lo que el BI debe provenir de un modo lineal con vector de ondas  $q = 0$ . Para  $\alpha = 0$ , el modo lineal con  $q = 0$  es el MI, por lo que la única entidad localizada en esta región es el BI. Sin embargo, para  $\alpha > 0$ , el MI tiene vector de ondas  $q = \pi$ , por lo que el BI no proviene de éste sino del fonón del fondo de la banda, el cual es un modo extendido. Así, siguiendo el mismo razonamiento que en el caso anterior, cabría pensar que existirían dos entidades localizadas: el BI y el MI. Sin embargo, las ecuaciones dinámicas son no lineales, por lo que el MI no existe salvo en las regiones en las que las ecuaciones de movimiento se pueden linealizar: es decir, en las colas. Por tanto, cuando  $\alpha > 0$ , tendremos dos tipos de soluciones localizadas: el BI (con  $q = 0$ ) y las colas del MI (con  $q = \pi$ ).

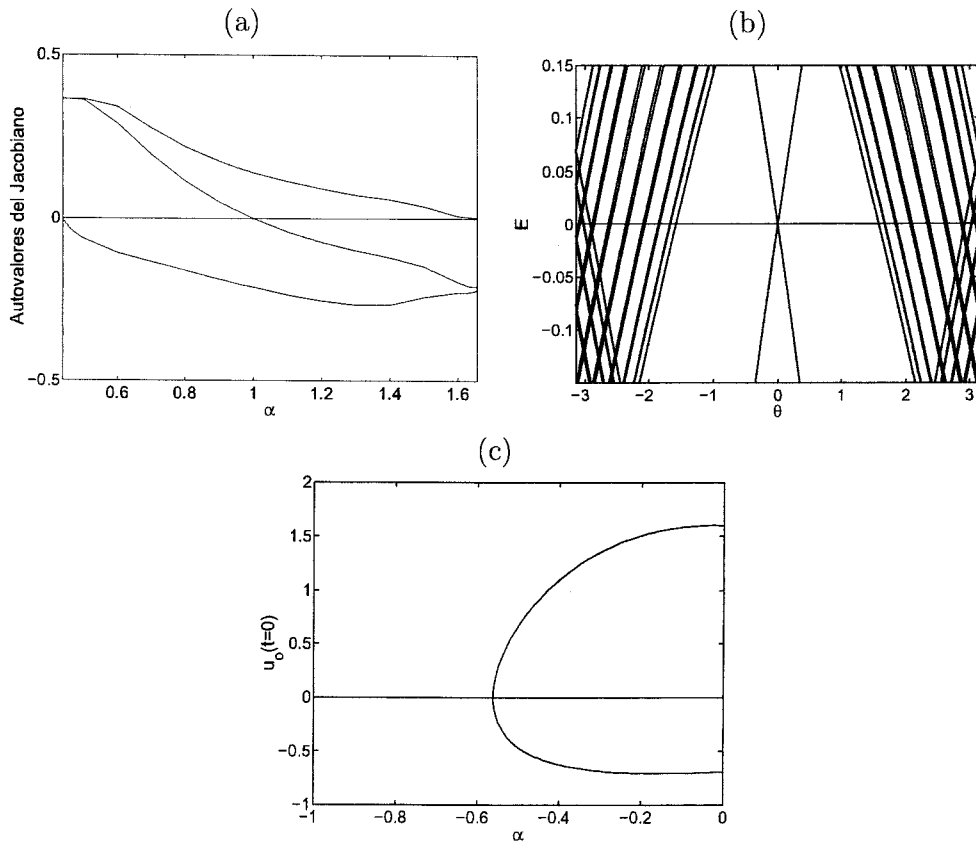
### 9.3. Hipótesis de Atrapamiento

A partir de las observaciones realizadas en la sección anterior, se puede establecer una hipótesis relaciona la existencia de breathers de impureza con la posibilidad de atrapamiento de breathers. Enunciamos la hipótesis de atrapamiento: “(1) para que exista un breather atrapado en redes Klein-Gordon hamiltonianas con una impureza es necesario que para ese valor de  $\alpha$  exista un breather de impureza y (2) que, además, no exista un modo de impureza con un patrón de vibración distinto”.

Recordemos que el atrapamiento existe en el rango  $(\alpha_2, \alpha_3)$  y que en  $(\alpha_1, \alpha_2)$ , el BM sólo es capaz de dejar la impureza excitada. Por otro lado, si se calcula  $\alpha_{\text{res}}$  para  $C = 0,13$  y  $\omega_b = 0,8$  usando la ecuación (9.11) se obtiene que  $\alpha_{\text{res}} = -0,5628$ , el cual es inferior a  $\alpha_1 \approx -0,54$ . Hemos realizado simulaciones con otros valores de la frecuencia y del acoplamiento, obteniendo que a veces  $\alpha_1 < \alpha_{\text{res}}$ , pero que siempre se cumple que  $\alpha_{\text{res}} < \alpha_2$ . Por otro lado, se observa que no existe atrapamiento para  $\alpha > 0$ . Todo esto indica que  $\alpha \in (\alpha_{\text{res}}, 0)$  es una condición necesaria para la existencia de atrapamiento.

Así, el atrapamiento debe ocurrir porque el BM excite al BI cuando se acerca a la impureza. Sin embargo, debido a que el movimiento introduce una deriva en la frecuencia, el BI ‘ve’ al BM con una frecuencia diferente a  $\omega_b$ , por lo que cuando interactúan se funden en una entidad con varias frecuencias. Esto puede explicar la naturaleza caótica del breather atrapado.

Cuando  $\alpha_{\text{res}} < \alpha < \alpha_2$ , no puede formarse el breather atrapado. Se observa que la energía del BI disminuye cuando aumenta  $|\alpha|$ . Así, debe haber un umbral



**Fig. 9.9:** (a) Dependencia con  $\alpha$  de los tres autovalores del jacobiano más cercanos al cero para un BI con  $C = 0,13$  y  $\omega_b = 0,8$ . Teniendo en cuenta la relación entre las bandas de Aubry y el jacobiano (Sección 4.5.3) se pueden extraer las siguientes conclusiones: (1) El autovalor central cruza el cero en  $\alpha \approx 0,99$  debido a una bifurcación de estabilidad. (2) El autovalor superior alcanza el cero en  $\alpha_c = 0,657$  debido a una bifurcación en la que participa un modo localizado, y en la cual se extingue el breather de impureza. (3) El autovalor inferior alcanza el cero en  $\alpha_{res} = -0,5628$ ; en este caso, la banda correspondiente al BI (que tiene  $E < 0$ ) se fusiona con la banda tangente a  $E = 0$ , de forma que se obtiene una banda con la forma correspondiente a un oscilador lineal, tal como se muestra en (b). Esta última bifurcación se representa en (c). Como se puede observar, la rama superior corresponde a un BI con  $u_n(0) > 0$ , mientras que la inferior se corresponde con la solución en oposición de fase. La rama central es la solución idénticamente nula.



en la energía del BI para que ocurra el atrapamiento. Por otro lado, tal como se observa en la figura 9.3, la densidad de energía en la impureza es mayor que la del breather de impureza con frecuencia  $\omega_b$ . Esto implica que, debido a que el potencial es blando, la frecuencia de la impureza excitada es menor que  $\omega_b$ . Por ello, la pequeña ventana de excitaciones de impurezas que se observa en el intervalo  $(\alpha_1, \alpha_2)$  puede deberse a una resonancia del BM con un BI de frecuencia ligeramente menor que  $\omega_b$ .

Cuando  $\alpha < \alpha_{\text{res}}$ , no se puede generar el breather atrapado, y el BM siempre rebota. Además, en esa región, el BI no existe, lo cual indica que debe haber una conexión entre ambos hechos, es decir, la existencia de un BI para unos determinados valores de los parámetros es una condición necesaria para la existencia de atrapamiento.

Por otro lado, el breather atrapado tampoco existe para  $\alpha > 0$ . Como vimos en la sección anterior, en esa región existen dos entidades localizadas: el BI y las colas del MI, las cuales tienen distinto patrón de vibración. Cuando un BM alcanza la impureza, excitará el BI, su cola y la del MI. Sin embargo, ambas colas tienen patrones de vibración opuestos y entrarán en conflicto, lo cual parece ser que impide la formación del breather atrapado.

En consecuencia, todas estas observaciones permiten enunciar la hipótesis formulada al inicio de esta sección. En los próximos apartados trataremos de confirmar esta hipótesis en modelos con distintos potenciales e implementaciones de la impureza.

#### 9.4. Inhomogeneidad en el pozo de potencial. Potencial $\phi^4$ duro

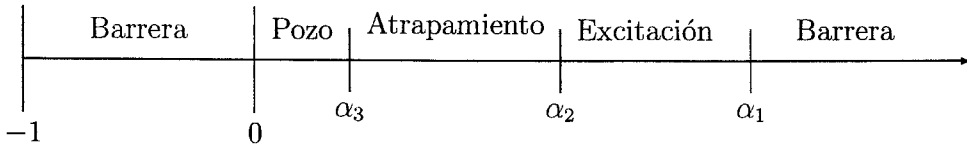
En este caso, el sistema que se estudia es una cadena de osciladores hamiltoniana con potencial  $\phi^4$  duro on-site y de interacción. Así, el hamiltoniano es de la forma:

$$H = \sum_n \left( \frac{1}{2} \dot{u}_n^2 + \frac{1}{2} \omega_n^2 u_n^2 + \frac{1}{4} u_n^4 + C \left( \frac{1}{2} (u_n - u_{n-1})^2 + \frac{1}{4} (u_n - u_{n-1})^4 \right) \right), \quad (9.12)$$

con  $\omega_n^2 = \omega_0^2(1 + \alpha \delta_{n,0})$ ,  $C = 0,5352$  y  $\omega_b = 3$ . En este caso, para que se cumpla la condición (2) de la hipótesis de atrapamiento, éste deberá ocurrir en la región  $\alpha > 0$ , tal como muestra en la figura 9.11. Además, encontramos que el breather de impureza tiene amplitud cero cuando  $\alpha = \alpha_{\text{res}}$ . En concreto,  $\alpha_{\text{res}} = 6,846$ .

#### 9.5. Inhomogeneidad en la masa

La hipótesis de atrapamiento puede verificarse también si la impureza se implementa de otras formas. En este caso, lo hace como una inhomogeneidad en la



**Fig. 9.10:** Diferentes regímenes en la interacción BM-impureza para un sistema hamiltoniano con potencial  $\phi^4$  duro y con una inhomogeneidad en el pozo de potencial. Los valores críticos para  $\lambda = 0,3$ ,  $C = 0,13$  y  $\omega_b = 0,8$  son:  $\alpha_3 \approx 0,53$  y  $\alpha_2 \approx 5,77$ . El valor  $\alpha_1$  es muy difícil de determinar.

masa de la partícula afectada. Así, la ecuaciones dinámicas del sistema pueden escribirse de la forma:

$$m_n \ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0, \quad (9.13)$$

donde  $m_n = m(1 + \Delta m \delta_{n,0})$ . Aunque en los cálculos numéricos hemos supuesto  $m = 1$ , no haremos esta sustitución en los cálculos analíticos.

Si en las ecuaciones (9.13) se sustituye el potencial  $V(u)$  por su versión linealizada, se obtienen las ecuaciones de los modos lineales:

$$m_n \ddot{u}_n + \omega_o^2 u_n + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0, \quad (9.14)$$

las cuales tienen, como en el caso de la impureza en el pozo,  $N - 1$  soluciones extendidas (MEs) y una localizada (MI). Para encontrar la dependencia con la frecuencia de los MIs, se introduce la relación (9.8) en (9.14), de modo que:

$$\omega_L^2 = \frac{\omega_o^2 - \text{sgn}(\Delta m) \sqrt{(\Delta m)^2 \omega_o^2 (\omega_o^2 + 4C) + 4C^2}}{m(1 - (\Delta m)^2)}. \quad (9.15)$$

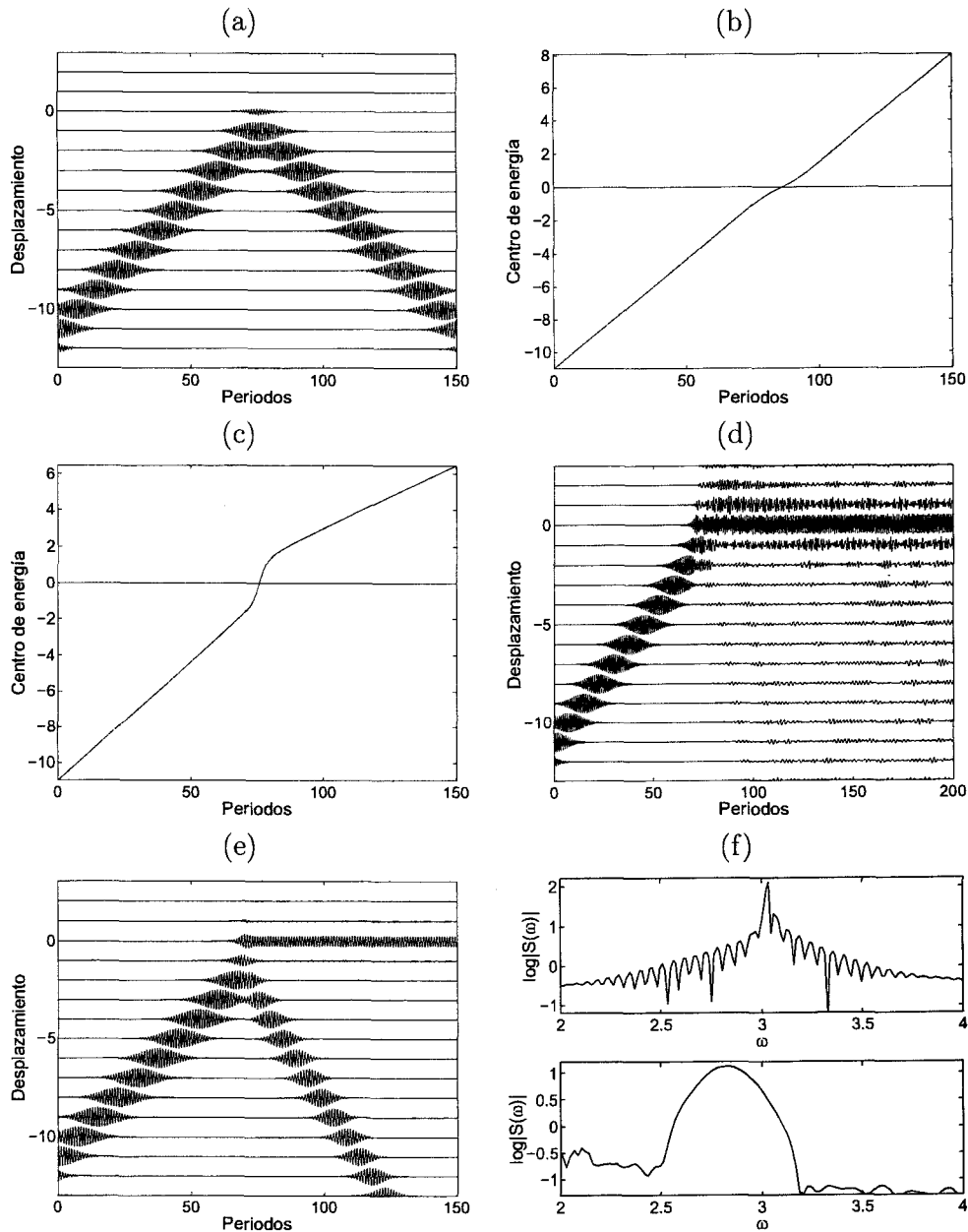
A partir de esta fórmula se puede despejar  $\Delta m$  en función de  $\omega_L$ . Así:

$$\Delta m = -\text{sgn}(\omega_L - \omega_o) \frac{\sqrt{(\omega_o^2 - m\omega_L^2)(\omega_o^2 - m\omega_L^2 + 4C)}}{m\omega_L^2}. \quad (9.16)$$

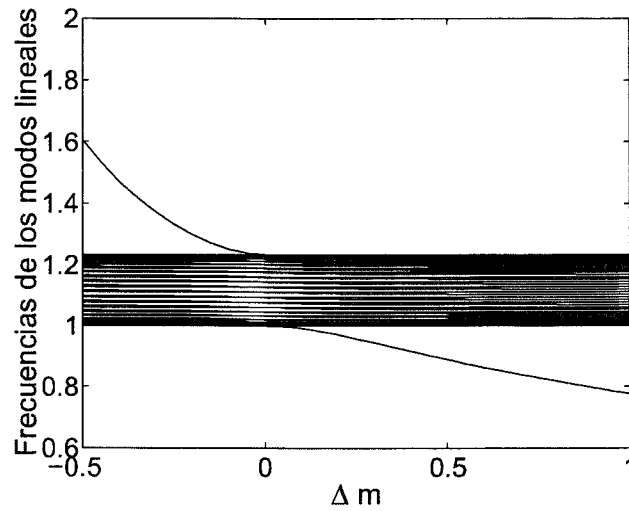
El parámetro  $r$  viene dado por:

$$r = \frac{|\Delta m|(\omega_o^2 + 2C) - \text{sgn}(\Delta m) \sqrt{(\Delta m)^2 \omega_o^2 (\omega_o^2 + 4C) + 4C^2}}{2C(|\Delta m| - 1)}. \quad (9.17)$$

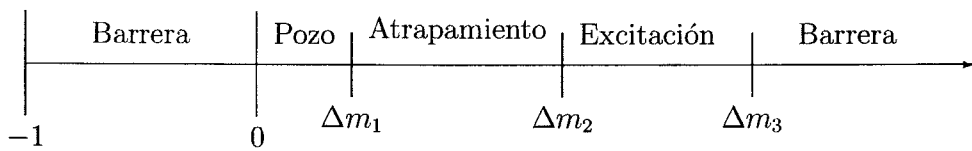
$\Delta m$  y  $r$  tienen el mismo signo. Por ello, para  $\alpha < 0$ , el modo de impureza tiene  $q = \pi$  y los extendidos tienen  $q \in [0, \pi)$ ; para  $\alpha > 0$ , el modo de impureza tiene  $q = 0$  y los extendidos tienen  $q \in (0, \pi]$ . En la figura 9.12 se ilustra este



**Fig. 9.11:** Diferentes comportamientos en la interacción breather móvil-impureza para un potencial  $\phi^4$  duro. El BM es lanzado con  $\lambda = 0,3$ . (a) corresponde a la evolución temporal para  $\alpha = -0,3$  (rebote); (b) y (c) representan la evolución del centro de energía para  $\alpha = -0,02$  y  $\alpha = 0,5$  (frenado y aceleración), respectivamente; (d) es el atrapamiento para  $\alpha = 4$ ; finalmente, en (e) se muestra la excitación de la impureza para  $\alpha = 6$ . En la figura (f) se representa el espectro de Fourier para la impureza excitada y el BM rebotado de (e); debido al aumento de energía de la impureza y a la dureza del potencial, la frecuencia de vibración de esta última es mayor que la del breather incidente ( $\omega_b = 3$ ), mientras que la frecuencia del BM rebotado será menor que este último valor.



**Fig. 9.12:** Dependencia de la frecuencia de los modos lineales con  $\Delta m$  para  $C = 0,13$ . Otros valores de  $C$  arrojan resultados cualitativamente similares.



**Fig. 9.13:** Diferentes regímenes en la interacción BM-impureza para un sistema hamiltoniano con potencial de Morse y con una inhomogeneidad en la masa. Los valores críticos para  $\lambda = 0,1$ ,  $C = 0,13$  y  $\omega_b = 0,8$  son:  $\Delta m_1 \approx 0,02$ ,  $\Delta m_2 \approx 0,49$ ,  $\Delta m_3 \approx 0,82$ .

hecho, mediante la representación de la dependencia de las frecuencias de los modos lineales con respecto a  $\Delta m$ .

Respecto al comportamiento de los BM cuando interaccionan con la impureza podemos concluir que se vuelve a cumplir la hipótesis de atrapamiento, ya que éste ocurre en la región  $\Delta m > 0$ , que es en la que el MI tiene el mismo patrón de vibración del BI. La figura 9.13 ilustra los distintos comportamientos mediante un esquema, mientras que la figura 9.14 muestra varios ejemplos.

### 9.6. Inhomogeneidad en los acoplamientos

En esta sección vamos a introducir la impureza como una inhomogeneidad en la constante de acoplo. Como una partícula diferente modifica el acoplamiento con sus vecinas, es conveniente definir el hamiltoniano de la siguiente forma:

$$H = \sum_n \left( \frac{1}{2} \dot{u}_n + V(u_n) + \frac{1}{2} C_n [W(u_n - u_{n+1}) + W(u_n - u_{n-1})] \right). \quad (9.18)$$

Así, las ecuaciones dinámicas serán:

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + \frac{1}{2} [C_n (W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n+1} - u_n)) + C_{n-1} W'(u_n - u_{n-1}) - C_{n+1} W'(u_{n+1} - u_n)] = 0. \quad (9.19)$$

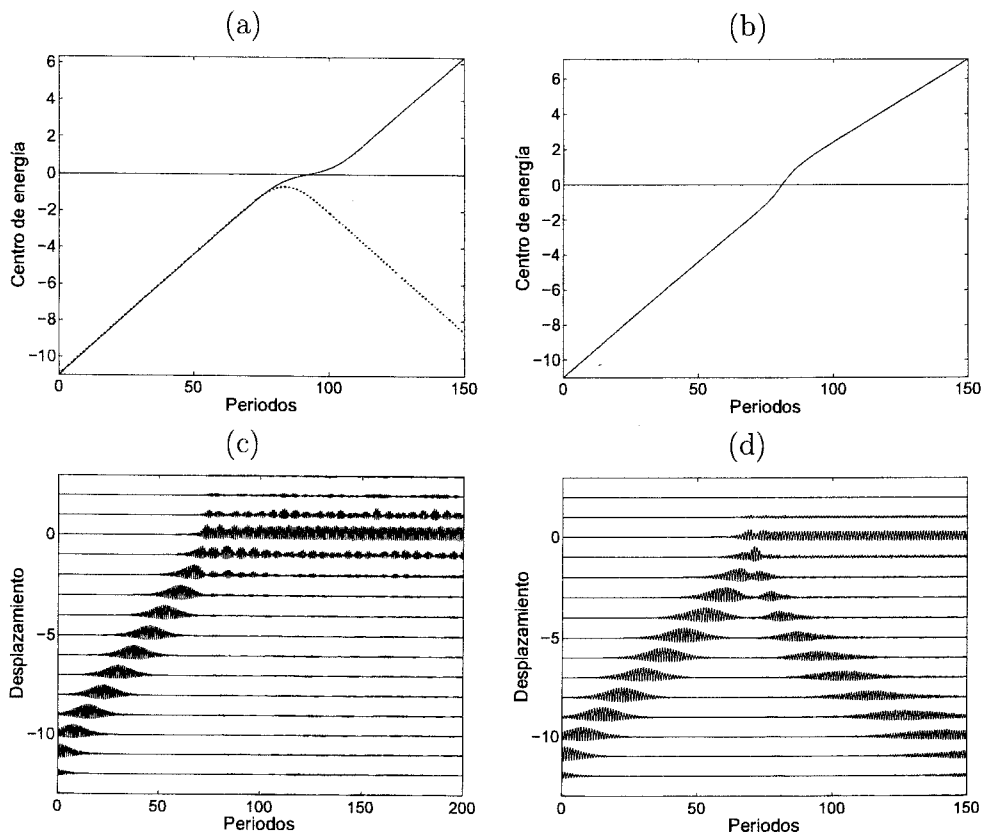
Si  $W(u)$  es un potencial armónico, podemos escribir:

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + [C_n (2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) + (C_{n+1} + C_{n-1})u_n - C_{n+1}u_{n+1} - C_{n-1}u_{n-1}] = 0. \quad (9.20)$$

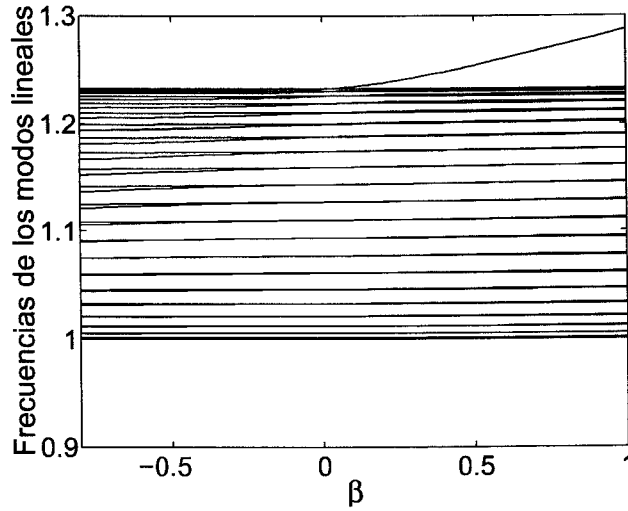
Si implementamos la impureza de la forma  $C_n = C(1 + \beta \delta_{n,0})$ , podemos particularizar las ecuaciones dinámicas para el sitio de la impureza, sus primeros vecinos y el resto de la red:

$$\begin{cases} \ddot{u}_0 + V'(u_0) + \frac{1}{2} C [(\beta + 2)(2u_0 - u_{-1} - u_1)] = 0, \\ \ddot{u}_{\pm 1} + V'(u_{\pm 1}) + \frac{1}{2} C [(\beta + 4)u_{\pm 1} - (\beta + 2)u_{\pm 1} - 2u_{\pm 2}] = 0, \\ \ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0. \quad |n| \geq 2 \end{cases} \quad (9.21)$$

Las ecuaciones de los modos lineales se obtienen sustituyendo  $V'(u)$  por  $\omega_0^2 u$ . Para obtener las frecuencias de los MI, debemos modificar la expresión (9.8) por:



**Fig. 9.14:** Diferentes comportamientos ante una impureza para un breather con potencial on-site de Morse lanzado con  $\lambda = 0,1$  cuando interactúa con una impureza en masa. Los parámetros del breather son  $\omega_b = 0,8$  y  $C = 0,13$  para los cuales el BI tiene amplitud cero en  $\Delta m_{\text{res}} = 0,8795$ . (a) muestra el centro de energía para  $\Delta m = -0,01$  (línea discontinua) y  $\Delta m = -0,005$  (línea continua) (barrera); (b) representa el centro de energía para  $\Delta m = 0,01$  (pozo); (c) y (d) se corresponden con los casos  $\Delta m = 0,2$  (atrapamiento) y  $\Delta m = 0,55$  (excitación), respectivamente.



**Fig. 9.15:** Dependencia de la frecuencia de los modos lineales con  $\beta$  para  $C = 0,13$ . Otros valores de  $C$  ofrecen resultados cualitativamente similares.

$$\begin{cases} u_1(t) = \lambda u_0 e^{j\omega_1 t} \\ u_n(t) = u_1 r^n e^{j\omega_1 t} \end{cases} \quad (9.22)$$

Introduciendo esta solución en las ecuaciones dinámicas linealizadas se obtiene la expresión de la frecuencia de los MI:

$$\omega_L^2 = \begin{cases} \omega_0 & \text{para } \beta < 0 \\ \frac{\beta + 2}{4\beta} C (\sqrt{9\beta^2 + 20\beta + 4} - 2 + 3\beta) & \text{para } \beta > 0 \end{cases} \quad (9.23)$$

Es decir, no existen modos localizados para  $\beta < 0$ .

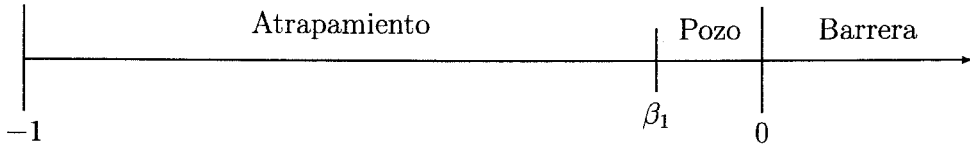
Los parámetros  $\lambda$  y  $r$  (para  $\beta > 0$ ) son:

$$\lambda = \frac{\beta + 2 - \sqrt{9\beta^2 + 20\beta + 4}}{4\beta}, \quad (9.24)$$

$$r = \frac{3\beta + 2 - \sqrt{9\beta^2 + 20\beta + 4}}{2\beta}. \quad (9.25)$$

$r$  y  $\lambda$  son negativos cuando  $\beta > 0$ , por lo que el MI en esta región tendrá vector de ondas  $q = \pi$ . La dependencia de las frecuencias de los modos lineales con  $\beta$  se muestra en la figura 9.15.

Según la hipótesis de atrapamiento, este sólo aparecerá cuando  $\beta < 0$ , ya que en esta región, el único modo localizado es el no lineal, aunque, a diferencia de



**Fig. 9.16:** Diferentes regímenes en la interacción BM-impureza para un sistema hamiltoniano con potencial de Morse y con una inhomogeneidad en el acoplo. El valor crítico para  $\lambda = 0,1$ ,  $C = 0,13$  y  $\omega_b = 0,8$  es  $\beta_1 \approx -0,12$ .

las implementaciones anteriores de la impureza, provenga de un modo extendido. Esto también implica que, en el caso de un potencial blando, el BI no bifurque con la solución nula, pues no podrá resonar con el MI, ya que éste no existe para frecuencias menores que  $\omega_o = 1$ . En consecuencia, el breather se atraparán en casi toda la región  $\beta < 0$ . Numéricamente se encuentra que para  $\beta < 0$ , la impureza actúa como un pozo de potencial para  $\beta$  cercano a cero, mientras que se atrapa en el resto de la región, sin que tengan lugar ni excitaciones de la impureza ni rebotes. En la región  $\beta > 0$ , la impureza se comporta como una barrera de potencial, como por otra parte cabría esperar. Este comportamiento se resume en la figura 9.16.

## 9.7. Comparación con el caso continuo y el discreto con baja no linealidad

### 9.7.1. Caso continuo

En el caso de la interacción de un kink con una impureza en modelos continuos, el kink rebotará, será atrapado o cruzará la impureza dependiendo de la velocidad del mismo [76, 77], para un valor fijo del parámetro de impureza.

En nuestro caso, para un valor fijo del parámetro de impureza, el atrapamiento ocurre independientemente de la velocidad de incidencia del breather móvil, salvo que nos encontremos en el límite entre las regiones de atrapamiento y pozo, donde el primer comportamiento ocurre para velocidades bajas, mientras que el segundo surge para velocidades lo suficientemente altas.

### 9.7.2. Caso discreto con baja no linealidad

El comportamiento de la interacción BM-impureza obtenido por Forinash *et al* [91] para redes con baja no linealidad es cualitativamente equivalente al obtenido en nuestro estudio. Sin embargo, el atrapamiento se produce cuando la frecuencia del breather resuena con la de un modo de impureza lineal. Por este motivo, el rango



de frecuencias en el que ocurre el atrapamiento es mucho más limitado. Además, la interpretación de Forinash *et al* no puede explicar el atrapamiento cuando la impureza se implementa como una inhomogeneidad en el acoplamiento, ya que este fenómeno se produce en la región en la que no existen modos de impureza lineales.

### 9.8. Interacción con la impureza en sistemas disipativos

En esta sección analizaremos brevemente las características de la interacción entre breathers móviles e impurezas en sistemas disipativos. En concreto, vamos a suponer que la impureza se implementa mediante la introducción de una inhomogeneidad en el pozo del potencial, tal como hicimos en la Sección 9.2. El breather móvil se calcula en el mismo sistema que en la sección 8.5, es decir, un modelo Frenkel–Kontorova. Los valores de los parámetros son  $F = 0,02$ ,  $\omega_b = 0,2\pi$  y  $C = 0,53$  para los cuales el breather móvil se obtiene haciendo uso del método del modo marginal. El caso de breathers móviles espontáneos no se va a considerar.

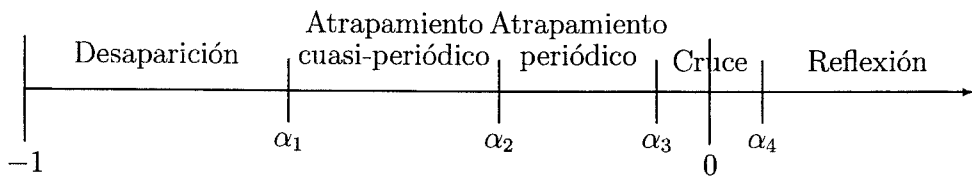
En la interacción con la impureza se observan los regímenes mostrados en la figura 9.17. Aparecen varias diferencias notables respecto al caso hamiltoniano que pasamos a describir a continuación:

- **Desaparición.** Para  $\alpha \leq \alpha_1$ , el breather es atrapado por la impureza pero, tras cierto tiempo, desaparece. Esto se debe a que para  $\alpha \leq \alpha_1$  no existe el breather estacionario centrado en la impureza.
- **Atrapamiento cuasi-periódico.** Para  $\alpha \in (\alpha_1, \alpha_2)$ , el breather es atrapado dando lugar a un breather cuasi-periódico centrado en la impureza.
- **Atrapamiento periódico.** Para  $\alpha \in (\alpha_2, \alpha_3)$ , el breather es atrapado, dando lugar a un breather estacionario periódico centrado en la impureza con los parámetros del breather móvil.
- **Cruce.** Para  $\alpha \in (\alpha_3, \alpha_4)$ , el breather cruza la impureza sin un cambio de velocidad apreciable.
- **Reflexión.** Para  $\alpha > \alpha_4$ , el breather es reflejado al llegar a la impureza, la cual permanece sin excitación aparente.

Las figuras 9.18 y 9.19 muestra ejemplos de estos comportamientos.

Como podemos apreciar, aparecen varias diferencias importantes respecto al caso hamiltoniano. Entre ellas cabe destacar:

- La existencia de un régimen en el que desaparece toda localización. Para estos valores de los parámetros, no existe un breather centrado en la impureza.
- La existencia de un tipo de atrapamiento en el que la solución atrapada es periódica.



**Fig. 9.17:** Diferentes regímenes en la interacción BM-impureza para un modelo Frenkel-Kontorova disipativo con una inhomogeneidad en el pozo de potencial. Los valores críticos para  $F = 0,02$ ,  $\omega_b = 0,2\pi$  y  $C = 0,53$  son  $\alpha_1 \approx -0,58$ ,  $\alpha_2 \approx -0,11$ ,  $\alpha_3 \approx -0,03$  y  $\alpha_4 \approx 0,05$ .

- El cruce de la impureza se realiza sin aceleración o frenado del breather móvil.
- La reflexión del breather móvil se realiza sin excitación de la impureza.

No obstante, al igual que en el caso hamiltoniano, no existe atrapamiento para  $\alpha > 0$ . Sin embargo, un análisis similar al que se realizó para formular la hipótesis de atrapamiento no se puede realizar en el caso disipativo, pues no se puede calcular de manera trivial el espectro de modos lineales.

### 9.9. Conclusiones

Hemos visto en este capítulo los posibles comportamientos cuando un breather móvil interactúa con una impureza en sistemas hamiltonianos y disipativos. Esta impureza se puede implementar introduciendo una inhomogeneidad en el pozo de potencial, en la masa de las partículas o en las constantes de acoplo. Los resultados obtenidos se pueden resumir de la siguiente forma:

**Conclusión 9.1:** *En el escenario de la interacción entre un breather móvil y una impureza en sistemas hamiltonianos se pueden distinguir tres regímenes diferenciados: (a) el breather rebota, pudiendo dejar la impureza excitada; (b) el breather puede cruzar la impureza, actuando ésta como una barrera o un pozo de potencial; (c) el breather es atrapado por la impureza.*

**Conclusión 9.2:** *En el escenario de la interacción entre un breather móvil y una impureza en sistemas disipativos se pueden distinguir cuatro regímenes diferenciados: (a) el breather rebota, sin dejar la impureza excitada; (b) el breather puede cruzar la impureza sin un cambio apreciable en la velocidad; (c) el breather es atrapado por la impureza; (d) el breather desaparece.*

**Conclusión 9.3:** *La formación del breather atrapado es independiente de la velocidad de incidencia del breather móvil salvo en el límite entre las regiones de*

---

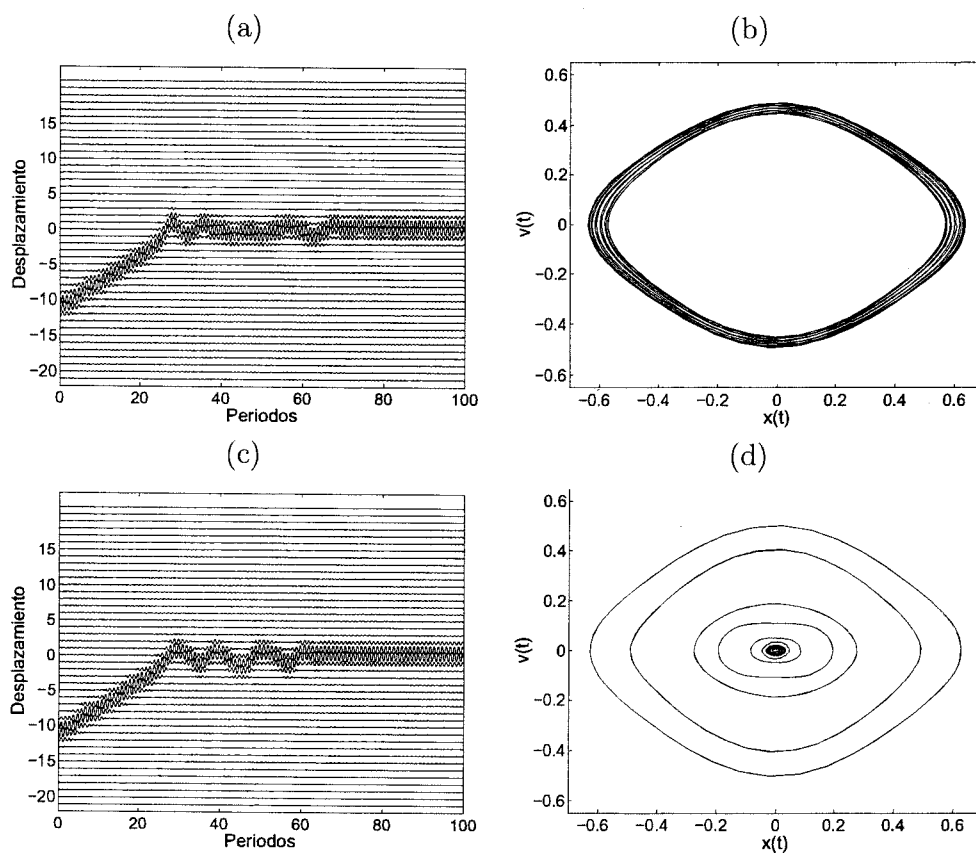
*atrapamiento y pozo (en el caso hamiltoniano). Este comportamiento difiere sustancialmente de la interacción kink-impureza en sistemas continuos.*

**Conclusión 9.4:** *El breather atrapado parece ser caótico en el caso hamiltoniano, mientras que en el caso disipativo o bien es cuasi-periódico, o bien es periódico.*

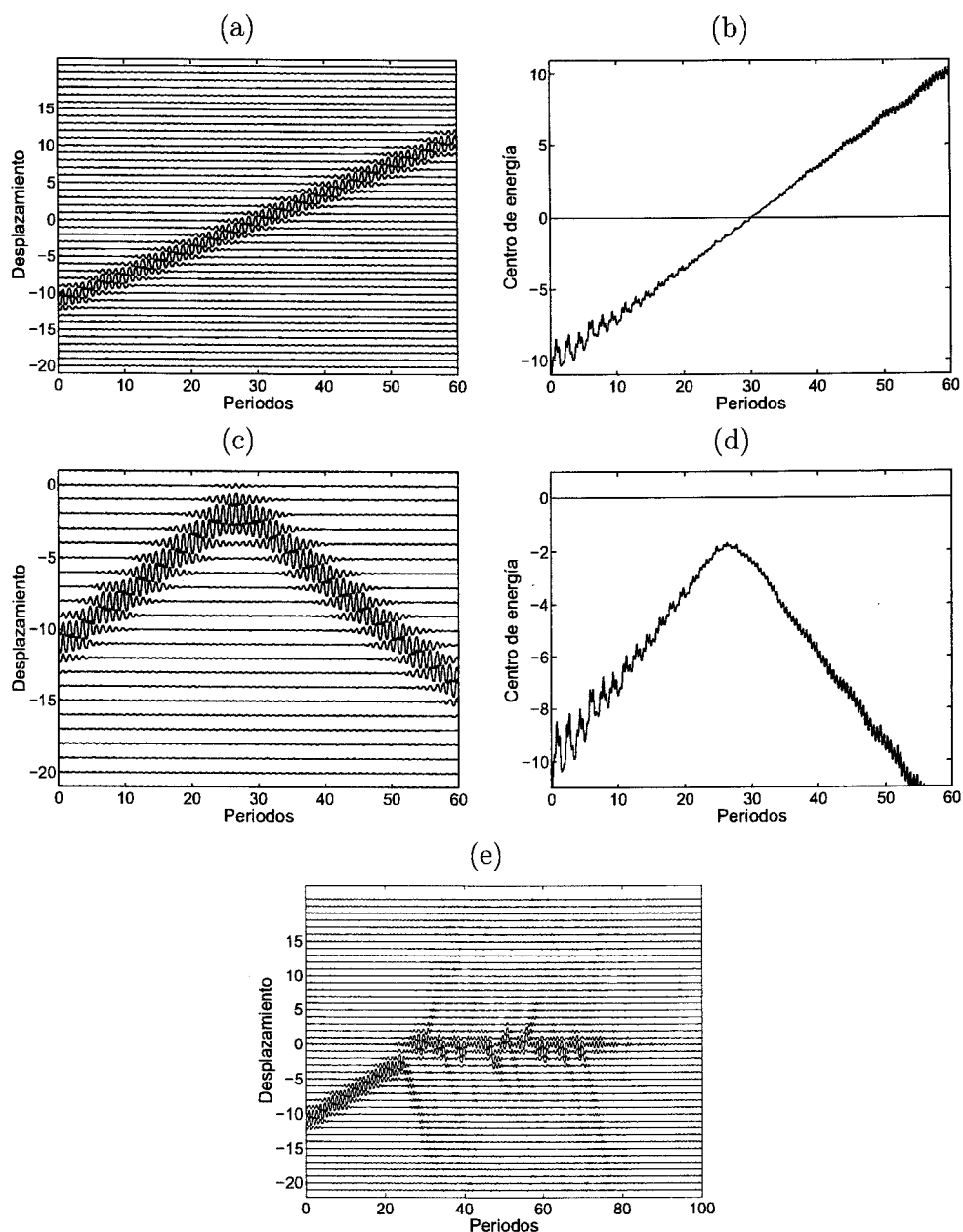
**Conclusión 9.5:** *Una condición necesaria para la aparición de atrapamiento en sistemas hamiltonianos es dada por la Hipótesis de Atrapamiento. Según esta, para que aparezca atrapamiento debe existir un breather centrado en la impureza con los parámetros del breather. Además, no debe existir un modo de impureza que vibre con un patrón de vibración distinto al del breather centrado en la impureza.*

**Conclusión 9.6:** *La Hipótesis de Atrapamiento se cumple en sistemas hamiltonianos con potencial on-site blando y duro y con inhomogeneidades en el pozo de potencial, la masa de las partículas y la constante de acoplo.*

**Conclusión 9.7:** *La Hipótesis de Atrapamiento con un breather de impureza es la principal diferencia que se establece con el estudio realizado en [91] para redes con no linealidad baja. Según este último trabajo, el atrapamiento se debería a la interacción con un modo de impureza, por lo que no podría explicar el atrapamiento cuando existe inhomogeneidad en la constante de acoplo.*



**Fig. 9.18:** Atrapamiento por una impureza de un breather móvil en un modelo Frenkel-Kontorova disipativo con parámetros  $F = 0,02$ ,  $\omega_b = 0,2\pi$  y  $C = 0,53$ . Las figuras superiores se corresponden con el caso  $\alpha = -0,2$  en el cual el breather atrapado es cuasi-periódico, mientras que las inferiores lo hacen con el caso  $\alpha = -0,1$  en el que el breather atrapado es periódico. Las figuras de la izquierda muestran la evolución temporal de ambos breathers, mientras que la derecha muestran el espacio de las fases del oscilador central (b) y de todo el breather (d) en los casos cuasi-periódico y periódico, respectivamente.



**Fig. 9.19:** Ejemplos de los regímenes de cruce, reflexión y desaparición cuando un breather móvil interactúa con una impureza en un modelo Frenkel-Kontorova disipativo con parámetros  $F = 0,02$ ,  $\omega_b = 0,2\pi$  y  $C = 0,53$ . Las figuras (a) y (b) muestran la evolución temporal del breather y su centro de energía, respectivamente, cuando el breather cruza la impureza ( $\alpha = -0,01$ ). Análogamente, (c) y (d) se corresponden con el caso de reflexión del breather móvil por la impureza ( $\alpha = 0,2$ ). (e) Muestra la evolución temporal del breather cuando éste desaparece debido a su interacción con la impureza ( $\alpha = -0,8$ ).

## 10. Breathers y ADN

### 10.1. *Introducción*

El Ácido Desoxirribonucleico o ADN es uno de los sistemas biológicos más interesantes, ya que almacena la información genética de los seres vivos. La reciente secuenciación del genoma humano lo ha convertido en uno de los objetos más significativos del panorama científico actual. Sin lugar a dudas, el gran esfuerzo experimental que se está invirtiendo en tratar de descifrar los misterios que encierra esta molécula justifica las investigaciones teóricas que se puedan realizar sobre ella. Desde la década de 1980, se está prestando gran atención a la dinámica del ADN, dado que está muy relacionada con su funcionamiento. Aunque los primeros estudios se limitaban a modelos lineales del ADN, muy pronto se consideró la no linealidad del sistema, estudiándose la dinámica de solitones. Hasta mediados de los noventa, cuando ya se estableció con claridad el concepto de breather, no se tuvo en cuenta la importancia de la discretitud en los modelos dinámicos de ADN. El objetivo de este capítulo es exponer una serie de conceptos básicos necesarios para entender la estructura de la molécula y, posteriormente, ofrecer una panorámica de los modelos de la misma, centrándonos en el de Peyrard-Bishop. En el próximo capítulo expondremos las características de una variante a este modelo introducida por el autor [55].

Muchos de los aspectos tratados en este capítulo se encuentran ampliados en las referencias [30, 94, 193].

### 10.2. *El ADN. Estructura y funcionamiento*

#### 10.2.1. *La estructura del ADN*

##### *Estructura primaria*

El ADN está formado por dos cadenas o *hebras* cada una de las cuales es un polímero. Los monómeros que forman estos polímeros se llaman *nucleótidos*, los cuales, a su vez, están formados por tres componentes: (1) un azúcar, la *desoxirribosa*; (2) un *fosfato*; (3) una *base nitrogenada* (o, *base*, para abreviar). Estas bases son de cuatro tipos: adenina (A), timina (T), citosina (C) y guanina (G). A y G son purinas y C y T son pirimidinas. Cuando el azúcar se une a la base mediante un enlace  $\beta$ -glucosídico se forma un *nucleósido*. El nucleótido se forma por fosfo-

relación de dos grupos hidroxilos del azúcar (los llamados 3' y 5'). Los nucleótidos se enlazan mediante enlaces fosfodiéster, de manera que forman un polinucleótido.

Es decir, cada una de las hebras de ADN es un polímero formado por un esqueleto de fosfatos y azúcares. A cada uno de estos últimos se encuentra enlazada una base. Estas bases tienen una determinada secuencia. Todo este conjunto constituye la llamada *estructura primaria* del ADN.

### *Estructura secundaria*

La unión de dos hebras de polinucleótidos constituye la *estructura secundaria* del ADN.

Estas hebras se encuentran enrolladas alrededor de un eje común de manera que forman una doble hélice, tal como descubrieron Watson y Crick. Las bases se encuentran en el interior de la hélice, mientras que el esqueleto de azúcares y fosfatos se encuentran en el exterior. El radio de la hélice es 20Å, mientras que la distancia entre dos bases de la misma hebra es 3,4Å. En un paso de rosca de la hélice hay 10 bases, por lo que éstas se encuentran giradas 36° entre sí.

Las hebras se encuentran unidas mediante *puentes de hidrógeno*. Estos cuales enlazan las bases de las distintas hebras, de manera que constituyen un *par de bases* (pb). Las dos hebras se dicen que son complementarias por dos motivos:

- Las hebras tienen polaridad opuesta: es decir, una se recorre en sentido 3'-5' y la otra en sentido 5'-3'.
- Los pares de bases se forman siguiendo la regla de Chargaff. Es decir, sólo hay dos tipos de pares de bases: A-T y C-G.

El número de puentes de hidrógeno que se necesitan para formar un par de bases depende de la naturaleza de los mismos. Así, en un par A-T hay dos puentes, mientras que en el C-G hay tres. La forma de estos pares de bases se muestra en la figura 10.1.

La energía de cada uno de estos enlaces es:

$$E_{A-T} = 7,00\text{kcal/mol} \quad (10.1)$$

$$E_{C-G} = 16,79\text{kcal/mol}. \quad (10.2)$$

Esta energía es pequeña comparada con los enlaces fosfodiéster que forman el esqueleto de la doble hélice.

Otro tipo de interacciones son las llamadas de *apilamiento* entre pares de bases. Su origen es bastante complejo y depende de la secuencia de bases.

Señalemos también que existen varios tipos de estructuras helicoidales estables, las cuales constituyen varias familias. La de más fácil estudio es la denominada





longitud de 15 a 20 pares de bases en la que el ADN está “derretido”, es decir, con sus puentes de hidrógeno rotos. A esta región se le llama *burbuja de transcripción*. Posteriormente, se inicia la *fase de elongación*, en la cual la polimerasa junto con la burbuja de transcripción se desplazan a lo largo del gen, copiando el código en una cadena de ARN. La transcripción finaliza cuando la polimerasa alcanza una región llamada *terminador*. Un aspecto interesante es que la formación de la burbuja de transcripción se produce sin que la polimerasa proporcione energía química.

Además de las regiones de código, promotoras y terminadoras, existen otras regiones reguladoras. Éstas pueden ser activadoras o inhibidoras. Cuando una proteína se ancla en una de estas regiones, activa o inhibe la transcripción. Sin embargo, la distancia entre el activador y el promotor es de cientos de pares de bases. Existen varias teorías para explicar esta interacción de largo alcance. Las que tienen una mayor concordancia con los datos experimentales son dos: una de ellas consiste en que el ADN se dobla de forma que el promotor y el activador se acercan. La otra, y que está tomando más fuerza últimamente, se basa en la existencia de transmisión de señales. Es decir, cuando una proteína o enzima se ancla en el activador, se manda una señal que la capta la polimerasa anclada en el promotor y se inicia entonces la transcripción.

### 10.3. Modelos dinámicos de ADN

#### 10.3.1. Introducción

Muchos aspectos del funcionamiento del ADN están relacionados estrechamente con su dinámica. Por ejemplo, la formación de la burbuja de transcripción, la transmisión de señales desde un activador al promotor, las transiciones conformacionales, el enrollamiento o desenrollamiento de la doble hélice y otra gran cantidad de fenómenos, requieren la consideración de la dinámica interna de la molécula de ADN.

Los movimientos del ADN pueden ser de muchos tipos. Los estudiados con mayor profusión son: torsión (*twisting*) y pliegue (*bending*) de la molécula, transiciones conformacionales y aperturas de la doble hélice. En esta sección nos centraremos en esta última categoría.

La doble hélice se abre debido a la rotura de los puentes de hidrógeno que forman los pares de bases. Este proceso recibe también el nombre de *fusión* o *desnaturalización* del ADN y es el paso previo para la replicación de la molécula. Sin embargo, también pueden existir aperturas locales, como es el caso de la formación de la burbuja de transcripción. Los modelos dinámicos que explican las aperturas de la doble hélice se dividen principalmente en dos tipos, según como consideren el origen de la apertura:

**Modelos de rotación de bases.** Estos consideran las bases como péndulos y la rotura se produce por la rotación de las mismas. El más representativo de estos modelos es el de Yakushevich [194].

**Modelos de desplazamientos transversales de las bases.** Estos consideran sólo movimientos transversales ignorando los longitudinales, pues no son dominantes en el proceso de separación. Para representar los puentes de hidrógeno se utilizan potenciales tales que la fuerza de interacción entre las bases sea muy pequeña cuando éstas están lo suficientemente separadas. El modelo de Peyrard–Bishop (PB) [158] es el principal representante.

Como podemos comprobar, en ambos tipos de modelos, los potenciales implicados son no lineales. Por este motivo no pueden ignorarse este tipo de efectos al estudiar la dinámica del ADN.

En lo que resta de tesis nos centramos en modelos del segundo tipo, basados en su mayoría en el modelo PB.

### 10.3.2. El modelo de Peyrard–Bishop

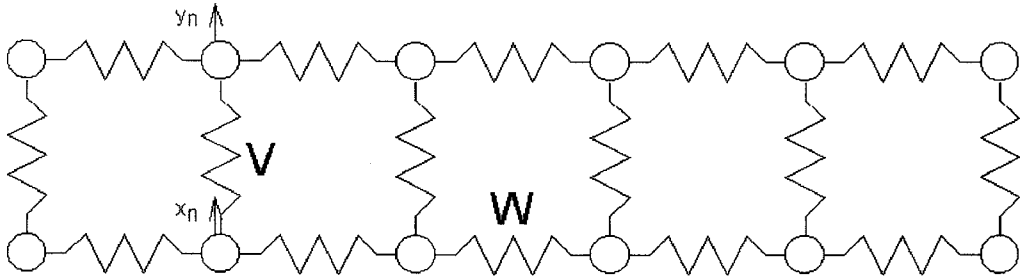
El modelo de Peyrard–Bishop fue introducido en 1989 para el estudio estadístico de la desnaturalización del ADN. Este modelo simplifica la dinámica a movimientos transversales de las bases ignorando los movimientos longitudinales. Otra simplificación radica en la propia estructura del ADN: ésta es una doble cadena plana de osciladores, tal como se muestra en la figura 10.2. Además, no se considera la aperiodicidad debida a la secuencia de bases. Las variables del sistema son los desplazamientos de las bases respecto a su posición de equilibrio, es decir,  $x_n$  y  $y_n$ . Las interacciones dentro de la cadena son de dos tipos:

**Interacciones dentro del par de bases.** Para modelar la rotura de los puentes de hidrógeno se necesita un potencial cuya pendiente sea muy pequeña a grandes distancias. Ejemplos de potenciales de este tipo son el de Lennard–Jones y el de Morse. En el artículo original se utilizó este último aunque sólo por motivos de simplificación a la hora de hacer los cálculos. Sin embargo, en posteriores artículos se ha seguido utilizando el mismo potencial.

**Interacciones entre los pares de bases.** La interacción entre los distintos pares de bases es de apilamiento o *stacking*. Como se comentó anteriormente, el origen de esta interacción es muy complejo, por lo que en un principio se supone armónica para simplificar los cálculos. También se supone que es de primeros vecinos pues el apilamiento sólo afecta a las bases adyacentes a una dada.

Con estos preliminares, se puede construir el hamiltoniano, que es de la forma:

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2}m(\dot{x}_n^2 + \dot{y}_n^2) + V(x_n - y_n) + \frac{1}{2}k[(x_n - x_{n-1})^2 + (y_n - y_{n-1})^2] \right\}, \quad (10.3)$$



**Fig. 10.2:** Esquema tanto del modelo de Peyrard–Bishop [158] como del de Muto [155]; el primero corresponde a un potencial  $W$  de apilamiento, usualmente armónico; el segundo incluye grados de libertad longitudinales (no representados), y el potencial  $W$  es anarmónico, pues representa los puentes fosfodiéster.

donde  $m$  es la masa de un nucleótido,  $k$  es la constante elástica de apilamiento y  $V(x_n - y_n)$  es el potencial de Morse. Éste es de la forma:

$$V(x_n - y_n) = D[\exp(-b(x_n - y_n)/\sqrt{2}) - 1]^2, \quad (10.4)$$

aquí  $D$  representa la energía de enlace de los puentes de hidrógeno y  $b$  da cuenta del alcance del potencial (es decir, de la longitud de enlace).

En el caso de cadenas homogéneas, para los parámetros  $D$ ,  $b$  y  $k$  se toman valores promedio y se calculan principalmente mediante ajuste a curvas de desnaturalización. Las masas de los nucleótidos difieren en menos del 1% por lo que pueden considerarse iguales.

El hamiltoniano (10.3) puede separarse en una parte acústica y otra óptica mediante el siguiente cambio de variable:

$$u_n = \frac{x_n - y_n}{\sqrt{2}}, \quad v_n = \frac{x_n + y_n}{\sqrt{2}}, \quad (10.5)$$

de forma que  $u_n$  corresponden a vibraciones en anti-fase de las bases y  $v_n$  lo hará con las vibraciones en fase. Así,  $u_n$  se corresponde con el estiramiento (*stretching*) de los puentes de hidrógeno y  $v_n$  lo hará con el movimiento del centro de masa del par de bases.

En consecuencia, el hamiltoniano puede escribirse de la forma:

$$H = H_{ac}(v_n) + H_{op}(u_n), \quad (10.6)$$

donde

$$H_{\text{ac}} = \sum_n \left( \frac{1}{2} m \dot{v}_n^2 + \frac{1}{2} k (v_n - v_{n-1})^2 \right), \quad (10.7)$$

$$H_{\text{op}} = \sum_n \left( \frac{1}{2} m \dot{u}_n^2 + V(u_n) + \frac{1}{2} k (u_n - u_{n-1})^2 \right). \quad (10.8)$$

Como se puede observar, el hamiltoniano acústico es lineal, por lo que su solución serán modos acústicos. El hamiltoniano óptico es no lineal y ha sido estudiado con profusión durante esta tesis pues se corresponde con el hamiltoniano de una cadena de osciladores con un potencial de Morse on-site y potencial de interacción armónico. Así, para el estudio de la dinámica no lineal del modelo PB sólo hay que utilizar las ecuaciones dinámicas que derivan de (10.8) pues las soluciones lineales son ya conocidas.

Este modelo ha sido utilizado por Dauxois, Peyrard y Bishop tanto para estudiar la desnaturalización del ADN mediante la realización de cálculos estadísticos, como para el estudio de la formación de aperturas locales (burbujas) mediante fluctuaciones térmicas [62, 63, 64, 65, 66, 160]. Basándose en el ajuste con curvas experimentales de desnaturalización, se han calculado los valores de las constantes  $D$ ,  $b$  y  $k$ , e, incluso, se han introducido términos no lineales en la interacción de apilamiento.

También se ha considerado el papel de la aperiodicidad del ADN en la desnaturalización. Por un lado, se han estudiado secuencias con sólo A-T ó C-G [159]. Por otro, se ha considerado la aperiodicidad total [59]. En este último caso, se pudo obtener detalles finos de la curva de desnaturalización. Una visión más reciente sobre la termalización de redes y la desnaturalización se puede encontrar en [161].

### 10.3.3. Otros modelos

A partir del modelo de PB se han realizado ciertas modificaciones. La más importante es la ampliación de este modelo a una estructura helicoidal realizada por Barbi, Cocco y Peyrard [30, 31, 32, 46, 47]. También se han considerado ciertas simplificaciones a la estructura helicoidal completa [41, 175].

Por otro lado, existen variaciones importantes al modelo de Yakushevish. La principal es el modelo de Salerno, en el cual se considera una cierta secuencia de ADN [168, 169, 171]. La manera de considerarla en éste y otros modelos es suponer que la energía de enlace del par C-G es 3/2 de la energía del A-T, pues el primero tiene 3 puentes de hidrógeno, mientras que el segundo tiene sólo 2. Se ignoran, por tanto, las heterogeneidades en las interacciones entre los pares de bases.

Finalmente, debe citarse el modelo de Virginia Muto [155, 156], que fue uno de los primeros en los que se investigó la desnaturalización del ADN. En este modelo se consideran además las interacciones de los enlaces fosfodiéster de las columna vertebral del ADN. Estos enlaces se modelan mediante un potencial de Toda, mientras que los puentes de hidrógeno lo hacen mediante un potencial de

Lennard–Jones. Este modelo es bidimensional, en el sentido de que las vibraciones longitudinales no pueden separarse de las transversales. Las ecuaciones del modelo pueden considerarse como las de una red FPU modificada. Sin embargo, como los potenciales de interacción son blandos, no pueden calcularse breathers (al menos, con las herramientas de las que se dispone hasta la fecha).

## 10.4. Localización en ADN

### 10.4.1. Introducción

Como hemos visto en la sección anterior, las ecuaciones que rigen la dinámica de los modelos de ADN son no lineales. Por ello, pueden tener soluciones localizadas sin tener en cuenta su aperiodicidad. Los primeros trabajos que señalan la posibilidad de localización de energía vibracional en forma de solitón fueron realizados por Englander *et al* [75]. Posteriormente, tras el descubrimiento de los breathers, se sugirió la posibilidad de que estos pudieran tener un papel importante en la dinámica del ADN, puesto que las ecuaciones del modelo de PB son iguales a las de una cadena de osciladores [67].

El estudio de la existencia de breathers en ADN, tanto estacionarios como móviles, ha sido tratado en la mayoría de los casos en la aproximación NLS, ya que se han considerado oscilaciones de pequeña amplitud o con frecuencias próximas a la de los modos lineales. Dentro de este marco existen varios trabajos. En [90] se estudia la existencia de breathers y la interacción entre ellos (en la aproximación NLS) de forma que las cadenas tienen distintas constantes de apilamiento. Este efecto sirve también para modelar diversas geometrías, ya que suponen dos cadenas con la misma constante de apilamiento, salvo en una región en la que ésta varía. Este hecho se había aplicado anteriormente en la referencia [186], trabajo en el que se vuelve a utilizar la aproximación NLS.

Hay que señalar que la existencia de excitaciones localizadas móviles puede tener gran importancia a la hora de explicar fenómenos de transmisión de información, como los que se suponen que existen entre los activadores y los promotores.

### 10.4.2. *Breathers en el modelo de Peyrard–Bishop*

El conocimiento de las propiedades de los breathers en el modelo de PB es inmediato tras haber estudiado breathers en cadenas de osciladores con el potencial de Morse. Las ecuaciones dinámicas del modelo PB se obtienen a partir del hamiltoniano (10.8) y son:

$$m\ddot{u}_n^2 + V'(u_n) + k(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) = 0, \quad (10.9)$$

donde  $V'(u_n) = 2Db(\exp(-bu_n) - 2\exp(-2bu_n))$ . Si se introducen los siguientes cambios de variable:

$$t \leftarrow \omega_0 t, \quad u_n \leftarrow b u_n, \quad C = \frac{k}{2b^2 D}, \quad (10.10)$$

con

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2b^2 D}{m}}, \quad (10.11)$$

resultan las ecuaciones dinámicas adimensionales:

$$\ddot{u}_n^2 + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) = 0, \quad (10.12)$$

y los parámetros el potencial de Morse toman los valores  $D = 1/2$  y  $b = 1$ .

En los capítulos precedentes de la tesis hemos estudiado breathers estacionarios y móviles para sistemas de este tipo. De los resultados de este estudio, sabemos que existirán breathers móviles para frecuencias mayores de  $2/3$  y que el valor mínimo de  $C$  para que existan es aproximadamente  $0,09$ . Estos resultados son en unidades adimensionales. En el próximo apartado veremos cómo se trasladan estos valores a la realidad.

También se pueden extraer conclusiones acerca de la interacción con impurezas. Si se consideran impurezas en la secuencia, debido a que en el modelo PB la profundidad del pozo de potencial se debe al número de puentes de hidrógeno dentro del par de bases, sólo existirá atrapamiento en una cadena en la que únicamente haya C ó G y la impureza sea una A ó T. Esto se debe a que, según la hipótesis de atrapamiento formulada en el Capítulo 9, es necesario que el pozo de potencial en la impureza sea menos profundo que en la zona homogénea para que exista atrapamiento. Otro factor que puede introducir una impureza en el pozo de potencial se debe a efectos químicos que pueden producirse al anclarse la ARN-polimerasa.

### 10.4.3. Valores de los parámetros

En el modelo PB aparecen tres constantes cuyo valor numérico es necesario conocer. Estas son el pozo de potencial  $D$ , la longitud de los puentes de hidrógeno  $b$  y la constante elástica de apilamiento  $k$ . Falta otra constante, la masa del nucleótido, para la cual se toma el valor  $m = 300$  uma.

Para los dos primeros parámetros se suelen utilizar los valores dados en [65], los cuales se obtienen mediante ajuste de las curvas de desnaturalización. Estos son  $D = 0,04$  eV y  $b = 4,45$  Å<sup>-1</sup>. El problema surge en la elección de la constante de apilamiento. Según se puede ver en [67], el valor de  $k$  oscila entre  $0,01$  eV/Å<sup>2</sup> y  $10$  eV/Å<sup>2</sup>. Esta alta discrepancia se debe a que la constante se mide experimentalmente siguiendo diversos mecanismos (torsión, plegado, estiramiento, medición de la velocidad del sonido,...). Prueba de esta inexactitud en el conocimiento de  $k$  se puede encontrar en las referencias [32, 48, 49].

Así, el valor de  $k$  no está completamente determinado, por lo que, siempre que esté en un límite aceptable, se tomará por válido el valor que se obtenga en cada

estudio particular del modelo.

Los valores de  $D$  y  $b$  anteriormente mencionados arrojan para la frecuencia característica el valor  $\omega_0 = 7,05 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ , por lo que los tiempos característicos del movimiento de las bases son del orden de picosegundos, lo cual está de acuerdo con los datos experimentales.

Por otro lado, se vio en el apartado anterior que no se ha podido encontrar breathers móviles con potencial de Morse para frecuencias menores de  $2/3$ ; el valor mínimo de  $C$  para encontrar breathers móviles es  $C \approx 0,09$ . Esto indica que, para que existan en el modelo de PB, el valor mínimo de la constante de apilamiento debe ser  $k = 0,14 \text{ eV/\AA}^2$ .

# 11. El modelo de ADN con interacción dipolar

## 11.1. *Introducción: la interacción dipolar en el ADN*

Hasta el momento, la única característica que hemos mostrado de los puentes de hidrógeno es la de unir las dos hebras de ADN. Sin embargo, estos enlaces poseen un momento dipolar, con lo cual aparece una interacción electrostática entre los pares de bases. Esta interacción es, además, de largo alcance.

Este tipo de interacción ha sido estudiado por primera vez en modelos de ADN en las referencias [10, 55]. En el primero de estos trabajos, realizado por Archilla *et al* se considera el modelo PB al que se le sustituye la interacción de apilamiento por otra dipolar de largo alcance, lo cual permite modelar el plegado de la molécula. En el segundo de estos trabajos, realizado por el autor entre otros, se tienen en cuenta ambas interacciones. A este modelo le llamaremos *modelo con interacción dipolar* durante el resto de esta tesis. En ambos trabajos no se han considerado aproximaciones, sino que se han resuelto las ecuaciones de Klein–Gordon completas. Un trabajo particularmente interesante es el realizado por Sánchez-Rey *et al* [180] en el que se demuestra que es posible no tener en cuenta la helicidad de la doble cadena de ADN, a cambio de una disminución en la constante de acoplo dipolar.

La interacción dipolar se ha considerado en modelos de biomoléculas, tal como se puede ver en [147], aunque en este caso se estudian solitones en la aproximación NLS.

El primer paso para poder modelar la interacción dipolar en el ADN es conocer el valor del momento dipolar de los puentes de hidrógeno. Sin embargo, no hemos sido capaces de encontrar trabajos en los que apareciera el valor de dicha magnitud, razón por la cual solicitamos la colaboración del Profesor Antonio Márquez, del departamento de Química Física de la Universidad de Sevilla, para la realización del cálculo de los momentos dipolares usando herramientas químico–cuánticas.

En la tabla 11.1 se muestra la transferencia de carga ( $q$ ) y la distancia de enlace ( $r$ ) de los distintos pares de bases. El momento dipolar será el producto de ambas magnitudes:  $p = q \cdot r$ . Más detalles sobre estos cálculos se pueden encontrar en [55].



par de bases A-T						
Método	Longitud puente H (Å)				transferencia de carga <sup>b)</sup>	momento dipolar (Debye)
	C=O ... H-N	N-H ... N	C=O	H-C <sup>a)</sup>		
RHF	2.0571	1.9204	2.9482		-0.0014	6.4420
PW91	1.8900	1.6975	2.6722		-0.0211	5.7547
B3LYP	1.9649	1.7772	2.7381		-0.0183	5.9817
par de bases G-C						
Método	Longitud puente H (Å)				transferencia de carga <sup>c)</sup>	momento dipolar (Debye)
	N-H ... O=C	N-H ... N	C=O ... H-N			
RHF	1.8947	2.0115	1.9987		-0.0248	6.4834
PW91	1.8476	1.8249	1.6635		-0.0612	6.0038
B3LYP	1-9026	1.8949	1.7475		-0.0548	6.0935

a) no hay puente de hidrógeno en la realidad, pero es necesario para los cálculos

b) A es el polo negativo

c) G es el polo negativo

**Tab. 11.1:** Distancias de enlace y transferencia de carga para los pares de bases A-T y G-C.

## 11.2. El modelo con interacción dipolar en cadenas planas.

El modelo con interacción dipolar introduce una pequeña variación respecto al modelo PB, la cual consiste en tener en cuenta la interacción de largo alcance electrostática entre los momentos dipolares que constituyen los puentes de hidrógeno. La deducción de las ecuaciones que rigen el modelo se realiza en la referencia [55] y será expuesta a continuación.

### 11.2.1. El hamiltoniano dipolar

El hamiltoniano del sistema puede expresarse de la forma:

$$H = H_{PB} + H_D, \quad (11.1)$$

donde  $H_{PB}$  es el hamiltoniano del modelo de Peyrard–Bishop (10.3).  $H_D$  es la contribución debida a la interacción dipolar. Para ver la expresión de este último, partimos de la energía de interacción dipolar  $U_D$  [100]:

$$U_D = \sum_n \sum_{i \neq n} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_{in}|^3} [\vec{p}_n \cdot \vec{p}_i - 3(\vec{p}_n \cdot \hat{r}_{in})(\vec{p}_i \cdot \hat{r}_{in})], \quad (11.2)$$

donde  $\vec{p}_n$  y  $\vec{p}_i$  son, respectivamente, los momentos dipolares de los pares de bases situados en los sitios  $n$  e  $i$  y  $\vec{r}_{in}$  es un vector que conecta el centro de ambos momentos dipolares, siendo  $\hat{r}_{in}$  un vector unitario en dicha dirección.

En nuestro modelo estamos suponiendo que el ADN es una doble cadena plana y homogénea, por lo que podemos suponer que los dipolos son paralelos y están orientados en el mismo sentido. Por tanto,  $\vec{p}_n$  y  $\vec{p}_i$  serán perpendiculares a  $\hat{r}_{in}$  y la última ecuación puede escribirse de la forma:

$$U_D = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{i \neq n} \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{1}{|d(n-i)|^3} p_n p_i, \quad (11.3)$$

donde  $d$  es la distancia entre pares de bases vecinos. En el equilibrio, todos los momentos dipolares tienen el mismo valor ( $p_n \equiv p_o, \forall n$ ) por lo que la energía de interacción en el equilibrio será:

$$U_D^o = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{i \neq n} \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{1}{|d(n-i)|^3} p_o^2, \quad (11.4)$$

Al considerar los estados excitados del sistema, suponemos que

$$p_n = p_o + q u_n, \quad (11.5)$$

donde  $u_n$  es la distancia de estiramiento de los puentes de hidrógeno respecto a su posición de equilibrio, y  $q$  es la transferencia de carga debida a la formación de los momentos dipolares (tabla 11.1). Si se introduce la expresión (11.5) en la ecuación (11.3), se puede expresar la energía dipolar de la forma:

$$U_D = U_D^o + U_D^1 + \frac{1}{2} \sum_n \sum_{i \neq n} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_o} \frac{1}{|d(n-i)|^3} u_n u_i, \quad (11.6)$$

donde  $U_D^o$  y  $U_D^1$  son constantes y lineales en  $\{u_n\}$ , respectivamente. Estos términos no tienen porqué aparecer en el hamiltoniano ya que, de acuerdo con la definición de equilibrio, los términos de orden cero y uno del desarrollo de Taylor de la energía potencial de un sistema deben anularse en ese punto, pues en este caso las variables  $u_n$  son cero.

Así, la contribución de la interacción dipolar al hamiltoniano del sistema puede escribirse de la forma:

$$H_D = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{i \neq n} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_o} \frac{1}{|d(n-i)|^3} u_n u_i. \quad (11.7)$$

Esta fórmula proporciona una expresión para la constante de acoplo dipolar:

$$Q = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_o d^3}, \quad (11.8)$$

por lo que el hamiltoniano dipolar puede escribirse de la forma:

$$H_D = \frac{1}{2} \sum_{n,i} Q_i u_{n+i} u_n, \quad (11.9)$$

donde,

$$Q_i = \begin{cases} \frac{Q}{|i|^3} & \text{para } 1 \leq |i| \leq (N-1)/2 \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (11.10)$$

$|i|$  es la distancia normalizada entre pares de bases. En la práctica, para mantener la homogeneidad espacial en un sistema finito de  $N$  partículas con condiciones de contorno periódicas, se limita la interacción de largo alcance a  $(N-1)/2$ , si  $N$  es impar, o a  $(N-2)/2$ , si  $N$  es par, en cada sentido [83].

### 11.2.2. Valores numéricos

Si tomamos los valores de la transferencia de carga calculados usando la técnica B3LYP (ver tabla 11.1), se obtiene que la constante  $Q$  tiene un valor:

$$Q_{A-T} = 1,23 \times 10^{-4} \text{ eV}/\text{Å}^2, \quad (11.11)$$

$$Q_{C-G} = 1,10 \times 10^{-3} \text{ eV}/\text{Å}^2, \quad (11.12)$$

donde hemos hecho uso de que  $d = 3,4 \text{ Å}$ . Como podemos comprobar, la interacción dipolar tiene una energía mucho menor que la de apilamiento. Sin embargo, estos valores de la constante  $Q$  los tomaremos de referencia aunque no del todo exacta pues no han sido comprobados experimentalmente con ADN real.

Haciendo un cambio de variables similar al realizado en (10.10), se tiene la constante de acoplo dipolar adimensional  $J$ :

$$J = \frac{Q}{2b^2 D} \quad (11.13)$$

Así,

$$J_{A-T} = 7,76 \times 10^{-5}, \quad (11.14)$$

$$J_{C-G} = 6,94 \times 10^{-4}. \quad (11.15)$$

En el próximo capítulo, haremos uso del hamiltoniano dipolar obtenido en esta sección para el cálculo de breathers estacionarios y móviles cuando se consideran las interacciones de apilamiento y dipolar.

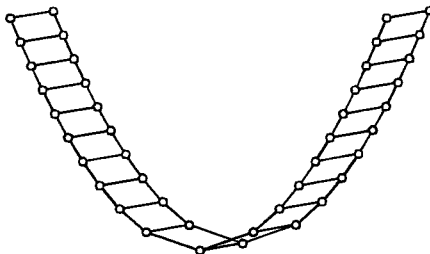


Fig. 11.1: Esquema del modelo dipolar curvado.

### 11.3. Modelo con interacción dipolar en cadenas curvadas

La introducción de una interacción de largo alcance, como es el caso de la electrostática, puede servir para modelar la geometría de la molécula. El estudio de la existencia de breathers en modelos curvados de ADN con interacción dipolar de tipo Klein–Gordon fue abordado por primera vez por Archilla *et al* en [10]. No obstante, existen estudios previos sobre localización en cadenas curvadas de osciladores en el marco de la ecuación de Klein–Gordon [11] y de la DNLS [45, 95]. Dentro de este último contexto, se ha considerado la inducción de curvatura mediante un breather [148]. Existen también trabajos en los que se calculan breathers en cadenas FPU bidimensionales, en las cuales la geometría se introduce de manera natural, sin necesidad de recurrir a inhomogeneidades ni interacciones de largo alcance [107, 166, 190]. Por otro lado, también se puede modelar la curvatura en hélices  $\alpha$  de proteínas sin necesidad de introducir interacciones de largo alcance, pero sí haciendo uso de interacciones electrostáticas (ver Sección 12.7) [13].

No obstante, los únicos trabajos en los que se estudia el efecto de la curvatura en modelos de ADN con interacción dipolar son el antes mencionado de Archilla *et al* [10] y el realizado para esta tesis, en el cual se estudia la movilidad de breathers y cuyos resultados se mostrarán en el próximo capítulo.

Pasemos a exponer cómo se modifica la energía de interacción dipolar calculada en el caso plano cuando se considera la curvatura. Para ello, debemos describir la geometría usada para modelarla. En concreto, suponemos que el plano que contiene las bases se pliega y se adapta a una parábola de curvatura  $\kappa$  (esto es, la localización del  $n$ -ésimo par de bases está determinada por la ecuación  $y_n = \kappa x_n^2/2$ ). La elección de esta forma se debe a que toda curva, en primera aproximación, se puede considerar una parábola siempre que se esté lo suficientemente cerca de ella. Tal como se muestra en la figura 11.1, todos los momentos dipolares son perpen-

diculares a la parábola y paralelos entre sí<sup>1</sup>. Así, la energía de interacción dipolar (11.3) se puede escribir de la forma [58]:

$$U_D = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{i \neq n} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_n - \vec{r}_i|^3} p_n p_i. \quad (11.16)$$

$\vec{r}_n = (x_n, y_n)$  representa la posición del  $n$ -ésimo par de bases. Suponemos que la cadena es inextensible, por lo que la distancia entre sitios vecinos permanece constante e igual a  $d$ . Es decir,

$$|\vec{r}_n - \vec{r}_{n+1}| \equiv d. \quad (11.17)$$

Así, siguiendo los mismos pasos que en la cadena plana, se puede reescribir el hamiltoniano (11.9) de la forma:

$$H_D = \frac{1}{2} \sum_{n,i} Q_{in} u_i u_n, \quad (11.18)$$

con

$$Q_{in} = \begin{cases} \frac{Q}{|(\vec{r}_n - \vec{r}_i)/d|^3} & \text{para } i \neq N \\ 0 & \text{para } i = N. \end{cases} \quad (11.19)$$

No hacemos la restricción en el alcance de la interacción, tal como hicimos en la cadena plana, pues vamos a considerar condiciones de contorno de extremos libres.

Las ecuaciones de movimiento se pueden adimensionalizar volviendo a hacer el cambio (11.13).

Como se puede ver en la expresión de  $Q_{in}$ , la curvatura rompe la simetría traslacional del sistema, cosa que no ocurría en el modelo dipolar plano. Esto implica que la curvatura puede considerarse como una inhomogeneidad.

Volveremos a estas ecuaciones en el próximo capítulo cuando consideremos el movimiento de los breathers en cadenas curvadas de ADN.

---

<sup>1</sup> Aunque el ADN celular no tiene exactamente estas características, sí es posible construir ADN sintético con estos requisitos.

## 12. Breathers en el modelo de ADN con interacción dipolar

### 12.1. Introducción. Ecuaciones dinámicas

En este capítulo se considera el estudio de breathers en cadenas de osciladores con dos tipos de interacción: una de corto alcance atractiva y otra de largo alcance repulsiva. Ambos tipos de interacción tienen reflejo en el modelo de ADN con interacción dipolar presentado en el capítulo anterior, pues la interacción atractiva de corto alcance es equivalente al apilamiento, mientras que la interacción dipolar es de largo alcance y repulsiva.

Así, el objetivo de este capítulo será el estudio de ciertas propiedades de breathers estacionarios y móviles en cadenas de osciladores con los dos tipos de interacciones antes mencionados. Como aplicación de estos resultados, se considerará el modelo de ADN dipolar. Finalmente, se expondrán resultados correspondientes a la movilidad de breathers en cadenas curvadas de ADN y de hélices  $\alpha$  de proteínas, los cuales estarán en estrecha relación con los obtenidos en el Capítulo 9.

El hamiltoniano que describe nuestro sistema es:

$$H = \sum_n \left( \frac{1}{2} \dot{u}_n^2 + V(u_n) + \frac{1}{2} C (u_n - u_{n+1})^2 + \frac{1}{2} \sum_i J_i u_{n+i} u_n \right), \quad (12.1)$$

con  $V(u_n)$  el potencial de Morse. Este hamiltoniano conduce a las ecuaciones dinámicas:

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) + \sum_{i>0} J_i (u_{n+i} + u_{n-i}) = 0, \quad (12.2)$$

con  $J_i$  dado por:

$$J_i = \frac{J}{i^s}, \quad (12.3)$$

donde el caso dipolar corresponde a  $s = 3$ . Así, se tienen dos constantes de acoplo que se corresponden con las interacciones de corto ( $C$ ) y largo alcance ( $J$ ). Nótese que esta última interacción es repulsiva.

Con estos preliminares, podemos pasar al estudio del comportamiento de las soluciones cuando varían los parámetros  $C$  y  $J$ , de forma que se produce una competición entre ambas interacciones [55].

## 12.2. *Breathers estacionarios*

### 12.2.1. *Modos lineales*

La relación de dispersión de los modos lineales se obtiene de manera inmediata a partir de la linealización de las ecuaciones dinámicas. Así,

$$\omega_{\text{ph}}^2(q) = \omega_o^2 + 4C \sin^2 \frac{q}{2} + 2J \sum_m \frac{\cos(mq)}{m^s}, \quad (12.4)$$

En el caso de un sistema infinito, la serie se puede expresar mediante la función polilogarítmica o de Jonquière [135]:

$$F_s(z) = \sum_k \frac{z^k}{k^s}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad |z| < 1. \quad (12.5)$$

Así,

$$\omega_{\text{ph}}^2(q) = \omega_o^2 + 4C \sin^2 \frac{q}{2} + 2JF_s(\text{Re}(\exp(iq))). \quad (12.6)$$

Como se puede observar en la figura 12.1, la banda de fonones está por encima de  $\omega_o$  si  $J = 0$ . En el caso  $C = 0$ , la banda de fonones está tanto por encima como por debajo de  $\omega_o$  y el breather deriva del fonón con  $q = \pi$ . Si  $C$  y  $J$  son distintos de cero, la banda se comporta como en el caso  $C = 0$  para  $J > C$ , y, cuando  $J < C$ , lo hará como en el caso  $J = 0$ .

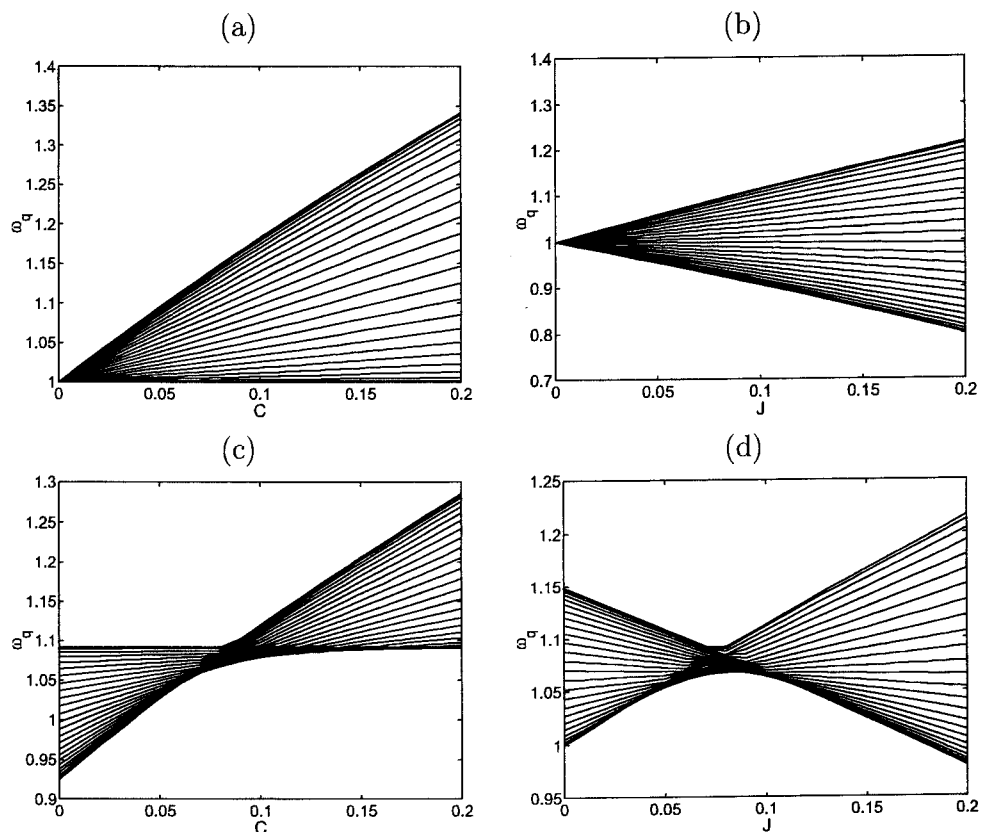
### 12.2.2. *Decaimiento de breathers con $C = 0$ . Función de Green reticular*

#### *Definición de Función de Green Reticular*

Para estudiar el decaimiento de las colas de los breathers se puede utilizar la técnica de la función de Green reticular (FGR) [136]. Tal como se muestra en [96], el decaimiento del breather es el mismo que el de la FGR <sup>1</sup>, que para un sistema infinito se define como:

$$G(n, \omega_b) = \int_0^\pi dq \frac{\cos(nq)}{\omega_b^2 - \omega_{\text{ph}}^2(q)}, \quad (12.7)$$

<sup>1</sup> Aunque sólo para distancia cortas, como mostraremos posteriormente



**Fig. 12.1:** (a) Dependencia de la frecuencia de los modos lineales con  $C$  para  $J = 0$ . (b) Dependencia de los modos lineales con  $J$  para  $C = 0$ . (c) Dependencia de los modos lineales con  $C$  para  $J = 0,08$ . (d) Dependencia de los modos lineales con  $J$  para  $C = 0,08$ . En todos los casos se considera interacción dipolar ( $s = 3$ ).



donde  $\omega_{\text{ph}}(q)$  es la frecuencia de los fonones dada por la relación de dispersión (12.6). La técnica de la FGR ha sido utilizada para obtener el decaimiento tanto para interacciones de primeros vecinos [67] como de largo alcance atractivas [83, 84, 96]. Sólo en el primer caso se puede calcular de manera exacta. Si se consideran interacciones de largo alcance, debe hacerse un desarrollo en serie de la relación de dispersión para vectores de onda pequeños. En ese caso, los límites de la FGR se pueden extender a  $\pm\infty$  y los resultados serán sólo válidos cuando la frecuencia del breather esté cerca de la banda.

Un estudio alternativo sobre el decaimiento de breathers con interacción de largo alcance atractiva se puede encontrar en [26].

### *Función de Green reticular para interacción de largo alcance repulsiva*

Consideremos sólo el efecto del largo alcance ( $C = 0$ ) y supongamos que la frecuencia del breather está cerca de la banda de fonones. Así, el breather deriva del fonón con  $q = \pi$ , por lo que las colas se pueden considerar ondas planas cuya relación de dispersión puede obtenerse mediante un desarrollo en serie de Taylor alrededor de  $q = \pi$  hasta el orden  $q^2$  de la ecuación (12.6):

$$\omega_{\text{ph}}^2(q) = \omega_0^2 + 2J \left[ \eta(s) - \frac{(q - \pi)^2}{2} \eta(s - 2) \right], \quad (12.8)$$

donde  $\eta(s) = \sum_m [(-1)^m / m^s]$  es la función eta de Dirichlet, que está definida para  $s \geq 1$ . Esta función se puede expresar en términos de la función zeta de Riemann  $\zeta(s)$  en la forma [2]:

$$\eta(s) = \begin{cases} (2^{1-s} - 1)\zeta(s) & s > 1 \\ -\ln(2) & s = 1. \end{cases} \quad (12.9)$$

Dado que la función  $\eta(s)$  no está definida para  $s < 1$ , el término en  $(q - \pi)^2$  de la ecuación (12.8) no será analítico para  $s < 3$ . En otras palabras, sólo podemos realizar el desarrollo en serie para  $s \geq 3$ .

Con todo ello, la FGR se puede escribir de la forma:

$$G(n, \omega_b) = \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{(-1)^n \cos(nq)}{\omega_b^2 - \omega_0^2 - J[\eta(s) - q^2 \eta(s - 2)]}. \quad (12.10)$$

Los límites de integración se pueden extender a infinito pues hemos realizado un cambio de variables  $q \leftarrow q - \pi$  y consideramos vectores de ondas muy cercanos a  $\pi$ .

El valor de la FGR es:

$$G(n, \omega_b) = (-1)^n G(0, \omega_b) \exp(-n\xi). \quad (12.11)$$

donde el parámetro de decaimiento  $\xi$  tiene el valor:

$$\xi = \sqrt{\frac{\eta(s-2)J}{\omega_o^2 - \omega_b^2 - 2\eta(s)J}}. \quad (12.12)$$

Sin embargo, tal como se ve en la figura 12.2, el breather tiene un decaimiento potencial para valores  $s = 3$  y  $s = 5$ . Esto se debe a que la aproximación de orden  $q^2$  en la relación de dispersión sólo es válida para distancias cortas, por lo que si queremos dar cuenta del decaimiento a distancias lejanas del centro, hemos de tener en cuenta términos de mayor orden en el desarrollo en serie. Sin embargo, el desarrollo alrededor de  $q = \pi$  incluye términos no analíticos pues la función  $\eta(s)$  no está definida para  $s < 1$ . Tal como se muestra en [83, 197], la existencia de términos no analíticos implica un decaimiento potencial. Por ello, el breather decae exponencialmente hasta una distancia a partir del cual comenzará a hacerlo de manera potencial. Este valor crítico de la distancia aumenta con  $s$ , siendo menor que uno para  $s = 3$  y  $s = 5$ .

La no existencia de términos analíticos en el desarrollo en serie de la relación de dispersión para  $1 < s < 3$  implica un decaimiento potencial del breather en esos casos.

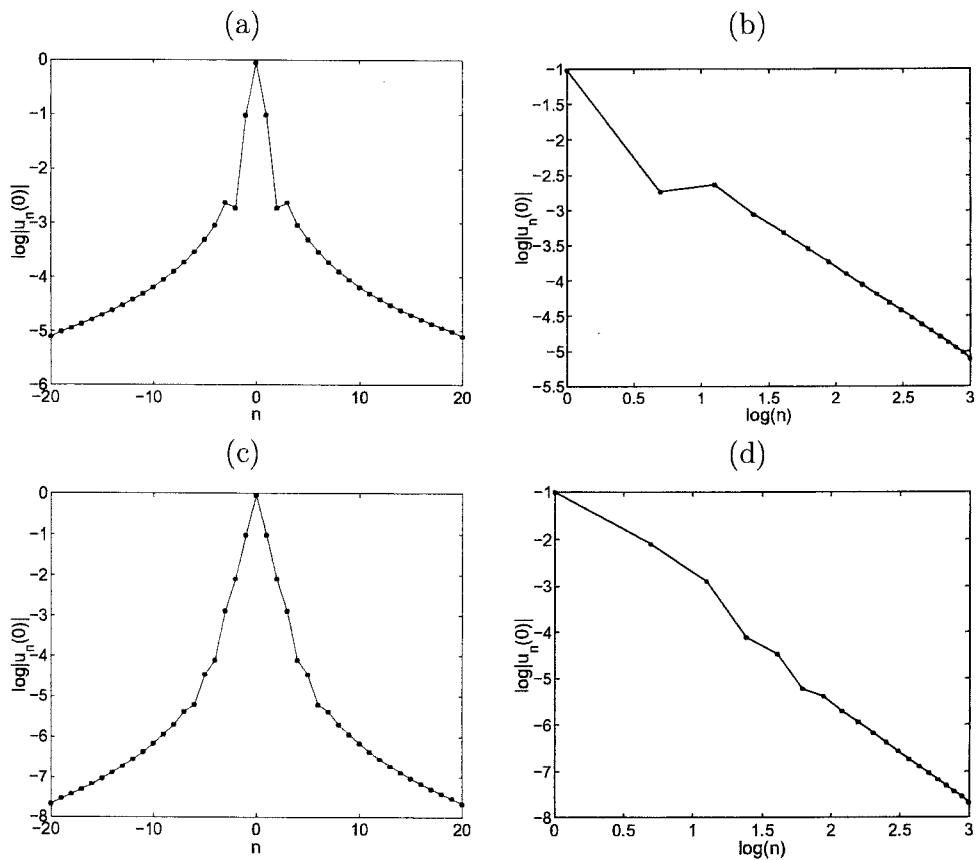
Todos estos resultados son análogos a los que se obtiene para el caso del potencial de largo alcance atractivo con un potencial duro, el cual se comenta brevemente en [83].

### 12.2.3. Patrones de vibración

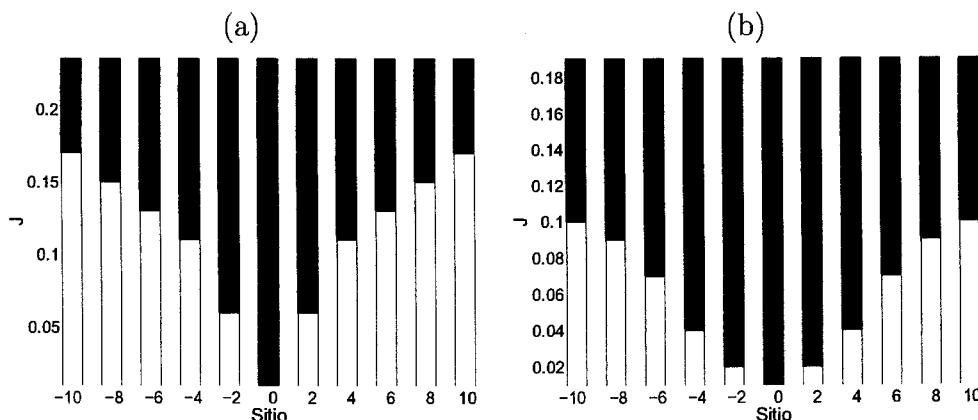
Cuando se considera el patrón de vibración de un breather con  $C = 0$  y  $\omega_b < \omega_o$  se observa que, para  $J$  pequeño, todas las partículas vibran en anti-fase respecto a la central; en consecuencia, el breather no tiene un patrón de vibración en zigzag, tal como sería de esperar si el acoplamiento fuera de corto alcance. A medida que aumenta el valor de  $J$ , las partículas en sitios pares se ponen en fase con el breather hasta que, para un  $J$  tal que la frecuencia del breather esté lo suficientemente cerca de la banda de fonones, el breather tiene el patrón de vibración en zigzag. En otras palabras, el patrón de vibración previsto por la FGR sólo es válido para  $\omega_b$  cerca de la banda de fonones. Este fenómeno se muestra en la figura 12.3. Este comportamiento también aparece cuando se consideran interacciones de largo alcance atractivas con  $\omega_b > \omega_o$ , aunque en los trabajos realizados hasta la fecha [83, 84, 96] no se ha estudiado dicho fenómeno. Por este motivo, vamos a realizar un estudio del comportamiento del patrón de vibración para  $J$  pequeño.

Queremos encontrar de un modo analítico la forma del patrón de vibración cuando se introduce la interacción de largo alcance. Señalemos que, cuando  $J$  es lo suficientemente pequeño ( $|J| < \varepsilon$ ), todas las partículas vibran en anti-fase respecto a la central. Cuando aumenta  $J$ , esta tendencia cambia tal como explicamos anteriormente. En este apartado nos centraremos en el caso de  $|J| < \varepsilon$ .

Para el estudio del patrón de vibración, partimos de las ecuaciones dinámicas del sistema:



**Fig. 12.2:** Representación de un breather con  $C = 0$ ,  $J = 0,05$  y  $\omega_b = 0,8$ . Las figuras de la izquierda representan al caso dipolar ( $s = 3$ ), mientras que las de la derecha corresponden a  $s = 5$ . Como se puede observar, el decaimiento del breather es potencial, siendo la forma del decaimiento en el centro distinto del de las colas. Nótese que en las figuras de la derecha, el eje X corresponde a  $\log(n)$ .



**Fig. 12.3:** Evolución con  $J$  del patrón de vibración de los breathers para  $C = 0$ . El color negro indica vibraciones en fase (es decir  $u_n(0) > 0$ ), mientras que el blanco corresponde a vibraciones en anti-fase. (a) representa el caso dipolar ( $s = 3$ ), mientras que (b) lo hace para con  $s = 5$ . En ambos casos,  $\omega_b = 0,8$ .

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + J \sum_{i>0} \frac{u_{n+i} + u_{n-i}}{i^s} = 0. \quad (12.13)$$

La solución para  $n = 0$  se puede obtener fácilmente pues, al ser  $|J| < \varepsilon$ , se puede considerar que el sistema está desacoplado y la solución correspondiente sería la de un oscilador aislado.

En el caso  $n \neq 0$ , las partículas vibran con pequeña amplitud, por lo que no podemos ignorar los términos debidos al acoplamiento, pero sí podemos suponer que el potencial on-site es lineal, es decir,  $V'(u_n) \approx \omega_o^2 u_n$  para  $n \neq 0$ . Tras un poco de álgebra se llega a:

$$u_n = -\frac{(2n)^s J}{(2n)^s \sqrt{\omega_o^2 - \omega_b^2} + 1} \left[ \frac{u_o}{n^s} + \sum_{i=1}^{n-1} \left( \frac{1}{(n-i)^s} + \frac{1}{(n+i)^s} \right) u_i \right], \quad (12.14)$$

expresión a partir de la cual se pueden obtener, por recurrencia, todos los valores de  $u_n$ . Si se analiza esta ecuación con detenimiento se observa que  $u_n \sim -J u_o n^{-s}$  cuando  $|J| < \varepsilon$ , ya que el término dominante en la suma del corchete es  $u_o$ . Por ello, *el signo de  $z_n$  será siempre opuesto al de  $z_o$* , lo cual explica el comportamiento del patrón de vibración. Además, se obtiene que el breather decae de forma potencial:  $u_n \propto n^{-s}$ .

En el caso de que la interacción tenga un alcance finito, se observa que el patrón de vibración sigue un comportamiento distinto. Si  $L$  es el alcance de la vibración, el patrón de vibración será de la forma descrita a continuación: los  $L$  primeros vecinos vibran en anti-fase; los vecinos entre  $L + 1$  y  $2L$  en fase; y así sucesivamente.

Este patrón se explica de manera similar al caso de la interacción de alcance infinito. Así, para  $1 < n \leq L$ , se llega a la expresión:

$$u_n = -\frac{J}{\sqrt{\omega_o^2 - \omega_b^2}} \left[ \frac{u_o}{n^s} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{u_i}{(L-i)^s} \right] \sim -\frac{Ju_o}{n^s}. \quad (12.15)$$

Como se puede comprobar, el término dominante vuelve corresponder a  $u_o$ , por lo que los  $L$  primeros vecinos vibran en anti-fase.

Sin embargo, cuando  $L < n \leq 2L$ , la ecuación (12.15) se transforma en:

$$u_n = -\frac{J}{\sqrt{\omega_o^2 - \omega_b^2}} \left[ \sum_{i=L}^{n-1} \frac{u_i}{(n - (2L - i))^s} \right] \sim -\frac{Ju_L}{(n - L)^s}, \quad (12.16)$$

por lo que el término dominante ahora corresponde a  $u_L$ , el cual tiene signo opuesto a  $u_o$ . Así, en la zona  $L < n \leq 2L$ , el breather vibra en fase. Este razonamiento se sigue aplicando sucesivamente, por lo que se llega a la conclusión de que el signo de  $u_n$  cambia cada  $L$  veces.

#### 12.2.4. Algunos comentarios acerca del caso $C \neq 0$

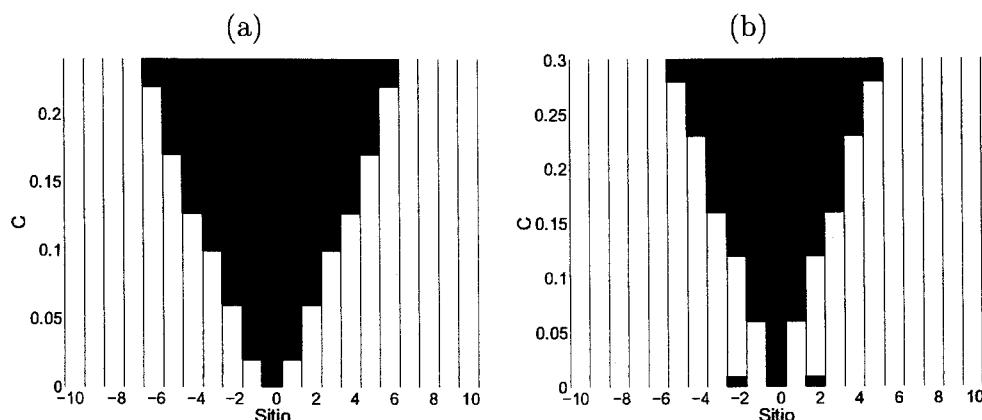
En el caso  $C \neq 0$ , ocurren ciertas variaciones respecto al caso  $C = 0$ . De ellas, consideraremos el rango de existencia y el patrón de vibración. A la luz de la figura 12.4 se puede observar que cuando se fija  $J$  ocurre lo siguiente: al aumentar  $C$  hasta un valor cercano a  $J$ , el sistema tiende a tener todas las partículas en anti-fase respecto a la central. Cuando  $C > J$ , las partículas vibran en fase, comenzando por las más cercanas a la central para ir aumentando el número de ellas con el valor de  $C$ .

Como vimos en la figura 12.1, cuando  $C > J$ , la banda de fonones se comporta aproximadamente como en el caso  $J = 0$ . Por otro lado, veremos en la próxima sección que, cuando  $J < C$ , el breather deja de existir debido a una bifurcación de extinción, la cual aparece mucho antes que la resonancia con fonones. Esto quiere decir que en el caso de  $J$  pequeño (para el que no aparezca la bifurcación de extinción), el breather dejará de existir cuando el segundo armónico resuene con el fonón del borde superior de la banda, que corresponde a  $q = \pi$ <sup>2</sup>. Así, para un valor dado de  $J$ , el valor de  $C$  para el que tiene lugar la resonancia es:

$$C_{\text{res}} = \omega_b^2 - \frac{\omega_o^2}{4} + 2J\eta(s). \quad (12.17)$$

En consecuencia, para un valor fijo de  $\omega_b$ , el rango de existencia del breather aumenta con  $J$ .

<sup>2</sup> El breather puede convertirse en phonobreather pues la resonancia se produce con el segundo armónico [139, 151, 152]



**Fig. 12.4:** Evolución con  $C$  del patrón de vibración de los breathers. El color negro indica vibraciones en fase (es decir  $u_n(0) > 0$ ), mientras que el blanco corresponde a vibraciones en anti-fase. (a) representa  $J = 0,02$  y (b) lo hace para  $J = 0,06$ . En ambos casos,  $s = 3$  y  $\omega_b = 0,8$ .

### 12.3. Existencia de breathers estacionarios y móviles. Bifurcaciones

#### 12.3.1. Tipos de bifurcaciones

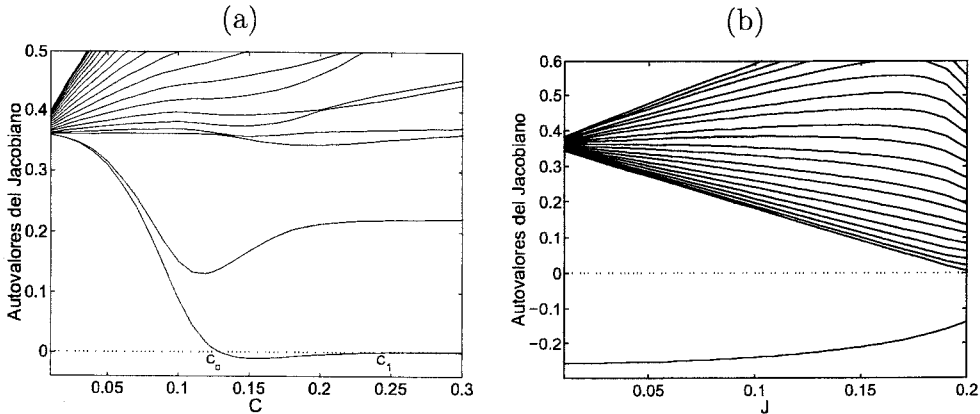
En esta sección vamos a analizar la aparición de bifurcaciones cuando se varían los parámetros  $C$  y  $J$ . La interacción de largo alcance va a ser de tipo dipolar ( $s = 3$ ). Veremos que aparecen dos tipos de bifurcaciones <sup>3</sup>:

- **Bifurcaciones de estabilidad:** Son las bifurcaciones de intercambio de estabilidad explicadas en el Capítulo 8, las cuales son necesarias para la existencia de breathers móviles. Se pueden detectar bien porque un multiplicador de Floquet correspondiente a un modo localizado se sale del círculo por  $\theta = 0$ , o bien porque un autovalor localizado del jacobiano cambia su signo.
- **Bifurcaciones de extinción:** ocurren cuando un autovalor del jacobiano localizado se anula y el breather no es continuable. No se corresponden con ninguna salida del círculo unidad por parte de los multiplicadores de Floquet.

Como podemos apreciar, el análisis de las bifurcaciones es crucial para determinar el rango de existencia de breathers estacionarios y móviles.

Un punto importante a destacar es que los valores de los parámetros para los que aparecen estas bifurcaciones son independientes del número de partículas

<sup>3</sup> En realidad, existen otras bifurcaciones, pero centraremos nuestra atención sólo en éstas porque son las que afectan a la existencia de breathers estacionarios y móviles



**Fig. 12.5:** Evolución de los autovalores del jacobiano cercanos a cero para  $s = 3$ ,  $\omega_b = 0,8$  y (a)  $J = 0$  y (b)  $C = 0$ . Pueden producirse bifurcaciones cuando un autovalor se anula. En el primer caso, se observa la existencia de dos bifurcaciones de estabilidad en los puntos  $C_0$  y  $C_1$ , mientras que en el segundo, la única bifurcación se debe a la anulación del autovalor correspondiente a un fonón, es decir, el breather deja de existir debido a la resonancia con los fonones.

del sistema, ya que implican modos localizados [19]. Este hecho ha sido también comprobado numéricamente, aumentando y disminuyendo el número de partículas.

A continuación veremos lo que ocurre a los 1sB y 2sB en los dos casos límites ( $C = 0$  y  $J = 0$ ), para después pasar al caso general. Recordemos que todos estos casos se refieren a breathers en un potencial de Morse.

### 12.3.2. Bifurcaciones con sólo interacción atractiva de primeros vecinos ( $J = 0$ )

Este caso, en el que  $C$  es el único parámetro, ha sido expuesto en el Capítulo 4 (figuras 4.4 y 4.9). No obstante, resumimos aquí los aspectos más relevantes.

Cuando el parámetro  $C$  varía, existen dos bifurcaciones de estabilidad en los puntos  $C_0$  y  $C_1$ . Como se puede observar en la figura 12.5, existen dos autovalores que se separan de la banda de fonones y uno de ellos es responsable de la bifurcación de estabilidad. En el caso del 1sB, éste será estable en  $(0, C_0)$ , inestable en  $(C_0, C_1)$  y estable por encima de  $C_1$ , tal como se muestra en la Sección 4.5.3.

### 12.3.3. Bifurcaciones con sólo interacción repulsiva de largo alcance ( $C = 0$ )

Este caso es parecido al de  $C < 0$  (ver figura 4.5). Cuando aumenta  $J$  lo único que ocurre es que la banda de fonones se expande, apareciendo sólo una bifurcación debida a la destrucción del breather al resonar con los fonones (figura 12.4). Esto

ocurre cuando el primer armónico del breather resuena con el fonón con  $q = \pi$ , que es el que corresponde al borde inferior de la banda. Así, siguiendo la ecuación (12.6) tenemos que, en el caso de un sistema infinito, la resonancia ocurre cuando:

$$J_{\text{res}} = \frac{\omega_o^2 - \omega_b^2}{2\eta(s)}. \quad (12.18)$$

Al no haber bifurcaciones de estabilidad, se llega a la siguiente conclusión: *en una red de tipo Klein-Gordon con potencial de Morse on-site, no existen breathers móviles cuando sólo se tiene en cuenta la interacción dipolar ( $C = 0$ ).*

#### 12.3.4. Caso general

En el caso general, es interesante separar los efectos en 1sB y 2sB, pues cada uno de ellos tendrá bifurcaciones distintas:

##### 1sB

Existe un valor crítico de  $J = J_{c1}$ , con las siguientes características:

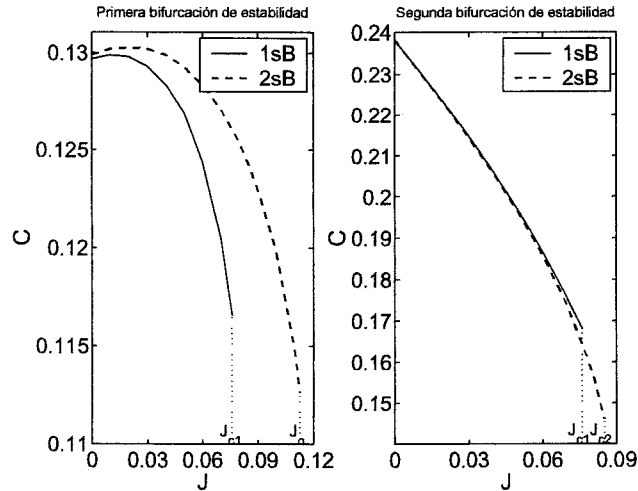
1. Para  $J < J_{c1}$ , el comportamiento es cualitativamente similar al observado para  $J = 0$ , es decir, existen bifurcaciones de estabilidad en dos puntos,  $C_o(J)$  y  $C_1(J)$ .  $C_o(J)$  es, además, una función creciente en casi todo este intervalo.
2. Para  $J > J_{c1}$ , no existen bifurcaciones de estabilidad porque hay una bifurcación de extinción para un valor de  $C = C_E(J) < C_o(J)$ , por encima de la cual, el breather no es continuable. Por tanto, no se pueden generar breathers móviles a partir del 1sB si  $J > J_{c1}$ .

##### 2sB

En el caso del 2sB, existen dos valores críticos de  $J$ . Uno es  $J_{c2}$ , el cual es análogo a  $J_{c1}$ ; el otro es  $J_o$ , al cual llamaremos el *límite de movilidad de breathers*, por motivos que veremos a continuación. Estos valores críticos definen tres intervalos de  $J$  con las siguientes propiedades:

1.  $J \in [0, J_{c2})$ . El breather es inestable para pequeños valores de  $C$ : Cuando  $C$  aumenta, aparecen dos bifurcaciones de estabilidad en  $C_o(J)$  y  $C_1(J)$ .
2.  $J \in (J_{c2}, J_o)$ . Sólo aparece la primera bifurcación de estabilidad en  $C_o(J)$ . Cuando aumenta  $C$ , el breather se extingue en  $C_E(J)$ . En  $J = J_o$ ,  $C_o(J_o) = C_E(J_o)$ . Además, ese valor crítico es igual a  $J_o$ , es decir,  $J_o = C_o(J_o) = C_E(J_o)$ .
3.  $J > J_o$ . La única bifurcación que aparece es de extinción.





**Fig. 12.6:** Curvas de bifurcación correspondientes a la primera y segunda bifurcación de estabilidad para los 1sB y 2sB. Los parámetros del sistema son  $\omega_b = 0,8$  y  $s = 3$ . Los valores críticos son  $J_{c1} = 0,076$ ,  $J_{c2} = 0,085$  y  $J_o = 0,11263$ . El 1sB es inestable en el intervalo entre las dos bifurcaciones. La estabilidad del 2sB sigue el comportamiento opuesto.

### 12.3.5. Discusión

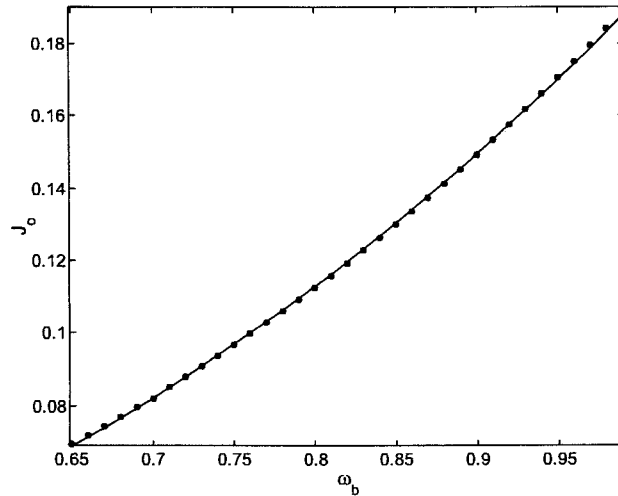
El análisis de las bifurcaciones de los 1sB muestra que sólo pueden generarse breathers móviles para  $J < J_{c1}$ . Análogamente, los 2sB pueden moverse para  $J < J_{c2}$ , siendo  $J_{c2} > J_{c1}$ . Estos últimos también pueden moverse para  $J \in [J_{c2}, J_o]$ . Así,  $J_o$  establece el valor máximo de  $J$  y el valor mínimo de  $C$  para el cual se pueden encontrar breathers móviles, es decir, *no hay breathers móviles para  $C < J_o$  ni para  $J > J_o$* . Esta es la razón por la cual  $J_o$  se llama el *límite de movilidad de breathers*.

Las curvas de bifurcación para las bifurcaciones de estabilidad se muestran en la figura 12.6. En la figura 12.7 se representa la dependencia del límite de movilidad de breathers con la frecuencia. Esta curva se ajusta muy bien a la ecuación:

$$J_o = A\omega_b^r, \quad (12.19)$$

donde  $A = 0,1921 \pm 0,0002$  y  $r = 2,377 \pm 0,005$ . Así, el rango de existencia de breathers móviles puede determinarse, para un valor dado de la frecuencia, de la siguiente manera:

- El valor mínimo de  $C$  es el límite de movilidad de breathers (12.19). El valor máximo de  $C$  viene dado por la resonancia con los fonones (12.17).
- Obviamente, el valor mínimo de  $J$  es 0. El valor máximo de  $J$  es el límite de movilidad de breathers (12.19).



**Fig. 12.7:** Dependencia del límite de movilidad de breathers  $J_0$  con respecto a la frecuencia del breather  $\omega_b$  para  $s = 3$ .

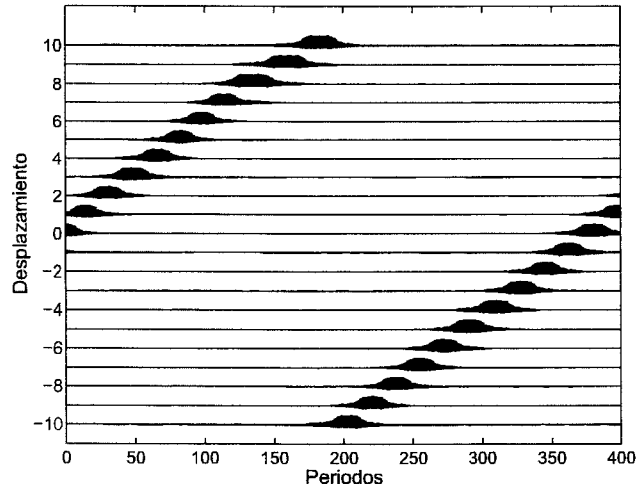
Finalmente, de tenerse en cuenta que este rango de existencia se modifica debido a las propiedades de los breathers móviles.

## 12.4. Breathers móviles

Una vez conocidas las condiciones necesarias para la existencia de BMs, el siguiente paso es obtenerlos y ver sus propiedades. Para ello, haremos uso de nuevo de las técnicas expuesta en el Capítulo 8, en concreto del método del modo marginal. Veremos que la interacción de largo alcance, al ser repulsiva, obstaculizará el movimiento del breather, haciendo que éste emita mayor cantidad de fonones llegando incluso a pararse. Un ejemplo de breather móvil con interacción de largo alcance es el de la figura 12.8. En él se aprecia un breather que se mueve durante 350 periodos. Si se analiza con detenimiento, se puede observar que después de todo ese tiempo el breather ha emitido un 0,12 % de radiación, valor que es grande comparado con la radiación inicial, que era sólo del 0,01 %.

A continuación expondremos una serie de resultados numéricos obtenidos cuando la interacción de largo alcance es dipolar ( $s = 3$ ) y la frecuencia es  $\omega_b = 0,8$ :

1. A partir del estudio de las bifurcaciones de breathers estacionarios, se obtiene que no existen breathers móviles para  $J > J_0 \approx 0,1162$ , pero existe un valor menor,  $J = J_{c1} \approx 0,076$ , por encima del cual, no pueden moverse los 1sB.
2. Para  $J$  pequeño, los 1sB y 2sB pueden moverse para valores de  $C$  por encima de la primera bifurcación de estabilidad. Estos valores de  $J$  son  $J \lesssim 0,5$  y  $J \lesssim 0,4$ , respectivamente.



**Fig. 12.8:** Breather móvil para  $J = 0,06$ ,  $C = 0,1244$ ,  $s = 3$ ,  $\omega_b = 0,8$  y  $\lambda = 0,1$ .

3. Para  $J$  mayor:

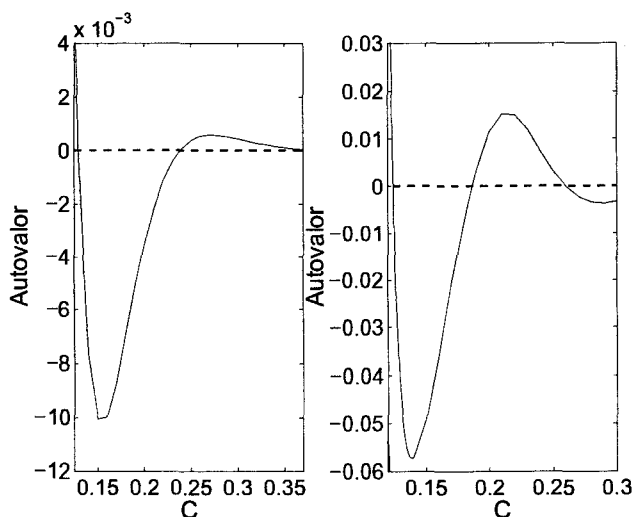
- a) El 1sB puede moverse sólo para valores de  $C$  cercanos a la primera bifurcación de estabilidad y para valores de  $C$  por encima de la segunda bifurcación de estabilidad.
- b) El 2sB puede moverse sólo cuando  $C$  es mayor que el valor para el que aparece la segunda bifurcación de estabilidad.

La explicación de estos fenómenos es que el breather debe ser cuasi-estable para poderse mover (ver Capítulo 8). Esto se plasma en el hecho de que el autovalor del jacobiano responsable de las bifurcaciones de estabilidad debe ser cercano a cero. En la figura 12.9 puede observarse que para  $J = 0$ , valor en el que es posible la movilidad para todo  $C > C_o$ , este autovalor está más cerca de cero que en el caso  $J = 0,06$  en el que el breather no siempre se puede mover.

Todos estos resultados se resumen en la figura 12.10, en la que se muestra el rango de existencia de breathers móviles para  $\omega_b = 0,8$ .

4. La dependencia con los parámetros de la masa efectiva del BM es bastante compleja. No obstante, pueden establecerse algunas características generales que se pueden observar en la figura 12.11:

- a) La masa efectiva tiene su valor máximo en el primer intercambio de estabilidad.
- b) Este valor máximo aumenta con  $J$ .



**Fig. 12.9:** Autovalor del jacobiano que produce la bifurcación de estabilidad frente a  $C$  para  $J = 0$  (a) y  $J = 0,06$  (b). Nótese que este autovalor está más cerca de cero para  $J = 0$  que para  $J = 0,06$  (ver texto). La proximidad a cero de este autovalor es una condición necesaria para la movilidad.

5. La suavidad del movimiento decrece cuando aumenta  $J$ . En otras palabras, la interacción de largo alcance repulsiva acentúa el carácter discreto del sistema. Esto puede observarse en la figura 12.12.

### 12.5. Aplicación al ADN

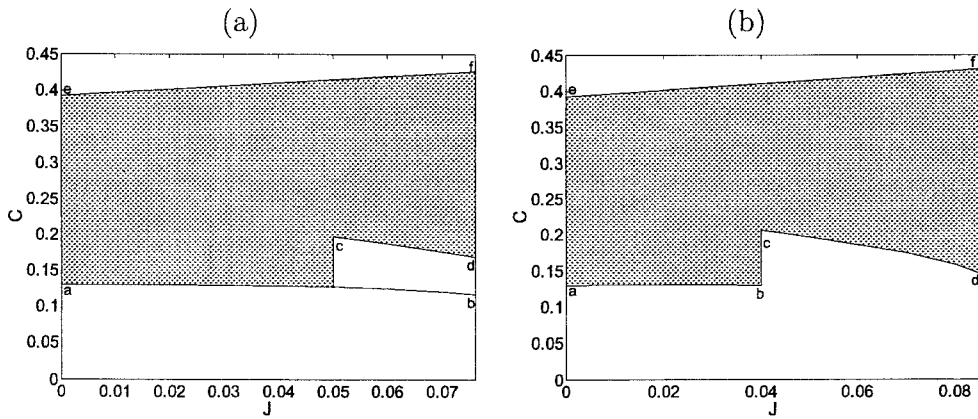
Todos estos resultados, junto con los datos de los Capítulos 10 y 11, nos ayudarán a establecer el efecto de la interacción dipolar en la dinámica del ADN.

Recordemos que con los valores de los parámetros  $D = 0,04$  eV,  $b = 4,45$  Å<sup>-1</sup> y  $m = 300$  uma, se tenía una frecuencia característica  $\omega_0 = 7,05 \times 10^{12}$  s<sup>-1</sup>. Así, las frecuencias de los modos no lineales, que deben estar en el intervalo  $\omega_b \in (0,67, 1)\omega_0$  para que existan breathers móviles, oscilarán entre  $4,5 \times 10^{12}$  s<sup>-1</sup> y  $7,05 \times 10^{12}$  s<sup>-1</sup>.

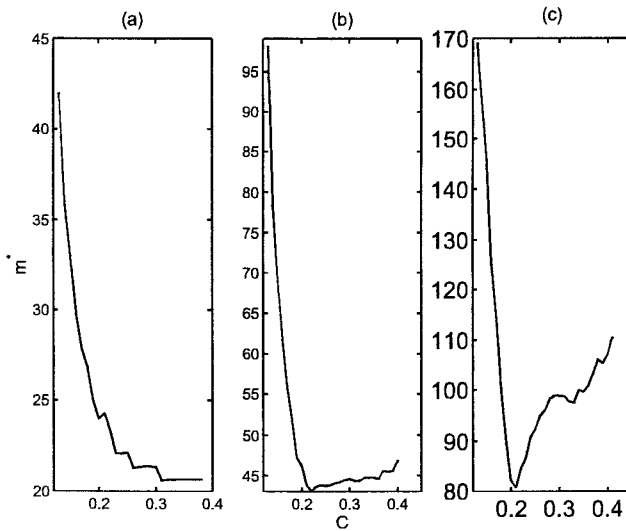
Por otro lado, el valor mínimo de  $C$  para que existan breathers móviles es el límite de movilidad de breathers (12.19), el cual oscila entre  $J_0 = 0,0690$  y  $J_0 = 0,1921$  en unidades adimensionales. Recordemos que este valor coincide también con el máximo de  $J$ . Así, para que existan breathers móviles, la constante de apilamiento debe valer (10.10):

$$k \geq 0,11 \text{ eV/Å}^2, \quad (12.20)$$

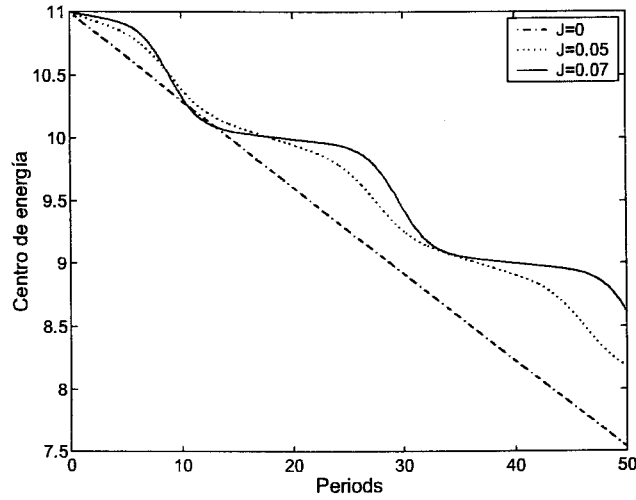
mientras que la constante dipolar debe cumplir (11.13):



**Fig. 12.10:** Rango de existencia de BMs obtenidos perturbando 1sB (a) o 2sB (b). a-b es la curva correspondiente a la primera bifurcación de estabilidad, c-d corresponde a la segunda y e-f lo hace con la curva de resonancia con los fonones. Los parámetros del sistema son  $\omega_b = 0,8$  y  $s = 3$ .



**Fig. 12.11:** Dependencia de la masa efectiva del breather con respecto a  $C$  para  $J = 0$  (a),  $J = 0,03$  (b) y  $J = 0,05$  (c). Nótese que el valor máximo de la masa se corresponde con la primera bifurcación de estabilidad (mínimo valor de  $C$ ), y que la masa para  $J = 0,05$  es siempre mayor que para  $J = 0$ . En consecuencia, la movilidad disminuye cuando aumenta la constante de acoplamiento dipolar  $J$ .



**Fig. 12.12:** Movimiento del centro de energía del breather móvil para distintos valores de la constante de acoplamiento dipolar  $J$ , siendo el valor de la constante de acoplamiento de apilamiento  $C$  el correspondiente al primer intercambio de estabilidad. Nótese que el movimiento se hace menos regular al aumentar  $J$ .

$$Q \leq 0,30 \text{ eV/\AA}^2. \quad (12.21)$$

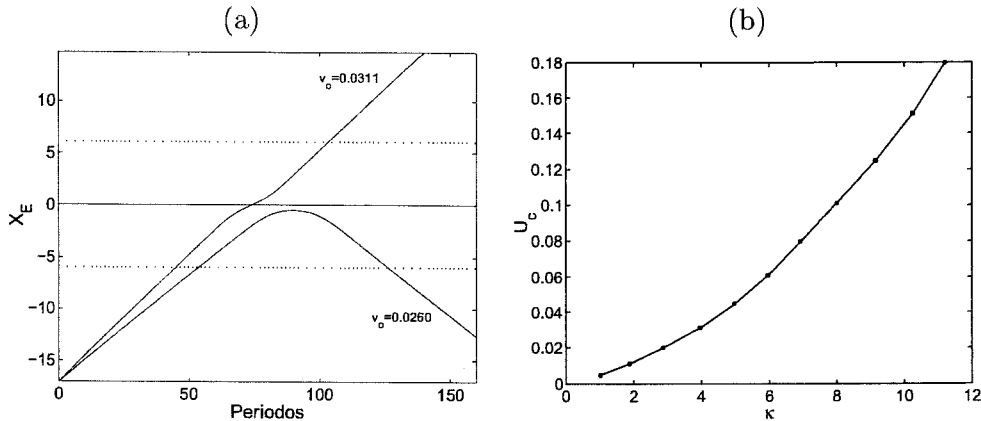
Como vimos en el Capítulo 11, el valor de esta constante obtenida mediante cálculos químico-cuánticos es menor que  $1,10 \times 10^{-3} \text{ eV/\AA}^2$ , valor que es cuatro órdenes de magnitud menor que el valor máximo. Sin embargo, este valor no debe tomarse como totalmente verdadero mientras que no se obtenga experimentalmente.

Señalemos que la interacción dipolar permite disminuir el valor umbral de la constante de apilamiento necesario para la movilidad de breathers.

## 12.6. Breathers en ADN curvado

A continuación vamos a mostrar los efectos de la curvatura en el movimiento de breathers. Para ello, se utilizan las ecuaciones para una cadena curvada en forma de una parábola obtenidas en el Capítulo 11 para calcular un breather estático, el cual es lanzado posteriormente hacia el vértice de la parábola.

Tal como se muestra en [58], sólo ocurren dos efectos cuando el breather llega al vértice: o bien lo atraviesa, o bien rebota, dependiendo de la energía de lanzamiento del breather  $E$ . Llamaremos energía crítica  $U_c$  al valor que separa ambos comportamientos. Además, en el primer caso, el BM se frena hasta que alcanza su velocidad mínima en el vértice para posteriormente recuperar la velocidad de inci-



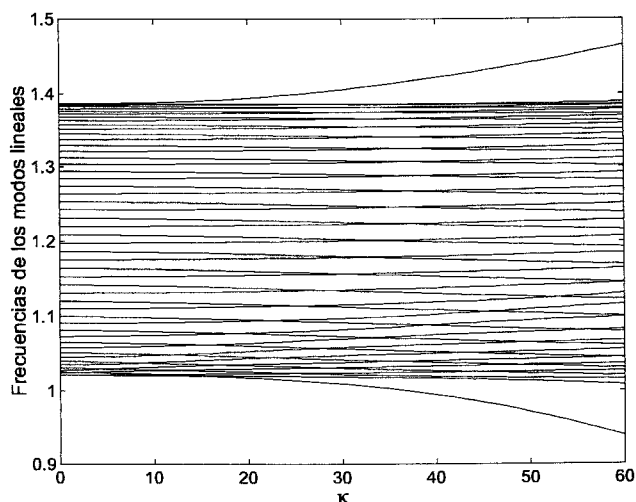
**Fig. 12.13:** (a) Evolución del centro de energía para dos velocidades iniciales distintas. La curvatura vale  $\kappa = 2$ . (b) Energía crítica en función de la curvatura. Los parámetros del sistema son  $C = 0,24$ ,  $J = 0,02$  y  $\omega_b = 0,8$ .

dencia. Otro efecto importante es que la energía crítica aumenta con la curvatura. Estos comportamientos se muestran en la figura 12.13.

Como se puede comprobar, un BM en presencia de curvatura se comporta como una partícula libre que atraviesa una barrera de potencial. Este efecto ocurre también en una cadena recta con una impureza pequeña en el pozo de potencial de valor  $\alpha > 0$  (ver Capítulo 9). Esto se debe a que para los valores de los parámetros  $C$  y  $J$  tales que exista el BM, no hay modos lineales que se localicen apreciablemente siempre que la curvatura no sea muy grande. Para curvaturas grandes, se observa la existencia de dos modos locales (figura 12.14). A partir de uno de ellos derivará el breather de impureza; el otro tendrá un patrón de vibración que entra en conflicto con las colas del breather de impureza. Por ello, el breather móvil se comporta como si estuviera en la región con  $\alpha > 0$ , y no aparece atrapamiento, ni la partícula en el vértice se excita, ni el BM se acelera cuando se acerca al vértice. Este hecho confirma la hipótesis de atrapamiento del Capítulo 9.

La barrera de potencial puede calcularse mediante los métodos explicados en el Capítulo 9. Un ejemplo de ello es dado en la figura 12.15.

Para los valores de los parámetros usados en este estudio ( $\omega_b = 0,8$ ,  $C = 0,24$  y  $J = 0,02$ ), hemos observado que la radiación fonónica no es despreciable si  $E \gtrsim 0,03$ , en cuyo caso las propiedades de los breathers móviles cambian. Así, para tener un buen acuerdo entre los métodos de cálculo de la barrera, la curvatura de la parábola debe ser  $\kappa \lesssim 4$  (ver figura 12.13). En caso contrario, el valor de la energía necesario para cruzar el vértice sería tan alto que la radiación fonónica alteraría el movimiento. En concreto, el valor  $\kappa = 4$  es muy alto y no es razonable que aparezca en el ADN. En la figure 12.15 se muestra este efecto para  $\kappa = 6$ . En este caso, no hay acuerdo entre los diferentes métodos de cálculo de la barrera y aparecen una especie de dientes de sierra en la barrera calculada a partir de los



**Fig. 12.14:** Frecuencias de los modos lineales en función de  $\kappa$  para  $C = 0,24$ ,  $J = 0,02$ ,  $\omega_b = 0,8$  y  $s = 3$ . Obsérvese que aparecen modos locales para valores muy altos de  $\kappa$ , los cuales no tienen sentido.

puntos de retorno.

### 12.7. Modelos curvados de hélices $\alpha$ en proteínas

La configuración de hélices  $\alpha$  en proteínas es otro sistema que puede modelarse mediante una cadena de osciladores. En esta sección describiremos brevemente el modelo y comprobaremos que se cumple la hipótesis de atrapamiento formulada en el Capítulo 9, tal como ocurre en nuestro modelo de ADN curvado.

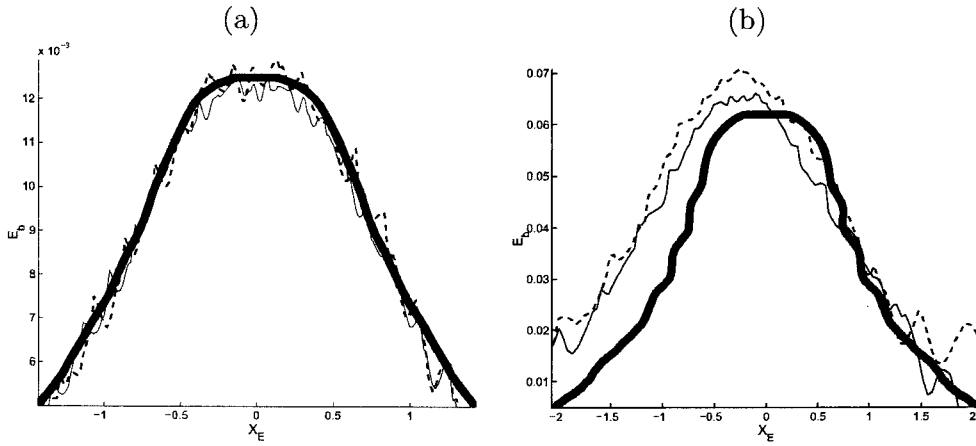
En las hélices  $\alpha$  existen grupos de péptidos que tienen momento dipolar paralelo a la cadena y grupos  $C = O$ , conocidos como amida-I, que interactúan mediante fonones acústicos. A diferencia de los que ocurre con el ADN, basta con tener en cuenta interacciones de primeros vecinos para que el sistema sienta la geometría de la cadena. Un esquema del modelo se muestra en la Figura 12.16.

A continuación describimos el modelo. Para ello designamos la posición del  $n$ -ésimo aminoácido por  $\vec{r}_n$ . La distancia entre ellos es una constante  $a$ , es decir,  $a = |\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_n|$ . La dirección de los momentos dipolares viene dada por los vectores unitarios  $\hat{t}_n = \frac{(\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_n|}$ , mientras que los momentos serán  $\vec{p}_n = p_n \hat{t}_n$ . Así, el hamiltoniano del sistema es de la forma:

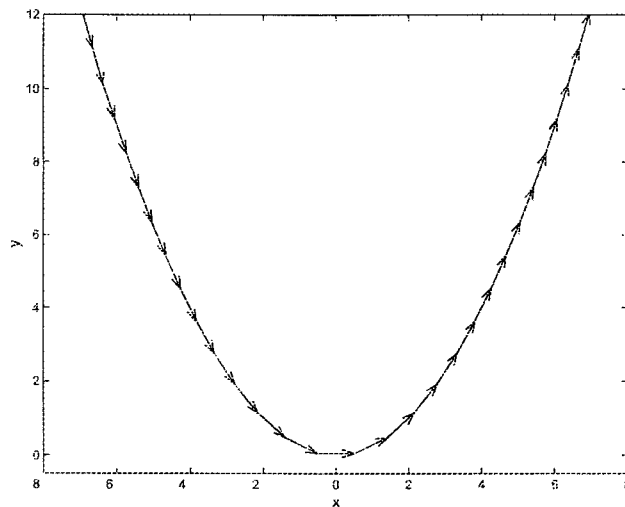
$$H = \sum_n \frac{1}{2} \dot{u}_n^2 + V(u_n) + \frac{1}{2} C (u_{n+1} - u_n)^2 + J (\hat{t}_{n+1} - \hat{t}_n)^2 u_n u_{n+1}, \quad (12.22)$$

donde  $V(u_n)$  es el potencial on-site (que es de tipo Morse),  $C$  es la constante de

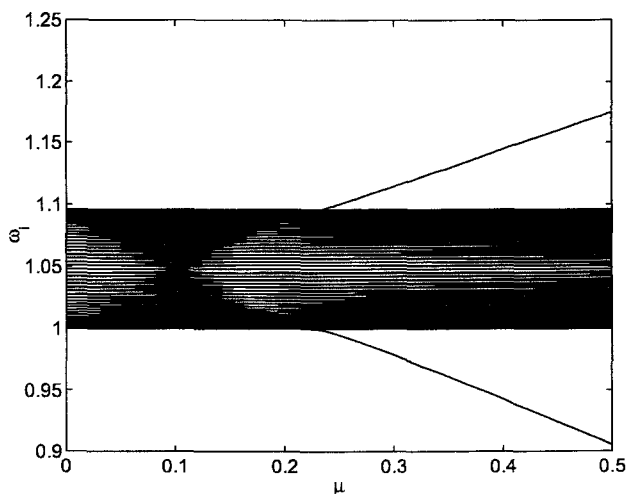




**Fig. 12.15:** (a) Barrera de potencial calculada mediante los puntos de rebote (línea continua gruesa) y usando la ecuación (9.4) para  $E = 0,0162$  (línea continua fina) y  $E = 0,0200$  (línea discontinua). El valor de la curvatura es  $\kappa = 2$ . (b) Barrera de potencial calculada mediante los puntos de rebote (línea continua gruesa) y usando la ecuación (9.4) para  $E = 0,0722$  (línea continua fina) y  $E = 0,0800$  (línea discontinua). El valor de la curvatura es  $\kappa = 6$ .



**Fig. 12.16:** Esquema del modelo de hélice  $\alpha$ .



**Fig. 12.17:** Dependencia con  $\mu$  del espectro de fonones para una cadena de hélice  $\alpha$  para  $C = 0,05$  y curvatura  $\kappa = 1$ . Como se puede observar, la forma del espectro es similar al caso del ADN curvado.

acoplo de apilamiento y  $J$  es la constante de acoplo dipolar.

Un estudio de breathers móviles en cadenas de hélices  $\alpha$  curvadas muestra un resultado similar al ADN curvado, es decir, el breather móvil se comporta como una partícula libre en una barrera de potencial. Este hecho sirve una vez más de comprobación de la hipótesis de atrapamiento del Capítulo 9, pues existe un modo lineal que tiene un patrón de vibración distinto al del breather. El espectro de los modos lineales, que se muestra en la figura 12.17 es similar al que aparece en el modelo de ADN curvado.

## 12.8. Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado las propiedades de breathers estacionarios y móviles en un modelo de ADN con interacción dipolar. Respecto a los breathers estacionarios podemos extraer las siguientes conclusiones:

**Conclusión 12.1:** *Cuando se consideran las interacciones de apilamiento y dipolar por separado, los breathers existen hasta que se produce la resonancia con la banda de fonones. Sin embargo, cuando se consideran ambas interacciones a la vez, existe un valor crítico de la constante de acoplo dipolar por encima del cual el breather desaparece al aumentar la constante de acoplo de apilamiento.*

**Conclusión 12.2:** *El breather decae potencialmente cuando sólo existe la interacción dipolar.*

**Conclusión 12.3:** *Para acoplos pequeños y con sólo interacción dipolar, todas las partículas vibran en oposición de fase respecto a la central si el alcance de la interacción es infinito. Si este último estuviera restringido a  $n$  vecinos, los  $n$  primeros vibrarían en oposición de fase, los  $n$  siguientes en fase, los  $n$  siguientes en oposición de fase, y así sucesivamente.*

**Conclusión 12.4:** *La interacción dipolar expande el rango de existencia de breathers estacionarios.*

Respecto a los breathers móviles se han obtenido los siguientes resultados:

**Conclusión 12.5:** *No existen breathers móviles cuando sólo se considera la interacción dipolar ( $C = 0$ ).*

**Conclusión 12.6:** *Existe un valor crítico de la constante de acoplo dipolar que denominamos Límite de movilidad de breathers, el cual depende sólo de la frecuencia del breather y delimita la región de existencia de breathers móviles. Así, la condición necesaria (pero no suficiente) para que existan breathers móviles es que los parámetros se encuentren en el siguiente rango:*

- *El valor mínimo de  $C$  es el límite de movilidad de breathers. El valor máximo de  $C$  viene dado por la resonancia con los fonones.*
- *El valor mínimo de  $J$  es 0. El valor máximo de  $J$  es el límite de movilidad de breathers.*

**Conclusión 12.7:** *Como resultado de las simulaciones numéricas se observa que el breather puede moverse sólo cuando es cuasi-estable.*

**Conclusión 12.8:** *La movilidad del breather, medida mediante su masa efectiva, disminuye al aumentar el acoplo dipolar.*

**Conclusión 12.9:** *La suavidad del movimiento disminuye cuando aumenta el acoplo dipolar. Es decir, la interacción dipolar acentúa el carácter discreto del sistema.*

Finalmente, hemos considerado un modelo de ADN curvado, obteniendo los siguientes resultados:

**Conclusión 12.10:** *Para un valor fijo de la curvatura, el breather rebota o cruza la zona curvada dependiendo de su velocidad. Si la velocidad es fija, el breather cruzará la zona curvada para curvaturas bajas, rebotando cuando la curvatura es alta. En otras palabras, el comportamiento de un breather móvil en la cadena curvada se asemeja al de una partícula libre en una barrera de potencial.*

---

**Conclusión 12.11:** *No existe atrapamiento en cadenas de ADN curvadas. Este hecho confirma la hipótesis de atrapamiento formulada en el Capítulo 9, pues las entidades localizadas del sistemas son un breather centrado en el vértice de la zona curvada y un modo local debido a la curvatura, el cual vibra con un patrón de vibración opuesto al del breather.*

**Conclusión 12.12:** *El comportamiento del breather móvil en una cadena de hélices  $\alpha$  de proteínas es cualitativamente similar al observado en ADN curvado. Este hecho también está de acuerdo con la hipótesis de atrapamiento del Capítulo 9.*

## 13. Conclusiones

En este apartado se recogen de un modo unificado los principales resultados que se han obtenido en la realización de la presente tesis:

1. Se han recopilado y ampliado los métodos de cálculo de breathers en el espacio de Fourier, haciendo especial énfasis en el tratamiento basado en la Transformada de Fourier Discreta.
2. Se han recopilado y ampliado resultados relativos a la estabilidad lineal de breathers, desarrollando la variante del Teorema de Estabilidad de Multi-breathers para potenciales asimétricos, y determinando el rango de validez del teorema.
3. Se han estudiado, mediante análisis de bandas y aplicando el Teorema de Estabilidad de Multibreathers, las propiedades de estabilidad de dark breathers, tanto en sistemas hamiltonianos como disipativos, analizando, además, los efectos del tamaño finito del sistema en la estabilidad de los mismos.
4. Se han ampliado los estudios previos sobre la conexión entre breathers y modos Anderson. Se han considerado distintas implementaciones del desorden, encontrándose que los modos Anderson con frecuencia máxima y mínima están conectados entre sí y con un dark breather. También se ha encontrado que en sistemas bidimensionales el tipo de conexiones entre modos Anderson y breathers son las mismas que en sistemas monodimensionales.
5. Se ha estudiado la interacción entre breathers móviles e impurezas, implementando ésta en los acoplos, masas y potenciales on-site, considerando distintos potenciales y suponiendo que el sistema es hamiltoniano o disipativo. Como consecuencia de ello, se ha formulado un método para predecir el atrapamiento de un breather móvil por una impureza, basado en las propiedades de los modos lineales y de los breathers localizados en la misma. Este método también es válido para modelos curvados de ADN y de proteínas.
6. Se ha propuesto un modelo para el estudio de ADN que tiene en cuenta interacciones electrostáticas de largo alcance, debidas al momento dipolar finito de los puentes de hidrógeno que unen las dos hebras de la molécula, y que, por tanto, dependen de la geometría del sistema. Este hecho permite estudiar la transferencia de energía a través de regiones curvadas de ADN.

7. Se ha estudiado, analítica y numéricamente, las propiedades de breathers estacionarios y móviles en un modelo de ADN con interacción dipolar, encontrándose que ésta dificulta la transmisión de energía, impidiéndola si su intensidad es lo suficientemente grande.
8. Se ha estudiado el efecto de la curvatura en el movimiento de breathers en el modelo de ADN con interacción dipolar, obteniéndose que, a partir de un cierto valor umbral de la misma, la energía es reflejada. También se ha comprobado que un breather móvil se comporta como una partícula libre de masa aproximadamente constante, la cual permanece invariable cuando el breather atraviesa la zona curvada.

# Apéndice

# A. Algunas demostraciones necesarias para el estudio de la estabilidad lineal

## A.1. Propiedades del operador de Newton

Como vimos en el capítulo 4, la ecuación dinámica de una perturbación  $\xi \in \mathcal{C}^2$  se puede expresar como la acción del operador de Newton  $\mathcal{N}$  sobre una función  $\xi$ , de forma que la ecuación de autovalores de  $\mathcal{N}$  es:

$$\mathcal{N}\xi = E\xi, \quad (\text{A.1})$$

donde  $\mathcal{N}$  viene dado por:

$$\mathcal{N}(u(t)) \cdot \xi \equiv \frac{d^2\xi}{dt^2} + V''(u(t))\xi + C\hat{J}(u(t)) \cdot \xi. \quad (\text{A.2})$$

El operador de Newton tiene una serie de propiedades de conmutación que expondremos en el apartado A.1.1. Además,  $\mathcal{N}$  es hermítico, como veremos en el apartado A.1.2. Todas estas propiedades implicarán una serie de simetrías en las autofunciones.

### A.1.1. Propiedades de conmutación

El operador  $\mathcal{N}$  conmuta con los siguientes operadores:

- **Inversión temporal:**  $Sf(t) = f(-t)$ . Como  $Su(t) = u(t)$ , entonces:

$$S\mathcal{N} = \mathcal{N}S \quad (\text{A.3})$$

- **Traslación temporal de un periodo  $T$ :**  $\mathcal{P}f(t) = f(t+T)$ . Como  $u(t+T) = u(t)$ , entonces:

$$\mathcal{P}\mathcal{N} = \mathcal{N}\mathcal{P} \quad (\text{A.4})$$

- **Conjugación.**  $\mathcal{C}f(t) = f^*(t)$ . Como  $\mathcal{N}$  es real,  $\mathcal{C}\mathcal{N}(x + jy) = \mathcal{N}x - j\mathcal{N}y = \mathcal{N}(x - jy) = \mathcal{N}\mathcal{C}(x + jy)$ , donde  $x$  é  $y$  son dos funciones reales. Así:

$$\mathcal{C}\mathcal{N} = \mathcal{N}\mathcal{C} \quad (\text{A.5})$$



Sin embargo,  $\mathcal{C}$  es antilineal:

$$\mathcal{C}(\lambda u + \mu v) = \lambda^* \mathcal{C}(u) + \mu^* \mathcal{C}(v) \quad (\text{A.6})$$

El hecho de que dos operadores lineales  $A$  y  $B$  conmuten implica que:

1. Si  $u_o$  es solución de  $Au_o = 0$ , entonces  $Bu_o$  también lo es, pues  $A(Bu_o) = B(Au_o) = B \cdot 0 = 0$ . En nuestro caso, si  $\xi(t)$  es solución de  $(\mathcal{N} - E)\xi = 0$ , también lo son  $\xi(-t)$  y  $\xi(t + nT)$  con  $n \in \mathbb{Z}$ .
2. Si  $u_a$  tiene autovalor  $a$  respecto á  $A$  ( $Au_a = au_a$ ), entonces  $Bu_a$  tiene el mismo autovalor pues  $A(Bu_a) = B(Au_a) = B(au_a) = a(Bu_a)$ . Es decir, la restricción de  $B$  al subespacio de  $a$  ( $V_a$ ) lo deja invariante, y podemos estudiar la ecuación de autovalores  $Bu = bu$  restringido a  $V_a$ . En otras palabras, podemos escoger las autofunciones de forma que lo sean simultáneamente de  $A$  y  $B$ .

Veamos cuales son, por separado, las propiedades de las autofunciones de los operadores  $\mathcal{S}$ ,  $\mathcal{P}$  y  $\mathcal{C}$ :

#### *Propiedades de las autofunciones de $\mathcal{S}$*

Sea  $s$  un autovalor de  $\mathcal{S}$ :  $\mathcal{S}f(t) = sf(t)$ . Por la definición de  $\mathcal{S}$  tenemos  $\mathcal{S}f(t) = f(-t)$ . Entonces  $\mathcal{S}^2 f(t) = \mathcal{S}f(-t) = f(t)$ . Por otro lado,  $\mathcal{S}^2 f(t) = s^2 f(t)$ . Por tanto,  $s^2 = 1$ , con lo que  $s = \pm 1$ . Es decir,

$$\mathcal{S}f(t) = f(-t) = \pm f(t), \quad (\text{A.7})$$

con lo que las autofunciones  $f(t)$  de  $\mathcal{S}$  son simétricas o antisimétricas en el tiempo. También se les denominan pares o impares, respectivamente.

#### *Propiedades de las autofunciones de $\mathcal{P}$*

Sea  $p$  un autovalor de  $\mathcal{P}$ :  $\mathcal{P}f(t) = pf(t)$ . Por definición,  $\mathcal{P}^n f(t) = f(t + nT)$ . Si escribimos  $p = e^{j\theta}$  (con  $\theta \in \mathbb{C}$ ), se tiene que  $\mathcal{P}^n f(t) = p^n f(t) = e^{jn\theta} f(t)$ . Es decir,

$$\mathcal{P}^n f(t) = f(t + nT) = e^{jn\theta} f(t) \quad (\text{A.8})$$

Definamos una función  $v(t)$  como:

$$v(t) = e^{-j\theta t/T} f(t). \quad (\text{A.9})$$

la cual es periódica ya que

$$v(t + T) = e^{-j\theta(t+T)/T} f(t + T) = e^{-j\theta t/T} f(t) = v(t) \quad (\text{A.10})$$

Así, las autofunciones de  $\mathcal{P}$  cumplen las siguientes propiedades:

- **Teorema de Bloch:** Las autofunciones del operador  $\mathcal{P}$  son de la forma  $f(t) = e^{j\theta t/T}v(t)$  con  $v(t)$  periódica. Este tipo de funciones se denominan *Funciones de Bloch*.
- **$\mathcal{S}$  y  $\mathcal{P}$  no conmutan**, ya que  $\mathcal{S}\mathcal{P}f(t) = \mathcal{S}f(t+T) = f(-t-T)$  y  $\mathcal{P}\mathcal{S}f(t) = \mathcal{P}f(-t) = f(-t+T)$ . Por tanto, no podemos elegir autofunciones que lo sean simultáneamente de ambos operadores.

Sin embargo, si  $f(t+nT) = \pm f(t)$ , ambos operadores conmutarán. Un caso particular ocurre con las funciones periódicas  $f(t+nT) = f(t)$ , para las cuales  $\theta = 0$ . Si esto ocurre, podemos elegir autofunciones solución del problema de autovalores (4.6) simétricas o antisimétricas en el tiempo. Otro caso particular corresponde a  $\theta = \pi$ , esto es,  $f(t+T) = -f(t)$ .

En consecuencia, las autofunciones de  $\mathcal{N}$  tienen la forma:

$$\xi(t) = e^{j\theta t/T}v(t), \quad (\text{A.11})$$

siendo  $v(t)$  una función periódica.

#### *Propiedades de la conmutación con $\mathcal{C}$*

Sea  $c$  un autovalor de  $\mathcal{C}$ :  $\mathcal{C}f(t) = cf(t)$ . Si expresamos  $f(t) = |f(t)|e^{j\alpha}$ , los autovalores de  $\mathcal{C}$  serán de la forma  $c = e^{-2j\alpha}$ .

Sea  $\xi$  una autofunción de  $\mathcal{N}$  con autovalor  $E$ :  $\mathcal{N}\xi = E\xi$ , entonces, teniendo en cuenta (A.5):  $\mathcal{N}\mathcal{C}\xi = \mathcal{C}\mathcal{N}\xi = \mathcal{C}(E\xi) = E^*\mathcal{C}\xi$ . Es decir,

$$\mathcal{N}\xi^* = E^*\xi^* \quad (\text{A.12})$$

Por tanto, las autofunciones conjugadas tienen autovalores conjugados.

#### *A.1.2. Hermiticidad del operador de Newton*

Un operador es hermítico si es igual a su adjunto, es decir,  $\mathcal{N} = \mathcal{N}^+$ . El operador adjunto en un espacio de Hilbert infinito se define de la forma:

$$\langle \mathcal{N}^+a | b \rangle = \langle a | \mathcal{N}b \rangle, \quad (\text{A.13})$$

donde

$$\langle a | b \rangle = \sum_n a_n^* b_n. \quad (\text{A.14})$$

es el producto escalar en la notación de Dirac.

Si el espacio de Hilbert es de dimensión finita, el operador  $\mathcal{N}$  se puede representar por una matriz, y el operador adjunto se define como  $[\mathcal{N}^+]_{nm} = [N^*]_{mn}$ , así, la condición de hermiticidad en un espacio finito se escribe de la forma:

$$[\mathcal{N}]_{nm} = [N^*]_{mn}. \quad (\text{A.15})$$

Para demostrar que el operador de Newton es hermítico tenemos que demostrar en primer lugar que es simpléctico.

*El operador de Newton es simpléctico*

La ecuación de autovalores (A.1) puede considerarse como proveniente de un hamiltoniano bilineal:

$$\tilde{H} = \sum_n \left( \frac{1}{2} \pi_n^2 + \frac{1}{2} (V''(u_n) - E) \xi_n^2 + \frac{1}{2} C \sum_m J_{mn} \xi_n \xi_m \right), \quad (\text{A.16})$$

siendo  $\pi \equiv \dot{\xi}$ .  $J_{mn}$  son las componentes de la matriz de acoplo, definida de la forma:

$$J_{mn} \equiv J_{nm}(u) = \frac{\partial^2 W(u)}{\partial u_m \partial u_n}, \quad (\text{A.17})$$

donde  $W(\{u\})$  es el potencial de interacción. La ecuación (A.16) se puede expresar de forma más compacta definiendo  $\mathcal{U} = \sum_n V(u_n) + CW(\{u\})$ . Así,

$$\tilde{H} = \sum_n \left( \frac{1}{2} \pi_n^2 + \frac{1}{2} \sum_m U_{nm} \xi_n \xi_m \right), \quad (\text{A.18})$$

siendo

$$U_{mn} \equiv U_{nm}(\{u\}) = \frac{\partial^2 \mathcal{U}}{\partial u_m \partial u_n} = (V''(u_n) - E) \delta_{nm} + C J_{nm}, \quad (\text{A.19})$$

Claramente,  $U_{nm} = U_{mn}$ . Las correspondientes ecuaciones de Hamilton, que equivalen a las ecuaciones de autovalores (A.1) son:

$$\begin{cases} \dot{\xi} = \pi \\ \dot{\pi} = -U(u)\xi \end{cases}, \quad (\text{A.20})$$

con  $U(u) \equiv U(\{u\})$ ,  $\xi = \{\xi_1 \dots \xi_n\}^T$  y  $\pi = \{\pi_1 \dots \pi_n\}^T$ .

Si llamamos  $\Omega = \begin{bmatrix} \xi \\ \pi \end{bmatrix}$ , tenemos, usando (A.20):

$$\dot{\Omega} = \begin{bmatrix} \dot{\xi} \\ \dot{\pi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pi \\ -U(u)\xi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U(u) & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi \\ \pi \end{bmatrix} \quad (\text{A.21})$$

Sea  $\mathcal{J}$  la matriz simpléctica definida de la forma:

$$\mathcal{J} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.22})$$

y  $\mathcal{H}$  la matriz hessiana del hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial \xi^2} & \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial \xi \partial \pi} \\ \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial \pi \partial \xi} & \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial \pi^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U(u) & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}. \quad (\text{A.23})$$

Así, podemos escribir (A.21) de forma compacta:

$$\dot{\Omega} = \mathcal{J}\mathcal{H}\Omega \quad (\text{A.24})$$

Esta ecuación es muy importante, pues como demostraremos posteriormente, todo operador cuyas autofunciones la cumplan es simpléctico. Esto es, el producto simpléctico de dos autofunciones cualesquiera se conserva. Antes de demostrar este hecho, expondremos algunas propiedades inmediatas de las matrices hessiana y simpléctica que nos serán de utilidad:

- $\mathcal{H}$  es hermítica:

$$\mathcal{H}^+ = \mathcal{H}, \quad (\text{A.25})$$

- $\mathcal{J}$  es anti-hermítica:

$$\mathcal{J}^+ = -\mathcal{J} \quad (\text{A.26})$$

Como consecuencia se tiene también:

$$\mathcal{J}^2 = -I \quad (\text{A.27})$$

$$\mathcal{J}^+ \mathcal{J} = I \quad (\text{A.28})$$

Pasemos pues a demostrar que el producto simpléctico de dos autofunciones se conserva cuando se cumple (A.24). El producto simpléctico se define como:

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \langle \Omega_1 | \mathcal{J}\Omega_2 \rangle = \sum_n (\xi_n^1 \pi_n^2 - \xi_n^2 \pi_n^1), \quad (\text{A.29})$$

es decir, es la suma de las áreas de los subespacios bidimensionales correspondientes a cada par de variables conjugadas. Derivemos la expresión anterior:

$$\frac{d}{dt} [\Omega_1, \Omega_2] = \langle \dot{\Omega}_1 | \mathcal{J}\Omega_2 \rangle + \langle \Omega_1 | \mathcal{J}\dot{\Omega}_2 \rangle. \quad (\text{A.30})$$

Usando (A.24) tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\Omega_1, \Omega_2] &= \langle \mathcal{J}\mathcal{H}\Omega_1 \mid \mathcal{J}\Omega_2 \rangle + \langle \Omega_1 \mid \mathcal{J}\mathcal{J}\mathcal{H}\Omega_2 \rangle = \\ &= \langle \mathcal{H}\Omega_1 \mid \mathcal{J}^+\mathcal{J}\Omega_2 \rangle + \langle \Omega_1 \mid \mathcal{J}^2\mathcal{H}\Omega_2 \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Haciendo uso de las propiedades (A.27) y (A.28) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\Omega_1, \Omega_2] &= \langle \mathcal{H}\Omega_2 \mid \Omega_2 \rangle - \langle \Omega_1 \mid \mathcal{H}\Omega_2 \rangle = \\ &= \langle \Omega_2 \mid \mathcal{H}^+\Omega_2 \rangle - \langle \Omega_1 \mid \mathcal{H}\Omega_2 \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Dado que  $\mathcal{H}$  es hermítico (A.25) se tiene finalmente:

$$\frac{d}{dt}[\Omega_1, \Omega_2] = 0, \quad (\text{A.33})$$

es decir, *el producto simpléctico no varía en el tiempo cuando se cumple (A.24), por lo que el operador de Newton es simpléctico.*

*El operador de Newton es hermítico*

Como se puede observar en (A.20),  $\mathcal{N}$  es la suma de dos operadores,  $\frac{d^2}{dt^2}$  y  $U(u)$ ;  $U(u)$  es real y simétrico ( $U_{nm}(u) = U_{mn}(u)$ ), por lo que es hermítico. Por tanto, sólo nos queda demostrar la hermiticidad del operador:

$$D^2 \equiv \frac{d^2}{dt^2}, \quad (\text{A.34})$$

lo cual es equivalente a probar que (ver ecuación (A.13)):

$$\langle D^2 f \mid g \rangle = \langle f \mid D^2 g \rangle, \quad (\text{A.35})$$

siendo  $f$  y  $g$  dos funciones cualesquiera y

$$\langle D^2 f \mid g \rangle = \int_0^T \sum_n \frac{d^2 f_n^*}{dt^2} g_n dt \quad \langle f \mid D^2 g \rangle = \int_0^T \sum_n f_n^* \frac{d^2 g_n}{dt^2} dt. \quad (\text{A.36})$$

Resolvemos la primera integral tras sacar fuera el sumatorio e integrar por partes:

$$\langle D^2 f \mid g \rangle = \sum_n \left( \left[ \frac{d^2 f_n^*}{dt^2} g_n \right]_0^T - \int_0^T \frac{d^2 f_n^*}{dt^2} \frac{d^2 g_n}{dt^2} dt \right). \quad (\text{A.37})$$

Volviendo a integrar por partes:

$$\begin{aligned}
 \langle D^2 f | g \rangle &= \sum_n \left( \left[ \frac{d^2 f_n^*}{dt^2} g_n \right]_0^T - \left[ f_n^* \frac{d^2 g_n}{dt^2} \right]_0^T - \int_0^T \frac{d^2 f_n^*}{dt^2} \frac{d^2 g_n}{dt^2} dt \right) = \\
 &= \left( \frac{d^2 f^*}{dt^2}(T)g(T) - \frac{d^2 f^*}{dt^2}(0)g(0) \right) - \left( f^*(T) \frac{d^2 g}{dt^2}(T) - f^*(0) \frac{d^2 g}{dt^2}(0) \right) + \langle f | D^2 g \rangle = \\
 &= \left( \frac{d^2 f^*}{dt^2}(T)g(T) - f^*(T) \frac{d^2 g}{dt^2}(T) \right) - \left( \frac{d^2 f^*}{dt^2}(0)g(0) - f^*(0) \frac{d^2 g}{dt^2}(0) \right) + \langle f | D^2 g \rangle
 \end{aligned} \tag{A.38}$$

Teniendo en cuenta la definición de producto simpléctico (ecuación (A.29)) y llamando  $\Omega_1(t) = \begin{bmatrix} f^*(t) \\ \dot{f}^*(t) \end{bmatrix}$  y  $\Omega_2(t) = \begin{bmatrix} g^*(t) \\ \dot{g}^*(t) \end{bmatrix}$  nos queda:

$$\langle D^2 f | g \rangle = [\Omega_1(T), \Omega_2(T)] - [\Omega_1(0), \Omega_2(0)] + \langle f | D^2 g \rangle. \tag{A.39}$$

Si  $\Omega_1$  y  $\Omega_2$  son autofunciones de un operador simpléctico, el producto simpléctico se conserva (A.33) y se demuestra la relación (A.35).

Por tanto,  $\mathcal{N}$  es hermítico al ser simpléctico. En consecuencia, *los autovalores de  $\mathcal{N}$  son reales*. Para demostrar esta afirmación suponemos que  $\xi$  es el autovector correspondiente al autovalor  $E$ , es decir,  $\mathcal{N}\xi = E\xi$ . Así, se cumplen las siguientes relaciones:

$$\langle \xi | \mathcal{N}\xi \rangle = \langle \xi | E\xi \rangle = E \langle \xi | \xi \rangle, \tag{A.40}$$

$$\langle \mathcal{N}\xi | \xi \rangle = \langle E\xi | \xi \rangle = E^* \langle \xi | \xi \rangle. \tag{A.41}$$

Como al ser  $\mathcal{N}$  hermítico,  $\langle \xi | \mathcal{N}\xi \rangle = \langle \mathcal{N}\xi | \xi \rangle$ , las expresiones (A.40) y (A.41) son iguales, y, por tanto,  $E = E^*$ , es decir,  $E$  es real.

Este hecho unido a la igualdad (A.12) hace que a autofunciones conjugadas le corresponda el mismo autovalor, es decir:

$$\mathcal{N}\xi^* = E\xi^*. \tag{A.42}$$

Esto implica también que si  $\xi(t)$  es un elemento de la base del subespacio propio correspondiente al autovalor  $E$  ( $V_E$ ),  $\xi^*(t)$  es otro autovector linealmente independiente. En lugar de ello, podemos tomar como elemento de la base las funciones reales  $\xi_R(t) = (\xi(t) + \xi^*(t))/2 = \text{Re}(\xi(t))$  y  $\xi_I(t) = (\xi(t) - \xi^*(t))/2 = \text{Im}(\xi(t))$ . Es decir,  $V_E$  tiene una base real.

## A.2. El operador de Floquet

### A.2.1. Definición

El operador de Floquet  $\mathcal{F}$  se define mediante el mapa:

$$\begin{bmatrix} \xi(T) \\ \pi(T) \end{bmatrix} = \mathcal{F}_E \begin{bmatrix} \xi(0) \\ \pi(0) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.43})$$

o, en distinta notación:

$$\Omega(T) = \mathcal{F}_E \Omega(0). \quad (\text{A.44})$$

Los vectores  $\Omega(T)$  se obtienen integrando la ecuación de autovalores  $\mathcal{N}\xi = E\xi$ . El subíndice  $E$  en el operador  $\mathcal{F}$  indica el autovalor de  $\mathcal{N}$  correspondiente. A la representación de  $\mathcal{F}$  se le llama *matriz monodromía*. En la literatura se suele utilizar la misma denominación para ambas entidades.

La dimensión de  $\mathcal{F}$  es  $2N \times 2N$ , donde  $N$  es el número de grados de libertad del sistema.

A las funciones de Bloch  $\xi(t) = e^{j\theta t/T} v(t)$  les corresponden autovalores de  $\mathcal{F}_E$  iguales a  $e^{j\theta}$ . Para demostrarlo se parte de la expresión de las autofunciones de  $\mathcal{N}$  (A.11):

$$\begin{cases} \xi(t) = e^{j\theta t/T} v(t) \\ \pi(t) = \frac{j\theta}{T} \xi(t) + e^{j\theta t/T} \dot{v}(t) \end{cases}, \quad (\text{A.45})$$

A partir de aquí se obtienen los valores de  $\{\xi(0), \pi(0)\}$  y  $\{\xi(T), \pi(T)\}$ :

$$\begin{cases} \xi(0) = v(0) & \pi(0) = \frac{j\theta}{T} v(0) + \dot{v}(0) \\ \xi(T) = e^{j\theta} v(T) & \pi(T) = e^{j\theta} \left( \frac{j\theta}{T} v(T) + \dot{v}(0) \right) \end{cases}. \quad (\text{A.46})$$

Como  $v(T) = v(0)$ ,  $\dot{v}(T) = \dot{v}(0)$  y, obviamente,

$$\Omega(T) = e^{j\theta} \Omega(0), \quad (\text{A.47})$$

como queríamos demostrar. Es decir, los autovalores de  $\mathcal{F}_E$  son funciones de Bloch (autofunciones del operador  $\mathcal{P}$ ), como cabía esperar, ya que  $\mathcal{F}_E$  es equivalente a  $\mathcal{P}$ , pues ambos trasladan las funciones un periodo.

### A.2.2. El operador de Floquet es simpléctico. Consecuencias

Como vimos en el apartado anterior, el producto simpléctico de dos autofunciones cualesquiera del operador de Newton se conserva. Esto implica que éste es un operador simpléctico.

Las autofunciones del operador de Floquet son también autofunciones del operador de Newton. Por ello, el producto simpléctico de dos de ellas se conserva y, en consecuencia, *el operador de Floquet es simpléctico*.

Aplicando la conservación del producto simpléctico a la definición del mismo (A.29), se obtiene:

$$\langle \Omega_2(T) | \mathcal{J}\Omega_1(T) \rangle = \langle \Omega_2(0) | \mathcal{J}\Omega_1(0) \rangle, \quad (\text{A.48})$$

donde  $\mathcal{J}$  es la matriz simpléctica definida en (A.22). Aplicando (A.44):

$$\langle \Omega_2(T) | \mathcal{J}\Omega_1(T) \rangle = \langle \mathcal{F}\Omega_2(0) | \mathcal{J}\mathcal{F}\Omega_1(0) \rangle = \langle \Omega_2(0) | \mathcal{F}^+ \mathcal{J} \mathcal{F} | \Omega_1(0) \rangle. \quad (\text{A.49})$$

Así, utilizando la igualdad (A.48) se llega a:

$$\mathcal{F}^+ \mathcal{J} \mathcal{F} = \mathcal{J}. \quad (\text{A.50})$$

Consecuencias:

1. Como para cualquier matriz el determinante no cambia con la conjugación,  $\det(\mathcal{J}^+ \mathcal{J}) = \det(\mathcal{J})^2$ . Como  $\mathcal{J}^+ \mathcal{J} = I$ , tenemos que:

$$\det(\mathcal{J}) = \pm 1 \quad (\text{A.51})$$

2. Como consecuencia de (A.50) y (A.51), tenemos que  $\det(\mathcal{F}^+ \mathcal{J} \mathcal{F}) = \det(\mathcal{J}) \rightarrow \det(\mathcal{F}^+) \det(\mathcal{F}) = 1$ . Así,

$$\det(\mathcal{F}) = \pm 1 \quad (\text{A.52})$$

3. Los autovalores de  $\mathcal{F}$  son las raíces del polinomio característico  $p(\lambda) = \det(\mathcal{F} - \lambda I)$ . A partir de (A.50) se tiene que  $\mathcal{F} = \mathcal{J}^+ \mathcal{F}^{+1} \mathcal{J} = -\mathcal{J} \mathcal{F}^{+1} \mathcal{J}$ . Luego  $p(\lambda) = \det(-\mathcal{J} \mathcal{F}^{+1} \mathcal{J} - \lambda I)$ . Como  $I = -\mathcal{J}^2$  (A.27), nos queda:

$$\begin{aligned} p(\lambda) &= \det(-\mathcal{J} \mathcal{F}^{+1} \mathcal{J} - \lambda \mathcal{J}^2) = \det(\mathcal{J}) \det(-\mathcal{F}^{+1} + \lambda I) \det(\mathcal{J}) = \\ &= \det(-\mathcal{F}^{+1} + \lambda I) = \pm \det(\mathcal{F}^+) \det(-\mathcal{F}^{+1} + \lambda I) = \\ &= \pm \det(-I + \lambda \mathcal{F}^+). \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

Teniendo en cuenta que el determinante de una matriz es el mismo que el de su transpuesta,

$$p(\lambda) = \pm \det(\lambda \mathcal{F} - I) = \pm \det \left( \lambda \left( \mathcal{F} - \frac{1}{\lambda} I \right) \right) = \pm \lambda^{2N} \det \left( \mathcal{F} - \frac{1}{\lambda} I \right) \quad (\text{A.54})$$



Por tanto:

$$p(\lambda) = \pm \lambda^{2N} p(1/\lambda), \quad (\text{A.55})$$

En consecuencia, si  $\lambda$  es una raíz del polinomio característico, también lo es  $1/\lambda$ .

Así, se llega a la siguiente conclusión, de gran importancia para la estabilidad lineal de una red de osciladores: *Si  $\lambda$  es un autovalor de  $\mathcal{F}_E$ , también lo es  $1/\lambda$ .*

Como  $\mathcal{F}$  es real, si  $\lambda$  es un autovalor suyo, también lo será  $\lambda^*$ . Es decir, *Los autovalores del operador de Floquet siempre aparecen en cuádrupletes  $\{\lambda, 1/\lambda, \lambda^*, 1/\lambda^*\}$  o dupletes  $\{\lambda, 1/\lambda\}$  si  $\lambda$  es real. Por tanto, si  $\lambda = e^{j\theta}$  es autovalor, también lo será  $\lambda^* = e^{-j\theta}$ . Así, la condición necesaria y suficiente para que una autofunción sea estable es que  $\theta$  sea real.*

### A.3. Forma de las autofunciones con $\theta$ real

Estas autofunciones son particularmente importantes pues corresponden a soluciones estables. Como hemos visto en las secciones anteriores, existe una correspondencia entre las autofunciones  $\xi(t)$  de  $\mathcal{N}$  y los autovectores  $\begin{bmatrix} \xi(0) \\ \pi(0) \end{bmatrix}$  de  $\mathcal{F}_E$ , por lo que, de ahora en adelante las propiedades que encontremos serán, siempre que no se indique lo contrario, las mismas para ambos.

Supongamos que  $e^{j\theta}$  es un autovalor simple (sin degeneración) de  $\mathcal{F}_E$ ; entonces, podemos escribir el teorema de Bloch de la forma:

$$\xi(t) = e^{j\theta t/T} \chi(\theta, t) \quad (\text{A.56})$$

Por las propiedades (A.3) y (A.5) resulta que también serán autofunciones de  $\mathcal{N}$  con autovalor  $E$  las siguientes funciones:

$$\xi(-t) = e^{-j\theta t/T} \chi(\theta, -t), \quad (\text{A.57})$$

$$\xi^*(t) = e^{-j\theta t/T} \chi^*(\theta, t). \quad (\text{A.58})$$

Estas dos funciones tienen como autovalor de  $\mathcal{F}_E$  a  $e^{-j\theta}$ , que es no degenerado, por lo que serán proporcionales:

$$\xi(-t) = \mu e^{2j\alpha} \xi^*(t), \quad (\mu, \alpha \in \mathbb{R}). \quad (\text{A.59})$$

A ambas funciones les corresponden el mismo autovalor de  $\mathcal{F}_E$  pero no la misma autofunción. La causa es que representan al mismo autovector (autofunción) respecto a  $\mathcal{F}_o(\mathcal{N})$  sobre  $\mathbb{C}$  pero no sobre  $\mathbb{R}$ . Esta sutil diferencia es importante, como veremos a continuación.

También se pueden construir autofunciones de  $\mathcal{N}$  con autovalor  $E$  que sean simétricas o anti-simétricas en el tiempo, reales e imaginarias:

$$\xi_s(t) = \frac{\xi(t) + \xi(-t)}{2}, \quad \xi_a(t) = \frac{\xi(t) - \xi(-t)}{2} \quad (\text{A.60})$$

$$\xi_R(t) = \frac{\xi(t) + \xi^*(t)}{2}, \quad \xi_I(t) = \frac{\xi(t) - \xi^*(t)}{2} \quad (\text{A.61})$$

El hecho de que  $\xi(-t) \neq \xi^*(t)$  hace que  $\xi_s \neq \xi_R$  y  $\xi_a \neq \xi_I$ .

Estas funciones, en cambio, no son autofunciones del operador de Floquet ni son funciones de Bloch (salvo cuando  $\theta = 0, \pi$ ).

#### Relación entre $\xi(-t)$ y $\xi^*(t)$ y consecuencias

A partir de la definición (A.56) y sabiendo que  $\chi(\theta, t)$  es periódica, podemos escribir:

$$\xi(t) = e^{j\theta t/T} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} z_k e^{jk\omega_b t}, \quad (\text{A.62})$$

con  $\theta \in (-\pi, \pi]$ . Llamamos  $\omega_k = k\omega_b + \theta/T$  y expresamos los coeficientes de Fourier  $z_k$  de la forma  $z_k = c_k e^{j\phi_k}$ , con  $c_k$  y  $\phi_k$  reales y  $\phi_k \in (-\pi, \pi]$ . Por todo ello,

$$\xi(t) = \sum_k z_k e^{j\omega_k t} = \sum_k c_k e^{j\phi_k} e^{j\omega_k t}. \quad (\text{A.63})$$

Entonces, a partir de esta relación y de (A.59), tenemos la igualdad:

$$\sum_k z_k e^{-j\omega_k t} = \mu e^{j2\alpha} \sum_k z_k^* e^{-j\omega_k t}. \quad (\text{A.64})$$

Quitando los sumatorios y multiplicando ambos miembros por  $z_k$  obtiene:

$$z_k^2 = \mu e^{j2\alpha} |z_k|^2. \quad (\text{A.65})$$

Sustituyendo  $z_k = c_k e^{j\phi_k}$ , se llega a:

$$e^{2j\phi_k} = \mu e^{j2\alpha}, \quad (\text{A.66})$$

y, en consecuencia:

$$\begin{cases} \mu = 1 \\ \phi_k = \alpha \pm \pi \end{cases}, \quad (\text{A.67})$$

o lo que es lo mismo,

$$z_k = c_k e^{j\alpha}, \quad (\text{A.68})$$

con  $c_k$  real, positivo o negativo. Es decir,

$$\xi(-t) = e^{j2\alpha} \xi^*(t), \quad (\text{A.69})$$

para algún  $\alpha$ . Pero lo más importante es que la relación

$$\xi(t) = e^{j\alpha} \sum_k c_k e^{j\omega_k t}, \quad (\text{A.70})$$

es trivial sobre  $\mathbb{C}$  pero no sobre  $\mathbb{R}$ , pues nos permite tener soluciones simétricas, antisimétricas o sin simetría.

En consecuencia, tenemos un representante canónico de  $\xi(t)$  que es:

$$\tilde{\xi}(t) = \sum_k c_k e^{j\omega_k t}. \quad (\text{A.71})$$

Para este representante,  $\tilde{\xi}(-t) = \tilde{\xi}^*(t)$ ,  $\tilde{\xi}_s = \tilde{\xi}_R$  y  $\tilde{\xi}_a = \tilde{\xi}_I$ . Además,  $\tilde{\xi}(0) = \sum_k c_k$  es real y  $\dot{\tilde{\xi}}(0) = j \sum_k (\omega_k c_k)$  es imaginario puro.

Por tanto,

$$\tilde{\Omega}(0) = \begin{bmatrix} \tilde{\xi}(0) \\ \dot{\tilde{\xi}}(0) \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \delta x \\ j\delta v \end{bmatrix}, \quad (\text{A.72})$$

con  $\delta x$  y  $\delta v$  reales. Además,  $\text{Re}(\tilde{\xi}(t)) = \tilde{\xi}_R(t)$  es simétrica en el tiempo e  $\text{Im}(\tilde{\xi}(t)) = \tilde{\xi}_I(t)$  es antisimétrica en el tiempo. Pero *para otro representante (que es distinto sobre  $\mathbb{R}$ ) no se cumple esta propiedad.*

## A.4. Modos de fase y crecimiento

Como vimos en el capítulo 4, existen dos autofunciones con autovalor  $E = 0$  que se pueden conocer, que son los llamados modos de fase y crecimiento.

### A.4.1. El modo de fase

Para ver la forma del modo de fase, se derivan con respecto al tiempo las ecuaciones dinámicas (2.2). Así, tenemos:

$$\ddot{u} + V''(u)\dot{u} + C\hat{J}\dot{u} = 0 \quad (\text{A.73})$$

Es decir,  $\mathcal{N}\dot{u} = 0$ , lo cual quiere decir que  $\dot{u}$  es autofunción del operador de Newton con autovalor cero <sup>1</sup>.

A  $\dot{u}$  le corresponde un autovector de  $\mathcal{F}$  llamado *modo de fase*:  $\Omega_f = \begin{bmatrix} \dot{u}(0) \\ \ddot{u}(0) \end{bmatrix}$ . Como  $\dot{u}(t)$  es periódica, a  $\Omega_f$  le corresponde trivialmente el autovalor  $\lambda = 1$ . Al

<sup>1</sup> Esta relación es válida también para acoplamientos no lineales.

ser  $\dot{u}(t)$  antisimétrica en el tiempo, no aparece en el espectro de autovalores del jacobiano. Este hecho también implica que  $\dot{u}(0) = 0$ , por lo que el modo de fase tiene la expresión final:

$$\Omega_f = \begin{bmatrix} 0 \\ \dot{u}(0) \end{bmatrix} \quad (\text{A.74})$$

El origen físico de este modo es la invariancia bajo traslación temporal de la solución, es decir,  $u(t + \delta t)$  es también solución de las ecuaciones dinámicas. En consecuencia, este modo no aparece en un sistema forzado y amortiguado.

#### A.4.2. El modo de crecimiento

Consideremos la solución de (2.2) dependiente de la frecuencia,  $u = u(t, \omega_b)$ , y derivemos respecto a  $\omega_b$ . Así:

$$\ddot{u}_\omega + V''(u)u_\omega + C\hat{J}u_\omega = 0 \Rightarrow \mathcal{N}u_\omega = 0, \quad (\text{A.75})$$

donde  $u_\omega \equiv \partial u / \partial \omega_b$ . Como  $u$  es periódica, real y simétrica en el tiempo, se puede expresar como una serie de Fourier  $u(t) = \sum_k z_k e^{jk\omega_b t}$  con  $z_k = z_{-k}$  real y  $z_k \equiv z(\omega_b, k)$ . Por tanto,  $u_\omega$  se puede escribir de la forma:

$$u_\omega = \sum_k \frac{\partial z_k}{\partial \omega_b} e^{jk\omega_b t} + t \sum_k jk\omega_b z_k e^{jk\omega_b t} = \sum_k \frac{\partial z_k}{\partial \omega_b} e^{jk\omega_b t} + t\dot{u}(t). \quad (\text{A.76})$$

Se define la función  $\gamma(t)$  de la forma:

$$\gamma(t) = \sum_k \frac{\partial z_k}{\partial \omega_b} e^{jk\omega_b t}. \quad (\text{A.77})$$

$\gamma(t)$  es real y simétrica en el tiempo, ya que  $\partial z_k / \partial \omega_b = \partial z_{-k} / \partial \omega_b$ . Además, tiene el mismo período de la solución  $u(t)$ , ya que  $\gamma(T) = \gamma(0)$ . Así,

$$u_\omega = \gamma(t) + t\dot{u}(t). \quad (\text{A.78})$$

A  $u_\omega$  le corresponde el autovector de  $\mathcal{F}$  llamado *modo de crecimiento* ( $\Omega_c$ ), cuya expresión es la siguiente:

$$\Omega_c = \begin{bmatrix} u_\omega(0) \\ \dot{u}_\omega(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(0) \\ \dot{\gamma}(0) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.79})$$

Como veremos posteriormente, tanto  $\gamma(t)$  como  $t\dot{u}(t)$  son reales y simétricas en el tiempo por lo que  $u_\omega(t)$  también lo es. Sin embargo, ésta no es periódica por lo que no es autovector de  $\mathcal{F}$  y tampoco aparece en el jacobiano.

Su significado físico es que siempre tenemos una solución próxima a  $u$  con frecuencia ligeramente diferente (en una bifurcación  $u_\omega$  no estaría definida). Si perturbamos  $u$  en la dirección de  $u_\omega$  obtenemos esa otra solución.

### A.5. Autofunciones y autovalores en $\theta = 0$

En esta sección vamos a estudiar la forma de las autofunciones del operador de Newton con  $\theta = 0$ . El gran interés de este estudio radica en saber cuáles de las autofunciones de  $\mathcal{F}$  y  $\mathcal{N}$  aparecen o no en el jacobiano y por qué.

Para hacer el estudio vamos a obtener una serie de expresiones para un  $\theta$  arbitrario, para después particularizar al valor  $\theta = 0$ .

#### A.5.1. Autofunciones para cualquier valor de $\theta$

Supongamos dos autovalores de  $\mathcal{F}_E$  complejos conjugados. Para abreviar, escribimos  $\omega \equiv \theta/T$ , de forma que las autofunciones correspondientes son:

$$\xi(\omega, t) = e^{j\omega t} \chi(\omega, t) \quad (\text{A.80})$$

$$\xi(-\omega, t) = e^{-j\omega t} \chi(-\omega, t) = e^{-j\omega t} \chi^*(\omega, t) = \xi^*(\omega, t). \quad (\text{A.81})$$

Además, tenemos otra autofunción

$$\xi(\omega, -t) = e^{-j\omega t} \chi(\omega, -t) = \mu e^{j2\alpha} \xi^*(\omega, t), \quad \mu, \alpha \in \mathbb{R}^+. \quad (\text{A.82})$$

Comparando (A.81) y (A.82) y suponiendo que los autovalores son no degenerados llegamos a:

$$\chi(-\omega, t) = \chi^*(\omega, t), \quad (\text{A.83})$$

$$\chi(\omega, -t) = \mu e^{j2\alpha} \chi^*(\omega, t), \quad (\text{A.84})$$

donde  $\alpha \in (-\pi/2, \pi/2]$ . Considerando (A.84) y multiplicando ambos miembros por  $\chi(\omega, 0)$  tenemos que  $\chi^2(\omega, 0) = \mu e^{j2\alpha} |\chi(\omega, 0)|^2$ . Si

$$\chi(\omega, 0) = |\chi(\omega, 0)| e^{j\phi}, \quad (\text{A.85})$$

entonces,

$$e^{2j\phi} = \mu e^{2j\alpha}, \quad (\text{A.86})$$

por lo que,

$$\begin{cases} \mu = 1 \\ \phi = \alpha \pm \pi \end{cases} \quad (\text{A.87})$$

O, expresado de otra forma:

$$\chi(\omega, 0) = \pm |\chi(\omega, 0)| e^{j\alpha}. \quad (\text{A.88})$$

Si comparamos los coeficientes de  $\chi(\omega, -t) = \sum z_k e^{-j\omega_b t}$  con los de  $\chi^*(\omega, t) = \sum z_k^* e^{-j\omega_b t}$  tenemos que  $z_k = e^{2j\alpha} z_k^*$ , y multiplicando por  $z_k$ , llegamos a  $(z_k)^2 = e^{2j\alpha} |z_k|^2$ . Si  $z_k = |z_k| e^{j\phi_k}$ ,  $\phi_k = \alpha \pm \pi$  o lo que es lo mismo,  $z_k = \pm |z_k| e^{j\alpha}$ . Si llamamos  $c_k = \pm |z_k|$ , tenemos que

$$\chi(\omega, t) = \sum c_k e^{j\alpha} e^{j\omega_b t}, \quad (\text{A.89})$$

con  $c_k \in \mathbb{R}$  positivo o negativo. Si se considera ahora la ecuación (A.83) y se identifican coeficientes, se obtiene

$$z_k = z_{-k}^* = c_{-k} e^{-j\alpha}, \quad (\text{A.90})$$

con  $c_{-k} \in \mathbb{R}$  positivo o negativo.

### A.5.2. Límite cuando $\theta \rightarrow 0$ ( $\omega \rightarrow 0$ )

En este caso la ecuación (A.83) se convierte en

$$\chi(0, t) = \chi^*(0, t) \rightarrow \chi(0, t) \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.91})$$

Por otro lado, las autofunciones correspondientes a la pareja de autovalores conjugados (A.80), (A.81), son de la forma:

$$\xi(0, t) = \chi(0, t), \quad (\text{A.92})$$

$$\xi^*(0, t) = \chi^*(0, t), \quad (\text{A.93})$$

por lo que, teniendo en cuenta la ecuación (A.91),  $\xi(\omega, t) = \xi^*(\omega, t)$  cuando  $\omega \rightarrow 0$ , es decir, se pierde una autofunción.

No obstante, podemos obtener otra solución linealmente independiente de la siguiente forma:

$$\xi_2(\omega, t) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\xi(\omega, t) - \xi(-\omega, t)}{2\omega} = \frac{\partial \xi(\omega, t)}{\partial \omega}. \quad (\text{A.94})$$

Así,

$$\xi_2(0, t) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \omega} (e^{j\omega t} \chi(\omega, t)) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \left( e^{j\omega t} \frac{\partial \chi}{\partial \omega}(\omega, t) + jt \chi(\omega, t) \right). \quad (\text{A.95})$$

Es decir,

$$\xi_2(0, t) = \frac{\partial \chi}{\partial \omega}(0, t) + jt \chi(0, t) \quad (\text{A.96})$$

En resumen, tenemos dos funciones linealmente independientes cuando  $\omega \rightarrow 0$ , las cuales constituyen una base del subespacio propio del autovalor 1. Éstas son las siguientes:

$$\begin{cases} \xi_1(0, t) = \chi(0, t) \\ \xi_2(0, t) = \chi_\omega(0, t) + jt\chi(0, t) \end{cases} \quad (\text{A.97})$$

Otra implicación de la ecuación (A.91) es la transformación de la ecuación (A.84) en:

$$\chi(0, -t) = e^{2j\alpha}\chi(0, t). \quad (\text{A.98})$$

Como  $\chi(0, t)$  es real, también lo será  $\chi(0, -t)$ . Esto implica que  $e^{2j\alpha} = \pm 1$ , por lo que  $\alpha = 0$  ó  $\alpha = \pi/2$ <sup>2</sup>. Dependiendo de los valores de  $\alpha$ , las autofunciones tendrán unas propiedades de simetría diferentes, las cuales pasamos a describir a continuación:

Caso  $\alpha = 0$

A partir de (A.98) se obtiene que  $\chi(0, -t) = \chi(0, t)$ , es decir,  $\chi(0, t)$  es simétrica en el tiempo (par). Como  $\chi(0, t)$  es real (A.80), podemos expresarla como una serie de Fourier coseno:

$$\chi(0, t) = c_0 + 2 \sum_{k \geq 1} c_k \cos(k\omega_b t) \quad (\text{A.99})$$

Por otro lado, a partir de (A.83) y (A.88) se llega a la igualdad:

$$\chi(\omega, -t) = \chi(-\omega, t) = \chi^*(\omega, t). \quad (\text{A.100})$$

Derivando respecto a  $\omega$  y tomando el límite cuando  $\omega \rightarrow 0$  se obtiene:

$$\chi_\omega(0, -t) = -\chi_\omega(0, t) = \chi_\omega^*(0, t). \quad (\text{A.101})$$

De la primera igualdad se tiene que  $\chi_\omega(0, t)$  es antisimétrica en el tiempo (impar) y de la segunda que es imaginaria pura. Así, las autofunciones (A.97) cumplen:  $\xi_1$  es par, real y periódica, mientras que  $\xi_2$  es impar, imaginaria pura y no periódica. En este caso, el autovalor asociado a  $\xi_1$  aparece en el jacobiano, mientras que el asociado a  $\xi_2$  no lo hace. Esta pareja de autofunciones no se corresponden con los modos de fase y crecimiento.

Veamos la forma del operador de Floquet asociado a ambas autofunciones. Para ello, calculamos el valor de  $\{\xi_1(0, t), \dot{\xi}_1(0, t)\}$  y  $\{\xi_2(0, t), \dot{\xi}_2(0, t)\}$  en  $t = 0$  y  $t = T$ . El cálculo para  $\xi_1$  es inmediato pues  $\xi_1(0, t) = \chi(0, t)$ , la cual es periódica. Por otro lado, aplicando (A.97), se obtienen los valores correspondientes de  $\chi_2(0, t)$ :

<sup>2</sup> Las otras posibilidades,  $\alpha = \pi$  y  $\alpha = -\pi/2$  estarían excluidas pues  $\alpha \in (\pi/2, \pi/2]$

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_2(0, 0) = \chi_\omega(0, 0) = 0 \\ \dot{\xi}_2(0, 0) = \dot{\chi}_\omega(0, 0) + j\chi(0, 0) \\ \xi_2(0, T) = \chi_\omega(0, 0) + jT\chi(0, 0) = jT\chi(0, 0) \\ \dot{\xi}_2(0, T) = \dot{\chi}_\omega(0, 0) + j\chi(0, 0) + jT\dot{\chi}(0, 0) = \dot{\chi}_\omega(0, 0) + j\chi(0, 0). \end{array} \right. \quad (\text{A.102})$$

Llamamos  $\delta x \equiv \chi(0, 0)$  y  $\delta v \equiv -j(\dot{\chi}_\omega(0, 0) + \chi(0, 0))$ , de forma que ambos sean reales, y definimos:

$$\Omega_1(t) = \begin{bmatrix} \xi_1(t) \\ \dot{\xi}_1(t) \end{bmatrix} \quad \Omega_2(t) = \frac{1}{j} \begin{bmatrix} \xi_2(t) \\ \dot{\xi}_2(t) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.103})$$

Tenemos pues:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Omega_1(T) = \Omega_1(0) \\ \Omega_2(T) = \Omega_2(0) + T\Omega_1(0) \end{array} \right. \quad (\text{A.104})$$

Tanto  $\{\Omega_1(0), \Omega_2(0)\}$  como  $\{\Omega_1(T), \Omega_2(T)\}$  son bases en el subespacio propio del autovalor 1,  $V(1)$ . Entonces,  $\Omega(T) = a(T)\Omega_1(0) + b(T)\Omega_2(0)$ , pero también  $\Omega(T) = a(0)\Omega_1(T) + b(0)\Omega_2(T)$ . Teniendo en cuenta (A.104),  $\Omega(T) = (a(0) + b(0)T)\Omega_1(0) + b(0)\Omega_2(0)$ , es decir:

$$\begin{bmatrix} a(T) \\ b(T) \end{bmatrix} = F^{(1)} \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.105})$$

donde

$$F^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & T \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.106})$$

es la restricción del operador de Floquet al subespacio  $V(1)$ . Esta matriz tiene autovalor +1 doble y no es diagonalizable. El elemento de la base  $\Omega_2(0)$  no es autovector ya que  $\Omega_2(T) \neq \lambda\Omega_2(0)$ .

Caso  $\alpha = \pi/2$

A partir de (A.98) se tiene que  $\chi(0, -t) = -\chi(0, t)$ , por lo que  $\chi(0, t)$  es *antisimétrica en el tiempo (impar)*. Como es real, la podemos expresar mediante una serie de Fourier seno:

$$\chi(0, t) = 2 \sum_{k \geq 1} c_k \text{sen}(k\omega_b t) \quad (\text{A.107})$$



De manera análoga al caso anterior, usando (A.83) y (A.88) se llega a:

$$\chi(\omega, -t) = -\chi(-\omega, t) = -\chi^*(\omega, t). \quad (\text{A.108})$$

Derivando respecto a  $\omega$  y tomando el límite cuando  $\omega \rightarrow 0$  se obtiene:

$$\chi_\omega(0, -t) = \chi_\omega(0, t) = -\chi_\omega^*(0, t). \quad (\text{A.109})$$

Por tanto,  $\chi_\omega(0, t)$  es par e imaginaria pura. Así, en el caso  $\alpha = \pi/2$  tenemos que  $\xi_1$  es impar, real y periódica y  $\xi_2$  es par, real y no periódica. Ninguno de los autovalores correspondientes aparecerá en el jacobiano. Los modos de fase y crecimiento se corresponden con una pareja de autofunciones de este tipo <sup>3</sup>.

Para calcular la forma de la matriz de Floquet, se procede de manera análoga al caso anterior. Así,  $\xi_2(0, t)$  cumple:

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_2(0, 0) = \chi_\omega(0, 0) \\ \dot{\xi}_2(0, 0) = \dot{\chi}_\omega(0, 0) + j\chi(0, 0) = 0 \\ \xi_2(0, T) = \chi_\omega(0, 0) + jT\chi(0, 0) = \chi_\omega(0, 0) \\ \dot{\xi}_2(0, T) = \dot{\chi}_\omega(0, 0) + j\chi(0, 0) + jT\dot{\chi}(0, 0) = jT\dot{\chi}(0, 0). \end{array} \right. \quad (\text{A.110})$$

Definimos  $\delta x \equiv j\chi_\omega(0, 0)$  y  $\delta v = T\dot{\chi}(0, 0)$  y <sup>4</sup>:

$$\Omega_1(t) = \frac{1}{j} \begin{bmatrix} \xi_2(t) \\ \dot{\xi}_2(t) \end{bmatrix} \quad \Omega_2(t) = \begin{bmatrix} \xi_1(t) \\ \dot{\xi}_1(t) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.111})$$

Así, tenemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Omega_1(T) = \Omega_1(0) + T\Omega_2(0) \\ \Omega_2(T) = \Omega_2(0) \end{array} \right. , \quad (\text{A.112})$$

Análogamente al caso anterior, la restricción del operador de Floquet a  $V(1)$  es:

$$F^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ T & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.113})$$

Como puede comprobarse,  $\Omega_1(0)$  no es autovector.

<sup>3</sup> Pero no todas las autofunciones de este tipo son el modo de fase y crecimiento.

<sup>4</sup> El cambio de índice se hace para que el subíndice 1 siga correspondiendo a condiciones iniciales no nulas

### A.5.3. Modos marginales

Las matrices (A.106) y (A.113) son la expresión del operador de Floquet  $\mathcal{F}_E$  en las bases  $\{\Omega_1(0), \Omega_2(0)\}$  (restringidas al subespacio correspondiente al autovalor 1). Como estas matrices no son diagonalizables, una perturbación crecerá en el tiempo. Para ver cómo crece esta perturbación calculamos la evolución del modo no acotado. Así, suponiendo el comportamiento (A.105) y  $\Omega(t) = a(t)\Omega_1(0) + b(t)\Omega_2(0)$ :

$$\begin{bmatrix} \alpha(nT) \\ b(nT) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & T \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^n \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & nT \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.114})$$

Así,  $\Omega(nT) = \Omega(0) + nT b(0)\Omega_2(0)$ , es decir, que la presencia de un autovalor doble en +1 hace que la una perturbación crezca linealmente en cada periodo. Este tipo de inestabilidad es llamada *marginal* pues una perturbación crece linealmente en lugar de exponencialmente. Por ello, al modo no acotado se llama *modo marginal asociado* al modo periódico. Es decir, el modo de crecimiento es el modo marginal asociado al modo de fase.

Estos modos también pueden aparecer para  $\theta \neq 0$ . En concreto, la aparición de los modos marginales están ligadas a la existencia de breathers móviles. En esos puntos los valores de los parámetros  $\theta$  asociados a cada autofunción coinciden por lo que se pierde una autofunción [21].

### A.5.4. Pendiente de las bandas en $\theta = 0$

Procedamos a calcular la pendiente de las bandas en el límite  $\theta \rightarrow 0$  ( $\omega \rightarrow 0$ ). Para ello, derivamos la ecuación de autovalores del operador de Newton (A.1) con respecto a  $\omega_b$ :

$$\mathcal{N}\xi_\omega = \frac{dE}{d\omega}\xi + E\xi_\omega. \quad (\text{A.115})$$

Además, sabemos que  $\xi_\omega$  es autovector de  $\mathcal{N}$  con autovalor  $E$  cuando  $\omega \rightarrow 0$  (A.94). Así,

$$\mathcal{N}\xi_\omega = E\xi_\omega. \quad (\text{A.116})$$

Comparando estas dos expresiones, resulta que:

$$\left. \frac{dE}{d\omega} \right|_{\omega=0} \equiv 0, \quad (\text{A.117})$$

es decir, las pendiente de las bandas es nula cuando  $\theta = 0$ , por lo que la banda correspondiente al modo de crecimiento será tangente al eje  $E = 0$ . Estos resultados son también válidos para  $\theta = \pi$ .

Este resultado tiene una aplicación inmediata para el cálculo de la signatura de Krein en  $\theta = 0$  y  $\theta = \pi$ . Como vimos en el Capítulo 4, ésta se puede definir como:

$$\kappa(\theta_\nu) = -\text{sgn} \left( \frac{dE_\nu(\theta)}{d\theta} \Big|_{\theta=\theta_\nu} \right). \quad (\text{A.118})$$

Así, la signatura de Krein es nula en  $\theta = 0$  y  $\theta = \pi$ .

### Resumen

En  $\theta = 0$ , los elementos de la base del subespacio correspondiente al autovalor doble 1 son  $\left\{ \begin{bmatrix} \delta x \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ j\delta v \end{bmatrix} \right\}$  ó  $\left\{ \begin{bmatrix} j\delta x \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ \delta v \end{bmatrix} \right\}$ .

Uno de los dos es periódico y el otro es no acotado. El vector  $\begin{bmatrix} \delta x \\ 0 \end{bmatrix}$  es par y, puede ser o bien periódico o bien no acotado y  $\begin{bmatrix} 0 \\ \delta v \end{bmatrix}$  es impar y no acotado o periódico, dependiendo del primer vector. Los modos no acotados crecen linealmente con el periodo.

Solamente las bandas en que la solución par es periódica tienen un autovalor correspondiente en el jacobiano.

### A.6. Signatura de Krein en el límite anti-continuo

En el límite anti-continuo, la matriz de Floquet es diagonal por bloques. Cada bloque es de dimensión 2 pues las autofunciones son de la forma  $\Omega(0) = \{\xi(0), \pi(0)\}$ . Existirán dos tipo de bloques: unos estarán asociados a los osciladores excitados (con autovalor +1) y serán de la forma (A.105); los otros están asociados a los osciladores en reposo y el autovalor asociado tendrá  $\theta \neq 0$ . Estos bloques son de la forma [133]:

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\omega_o \text{sen } \theta \\ (\text{sen } \theta)/\omega_o & \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (\text{A.119})$$

de forma que los autovalores son  $e^{\pm j\theta}$ . Se define la signatura de Krein a partir de un producto simpléctico:

$$\kappa(\theta) = \text{sgn}([\Omega, \mathcal{M}\Omega]) = \text{sgn}(\langle \Omega | \mathcal{J}\mathcal{M}\Omega \rangle), \quad (\text{A.120})$$

donde  $\mathcal{J}$  es la matriz simpléctica (A.22), y  $\Omega \equiv [\xi, \pi]$ . Así, la signatura de Krein será:

$$\kappa(\theta) = \text{sgn} \left( \frac{\text{sen } \theta}{\omega_o} (\xi^2 + \omega_o^2 \pi^2) \right), \quad (\text{A.121})$$

es decir,

$$\kappa(\theta) = \text{sgn}(\text{sen } \theta), \quad (\text{A.122})$$

por lo que la signatura de Krein es positiva si el autovalor está en el semiplano superior del plano complejo, y negativa, si está en el inferior.

## B. Demostración del Teorema de Estabilidad de Multibreathers (TEM)

En este apéndice expondremos la demostración del Teorema de Estabilidad de Multibreathers (Sección 4.6), debida a JFR Archilla [12].

Recordemos que el TEM proporciona un método para predecir la estabilidad de multibreathers con acoplamiento débil sin necesidad de realizar cálculo numérico. Este teorema conjuga la teoría de bandas de Aubry con la teoría de perturbaciones degenerada [99].

### *B.1. Introducción a la teoría de perturbaciones degenerada. Notación de Dirac*

El uso de la teoría de perturbaciones se simplifica usando una notación similar a la de mecánica cuántica (o de Dirac), es decir,  $|u\rangle \equiv [u_1(t), \dots, u_N(t)]^\dagger$  (donde  $\dagger$  simboliza la matriz transpuesta).

La teoría de perturbaciones degenerada establece que si  $\mathcal{N}_0$  es un operador con un autovalor degenerado  $E_0$ , el cual tiene autovectores  $\{|v_n\rangle\}$  ortonormales con respecto al producto escalar, es decir,  $\langle v_n | v_m \rangle = \delta_{nm}$ , y si  $\varepsilon \tilde{\mathcal{N}}$  es una perturbación de  $\mathcal{N}_0$ , con  $\varepsilon$  pequeño; entonces, en el primer orden en  $\varepsilon$ , los autovalores de  $\mathcal{N}_0 + \varepsilon \tilde{\mathcal{N}}$  son  $E_0 + \varepsilon \lambda_i$ , siendo  $\lambda_i$  los autovalores de la matriz de la perturbación  $Q$ . Los elementos de esta matriz son  $Q_{nm} = \langle v_n | \tilde{\mathcal{N}} | v_m \rangle$ .

Nótese que la teoría de perturbaciones en mecánica cuántica suele estar basada en la ecuación de Schrödinger, cuya coordenada es espacial ( $x$ ). Sin embargo, la teoría de bandas de Aubry considera ecuaciones de Hill, las cuales son equivalentes a aquéllas salvo por el hecho de que la variable es el tiempo ( $t$ ). Esto justifica la elección de la denominada, en mecánica cuántica, teoría de perturbaciones independiente del tiempo.

Supongamos que nuestro sistema es una red de tipo Klein–Gordon con acoplamiento lineal. Podemos escribir las ecuaciones de forma compacta:

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C \sum_{m=1}^N J_{nm} u_m = 0 \quad n = 1, \dots, N. \quad (\text{B.1})$$

donde  $C$  es la constante de acoplo y  $J$  es una matriz de acoplo, la cual es constante e incluye las condiciones de contorno.

Si definimos  $V(u) = [V(u_1), \dots, V(u_N)]^\dagger$  y, de manera análoga, sus derivadas, la ecuación anterior puede escribirse usando la notación de Dirac:

$$|\ddot{u}\rangle + |V'(u)\rangle + C J |u\rangle = 0. \quad (\text{B.2})$$

Recordemos que las propiedades de estabilidad lineal de la solución  $|u\rangle$  dependen de las de la ecuación de autovalores del operador de Newton  $\mathcal{N}_\varepsilon$ , el cual se expresa en la notación de Dirac de la forma:

$$\mathcal{N}_\varepsilon(u(\varepsilon, t)) |\xi\rangle \equiv |\ddot{\xi}\rangle + V''(u(\varepsilon, t)) \cdot |\xi\rangle + C J |\xi\rangle = E |\xi\rangle. \quad (\text{B.3})$$

## B.2. Ecuaciones en el límite anti-continuo

La teoría de perturbaciones nos permitirá conocer el efecto cuando el parámetro perturbativo es pequeño. En nuestro caso éste será la constante de acoplo  $C$ . Así, debemos conocer las soluciones de las ecuaciones dinámicas y de las ecuaciones de autovalores del operador de Newton cuando  $C = 0$ , es decir, en el límite anti-continuo. El autovalor degenerado del cual queremos saber cómo afecta la perturbación será  $E = 0$ , por lo que restringiremos nuestras soluciones a las que están en el subespacio correspondiente a ese autovalor.

Recordemos que en el límite anti-continuo, las ecuaciones dinámicas tienen  $p$  soluciones correspondientes a osciladores excitados con frecuencia  $\omega_b$  o periodo  $T$  (los cuales pueden vibrar con fase cero,  $u_n(t) = u^0(t)$ , o fase  $\pi$ ,  $u_n(t) = u^0(t + T/2)$ ), y  $N - p$  correspondientes a osciladores en reposo. Estas tres soluciones llevan asociado un código 1,  $-1$  ó 0, respectivamente, de forma que el multibreather completo se puede caracterizar por un código  $\sigma$  unión de los anteriores.

La ecuación (B.3) en el límite anti-continuo se desacopla en  $p$  ecuaciones correspondientes a osciladores excitados:

$$\ddot{\xi}_n + V''(u^0) \xi_n = E \xi_n, \quad (\text{B.4})$$

y  $N - p$  correspondientes a osciladores en reposo:

$$\ddot{\xi}_n + \omega_o^2 \xi_n = E \xi_n, \quad (\text{B.5})$$

con  $\omega_o = \sqrt{V''(0)}$ .

La única solución periódica para  $E = 0$  en el sistema (B.4) es el modo de fase  $u^0(t)$ <sup>1</sup>. Esta solución da lugar a  $p$  bandas tangentes al eje  $E = 0$  idénticas (ver Sección 4.5.2). Esta banda tiene curvatura positiva si el potencial es blando y negativa si es duro.

En el caso del sistema de ecuaciones (B.5), la única solución con la frecuencia del breather es la nula, por lo que no ha de tenerse en cuenta en el análisis perturbativo.

<sup>1</sup> Habría otra solución, el modo de crecimiento, pero no esta acotada y, por lo tanto, no es periódica.

### B.3. Efecto del acoplamiento

Cuando se introduce el acoplamiento en el sistema, las bandas tangentes al eje  $E = 0$  rompen su degeneración. Puede ocurrir entonces que bajen o suban. En el caso de un potencial blando, el multibreather se hará inestable siempre que suba alguna banda, mientras que si el potencial es duro, la inestabilidad aparecerá al bajar alguna de ellas.

En este apartado veremos cuál de estos efectos ocurre. Para ello haremos uso de la teoría de perturbaciones degeneradas expuesta en la Sección B.1. La aplicación de ésta dependerá de si los osciladores excitados vibran en fase (el código sólo incluye 0 y 1) o, si, por el contrario, existe algún oscilador vibrando en oposición de fase (existe algún  $-1$  en el código). Estudiemos cada caso por separado:

#### B.3.1. Osciladores en fase

Para poder aplicar la teoría de perturbaciones necesitamos un producto escalar adecuado, una base ortonormal del subespacio propio del autovalor  $E_0 = 0$  e identificar el operador de la perturbación ( $\tilde{N}$ ).

El producto escalar se define de la forma:

$$\langle \xi_1 | \xi_2 \rangle = \sum_{n=1}^N \int_{-T/2}^{T/2} \xi_1^*(t) \xi_2(t) \cdot dt, \quad (\text{B.6})$$

de forma que los  $p$  elementos de la base son:

$$|n\rangle = \frac{1}{\mu} [0, \dots, 0, \xi_n, 0, \dots, 0]^\dagger = \frac{1}{\mu} [0, \dots, 0, \dot{u}^0, 0, \dots, 0]^\dagger, \quad (\text{B.7})$$

estando el elemento no nulo en la posición  $n$ -ésima.  $\mu = \sqrt{\int_{-T/2}^{T/2} (\dot{u}^0)^2 dt}$  es un factor que se introduce para que la base sea ortonormal.

Basta con conocer los autovalores correspondientes a las soluciones periódicas y reales, es decir, cuyo argumento de Floquet  $\theta = 0$ , ya que las intersecciones de las bandas con el eje  $\theta = 0$  se corresponden con los soluciones periódicas de la ecuación (B.3). Por tanto, los  $p$  vectores  $|n\rangle$  forman la base del autovalor degenerado  $E_0 = 0$  necesaria para aplicar la teoría de perturbaciones.

Para obtener el operador de la perturbación, desarrollamos la ecuación (B.3) en serie de Taylor alrededor de  $C = 0$  hasta el primer orden en  $C$ .

$$\mathcal{N}_\varepsilon(u(C, t)) |\xi\rangle = |\ddot{\xi}\rangle + V''(u(0, t)) \cdot |\xi\rangle + C (V'''(u(0, t)) \cdot u_C(0, t) \cdot |\xi\rangle + J |\xi\rangle) \quad (\text{B.8})$$

donde se define el producto  $\cdot$  como el producto lista, es decir,  $f(u) \cdot |\xi\rangle$  es la matriz columna cuyos elementos son  $f(u_n(t)) \xi_n(t)$ . Como

$$\mathcal{N}_o(u(C, t))|\xi\rangle = (E_0 + C \lambda_i)|\xi\rangle, \quad (\text{B.9})$$

el operador de la perturbación será:

$$\tilde{\mathcal{N}}|\xi\rangle = V'''(u(0, t)) \cdot u_C(0, t) \cdot |\xi\rangle + C|\xi\rangle. \quad (\text{B.10})$$

Así, los autovalores perturbados  $E_i$  serán  $C \lambda_i$ , donde  $\lambda_i$  son los autovalores de la matriz  $Q$ , cuyos elementos  $Q_{nm}$  son:

$$Q_{nm} = \langle n|\tilde{\mathcal{N}}|m\rangle = \langle n|\tilde{V}|m\rangle + \langle n|J|m\rangle, \quad (\text{B.11})$$

donde  $\tilde{V} = V'''(u(0, t)) \cdot u_C(0, t)$ .

Para simplificar los cálculos, es equivalente sustituir la matriz  $J$  por  $\tilde{J}$ , siendo esta última igual a la primera pero sin las filas y columnas correspondientes a los osciladores en reposo.

Para calcular los elementos de matriz de  $\tilde{V}$ , debe conocerse  $u_C(0, t)$ . Esto puede hacerse derivando las ecuaciones dinámicas (B.2) respecto a  $C$ , en  $C = 0$ :

$$|\ddot{u}_C\rangle + V''(u) \cdot |u_C\rangle + J|u\rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \mathcal{N}_0|u_C\rangle = -J|u\rangle, \quad (\text{B.12})$$

donde  $|u_C\rangle$  se calcula en  $C = 0$ .

Además, los elementos de matriz de  $\tilde{V}$  tienen la expresión:

$$\begin{aligned} \langle n|\tilde{V}|m\rangle = & \\ \frac{1}{\mu^2} \int_{-T/2}^{T/2} [\dots, 0, \dot{u}_n^0, 0, \dots] & \quad [\dots, 0, V'''(u^0) u_{n,C} \dot{u}_m^0, 0, \dots]^\dagger dt = \\ & \frac{\delta_{nm}}{\mu^2} \int_{-T/2}^{T/2} \dot{u}^0 V'''(u^0) u_{n,C} \dot{u}^0 dt, \quad (\text{B.13}) \end{aligned}$$

con  $u_{n,C} = \frac{\partial u_n}{\partial C}$  en  $C = 0$ . Esto es, sólo los elementos diagonales de  $\langle n|\tilde{V}|n\rangle$  son distintos de cero. Para calcular la última integral de la ecuación anterior, integramos por partes y usamos la propiedad de que la integral en un periodo de la derivada de una función periódica es cero, y además, que las funciones  $u_{n,C}$  son periódicas.

En la siguiente deducción, todos los límites de integración son  $-T/2$  y  $T/2$ , y los términos entre corchetes provenientes de la integración por partes serán cero. Así, la última integral en la ecuación (B.13) será:

$$\begin{aligned} & \int_{-T/2}^{T/2} \dot{u}^0 V'''(u^0) u_{n,C} \dot{u}^0 dt = \\ & [i^0 u_{n,C} V''(u^0)]_{-T/2}^{T/2} - \int V''(u^0) \dot{u}^0 \dot{u}_{n,C} dt - \int V''(u^0) \ddot{u}^0 u_{n,C} dt = \\ & - [V'(u^0) \dot{u}_{n,C}]_{-T/2}^{T/2} + \int V'(u^0) \ddot{u}_{n,C} dt - \int V''(u^0) \ddot{u}^0 u_{n,C} dt = \\ & - \int \ddot{u}^0 (\ddot{u}_{n,C} + V''(u^0) u_{n,C}) dt. \quad (\text{B.14}) \end{aligned}$$



El término entre paréntesis es la  $n$ -ésima componente de la ecuación (B.12), es decir, se transforma en  $-\sum_m J_{nm} u_m^0$ , donde  $u_m^0 = u^0$ , si el  $m$ -ésimo oscilador está excitado, y cero en cualquier otro caso. O, dicho de otro modo, será igual a  $-\sum_m \tilde{J}_{nm} u^0 = -(\sum_m \tilde{J}_{nm}) u^0$ . En consecuencia, La ecuación (B.14) se transforma en:

$$\int_{-T/2}^{T/2} \dot{u}^0 V'''(u^0) u_{n,C} \dot{u}^0 dt = \quad (\text{B.15})$$

$$\begin{aligned} & \left( \sum_m \tilde{J}_{nm} \right) \int \ddot{u}^0 u^0 dt = \\ & \left( \sum_m \tilde{J}_{nm} \right) \left( [\dot{u}^0 u^0]_{-T/2}^{T/2} - \int (\dot{u}^0)^2 dt \right) = - \left( \sum_m \tilde{J}_{nm} \right) \mu^2. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Esto es, la ecuación (B.13) implica que:

$$\langle n | \tilde{V} | m \rangle = \left( - \sum_p \tilde{J}_{np} \right) \delta_{nm} \quad (\text{B.17})$$

Por tanto, los elementos diagonales de la matriz de la perturbación  $Q$  son:

$$Q_{nn} = - \sum_m \tilde{J}_{nm} + \tilde{J}_{nn} = - \sum_{m \neq n} \tilde{J}_{nm}. \quad (\text{B.18})$$

Resumiendo, la matriz de la perturbación  $Q$  viene dada por:

$$Q_{nm} = \tilde{J}_{nm}, \quad n \neq m \quad ; \quad Q_{nn} = - \sum_{m \neq n} \tilde{J}_{nm}, \quad (\text{B.19})$$

donde  $\tilde{J}$  es la matriz de acoplo sin las  $N - p$  filas y columnas correspondientes a osciladores en reposo.

### B.3.2. Osciladores en fase y anti-fase

Los resultados del apartado anterior pueden extenderse al caso en el que existe algún oscilador excitado vibrando en oposición de fase. Dependiendo de que el potencial on-site sea simétrico o no, la expresión de la matriz  $Q$  varía significativamente. Consideremos ambos casos por separado:

#### Potencial simétrico

En este caso  $u^0(t + T/2) = -u^0(t)$  y  $\dot{u}^0(t + T/2) = -\dot{u}^0(t)$ . Definamos un nuevo código  $\tilde{\sigma}$ , que es igual al del multibreather ( $\sigma$ ), pero con +1 en lugar de ceros. Supongamos además que  $u_n = \tilde{\sigma}_n \tilde{u}_n$ . Sustituyendo en las ecuaciones dinámicas



(B.1), y teniendo en cuenta que  $V'(u_n) = V'(\tilde{\sigma}_n \tilde{u}_n) = \tilde{\sigma}_n V'(\tilde{u}_n)$  ( $V'(u)$  es impar), obtenemos que:

$$\tilde{\sigma}^n \ddot{\tilde{u}}^n + \tilde{\sigma}_n V'(\tilde{u}^n) + C \sum_m J_{nm} \tilde{\sigma}_m \tilde{u}^m = 0. \tag{B.20}$$

Multiplicando por  $\tilde{\sigma}_n$ , y usando que su cuadrado es +1, tenemos:

$$\ddot{\tilde{u}}^n + V'(\tilde{u}^n) + C \sum_m \tilde{\sigma}_n J_{nm} \tilde{\sigma}_m \tilde{u}^m = 0. \tag{B.21}$$

Como los elementos de  $J$  con un índice correspondiente a un oscilador en reposo no aparecerán en los cálculos, podemos definir una nueva matriz de acoplo, cuyos elementos son  $\sigma_n J_{nm} \sigma_m$ , es decir,  $\text{Diag}(\sigma) J \text{Diag}(\sigma)$ . Los autovalores  $E_i$  tendrán el signo correcto, pero las autofunciones  $\xi$  del operador de Newton correspondiente a (B.21) deben transformarse para recuperar las originales mediante el cambio  $|\xi\rangle = \text{Diag}(\sigma) |\tilde{\xi}\rangle$ .

Así,

$$Q_{nm} = \sigma_n \sigma_m \tilde{J}_{nm}, \quad n \neq m \quad ; \quad Q_{nn} = - \sum_{m \neq n} Q_{nm}. \tag{B.22}$$

*Potencial no simétrico*

La aplicación a potenciales no simétricos implica un cálculo previo.

Si el potencial no es simétrico, existen dos soluciones simétricas en el tiempo y de periodo  $T$  para las ecuaciones dinámicas del oscilador aislado. A saber:  $u^0(t)$ , con código +1, and  $u^0(t + T/2) \neq -u^0(t)$ , con código -1. Los  $p$  elementos de la base,  $\{|n\rangle\}$ , serán los mismos de la ecuación (B.7), pero con  $\dot{u}^0(t + T/2)$  en lugar de  $\dot{u}^0(t)$  si  $\sigma_n = -1$ . Definamos el coeficiente de simetría  $\gamma$  de la siguiente manera:

$$\gamma = - \frac{\int_{-T/2}^{T/2} \dot{u}^0(t) \dot{u}^0(t + T/2) dt}{\int_{-T/2}^{T/2} \dot{u}^0(t) \dot{u}^0(t) dt} \tag{B.23}$$

Si  $\{z_k\}_{k=0}^\infty$  son los coeficientes de Fourier de una serie coseno de  $u^0(t)$ , es decir,  $u^0(t) = z_0 + \sum_{k=1}^\infty 2 z_k \cos(k \omega_b t)$ , entonces:

$$\gamma = - \frac{\sum_{k=1}^\infty (-1)^k k^2 z_k^2}{\sum_{k=1}^\infty k^2 z_k^2}. \tag{B.24}$$

Nótese que el parámetro  $\gamma$  depende de la frecuencia del breather a través de los coeficientes  $z_k$ , y está comprendido entre cero y uno, de forma que  $\gamma = 1$  corresponde al caso simétrico.

A partir de aquí, sólo hay que aplicar los mismos pasos que en el caso simétrico, llegando a que:

$$Q_{nm} = \frac{1}{2} \tilde{J}_{nm} [(\sigma_n \sigma_m + 1) + \gamma(\sigma_n \sigma_m - 1)], \quad n \neq m \quad ; \quad Q_{nn} = - \sum_{m \neq n} Q_{nm}. \quad (\text{B.25})$$

#### B.4. Cálculo del parámetro de simetría $\gamma$ para un potencial de Morse

En este apartado vamos a calcular el valor del parámetro de simetría  $\gamma$  que aparece cuando se estudian potenciales no simétricos. En concreto, vamos a centrarnos en el potencial de Morse, cuyas órbitas poseen una expresión fácil de manejar. Demostraremos que para este potencial,  $\gamma = \omega_b$ .

Supongamos un oscilador aislado sometido a un potencial de Morse. La energía del sistema es:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \dot{x}^2 + \frac{1}{2} (\exp(-x) - 1)^2. \quad (\text{B.26})$$

Buscamos soluciones con periodo  $T = 2\pi/\omega_b$  que sean reversibles en el tiempo, es decir, con  $\dot{x}(0) = 0$ , o, en otras palabras, tal que el sistema en  $t = 0$  se encuentre en un punto de retorno. Existen dos puntos de retornos en el sistema, los cuales vienen dados por la expresión siguiente:  $x_1 = -\log(1 + \sqrt{2\mathcal{E}}) < 0$  y  $x_2 = -\log(1 - \sqrt{2\mathcal{E}}) > 0$ . Si consideramos la solución con  $x(0) = x_1$ ,  $t(x)$  viene dado por:

$$t(x) = \int_{x_1}^x \frac{dx}{\sqrt{2(\mathcal{E} - (\exp(-x) - 1)^2/2)}}, \quad (\text{B.27})$$

lo cual implica que:

$$t(x) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2\mathcal{E}}} \left\{ \frac{\pi}{2} - \arcsin \left[ \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{E}}} \left( 1 + \frac{2\mathcal{E} - 1}{\exp(-x)} \right) \right] \right\}. \quad (\text{B.28})$$

Haciendo  $t = T/2 = \pi/\omega_b$  y  $x = x_2$  se obtiene que  $\omega_b = \sqrt{1 - 2\mathcal{E}}$ .

La inversión de la ecuación (B.28) implica:

$$x(t) = \log \frac{1 - \sqrt{1 - \omega_b^2} \cos \omega_b t}{\omega_b^2}. \quad (\text{B.29})$$

Para calcular  $\gamma$  se necesitan los coeficientes de Fourier de  $x(t)$ . Si la solución  $x(t)$  se expresa como:

$$x(t) = z_0 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} z_k \cos(k \omega_b t), \quad (\text{B.30})$$

los coeficientes  $\{z_k\}_{k=0}^{\infty}$  vienen dados por:

$$z_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} x(\omega_b t) \cos(k \omega_b t) d\omega_b t. \quad (\text{B.31})$$

El cálculo de esta integral es trivial [98] y da lugar a:

$$z_0 = \log \frac{1 + \omega_b}{2\omega_b^2} \quad ; \quad z_k = -\frac{1}{n} \left( \frac{1 - \omega_b}{1 + \omega_b} \right)^{k/2}, \quad (\text{B.32})$$

Sustituyendo estos coeficientes de Fourier en la ecuación (B.24), obtenemos:

$$\gamma = -\frac{\sum_{k \geq 1} (-r)^k}{\sum_{k \geq 1} r^k} \quad \text{con} \quad r = \frac{1 - \omega_b}{1 + \omega_b}. \quad (\text{B.33})$$

Como  $|r| < 1$ ,  $\gamma$  puede calcularse fácilmente usando las expresiones para la suma de una progresión geométrica infinita:

$$\sum_{k \geq 1} r^k = \frac{r}{1 - r}, \quad \sum_{k \geq 1} (-r)^k = -\frac{r}{1 + r} \quad (\text{B.34})$$

Introduciendo estas expresiones en (B.33) se obtiene finalmente que

$$\gamma = \omega_b, \quad (\text{B.35})$$

como queríamos demostrar.

## B.5. Algunas consideraciones

### B.5.1. Elementos diagonales

Los elementos diagonales de  $C$  no juegan ningún papel en la aplicación del TEM, ya que no aparecen en la matriz de la perturbación (ver ecuación (B.12)). Por tanto, un acoplamiento del tipo muelle como  $C(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})$  da idénticos resultados que el de tipo dipolar  $-C(u_{n-1} + u_{n+1})$ .

### B.5.2. Modo de fase global

La matriz  $Q$  tiene siempre un autovalor nulo correspondiente al modo de fase global, lo que es coherente con la teoría. Además, puede ser útil tenerlo en cuenta pues reduce el orden de la ecuación característica.

Consideremos la matriz  $Z = Q - \lambda I$ , siendo  $\det(Z) = 0$  la ecuación característica de  $Q$ .  $\det(Z)$  no varía si cambiamos  $Z$  por otra matriz  $Z'$  obtenida añadiendo a la primera la columna la suma de las restantes. Entonces  $Z'_{11} = -\sum_{m \neq 1} \tilde{J}_{1,m} - \lambda + \sum_{m \neq 1} \tilde{J}_{1,m} = -\lambda$  e, igualmente,  $Z'_{n,1} = -\lambda$ . Ahora podemos anular todos los elementos de la primera columna excepto uno, por ejemplo, restando la primera fila del resto de ellas. El resultado es una matriz con la primera columna de ceros excepto en la primera fila que será igual a  $-\lambda$ . Por tanto,  $\lambda = 0$  es un autovalor de  $Q$  y el grado de la ecuación característica se reduce en una unidad.

---

El autovector correspondiente  $\tilde{x}$  satisface la ecuación  $Q \tilde{x} = 0$ . En otras palabras,  $-(\sum_{m \neq n} \tilde{J}_{nm}) \tilde{x}_n + \sum_{m \neq n} \tilde{J}_{nm} \tilde{x}_m = 0 \forall n$ , cuya solución es  $\tilde{x}_n = 1 \forall n$ . Por tanto,  $x = S \tilde{x} = \sigma$ , que es el modo de fase global.

## Bibliografía

- [1] MJ Ablowitz y JF Ladik. Nonlinear differential-difference equations and Fourier analysis. *Journal of Mathematical Physics*, 17:1011, 1976.
- [2] M Abramowitz y IA Stegun. *Handbook of mathematical functions*. Dover, Nueva York, 1965.
- [3] T Ahn. Multisite oscillations in networks of weakly coupled autonomous oscillators. *Nonlinearity*, 11:965, 1998.
- [4] T Ahn, RS MacKay y JA Sepulchre. Dynamics of relative phases: generalised multibreathers. *Nonlinear Dynamics*, 25:157, 2001.
- [5] C Albanese y J Fröhlich. Periodic solutions of some infinite-dimensional Hamiltonian systems associated with non-linear partial difference equations. I. *Communications in Mathematical Physics*, 116:475, 1988.
- [6] C Albanese y J Fröhlich. Periodic solutions of some infinite-dimensional Hamiltonian systems associated with non-linear partial difference equations. II. *Communications in Mathematical Physics*, 119:677, 1988.
- [7] C Albanese y J Fröhlich. Perturbation theory for periodic orbits in a class of infinite dimensional Hamiltonian systems. *Communications in Mathematical Physics*, 138:193, 1991.
- [8] A Álvarez, JFR Archilla, J Cuevas y FR Romero. Dark breathers in Klein-Gordon lattices. Band analysis of their stability properties. *New Journal of Physics*, 4:72, 2002.
- [9] PW Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, 109:1492, 1958.
- [10] JFR Archilla, PL Christiansen y YuB Gaididei. Interplay of nonlinearity and geometry in a DNA-related, Klein-Gordon model with long-range dipole-dipole interaction. *Physical Review E*, 65:016609, 2001.
- [11] JFR Archilla, PL Christiansen, SF Mingaleev y YuB Gaididei. Numerical study of breathers in a bent chain of oscillators with long range interaction. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34:6363, 2001.

- 
- [12] JFR Archilla, J Cuevas, B Sánchez-Rey y A Álvarez. Demonstration of the stability or instability of multibreathers at low coupling. *Physica D*. Preprint. ArXiv:nlin.PS/0208014.
- [13] JFR Archilla, YuB Gaididei, PL Christiansen y J Cuevas. Stationary and moving breathers in a simplified model of curved alpha-helix proteins. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. Pendiente de publicación. ArXiv:nlin.PS/0206050.
- [14] JFR Archilla, RS MacKay y JL Marín. Discrete breathers and Anderson modes: two faces of the same phenomenon? *Physica D*, 134:406, 1999.
- [15] VI Arnold y A Avez. *Ergodic Problems of Classical Mechanics*. Benjamin, New York, 1968. Ap. 29.
- [16] NW Ashcroft y ND Mermin. *Solid State physics*. Philadelphia Saunders College, 1976.
- [17] S Aubry. The concept of anti-integrability applied to dynamical systems and to structural and electronic models in condensed matter physics. *Physica D*, 71:196, 1994.
- [18] S Aubry. Anti-integrability in dynamical and variational problems. *Physica D*, 86:284, 1995.
- [19] S Aubry. Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization. *Physica D*, 103:201, 1997.
- [20] S Aubry y G Abramovici. Chaotic trajectories in the standard map: the concept of anti-integrability. *Physica D*, 43:199, 1990.
- [21] S Aubry y T Cretegny. Mobility and reactivity of discrete breathers. *Physica D*, 119:34, 1998.
- [22] S Aubry, G Kopidakis y V Kadelburg. Variational proof for hard discrete breathers in some classes of Hamiltonian dynamical systems. *Discrete and Continuous Dynamical Systems-Series B*, 1(3):271, 2001.
- [23] S Aubry, G Kopidakis, AM Morgante y GP Tsironis. Analytic conditions for targeted energy transfer between nonlinear oscillators or discrete breathers. *Physica B*, 296:222, 2001.
- [24] C Baesens, S Kim y RS MacKay. Localised modes on localised equilibria. *Physica D*, 113:242, 1998.
- [25] C Baesens y RS MacKay. Exponential localization of linear response in networks with exponentially decaying coupling. *Nonlinearity*, 10:931, 1997.

- 
- [26] C Baesens y RS MacKay. Algebraic localisation of linear response in networks with algebraically decaying interaction, and application to discrete breathers in dipole-dipole systems. *Helv Phys Acta*, 72:23, 1999.
- [27] D Bambusi. Exponential stability of breathers in Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators. *Nonlinearity*, 9:433, 1996.
- [28] D Bambusi y D Vella. Quasi-periodic breathers in Hamiltonian lattices with symmetries. *Discrete and Continuous Dynamical Systems–Series A*, 8(4):1–14, 2002.
- [29] O Bang y M Peyrard. Higher order breathers solutions to a discrete nonlinear Klein-Gordon model. *Physica D*, 81:9, 1995.
- [30] M Barbi. *Localized solutions in a model of DNA helicoidal structure*. Tesis Doctoral, Università degli Studi di Firenze, 1998.
- [31] M Barbi, S Cocco y M Peyrard. Helicoidal model for DNA opening. *Physics Letters A*, 253:358, 1999.
- [32] M Barbi, S Cocco, M Peyrard y S Ruffo. A twist opening model for DNA. *Journal of Biological Physics*, 24:358, 1999.
- [33] JM Bergamin, T Bountis y MN Vrahatis. Homoclinic orbits of invertible maps. Preprint.
- [34] P Binder, D Abraimov, AV Ustinov, S Flach y Y Zolotaryuk. Observation of breathers in Josephson ladders. *Physical Review Letters*, 84(4):745, 2000.
- [35] B Birnir. Nonexistence of periodic solutions to hyperbolic partial differential equations. En M Gyllenberg y LE Persson, eds., *Analysis, Algebra and Computers in mathematical research*, pág. 43. Marcel Dekker, Nueva York, 1994.
- [36] RE Borland. The nature of the electronic states in disordered one-dimensional systems. *Proceedings of the Royal Society of London Serie A*, 274:529, 1963.
- [37] OM Braun y YuS Kivshar. Nonlinear dynamics of the Frenkel–Kontorova model with impurities. *Physical Review A*, 43:1060, 1991.
- [38] OM Braun y YuS Kivshar. Nonlinear dynamics of the Frenkel–Kontorova model. *Physics Reports*, 306:1, 1998.
- [39] VM Burlakov y SA Kisilev. Molecular-dynamics simulation of the decay kinetics of uniform excitation of an anharmonic 1d chain. *Soviet Physics–JETP*, 72:854, 1991.



- [40] VM Burlakov, SA Kisilev y VN Pyrkov. Computer simulation of intrinsic localized modes in one-dimensional and two-dimensional anharmonic lattices. *Physical Review B*, 42:4921, 1990.
- [41] A Campa. Bubble propagation in a helicoidal molecular chain. *Physical Review E*, 63:021901, 2001.
- [42] DK Campbell y M Peyrard. Chaos and order in nonintegrable model field theories. En DK Campbell, ed., *Chaos / Xaos - Soviet American Perspectives on Nonlinear Science*, pág. 305. American Institute of Physics, Nueva York, 1990.
- [43] Ding Chen, S Aubry y GP Tsironis. Breather mobility in discrete  $\phi^4$  lattices. *Physical Review Letters*, 77:4776, 1996.
- [44] PL Christiansen, YuB Gaididei, M Johansson, KØ Rasmussen, D Usero y L Vázquez. Stabilization of nonlinear excitations by disorder. *Physical Review B*, 56:14407, 1997.
- [45] PL Christiansen, YuB Gaididei y SF Mingaleev. Effects of finite curvature on soliton dynamics in a chain of nonlinear oscillators. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13:1181, 2001.
- [46] S Cocco. *Uno studio teorico delle vibrazioni della struttura elicoidale del DNA B e della transizione di denaturazione*. Tesis Doctoral, Università degli studi di Roma La Sapienza, 2000.
- [47] S Cocco, M Barbi y M Peyrard. Vector nonlinear Klein-Gordon lattices: General derivation of small amplitude envelope soliton solutions. *Physics Letters A*, 253:161, 1999.
- [48] S Cocco y R Monasson. Statistical mechanics of torque induced denaturation of DNA. *Physical Review Letters*, 83:5178, 1999.
- [49] S Cocco y R Monasson. Theoretical study of collective modes in DNA at ambient temperature. *J. Chem. Phys.*, 112:10017, 2000.
- [50] T Cretegny. *Dynamique collective et localisation de l'énergie dans les reseaux non-linéaires*. Tesis Doctoral, École Normale Supérieure de Lyon, 1998.
- [51] T Cretegny y S Aubry. Spatially inhomogeneous time-periodic propagating waves in anharmonic systems. *Physical Review B*, 55:R11929, 1997.
- [52] T Cretegny y S Aubry. Patterns of energy flux in periodic solutions of Klein-Gordon lattices. *Physica D*, 113:162, 1998.
- [53] T Cretegny, R Livi y M Spicci. Breather dynamics in diatomic FPU chains. *Physica D*, 119:88, 1998.

- 
- [54] J Cuevas. *Localización de energía en redes anarmónicas*. Trabajo de investigación, Universidad de Sevilla, Diciembre 2001.
- [55] J Cuevas, JFR Archilla, YuB Gaididei y FR Romero. Moving breathers in a DNA model with competing short- and long-range dispersive interactions. *Physica D*, 163:106, 2002.
- [56] J Cuevas, JFR Archilla, F Palmero y F Romero. Numerical study of two-dimensional disordered Klein-Gordon lattices with cubic soft anharmonicity. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34:L1-L10, 2001.
- [57] J Cuevas, F Palmero, JFR Archilla y FR Romero. Moving discrete breathers in a Klein-Gordon chain with an impurity. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. Pendiente de publicación. ArXiv:nlin.PS/0203026.
- [58] J Cuevas, F Palmero, JFR Archilla y FR Romero. Moving breathers in a bent DNA model. *Physics Letters A*, 299:221, 2002.
- [59] D Cule y T Hwa. Denaturation of heterogeneous DNA. *Physical Review Letters*, 79:2375, 1997.
- [60] I Daumont, T Dauxois y M Peyrard. Modulational instability: first step towards energy localization in nonlinear lattices. *Nonlinearity*, 10:617, 1997.
- [61] T Dauxois y M Peyrard. Energy localization in nonlinear lattices. *Physical Review Letters*, 70(25):3935, 1993.
- [62] T Dauxois y M Peyrard. Entropy-driven transition in a one-dimensional system. *Physical Review E*, 51:4027, 1995.
- [63] T Dauxois y M Peyrard. A nonlinear model for DNA melting. En M Peyrard, ed., *Nonlinear Excitations in Biomolecules*, pág. 128. Editions de Physique, Springer-Verlag, 1995.
- [64] T Dauxois, M Peyrard y AR Bishop. Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Physical Review E*, 47:684, 1993.
- [65] T Dauxois, M Peyrard y AR Bishop. Entropy-driven DNA denaturation. *Physical Review E*, 47:R44, 1993.
- [66] T Dauxois, M Peyrard y AR Bishop. Thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Physica D*, 66:35, 1993.
- [67] T Dauxois, M Peyrard y CR Willis. Localized breather-like solution in a discrete Klein-Gordon model and application to DNA. *Physica D*, 57:267, 1992.
- [68] T Dauxois, M Peyrard y CR Willis. Discreteness effects on the formation and propagation of breathers in nonlinear Klein-Gordon equations. *Physical Review E*, 48:4768, 1993.

- [69] P Dean. The vibrational properties of disordered systems: numerical studies. *Reviews of Modern Physics*, 44:127, 1972.
- [70] J Denzler. Nonpersistence of breathers familiares for the perturbed sine-Gordon equation. *Communications in Mathematical Physics*, 158:397, 1993.
- [71] RK Dodd, JC Eilbeck, JD Gibbon y HC Morris. *Solitons and nonlinear wave equations*. Academic Press, New York, 1982.
- [72] AS Dolgov. Localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure. *Soviet Physics Solid State*, 28:907, 1986.
- [73] DB Duncan, JC Eilbeck, H Feddersen y JAD Wattis. Solitons on lattices. *Physica D*, 68:1, 1993.
- [74] EN Economou. *Green's functions in quantum physics*, tomo 7 de *Springer series in solid-state sciences*. Springer-Verlag, Berlín, 2ª edición, 1990.
- [75] SW Englander, NR Kallenbach, AJ Heeger, JA Krumhansl y S Litwin. Natural of the opening state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA*, 77:7222, 1980.
- [76] Z Fei, YuS Kivshar y L Vázquez. Resonant kink-impurity interactions in the  $\phi^4$  model. *Physical Review A*, 46:5214, 1992.
- [77] Z Fei, YuS Kivshar y L Vázquez. Resonant kink-impurity interactions in the sine-Gordon model. *Physical Review A*, 45:6019, 1992.
- [78] E Fermi, JR Pasta y SM Ulam. Studies of nonlinear problems. Tech. Rep. LA-1940, Los Alamos National Laboratory, Mayo 1955.
- [79] E Fermi, JR Pasta y SM Ulam. *Collected Papers of Enrico Fermi*, tomo 2, pág. 978. University of Chicago Press, Chicago, 1965.
- [80] HW Fink y C Schönenberger. Electrical conduction through DNA molecules. *Nature*, 308:407, 2000.
- [81] S Flach. Conditions on the existence of localized excitations in nonlinear discrete systems. *Physical Review E*, 50:3134, 1994.
- [82] S Flach. Tangent bifurcation of band edge plane waves, dynamical symmetry breaking and vibrational localization. *Physica D*, 91:223, 1996.
- [83] S Flach. Breathers on lattices with long range interaction. *Physical Review E*, 58:R4116, 1998.
- [84] S Flach. Energy properties of discrete breathers. *Physica D*, 113:184, 1998.
- [85] S Flach y K Kladko. Moving discrete breathers? *Physica D*, 127:61, 1999.

- 
- [86] S Flach y CR Willis. Movability of localized excitations in nonlinear discrete systems. *Physical Review Letters*, 72:1777, 1994.
- [87] S Flach y CR Willis. Discrete breathers. *Physics Reports*, 295:181, 1998.
- [88] LM Floría. Superconducting ladders take breather. *Physics World*, 13(4):23, Abril 2000.
- [89] LM Floría, JL Marín y JJ Mazo. Física de los modos discretos. *Investigación y Ciencia*, 309:68, Junio 2002.
- [90] K Forinash, T Cretegny y M Peyrard. Local modes and localization in a multicomponent nonlinear lattices. *Physical Review E*, 55:4740, 1997.
- [91] K Forinash, M Peyrard y BA Malomed. Interaction of discrete breathers with impurity modes. *Physical Review E*, 49:3400, 1994.
- [92] J Fröhlich y T Spencer. Absence of diffusion in the Anderson tight binding model for large disorder or low energy. *Communications in Mathematical Physics*, 88:151, 1983.
- [93] J Fröhlich, T Spencer y CE Wayne. Localization in disordered, nonlinear dynamical systems. *Journal of Statistical Physics*, 42:247, 1986.
- [94] G Gaeta, C Reiss, M Peyrard y T Dauxois. Simple models of nonlinear DNA dynamics. *Rivista del Nuovo Cimento*, 17:1, 1994.
- [95] YuB Gaididei, SF Mingaleev y PL Christiansen. Curvature-induced symmetry breaking in nonlinear Schrödinger models. *Physical Review E*, 62:R53, 2000.
- [96] YuB Gaididei, SF Mingaleev, PL Christiansen y KØ Rasmussen. Effects of nonlocal dispersive interactions on self-trapping excitations. *Physical Review E*, 55(3):6141–6150, 1997.
- [97] P Glendinning. *Stability, instability and chaos: An introduction to the theory of nonlinear differential equations*. Cambridge University Press, 1994.
- [98] IS Gradshteyn y IM Ryzhik. *Table of integrals, series, and products*. Academic Press, Nueva York, 1965.
- [99] D Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, Nueva Jersey, 1995.
- [100] DJ Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. Prentice Hall, Nueva Jersey, 1981.
- [101] K Hori y S Takeno. Low-frequency and high-frequency moving anharmonic localized modes in a one-dimensional lattice with quartic anharmonicity. *Journal of the Physical Society of Japan*, 61:4263, 1992.

- 
- [102] K Hori y S Takeno. Moving self-localized modes for the displacement field in a one-dimensional lattice system with quartic anharmonicity. *Journal of the Physical Society of Japan*, 61:2186, 1992.
- [103] PA Houle. Phase plane of moving discrete breathers. *Physical Review E*, 53:3657, 1997.
- [104] M Hörnquist. *Aperiodically ordered structures in one dimension*. Tesis Doctoral, Universidad de Linköping, Departamento de Física y Tecnología de la Medida (IFM), 1999.
- [105] M Hörnquist, E Lennholm y C Basu. Discrete breathers in aperiodic diatomic FPU lattices with long range order. *Physica D*, 136:93, 2000.
- [106] M Hörnquist y R Riklund. Stationary anharmonic gap modes in diatomic aperiodic lattices. *Physical Review B*, 55:875, 1997.
- [107] M Ibañes, JM Sancho y GP Tsironis. Dynamical properties of discrete breathers in curved chains with first and second neighbors interaction. *Physical Review E*, 65:041902, 2002.
- [108] G James. Centre manifold reduction for quasilinear discrete systems. Preprint.
- [109] G James. Existence of breathers on FPU lattices. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Série I*, 232:581, 2001.
- [110] M Johansson y YuS Kivshar. Discreteness-induced oscillatory instabilities of dark solitons. *Physical Review Letters*, 82:85, 1999.
- [111] M Johansson y S Aubry. Existence and stability of quasiperiodic breathers in the Discrete Nonlinear Schrödinger Equation. *Nonlinearity*, 10:1151, 1997.
- [112] M Johansson, S Aubry, YuB Gaididei, PL Christiansen y KØ Rasmussen. Dynamics of breathers in Discrete Nonlinear Schrödinger models. *Physica D*, 119:115, 1998.
- [113] G Kalosakas, Y Zolotaryuk, GP Tsironis y EN Economou. Propagation of solitons in hydrogen-bonded chains with mass variation. *Physical Review E*, 56:1088, 1997.
- [114] SA Kisilev y VI Rupasov. Stationary vibrational modes of a polyatomic chain of particles interacting via an even order potential. *Physics Letters A*, 148:355, 1990.
- [115] C Kittel. *Física del estado sólido*. Reverté, Barcelona, 3ª edición, 1998.
- [116] YuS Kivshar. Soliton scattering by impurities in hydrogen-bonded chains. *Physical Review A*, 43:3117, 1991.

- 
- [117] YuS Kivshar, Z Fei y L Vázquez. Resonant soliton-impurity interactions. *Physical Review Letters*, 67:1177, 1991.
- [118] YuS Kivshar, W Królikowski y OA Chubykalo. Dark solitons in discrete lattices. *Physical Review E*, 50(6):5020, 1994.
- [119] AN Kolmogorov y SV Fomin. *Elementos de la teoría de funciones y del análisis funcional*. Mir, Moscú, 1972.
- [120] VV Konotop y S Takeno. Stationary dark localized modes: Discrete nonlinear Schrödinger equations. *Physical Review E*, 60:1001, 1999.
- [121] G Kopidakis y S Aubry. Intraband discrete breathers in disordered nonlinear systems. i: Delocalization. *Physica D*, 130:155, 1999.
- [122] G Kopidakis y S Aubry. Discrete breathers and delocalization in nonlinear disordered systems. *Physical Review Letters*, 84:3236, 2000.
- [123] G Kopidakis y S Aubry. Intraband discrete breathers in disordered nonlinear systems. ii: Localization. *Physica D*, 139:247, 2000.
- [124] G Kopidakis, S Aubry y GP Tsironis. Targeted energy transfer through discrete breathers in nonlinear systems. *Physical Review Letters*, 87:165501, 2001.
- [125] AM Kosevich y AS Kovalev. Self-localization of vibrations in a one-dimensional anharmonic chain. *Soviet Physics-JETP*, 67:1793, 1974.
- [126] H Kunz y B Souillard. Sur le spectre des opérateurs aux différences finies aléatoires. *Communications in Mathematical Physics*, 78:201, 1980.
- [127] PA Lee y TV Ramakrishnan. Disordered electronic systems. *Reviews of Modern Physics*, 57:287, 1985.
- [128] EM Lifshitz. Optical behaviour of non-ideal crystal lattices in the infra-red. *Journal of Physics (USSR)*, 7:215, 1943.
- [129] R Livi, M Spicci y RS MacKay. Breathers on a diatomic FPU chain. *Nonlinearity*, 10:1421, 1997.
- [130] RS MacKay. Discrete breathers. Próxima publicación en Nature.
- [131] RS MacKay. Discrete breathers: classical and quantum. *Physica A*, 288:175, 2000.
- [132] RS MacKay y S Aubry. Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators. *Nonlinearity*, 7:1623, 1994.

- [133] RS MacKay y JA Sepulchre. Stability of discrete breathers. *Physica D*, 119:148, 1998.
- [134] RS MacKay y JA Sepulchre. Effective Hamiltonian for travelling discrete breathers. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 65:3985, 2002.
- [135] W Magnus, F Oberhettinger y RP Soni. *Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics*. Springer-Verlag, Berlín, 1966.
- [136] AA Maradudin, EW Montroll y GH Weiss. *Theory of lattice dynamics in the harmonic approximation*. Academic Press, Nueva York, 1963.
- [137] JL Marín. *Modos Intrínsecos Localizados en redes no lineales*. Tesis Doctoral, Universidad de Zaragoza, Departamento de Física de la Materia Condensada, Junio 1997.
- [138] JL Marín y S Aubry. Breathers in nonlinear lattices: Numerical methods based on the anti-integrability concept. En L Vázquez, L Streit y VM Pérez-García, eds., *Nonlinear Klein-Gordon and Schrödinger Systems: Theory and Applications*, pág. 317. World Scientific, Singapore and Philadelphia, 1995.
- [139] JL Marín y S Aubry. Breathers in nonlinear lattices: Numerical calculation from the anticontinuous limit. *Nonlinearity*, 9:1501, 1996.
- [140] JL Marín, JC Eilbeck y FM Russell. Localized moving breathers in a 2-D hexagonal lattice. *Physics Letters A*, 248:225–229, 1998.
- [141] JL Marín y S Aubry. Finite size effects on instabilities of discrete breathers. *Physica D*, 119:163, 1998.
- [142] JL Marín, S Aubry y LM Floría. Intrinsic localized modes: Discrete breathers. existence and linear stability. *Physica D*, 113:283, 1998.
- [143] JL Marín, T Cretegny y S Aubry. Instability by a pinning mode and Peierls-Nabarro barrier of a breather in a nonlinear lattice. No publicado.
- [144] JL Marín, JC Eilbeck y FM Russel. 2-D breathers and applications. En PL Christiansen y MP Soerensen, eds., *Nonlinear Science at the dawn of the 21st century*, pág. 293. Springer, 2000.
- [145] JL Marín, F Falo, PJ Martínez y LM Floría. Discrete breathers in dissipative lattices. *Physical Review E*, 63:066603, 2001.
- [146] JL Marín, FM Russell y JC Eilbeck. Breathers in cuprate-like lattices. *Physics Letters A*, 281:21–25, 2001.
- [147] SF Mingaleev, PL Christiansen, YuB Gaididei, M Johansson y KØ Rasmussen. Models for energy and charge transport and storage in biomolecules. *Journal of Biological Physics*, 25:41–63, 1999.

- 
- [148] SF Mingaleev, YuB Gaididei, PL Christiansen y YuB Kivshar. Nonlinearity-induced conformational instability and dynamics of biopolymers. ArXiv:cond-mat/0108362.
- [149] SF Mingaleev, YuB Gaididei, E Majernikova y S Shpyrko. Interplay of disorder and nonlinearity in Klein-Gordon models: Immobile kinks. *Physical Review B*, 59:4074, 1999.
- [150] AM Morgante. *Multibreathers et ondes stationnaires dans des réseaux discrets non-linéaires*. Tesis doctoral, Ecole Polytechnique (CEA), Saclay, Septiembre 2001.
- [151] AM Morgante, M Johansson, G Kopidakis y S Aubry. Standing waves instabilities in a chain of nonlinear coupled oscillators. *Physica D*, 162:53, 2002.
- [152] AM Morgante, M Johansson, S Aubry y G Kopidakis. Breather-phonon resonances in finite-size lattices: 'phantom breathers'? *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35:4999, 2002.
- [153] NF Mott. Electrons in disordered structures. *Advances in Physics*, 16:49, 1967.
- [154] NF Mott y WD Twose. The theory of impurity conduction. *Advances in Physics*, 10:107, 1961.
- [155] V Muto, PS Lomdahl y PL Christiansen. Two-dimensional discrete model for DNA dynamics: Longitudinal wave propagation and denaturation. *Physical Review A*, 42:7452, 1990.
- [156] V Muto, AC Scott y PL Christiansen. Thermally generated solitons in a Toda lattice model of DNA. *Physics Letters A*, 136:33, 1989.
- [157] JB Page. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. *Physical Review B*, 41:7835, 1990.
- [158] M Peyrard y AR Bishop. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Physical Review Letters*, 62:2755, 1989.
- [159] M Peyrard y T Dauxois. Role of the base sequence on the dynamics of DNA melting. En Gruber y Tomassini, eds., *Proceedings of the 6th Joint EPS-APS International Conference on Physics Computing. Physics Computing '94*. European Physical Society, Ginebra, 1994.
- [160] M Peyrard, T Dauxois, H Hoyet y CR Willis. Biomolecular dynamics of DNA: statistical mechanics and dynamical models. *Physica D*, 68:104, 1993.
- [161] M Peyrard y J Farago. Nonlinear localization in thermalized lattices: application to DNA. *Physica A*, 288:199, 2000.



- 
- [162] WH Press, SA Teukolsky, WT Vetterling y BP Flannery. *Numerical Recipes in FORTRAN / C*. Cambridge University Press, 2<sup>a</sup> edición, 1992.
- [163] PV Pávlov y AF Jojlov. *Física del estado sólido*. MIR, Moscú, 1985.
- [164] KØ Rasmussen, C Cai, AR Bishop y N Gronbech-Jensen. Localization in a nonlinear disordered system. *Europhysics Letters*, 47:421, 1999.
- [165] M Reed y B Simon. *Methods of modern mathematical physics I: Functional Analysis*. Academic Press, New York, 1972.
- [166] R Reigada, JM Sancho, M Ibañes y GP Tsironis. Resonant motion of discrete breathers in curved nonlinear chains. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34:8465, 2001.
- [167] FM Russell, Y Zolotaryuk, JC Eilbeck y T Dauxois. Moving breathers in a chain of magnetic pendulums. *Physical Review B*, 55:6304, 1997.
- [168] M Salerno. Discrete model for DNA-promoter dynamics. *Physical Review A*, 44:5292, 1991.
- [169] M Salerno. Dynamical properties of DNA promoters. *Physics Letters A*, 167:49, 1992.
- [170] M Salerno. Quantum deformations of the discrete nonlinear Schrödinger equation. *Physical Review A*, 46(6856), 1992.
- [171] M Salerno y Yu Kivshar. DNA promoters and nonlinear dynamics. *Physics Letters A*, 193:263, 1994.
- [172] KW Sandusky y JB Page. Interrelation between the stability of extended normal modes and the existence of intrinsic localized modes in nonlinear lattices with realistic potentials. *Physical Review B*, 50:866, 1994.
- [173] KW Sandusky, JB Page y KE Schmidt. Stability and motion of Intrinsic Localized Modes in nonlinear periodic lattices. *Physical Review B*, 46:6161, 1992.
- [174] JM Sanz-Serna y MP Calvo. *Numerical Hamiltonian problems*. Chapman and Hall, 1994.
- [175] MV Satarić. The influence of endogenous AC fields on the breather dynamics in DNA. *Physica D*, 126:60, 1999.
- [176] JA Sepulchre y RS MacKay. Localized oscillations in conservative or dissipative networks of weakly coupled autonomous oscillators. *Nonlinearity*, 10:679, 1997.
- [177] JA Sepulchre y RS MacKay. Discrete breathers in disordered media. *Physica D*, 113:342, 1998.

- 
- [178] R Seydel. *Practical Bifurcation and Stability Analysis. From Equilibrium to Chaos*, tomo 5 de *Springer Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer, New York, 1994.
- [179] AJ Sievers y S Takeno. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. *Physical Review Letters*, 61:970, 1988.
- [180] B Sánchez-Rey, JFR Archilla, F Palmero y FR Romero. Breathers in a system with helicity and dipole interaction. *Physical Review E*, 66:017601, 2002.
- [181] BI Swanson, JA Brozik, SP Love, GF Strouse, AR Bishop, W-Z Wang y MI Salkola. Observation of intrinsically localized modes in a discrete low-dimensional material. *Physical Review Letters*, 84:741, 2000.
- [182] S Takeno y K Hori. A propagating self-localized mode in a one-dimensional lattice with quartic anharmonicity. *Journal of the Physical Society of Japan*, 59:3037, 1990.
- [183] S Takeno y K Hori. Self-localized modes in a pure one-dimensional lattice with cubic and quartic lattice anharmonicity. *Journal of the Physical Society of Japan*, 60:947, 1991.
- [184] S Takeno, K Kisoda y AJ Sievers. Intrinsic localized vibrational modes in anharmonic crystals. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 94:242, 1988.
- [185] M Terraneo, M Peyrard y G Casati. Controlling the energy flow in nonlinear lattices: a model for thermal rectifier. *Physical Review Letters*, 88:094302, 2002.
- [186] JL Ting y M Peyrard. Effective breather trapping mechanism for DNA transcription. *Physical Review E*, 53:1011, 1996.
- [187] M Toda. *Theory of nonlinear lattices*. Springer, Berlin, 1989.
- [188] E Trias, JJ Mazo y TP Orlando. Discrete breathers in nonlinear lattices: experimental detection in a Josephson array. *Physical Review Letters*, 84:741, 2000.
- [189] GP Tsironis. An algebraic approach to discrete breather construction. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35:951, 2002.
- [190] GP Tsironis, JM Sancho y M Ibañes. Localized energy transport in biopolymer models with rigidity. *Europhysics Letters*, 57:697, 2002.
- [191] HSJ van der Zant, M Barahona, AE Duwel, E Trias, TP Orlando, S Watanabe y S Strogatz. Dynamics of one-dimensional Josephson-junction arrays. *Physica D*, 119:219, 1998.

- [192] S Watanabe, HSJ van der Zant, SH Strogatz y T Orlando. Dynamics of circular arrays of Josephson junctions and the discrete sine-Gordon equation. *Physica D*, 97:429, 1996.
- [193] LV Yakusevich. *Nonlinear dynamics of DNA*. Wiley series in nonlinear sciences. John Wiley & sons, Chichester, 1998.
- [194] LV Yakushevich. Nonlinear DNA dynamics: a new model. *Physics Letters A*, 136:413, 1989.
- [195] VE Zakharov y AB Shabat. Exact theory of two-dimensional self-focusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media. *Soviet Physics JETP*, 34:62, 1972.
- [196] VE Zakharov y AB Shabat. Interaction between solitons in a stable medium. *Soviet Physics JETP*, 37:823, 1973.
- [197] A Zygmund. *Trigonometric Series*. Cambridge University, 1968.

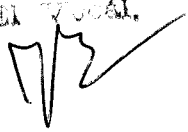
# UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Reunión de Excmo. Consejo de la Universidad por los doctores firmantes  
 en el día de 20 de febrero de 2003 para justificar la Tesis Doctoral de

D. Jenís Cuevas Parra  
 en el tema de Localización y transferencia de energía  
en redes acústicas no homogéneas

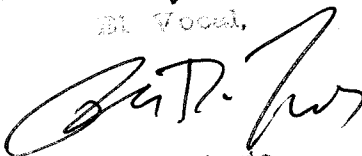
para el grado de Subsistente en Lengua  
 accediendo a la misma por unanimidad

El Vocal,




El PRESIDENTE,

El Vocal,



El Secretario,

El Vocal,



El Doctorado,

