



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO



FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DE LA DINÁMICA INTERNA DEL ADN
GOBERNADA POR LA ECUACIÓN NO LINEAL DE
SCHRÖDINGER GENERALIZADA

TESIS TRADICIONAL

que para obtener el grado de:

Doctor en Ciencias
(Física)

PRESENTA:

M. en C. Omar Pavón Torres

Tutor académico:

Dr. Máximo Agüero Granados (UAEM)

Tutores adjuntos:

Dra. Tatyana Belyaeva Leonidovna (UAEM)

Dr. Vladimir Serkin (BUAP)

Resumen

En el presente trabajo se estudió la dinámica interna de la forma B del ADN interactuando con una proteína mediante la generalización de un modelo aproximado con torsión. Propuesto originalmente por Shozo Takeno y Shigeo Homma, el modelo se basa principalmente en los grados de libertad de las rotaciones angulares de los pares de bases en un plano normal a ellas. Los posibles modos de deformación de la macromolécula y las energías principales que contribuyen a la conformación y estabilidad del ADN -como lo son la energía de apilamiento de las bases, la energía de los enlaces de hidrógeno, acoplamiento con fonones térmicos, entre otras- se resumen en un Hamiltoniano generalizado, el cual puede ser expresado en términos de operadores de quasi-spin. Realizando una analogía entre el modelo del ADN y el modelo de Heisenberg, se puede concebir el ADN como un sistema de cadenas acopladas anisotrópicamente.

De manera análoga a los modelos ferromagnéticos descritos por el modelo generalizado de Heisenberg, los efectos colectivos no lineales del sistema molecular del ADN se estudiaron empleando el procedimiento de reducción de estados coherentes generalizados. Debido a que el Hamiltoniano y los estados coherentes generalizados son construidos sobre los operadores del mismo grupo cociente $SU(2)/U(1)$, estos fueron idóneos para promediar el Hamiltoniano discreto quasi-cuántico y así llegar a un Hamiltoniano discreto clásico. Además, considerando el hecho que la cadena molecular del ADN es mucho mayor que la

distancia existente entre las bases apiladas, resulta casi evidente el uso de límite continuo para estudiar la dinámica interna de los pares de bases. Una vez obtenido nuestro Hamiltoniano clásico y continuo se estudiaron las condiciones para una la obtención de estructuras no lineales clásicas y no clásicas como responsables de la transmisión de energía e información. Por otra parte, se investigó la evolución de estas estructuras no lineales cuando el sistema molecular bajo estudio se encuentra inmerso en un medio viscoso. Esto se logro aplicando un enfoque quasi-estacionario y numérico, considerando a esta interacción de nuestro sistema molecular con el medio viscoso mediante un término de amortiguamiento en la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger. Finalmente, se discuten los resultados analíticos y numéricos usando los valores experimentales del proceso de transcripción del ADN.

Índice general

Resumen	2
Introducción	1
Antecedentes	9
1.1. Consideraciones generales del ADN	9
1.1.1. Estructura primaria del ADN	9
1.1.2. Estructura secundaria del ADN	12
1.1.3. Estructura terciaria del ADN	18
1.2. Importancia de la modelación matemática del ADN	20
1.3. El modelo de Takeno-Homma	23
1.4. El modelo generalizado de Takeno-Homma	28
Objetivos	32
Método de estados coherentes generalizados	33
2.1. Estados Coherentes	34
2.1.1. El grupo de Heisenberg-Weyl	34
2.1.2. Estados coherentes asociados al grupo de Heisenberg-Weyl	37
2.2. Estados coherentes generalizados	43

2.2.1.	Definición de estados coherentes generalizados	43
2.2.2.	Propiedades generales	45
2.3.	Estados coherentes para el grupo de rotación del espacio tridimensional . . .	49
2.3.1.	Estructura del grupo $SU(2)$	50
2.4.	Representación del grupo $SU(2)$	52
2.5.	Estados coherentes asociados al grupo $SU(2)$	55
Resultados		65
3.1.	Dinámica de pares de bases del ADN interactuando con una proteína	65
3.2.	Ecuación no lineal de Schrödinger con no-linealidad saturable	66
3.3.	Método de analogía mecánica	72
3.4.	Ecuación cúbica quinta no lineal de Schrödinger y soluciones tipo soliton .	76
3.5.	Aproximación directa a la perturbación de solitones usando el método de multi-escalas	81
3.6.	Un análisis perturbativo para la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödin- ger con amortiguamiento	83
3.7.	Perturbaciones de primer orden para solitones tipo gota de la ecuación cúbica quinta no lineal de Schrödinger	86
3.8.	Aspectos teóricos de la transcripción del ADN	90
Discusión		94
Conclusiones		96

Introducción

Los ácidos nucleicos son los componentes más fundamentales de la célula. Existen dos clases de ácidos nucleicos: el ácido ribonucleico y el ácido desoxirribonucleico. Siendo cada uno de ellos una cadena polimérica, las unidades monoméricas que las componen están conectadas por enlaces covalentes. Estas son las únicas sustancias biológicas que poseen la notable propiedad de la autoduplicación. Desde el final de la primera década del siglo XIX los científicos habían sospechado la posibilidad de que el ADN fuera el material genético cuando el bioquímico alemán Friedrich Miescher aisló por primera vez el ADN del esperma de salmón. Estudios posteriormente realizados fueron los responsables de frenar estas insinuaciones al revelar que el ADN contenía solo cuatro clases de monómeros, los investigadores se inclinaron a creer que los genes estaban formados por proteínas, ya que eran moléculas con mayor grado de complejidad. En los siguientes años solo se consideró al ADN como una clase de sustancia estructural del núcleo celular. No fue hasta mediados del siglo XX cuando una serie de experimentos cruciales confirmaron al ADN como material genético. En 1944 Avery *et al* [1] descubrieron que el ADN de cepas patógenas de la bacteria *Pneumococcus* podía transferirse a cepas no patógenas, haciéndolas patógenas. Este proceso era genéticamente estable y las nuevas generaciones de bacterias conservaban las nuevas características. Fue el experimento realizado por Hershey y Martha Chase el cual disipó las dudas existentes, en el se estudiaron la infección de la bacteria *Escherichia*

coli por un virus bacteriano, el bacteriófago T2 [2]. A estos experimentos siguieron muchos similares, ya en 1952 se había aceptado al ADN como material genético. Esto, a su vez, hizo preguntar a los científicos cómo el ADN podía transmitir y transportar toda la información que una célula necesitaba y, tal vez el cuestionamiento más importante, la manera exacta de reproducirse durante la división celular. El siguiente paso, y uno de los hitos de la ciencia moderna, lo dieron J.D. Watson y F.H.C. Crick, cuando propusieron basándose en estudios experimentales realizados con difracción de rayos-X, un modelo que describía la estructura molecular del ADN [3]. El golpe intuitivo de Watson y Crick fue el darse cuenta que una hélice de la doble cadena podía estabilizarse mediante enlaces de hidrógeno entre las bases de las cadenas opuestas si las bases se apareaban de una manera concreta: los pares adenina-timina (A-T) y guanina y citosina (G-C). Por otro lado, el bioquímico Erwin Chargaff, había determinado que tanto la adenina como la timina se encuentran en cantidades iguales, al igual que la guanina con la citosina. El modelo del ADN de Watson y Crick explicaba como se apareaban las bases de dos cadenas complementarias, y a la vez explicaba que si las dos cadenas de ADN pudieran separarse y pudiera sintetizarse un nuevo ADN a lo largo de una de ellas se podrían obtener dos moléculas de ADN, siguiendo el mismo principio de apareamiento concreto de las bases. Desde ese momento el ADN, así como los diversos procesos en los que este interviene, ha sido objeto de diversos estudios. No sólo los biólogos son los responsables de estos estudios, también, físicos y químicos se han interesado por una de las moléculas más maravillosas y misteriosas, sin mencionar que su estudio es fundamental.

El ADN es ante todo una entidad dinámica por lo tanto resultaría insuficiente conocer sólo su estructura estática, ejemplos de ello son la serie de cambios conformacionales que

sufre durante procesos como la transcripción (es decir, la lectura del código genético) o como la replicación. Debido a su estructura altamente compleja del ADN, uno puede esperar que sus movimientos internos también lo sean. Existen muchos tipos de movimientos internos con diferentes tiempos característicos, amplitudes y energías de activación. Sin embargo los investigadores tratan con grupos limitados de movimientos con características cercanas a los parámetros de los procesos biológicos considerados.

Muchos modelos teóricos han surgido con el propósito de explicar, de manera concreta, dichos movimientos. Estos modelos, a su vez, se dividen en modelos lineales y modelos no-lineales; la aproximación lineal (o armónica) de la teoría del ADN es válida cuando las amplitudes de los movimientos internos son pequeñas, si las amplitudes, por el contrario, son grandes los efectos no-lineales (o anarmónicos) deben ser tomados en cuenta. Un ejemplo donde se considere una aproximación lineal es el caso de vibraciones pequeñas de átomos individuales o grupos atómicos cerca de sus posiciones de equilibrio con amplitudes no mayores que 0.1 \AA , por el contrario consideramos una aproximación no-lineal para movimientos de amplitudes grandes de los fragmentos de las cadenas polinucleótidas asociadas con el desenrollamiento local o la apertura de la hélice doble. Las oscilaciones moleculares no-lineales en el doble hélice del ADN juega un papel muy importante en la conservación y transformación de la información genética en sistemas biológicos [4,5]. Por otro lado, el papel de los solitones en las propiedades del ADN ha sido ampliamente discutido ya que proveen un mecanismo para la transferencia de energía de largo alcance, el mecanismo de la duplicación del ADN, la transcripción de mRNA, producción de proteína en células, transiciones conformacionales, y otros procesos más. En estos procesos se puede ver la importancia que tienen los modelos teóricos, ya que son capaces de explicarlos ade-

cuadamente. Así mismo, el problema del transporte de energía es de mucha relevancia en la biología y en sistemas biológicos, el cual puede ser explicado por medio de excitaciones expresadas como solitones. Estos modelos están basados en movimientos longitudinales y transversales, así como el doblamiento, estiramiento y las rotaciones [7–13]. Entre estos movimientos los que más contribuyen a la apertura de los pares de bases del ADN es el movimiento rotacional de las bases. Los pioneros en el estudio de la dinámica no-lineal del ADN fueron Englander y sus colaboradores [14], quienes tomaron en cuenta solo el movimiento rotacional de las bases nitrogenadas. Ellos propusieron el uso de un sistema mecánico simple el cual consistía en una cadena de péndulos acoplados, cada péndulo podía rotar en un plano perpendicular al eje de la cadena, consecuencia de esto fue el encontrar perturbaciones moleculares no lineales. El modelo fue retomado por Salerno en una versión discreta con la cual intentó entender la relación entre secuencia genética y lugares funcionalmente relevantes de la molécula, tales como los promotores (secuencias cortas que marcan el inicio de un gen) [15]. La propuesta tuvo éxito en un principio, pero trabajos recientes muestran que ese éxito es producto de un modelado de la secuencia sin suficiente precisión. Sin embargo, el modelo de Englander *et al*, dió paso a comprender que la no linealidad en el ADN nos conduce a la posibilidad de perturbaciones localizadas, coherentes en la forma de solitones como kink-antikink [16, 17], pulsones [18, 19], burbuja [20] y compactones-anticompactones [21].

Modelos teóricos como el propuesto por Peyrard y Bishop [22, 23], en el cual se asume que la contribución principal al proceso de que los pares de bases se abran (o el derretimiento local de la doble hélice) se hace por el alargamiento de los enlaces de hidrógeno.

Esto es debido a que, en lugar de los movimientos de rotación de bases, el modelo incluye dos tipos diferentes de movimientos internos, es decir, los desplazamientos de las bases con respecto a sus posiciones de equilibrio a lo largo de la dirección de los enlaces de hidrógeno que conectan las dos bases en un par, además, el potencial para los enlaces de hidrógeno es modelado por un potencial de Morse y un acoplamiento armónico debido al apilamiento es debido entre las bases vecinas, describen de manera adecuada procesos biológicos. Como ejemplo mencionamos el modelo de Peyrard y Bishop que describe el proceso de desnaturalización, así mismo Christiansen y sus colaboradores [24] explicaron este proceso incluyendo movimientos transversales, longitudinales y torsionales. Otros ejemplos donde los modelos no lineales se implementaron fue para explicar adecuadamente los siguientes procesos: los mecanismos dinámicos de transición entre diferentes formas de ADN [25], la regulación de transcripción [16], la síntesis de proteína (por ejemplo, la producción de insulina) [26], la carcinogenesis [27], el trabajo realizado por Alireza Sepehri, considerando conceptos de la teoría de cuerdas para demostrar los cambios de energía y corriente extra que ocurren en la presencia de una enfermedad [28], entre otros.

En la mayoría de los estudios descritos la dinámica interna de los pares de bases fue descrita mediante ecuaciones diferenciales con no lineales de orden superior. Este tipo de ecuaciones se encuentra entre las ecuaciones más significativas de la física no lineal, ya que son fundamentales en la descripción de fenómenos físicos no lineales y su aplicación ha sido ampliamente demostrada. Esta ecuación aparece cuando tratamos de explicar fenómenos como la dinámica de olas de agua poco profundas o pulsos de luz en fibras ópticas [29–33]. Como un caso particular de interés tenemos a la ecuación no lineal de Schrödinger con no linealidad cúbica-quinta comúnmente conocida como ecuación cúbica-quinta no lineal de

Schödinger, la cual aparece en muchas ramas de la física. Por ejemplo: la hidrodinámica nuclear con fuerzas de Skyrme [34], en el condensado de Bose-Einstein [35, 36], en la física de plasmas [37], para un sólido elástico generalizado [38], en la dinámica no lineal del ADN interactuando con una proteína [39] y las aplicaciones principales son en óptica no lineal para describir la propagación de pulsos ópticos en medios dieléctricos de tipo Kerr [40]. Debido a su importancia se han realizado diferentes esfuerzos para encontrar nuevas soluciones exactas empleando diversas herramientas matemáticas disponibles desarrollados recientemente. Como ejemplos de la afirmación anterior podemos considerar las nuevas soluciones en términos de funciones elípticas de Jacobi [41] y nuevas soluciones tipo soliton con coeficientes modulados [42].

Asimismo, el ADN es un ejemplo ideal de cómo los sistemas físicos gobernados por ecuaciones diferenciales no lineales son sensibles a su interacción con el medio y, en consecuencia, esta interacción nos guía de manera natural al estudio de perturbaciones. En el caso de la dinámica interna del ADN esta contribución juega un papel preponderante, ya que, no solo la interacción con su medio nos lleva a estos estudios también las inhomogeneidades de las hebras dobles actúan como una perturbación a todo el sistema bajo estudio [43].

Los resultados obtenidos de estudiar sistemas moleculares, haciendo uso de modelos aproximados, han sido impresionantes y nos han permitido tener una mayor comprensión de la dinámica del ADN. Sin embargo, el estudio de cambios conformacionales del ADN debidos a las interacciones con otras moléculas sigue representando un problema. Por ejemplo, las proteínas y el ADN experimentan muchos cambios conformacionales con el fin de formar complejos funcionales y también para facilitar interacciones con otras moléculas.

La condensación cromosómica adecuada y la segregación requiere que la proteína interactue con el ADN ya que así se facilita la organización de cromosomas a través de la unión y el estiramiento del ADN. Experimentalmente, usando resonancia plasmónica de superficie, interferometría de luz blanca o el ensayo de cambio en la corrida electroforética puede medirse la interacción del ADN con una proteína pero estos métodos no son sensibles a como la proteína hace que el ADN sea modificado conformacionalmente [44]. Estos cambios conformacionales han sido explicados teóricamente en términos de excitaciones localizadas de larga duración y de amplitud constante. Estos estudios han demostrado que los modos de pulsación (o aperturas fluctuantes) son los estados precursores para la transcripción del ADN y la desnaturalización. Si bien estos estudios teóricos han aportado nueva información de los procesos biológicos y han extendido nuestro entendimiento siguen siendo muy idealizados ya que ignoran la interacción de este sistema con el medio. En este trabajo se estudio este sistema inmerso en un medio y se estudio como evolucionan las estructuras no lineales contenidas en el ADN interactuando con una proteína. En la primera parte del trabajo se resumirá las consideraciones esenciales del ADN y el modelo aproximado empleado; tanto el modelo obtenido originalmente por Takeno y Homma; así como la generalización del mismo. Este modelo es representado por un Hamiltoniano expresado en términos de operadores de quasi-spin, la tarea principal es encontrar una relación entre los efectos colectivos no lineales de nuestro sistema quasi-cuántico y uno clásico, para ello empleamos el procedimiento de reducción conocido como el método de estados coherentes generalizados, después de una exhaustiva revisión a los conceptos fundamentales y al aparato matemático del método se aplicará para promediar el Hamiltoniano generalizado y posteriormente se obtendrán las ecuaciones clásicas de movimiento para el ADN y los en-

laces de hidrógeno y se analizarán las soluciones analíticas contenidas en estas ecuaciones. Finalmente, se analizará la evolución de estas estructuras cuando el sistema molecular del ADN y la proteína está inmerso en un medio viscoso mediante un análisis perturbativo.

Antecedentes

1.1. Consideraciones generales del ADN

En esta sección se presentarán los aspectos fundamentales de la estructura del ADN tanto la conformación de los enlaces llamada *estructura primaria*, la estructura repetitiva que se forma de estos enlaces y las características principales y las diferentes formas, como las cuales dependen de la humedad del medio en el que se encuentra (*estructura secundaria*) y, finalmente, las diferentes configuraciones y las formas que puede adoptar dentro de una célula (*estructura terciaria*).

1.1.1. Estructura primaria del ADN

El ADN es una cadena polimérica, en la cual las unidades monoméricas están conectadas por enlaces covalentes. Cada unidad monomérica contiene un azúcar de 5 carbonos la ribosa en el ARN y la 2'-desoxirribosa en el ADN. Los átomos de hidrógeno se designan con primas (1', 2', etc) para diferenciarlos de los átomos de las bases. La diferencia entre los dos azúcares radica únicamente en el grupo hidroxilo 2' de la ribosa del ARN, que está sustituido por el hidrógeno en el ADN. La conexión entre las unidades monoméricas sucesivas de los ácidos nucleicos se realiza mediante un residuo fosfato unido al hidroxilo del carbono 5' de una unidad y al hidroxilo 3' de la siguiente. Esto forma un enlace

fosfodiéster entre dos residuos de azúcar. Estos residuos de azúcar unidos mediante un enlace fosfodiéster constituyen el esqueleto del ácido nucleico. La importancia de los ácidos nucleicos en el almacenamiento y transmisión deriva de que son heteropolímeros. Cada monómero de la cadena contiene una base heterocíclica, que siempre va unida al carbono 1' del azúcar. Como es bien sabido existen dos tipos de bases heterocíclicas, denominadas purinas y pirimidinas. El ADN contiene dos purinas, adenina (A) y guanina (G), y dos pirimidinas, citosina (C) y timina (T). El ARN posee las mismas bases, excepto que la timina es sustituida por uracilo (U). En resumen, el ADN y el ARN pueden considerarse, cada uno de ellos, como un polímero formado por cuatro clases de monómeros. Los monómeros son moléculas de ribosa o desoxirribosa fosforiladas, con bases púricas o pirimidínicas unidas a sus carbonos 1'. En las purinas, la unión se realiza con el nitrógeno 9 y en las pirimidinas con el nitrógeno 1. El enlace entre el carbono 1' del azúcar y el nitrógeno de la base se denomina enlace glucosídico. Estos monómeros se denominan nucleótidos. Cada nucleótido puede considerarse el derivado 5'-monofosforilado de un aducto azúcar-base denominado nucleósido. Es común que los nucleótidos pueden denominarse nucleósidos 5'-monofosfato.

Existen dos características importantes de todas las cadenas polinucleótidas

1. Una cadena polinucleótida posee un sentido o direccionalidad. El enlace fosfodiéster entre las unidades monoméricas se produce entre el carbono 3' de un monómero y el carbono 5' del siguiente. Así pues, los dos extremos de la cadena polinucleotida lineal son diferenciables. Un extremo lleva normalmente un fosfato 5' sin reaccionar, y el otro extremo un grupo hidroxilo 3' sin reaccionar.
2. Una cadena polinucleotida posee individualidad, determinada por la secuencia de sus

bases, es decir, la secuencia de nucleótidos. Esta secuencia se denomina *estructura primaria* de ese ácido nucleico concreto.

En general, resulta completamente innecesario dibujar a la molécula, ya sea ARN o ADN, en su totalidad. Basta indicar que se está hablando de una o de otra, con ello se comprende la mayor parte de su estructura. Por ejemplo podemos abreviar una molécula pequeña de ADN de la siguiente manera:

La notación anterior indica:

1. La secuencia de nucleótidos mediante sus abreviaturas de una letra (A, C, G, T)
2. Todos los enlaces fosfodiéster son entre hidroxilos 3' y fosfatos 5'
3. La molécula tiene un grupo fosfato en su extremo 5' y un hidroxilo 3' sin reaccionar en su extremo 3'.
4. La secuencia pertenece a una molécula de ADN y no de ARN, ya que contiene T en lugar de U.

Si se supone que todos los enlaces fosfodiéster unen un hidroxilo 3' a un fosfato 5', puede utilizarse una notación más compacta, expresada de la siguiente manera:



Si por otro lado nos interesa exclusivamente la secuencia de las bases en la molécula podemos utilizar la siguiente notación:



Por convención suele escribirse a la izquierda el extremo 5' y a la derecha el extremo 3'. La importancia de la estructura primaria radica en que la información genética está contenida ahí. Por tanto, un *gen* es una secuencia concreta de ADN, que codifica la información mediante el uso de cuatro letras (A, C, G, T) correspondiente a cada base.

1.1.2. Estructura secundaria del ADN

Mientras trabajaban en la Universidad de Cambridge, Watson y Crick obtuvieron acceso a los patrones del ADN fotografiados por Rosalind Franklin, obtenida utilizando la técnica de difracción de rayos X. En esas fotografías se apreciaba claramente que el ADN de las fibras debía de tener alguna estructura tridimensional repetitiva. Además, observaron que el espaciamiento de la línea de la capa era la décima parte de la repetición del patrón, debía haber 10 residuos. Este plegado regular de polímeros se conoce como *estructura secundaria del ADN*.

Cuando Watson y Crick propusieron el modelo del ADN basado en sus observaciones de la estructura secundaria del ADN se habían obtenido dos patrones de difracción de rayos X bastante distintos entre ellos: una es la forma B del ADN, que se observa en fibras preparadas en una condiciones de humedad elevada y la forma A del ADN, que se observa en fibras preparadas en condiciones de humedad baja. Watson y Crick estudiaron la forma B del ADN ya que preveían que era la forma hallada en el medio acuoso de la célula. Aunque no es nada extraño encontrar comunmente la forma A, esta forma se encuentra en las moléculas de ARN de doble cadena y las moléculas híbridas de ADN- ARN. Estas no son las únicas estructuras secundarias podemos encontrar una tercera que es la forma Z del ADN la cual puede ser vista en circunstancias especiales. Las formas B y A son extremadamente distintivas entre ellas, pese a lo que se podría pensar, en la hélice B las

bases se encuentran más próximas al eje helicoidal, que pasa entre los enlaces de hidrógeno y las bases en la hélice A están situadas más al extremo y están muy inclinadas respecto al eje helicoidal.

Todos los estudios de difracción de rayos X de las fibras, incluyendo los que aportaron la información que se ha descrito, tiene una limitación muy importante, ya que al analizar los patrones de las fibras, no se podían determinar directamente los detalles de la estructura secundaria del ácido nucleico. La solución fue proponer los modelos que expliquen las posiciones y las intensidades de las manchas del patrón de difracción. Este enfoque es necesario porque las fibras no son nunca cristales perfectos y siempre existe ambigüedad en la interpretación de sus patrones de difracción. Un avance fundamental en la investigación del ADN se produjo cuando R. E. Dickerson y lograron cristalizar un pequeño fragmento del ADN. La cristalografía molecular de este fragmento presentó información detallada de la estructura secundaria de este polinucleótido como la posición específica de cada átomo de una mejor manera. Además, al comparar estas cristalografías moleculares con los modelos elaborados a partir de los patrones de fibras se muestra que estos modelos constituyen una simplificación excesiva de la estructura secundaria. Al observar la forma real de la estructura secundaria del ADN mediante cristales moleculares se apreciaron las variaciones locales del ángulo de rotación de los pares de bases; la conformación del azúcar; la inclinación de las bases e incluso la distancia de elevación; la no homogeneidad de las hebras; variaciones en las secuencias locales; entre otras. Otras aportaciones fundamentales son el hecho de que las moléculas del ADN están ligeramente dobladas, es decir, el eje helicoidal no sigue una línea y que recta y la posible explicación de porque la forma B del ADN está favorecida por un medio acuoso. La forma B del ADN, pero no la forma A,

puede acomodar una columna de moléculas de agua situadas en el surco secundario. Los enlaces de hidrógeno entre estas moléculas de agua y el ADN pueden conferir estabilidad a la forma B. Según esta hipótesis, cuando se elimina esta agua (como ocurre en las fibras con humedad baja), la forma B se hace menos estable que la forma A. Las características principales de la estructura secundaria pueden ser formuladas brevemente de la siguiente manera:

1. Dos cadenas polinucleótidas se enrollan alrededor de un eje común para producir una hélice doble.
2. El diámetro de la hélice es 20 Å. Las bases adyacentes están separadas 3.4 Å a lo largo de todo el eje y rotan un ángulo de 36 ° una respecto a la otra. Teniendo los 10 nucleótidos por cada giro completo de la hélice, el cuál corresponde a una longitud de 34 Å.
3. Las bases se localizan en el interior, de manera que los fosfatos y azúcares se encuentran afuera de la hélice doble.
4. Solo ciertos pares de bases son posibles: una debe ser purina y la otra una pirimidina. Debidas a un apareamiento específico, las cadenas de nucleótidos se complementan la una a la otra.
5. Ambas cadenas de polinucleótidos se mantienen juntas por enlaces de hidrógeno entre las bases, que a su vez se mantienen juntas en pares. La base de cada hebra está unida mediante un enlace de hidrógeno a la base de la hebra complementaria.

Las interacciones moleculares no covalentes son de vital importancia para comprender los diversos procesos en los cuales el ADN participa, tal es el caso de la replicación, el ple-

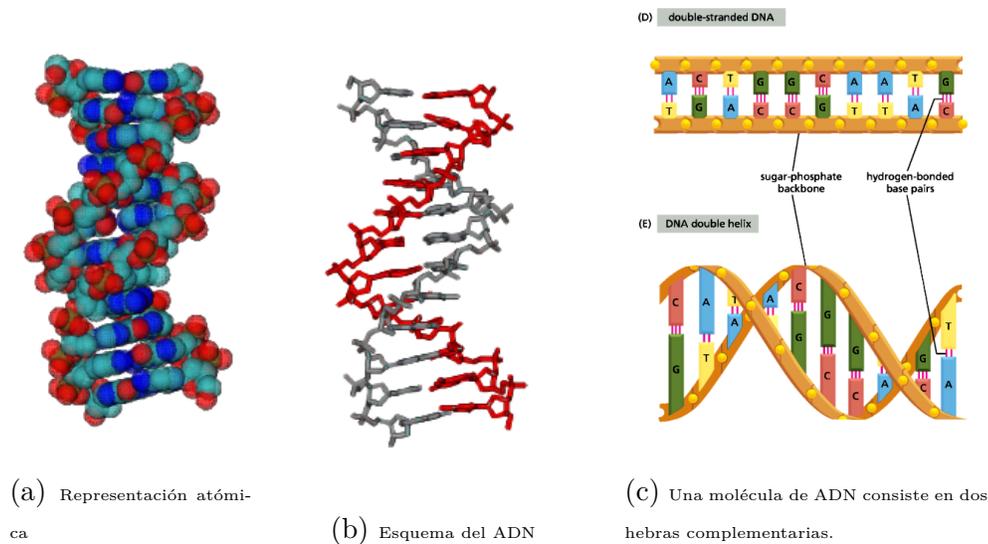


Figura 1.1: La estructura de doble hélice del ADN (secundaria)

gamiento de proteínas en intrincadas formas tridimensionales, el reconocimiento específico de sustratos por enzimas, y la detención de señales moleculares. Todas las estructuras y procesos biológicos dependen de la interacción de interacciones covalentes y no covalentes. Las interacciones fundamentales son los enlaces no covalentes, es decir, las interacciones electrostáticas, los enlaces de hidrógeno, y las interacciones de van der Waals.

Ellos difieren en geometría, fortaleza y especificidad. Además, estos enlaces son afectados en diferentes maneras por la presencia del agua.

Las interacciones electrostáticas dependen de la carga eléctrica en los átomos. La energía de la interacción es dada por la ley de Coulomb. Por ejemplo la interacción electrostática entre dos átomos con cargas opuestas y únicas separadas 3\AA en agua (la cual tiene una constante dieléctrica de 80) tiene energía de $1.4 \text{ kcal mol}^{-1}$ (5.9 kJ mol^{-1}).

Aunque los enlaces de hidrógeno son interacciones electrostáticas relativamente débiles son fundamentales ya son responsables de muchas propiedades que hacen al agua un solvente tan especial. El átomo de hidrógeno en el enlace de hidrógeno es parcialmente

compartida entre dos átomos relativamente electronegativos como lo son el nitrógeno o el oxígeno. El donante del enlace de hidrógeno es el grupo que incluye tanto al átomo al cual el hidrógeno está más fuertemente ligado y al átomo de hidrógeno mismo, mientras que el aceptador del enlace de hidrógeno es el átomo que está menos fuertemente ligado al átomo de hidrógeno.

Los enlaces de hidrógeno son mucho más débiles que los enlaces covalentes. Los primeros tienen energías de 1-3 kcalmol^{-1} (4-13 kJmol^{-1}) comparados con 100 kcalmol^{-1} (418 kJmol^{-1}) para un enlace covalente de carbono-hidrógeno. Los enlaces de hidrógeno son también más largos que los enlaces covalentes; sus distancias de enlace (medidas desde el átomo de hidrógeno) van desde los 1.5 a 2.6 Å; por lo tanto, las distancias que separan los otros átomos en un enlace de hidrógeno van de 2.4 a 3.5 Å. Los enlaces de hidrógeno más fuertes tienen una tendencia a mantenerse alineados, de manera que el donador de los enlaces de hidrógeno, el átomo de hidrógeno, y el aceptante del enlace de hidrógeno se encuentran en una línea recta.

La base de una interacción de van der Waals es que la distribución de la carga electrónica alrededor de un átomo cambia con el tiempo. En cualquier instante, la distribución de carga no es perfectamente simétrica. Esta simetría transitoria en la carga electrónica alrededor de un átomo actúa a través de interacciones electrostáticas para inducir una simetría complementaria en la distribución del electrón alrededor de sus átomos vecinos. La atracción resultante entre los dos átomos crece a medida que se acercan más el uno al otro, hasta que son separados por la distancia de contacto de van der Waals. En una distancia más corta, las fuerzas repulsivas fuertes se vuelven dominantes ya que las nubes externas de electrones se traslapan. Las energías asociadas con las interacciones de van

der Waals son muy pequeñas; las interacciones típicas contribuyen desde 0.5 a 1.0 kcal mol^{-1} (desde 2 a 4 kJ mol^{-1}) por par de átomos. Cuando las superficies de dos moléculas grandes se junta, un gran número de átomos se encuentran en contacto de van der Waals, y su efecto de red, sumado sobre muchos pares de átomos pueden ser sustanciales.

La fortaleza y la especificidad de las interacciones débiles son altamente dependientes del medio en el cual toman lugar, y la mayoría de las interacciones biológicas toman lugar en agua. Las dos propiedades del agua que son especialmente importantes en el proceso biológico:

- El agua es una molécula polar. El agua es una molécula doblada, no lineal, y la distribución de carga es asimétrica. La molécula del agua es una estructura eléctricamente polar.
- El agua es cohesiva. Las moléculas de agua interactúan fuertemente con otra a través de enlaces de hidrógeno. Las redes de enlaces de hidrógeno mantienen su estructura junta; interacciones similares ligan a las moléculas en agua líquida, aunque, en el estado líquido, algunos de los enlaces de hidrógeno se rompen. La naturaleza altamente cohesiva del agua afecta dramáticamente las interacciones entre las moléculas en una solución acuosa.

La polaridad y la capacidad del enlace de hidrógeno del agua la vuelven una molécula altamente interactuante. El agua es un excelente solvente para las moléculas polares. La razón es que el agua debilita fuerzas electrostáticas y el enlace de hidrógeno entre las moléculas polares. La constante dieléctrica del agua es 80, por tanto el agua disminuye la fortaleza de las atracciones electrostáticas por un factor de 80 comparado con la fortaleza de aquellas mismas interacciones en el vacío. La constante dieléctrica del agua es

inusualmente alta ya que su polaridad y su capacidad de formar proyectiles solventes orientados alrededor de los iones. Estos proyectiles solvente orientados producen campos por sí mismos, los cuales se oponen a los campos producidos por los iones. En consecuencia, la presencia del agua debilita marcadamente las interacciones electrostáticas entre los iones.

La existencia de la vida en la Tierra depende críticamente de la capacidad del agua de disolver un arreglo de moléculas polares que surven como combustibles, bloques de construcción, catalisis, y portadores de información. Las altas concentraciones de estas moléculas polares pueden coexistir en el agua, donde son libres para difundirse e interactuar entre ellas. Sin embargo, esta solvencia presenta un problema, ya que también debilita las interacciones entre las moléculas polares. La presencia de sistemas biológicos microscópicos libres de agua evitan este problema. Existen varios ejemplos de estos nichos especialmente contruidos en las proteínas. Sin embargo, la presencia de agua con su naturaleza polar permite otro tipo de interacción débil permite otro tipo de interacción débil, el plegamiento de las proteínas y la formación de fronteras de la célula.

1.1.3. Estructura terciaria del ADN

Muchas de las moléculas del ADN son circulares, lo cual significa que no tienen extremos 5' o 3' libres. Los círculos pueden ser pequeños, como ocurre en el ADN del bacteriofago, o inmensos como en el caso del ADN de *E. Coli*, y pueden estar formados por una sola cadena o por dos cadenas entrelazadas en una doble hélice en su forma B. Las moléculas del ADN también pueden ser lineales como el ADN de un virus, el bacteriófago T2, por ejemplo. Los cromosomas humanos también contienen moléculas gigantes de ADN lineal. Existe un aspecto especial en las moléculas de ADN circular y es que muchas de es-

tas están superenrolladas. Un círculo relajado puede estar aplastado sobre una superficie plana, mientras que una molécula superenrollada no puede estarlo. Además, la torsión de las cadenas de ADN, una alrededor de la otra, una molécula superenrollada tiene otras torsiones adicionales en el propio eje de la hélice (el eje helicoidal se cruza sobre sí mismo una o varias veces). La estructura tridimensional, como el superenrollamiento, que presenta un plegado de orden superior de los elementos de una estructura secundaria regular, es denominado *estructura terciaria del ADN*. El superenrollamiento es un estado habitual de las moléculas cerradas del ADN circular. La mayor parte de las moléculas de ADN circular que se encuentran en la naturaleza tienen torsiones superhelicoidales, aunque es posible formar moléculas de ADN con superhélices.

Algunas moléculas de ADN difieren solamente en su topología, por lo que se les denomina topoisómeros. Los topoisómeros pueden interconvertirse únicamente mediante el corte y la nueva unión del ADN. Las células poseen enzimas que pueden realizar este proceso. Estas enzimas, que se denominan topoisomerasas, regulan la superhelicoidalidad de las moléculas naturales del ADN. Cuando se introducen vueltas superhelicoidales en una molécula de ADN que anteriormente estaba relajada, esta molécula pasa a estar en tensión. En consecuencia, debe gastarse energía para formar una molécula de ADN superenrollada. Las células procariotas como *E. Coli* tienen una topoisomerasa especial denominada ADN girasa. Esta enzima introduce giros superhelicoidales mediante una reacción impulsada por la hidrólisis del ATP. Algunas topoisomerasas, que sólo pueden relajar el ADN superenrollado, no requieren ATP. Ya que la energía almacenada en los ADN circulares al torsionarlos en el superenrollamiento pueden tener efectos importantes sobre la conformación del ADN existe un área dedicada a estudios donde se estudia la topología y la geometría de estos

procesos denominada *aproximación topológica a la enzimología*.

1.2. Importancia de la modelación matemática del ADN

Físicamente, el ADN es una macromolécula lineal de doble cadena gigante, con longitud que va desde milímetros (bacteria) a metros (humanos) y puede aproximarse a kilómetros (salamandras). Cada célula humana, sin división, contiene un total de cerca de 6×10^9 pares de bases. Aunque la molécula de ADN siempre está compactada a modo que se ajuste a un espacio del tamaño de un micrométero, ya sea como una estructura suelta en procariotas (bacterias), o en densamente compactadas, unidad dedicada, el núcleo, en eucariotas (las células más evolucionadas). La molécula se encuentra integrada por aminoácidos y nucleótidos, estos a su vez se encuentran integrados por subunidades de enlaces similares entre ellas; estas estructuras biológicas forman una cadena larga y repetitiva. Si todas estas subunidades son idénticas, las subunidades vecinas en la cadena ajustan sus posiciones relativas con el fin de minimizar la energía libre de contacto entre ellas. Cada segmento correspondiente a un par de base tiene cerca de 100 grados de libertad, y una molécula de ADN puede contener 10^{10} de dichos segmentos (incluso 10^{13} para las salamandras), teniendo de esa manera 10^{12} grados de libertad. Por si eso fuera poco, el ADN es muy sensible a las "condiciones de frontera", es decir a las características físicas y químicas de su entorno, por ejemplo la temperatura, la radiación y el medio que lo rodea. No hay un solo químico o bioquímico que pueda imaginar el ADN completamente aislado, o expresándolo de otra manera, sin especificar en que entorno opera. Aún sin considerar las interacciones de la molécula del ADN con su medio los números podrían parecer desalentadores si uno intenta modelar matemática y detalladamente dicha molécula. La labor de

la física teórica y experimental consiste en la reducción de sistemas reales complejos a modelos matemáticos simples, siendo este procedimiento exitoso la mayoría de las ocasiones, pero ese motivo no es suficiente para implementar este procedimiento en este problema, sin mencionar que en un sistema biológico la complejidad es algo inherente al sistema, en contraste con un sistema físico. Un ejemplo simple sería como se estudia la gravitación sin las perturbaciones del aire por medio de masas que caen en un tubo de vacío: en biología simplificar el sistema lo terminaría. Sin embargo, en las últimas décadas han surgido modelos para comprender la estructura y dinámica interna del ADN estos modelos solo consideran las propiedades estructurales dominantes de la molécula, así como los grados de libertad efectivos para el problema en cuestión. Es cierto que la molécula del ADN es terriblemente complicada, pero también es cierto que la molécula del ADN realiza una gran variedad de tareas fundamentales. Es posible pensar en un modelo orientado hacia un proceso del ADN, es decir que podemos obtener un modelo del ADN el cual no tenga la ambición de describir a la molécula en general, sino limitar nuestro modelo a un proceso específico. Esta forma de modelar el ADN requiere de identificar los aspectos específicos (o grados de libertad) del ADN que sean esenciales para el proceso bajo estudio.

Uno podría pensar que un modelo en escala atómica podría ser mejor para describir la dinámica de los grupos de átomos (las bases por ejemplo) y podría resultar más exacto que un modelo a mayor escala. Estas simulaciones numéricas no serían prácticas. Pongamos por ejemplo la transcripción (de la cuál se hablara más adelante con cierto detalle), la transcripción involucra una región abierta que abarca 20 pares de bases. Por lo tanto, para estudiarla con un modelo, uno tiene que incluir por lo menos 100 pares de bases. Para estudiar una transición de fase como es la desnaturalización térmica del ADN, el

modelo debe abarcar miles de pares de bases debido a que la desnaturalización es un efecto colectivo. Usualmente la dinámica molecular puede simular de 10 a 20 pares de bases, solo por escalas de tiempo de unos pocos nanosegundos, y dichas simulaciones son cálculos enormes.

Esta es la razón por la cual los modelos a escalas intermedias son tan útiles. El hecho de que los modelos sean menos precisos no implica que su desarrollo sea más simple. Zhang y Collins [46], tomando en cuenta pocos grados de libertad obtuvieron resultados muy valiosos. Ellos compararon los resultados obtenidos utilizando un modelo simplificado con simulaciones de todos los átomos, lo que encontraron fue que la modelación matemática en términos de pocos grados de libertad no es para nada insatisfactoria, por lo menos para el análisis de procesos específicos.

Otro movimiento importante de la molécula es su apertura fluctuacional. En estas largas fluctuaciones, los pares de bases son rotos temporalmente y las dos bases son expuestas para una reacción química por un periodo de tiempo muy corto (10^{-7} s). La deformación molecular involucrada es tan grande que no puede ser descrita por aproximaciones lineales. La dinámica biomolecular es un tema fundamental para la ciencia no lineal debido a que está relacionada con fenómenos básicos de la vida y como sabemos tiene que ser fundamentalmente no lineal. Por lo tanto, el ADN provee un hermoso ejemplo de un sistema en que los efectos no lineales son esenciales, e indudablemente ha servido como un "modelo de prueba" para estudios fundamentales en la dinámica no lineal. La dinámica no lineal de moléculas biológicas fue considerada primero para proteínas en el famoso modelo de Davydov del hélice α [47, 48] el cual acopla una deformación de la proteína con una vibración interna de un enlace $C = 0$. La no-linealidad actúa en este caso para atrapar energía

de la vibración en un estado localizado que puede propagarse a lo largo de la molécula. Una descripción apropiada de este fenómeno puede solo ser lograda si dentro de la teoría cuántica. La situación en el ADN es diferente ya que estamos interesados en cambios conformacionales grandes de la molécula, que ocurren en bajas frecuencias y que involucran grupos grandes de átomos en la molécula. Por lo tanto una descripción clásica bastaría. Sin embargo la dificultad es seleccionar los grados de libertad los cuales son relevantes y deben estar involucrados en el modelo, y dar potenciales efectivos apropiados para ellos.

1.3. El modelo de Takeno-Homma

Yomosa propuso un modelo, el cual incluía el movimiento rotacional de las bases llevando a pozo potencial doble [49, 50]. Este modelo toma en consideración las energías principales que estabilizan la estructura del ADN: la energía de apilamiento de las bases adyacentes y la energía de los enlaces de hidrogeno entre las bases complementarias de sitios similares en ambas hebras. Este modelo fue después refinado por Takeno y Homma, y posteriormente generalizado a un modelo de rotadores tridimensionales acoplados [51, 52]. En el modelo se hace una analogía de la cadena molecular del ADN con cadenas de espines acoplados anisotropicamente, construyendo de ese modo el Hamiltoniano del modelo de Heisenberg asociado.

Tres consideraciones iniciales fundamentales fueron empleadas para estudiar la dinámica interna del ADN:

1. Los puntos esenciales del problema pueden ser obtenidos solamente prestando atención a las bases en las hebras dobles.
2. Las fluctuaciones de las posiciones de las bases se dan a través de su movimiento

rotacional alrededor de los puntos donde están atadas a las hebras.

3. Las fluctuaciones se producen, bajo ciertas circunstancias, para el rompimiento del enlace de hidrógeno de las bases, por medio de esto inducen el desenrollamiento de las hebras dobles a las cuales están sujetos.

A continuación resumimos los puntos esenciales del modelo.

Consideramos la forma B del ADN con z siendo el eje helicoidal, representado esquemáticamente en la Figura 1.2a, las hebras dobles del ADN (el esqueleto de azúcar fosfato) son representadas por dos listones S y S' enrollados alrededor de sí mismos, respectivamente. La base está representada por una flecha unida a la hebra y su base complementaria está representada por una flecha conjugada en el sitio similar. En la figura 1.2b y 1.2c se muestra la proyección de la n -ésimo par de base en el plano XY y XZ , respectivamente. En la figura 1.2b Q_n y Q'_n representan los extremos de la de las bases correspondientes a la hebra S y S' . Los puntos donde las bases se encuentran fijas a la hebras están representados por P_n y P'_n , siendo $(r \cos n\varphi_0, r \sin n\varphi_0, z_n)$ y $(r \cos (n\varphi_0 + \pi), r \sin (n\varphi_0 + \pi), z_n)$ con $\varphi_0 = 2\pi/p$ siendo $p = 10$ Los ángulos de rotación alrededor de los puntos P_n y P'_n son (θ_n, ϕ_n) y (θ'_n, ϕ'_n) , además (θ_n, ϕ_n, z_n) y $(\theta'_n, \phi'_n, z'_n)$ determinan la desviación de las posiciones del n -ésimo par de bases de la forma B del ADN.

La conformación y estabilidad de la doble hélice del ADN está determinada principalmente por la energía en el interior de las bases adyacentes o energía de apilamiento, la energía de los enlaces de hidrogeno entre las bases complementarias del mismo sitio, entre otras energías. Es conocido de que la energía de apilamiento o interacción base-base es

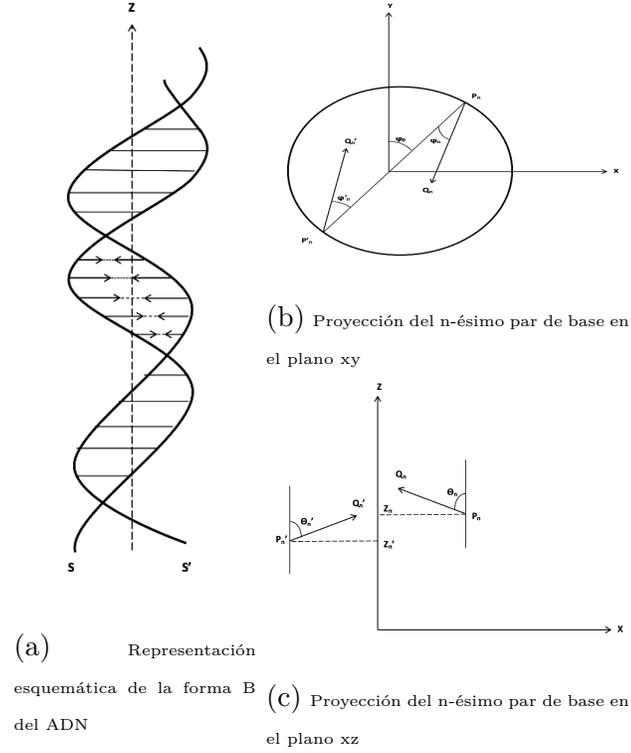


Figura 1.2: Esquema de la forma B del ADN

más fuerte que la energía de los enlaces de hidrogeno y de hecho el apilamiento entre las bases adyacentes contribuye más que un medio de la energía total libre de los pares de bases [53]. Siguiendo el razonamiento de Takeno y Homma [52] se asume que la energía de los enlaces de hidrogeno de el par de bases depende de la distancia entre estos. Por lo tanto podemos escribir esta distancia como:

$$\begin{aligned}
 L_n^2 = & 2 + 4r^2 + (z_n - z'_n)^2 + 2(z_n - z'_n)(\cos\theta_n - \cos\theta'_n) - 4r(\sin\theta_n\cos\varphi_n + \sin\theta'_n\cos\varphi'_n) \\
 & + 2[\sin\theta_n\sin\theta'_n(\cos\varphi_n\cos\varphi'_n + \sin\varphi_n\sin\varphi'_n - \cos\theta_n\cos\theta'_n)],
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

donde r es el radio del círculo representado en la figura 1.2b. La energía de los enlaces de hidrogeno (1.1) puede ser entendida de una manera más clara introduciendo los operadores de quasi-spin $\vec{S}_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)$ y $\vec{S}'_n = (S'_n{}^x, S'_n{}^y, S'_n{}^z)$ de la forma

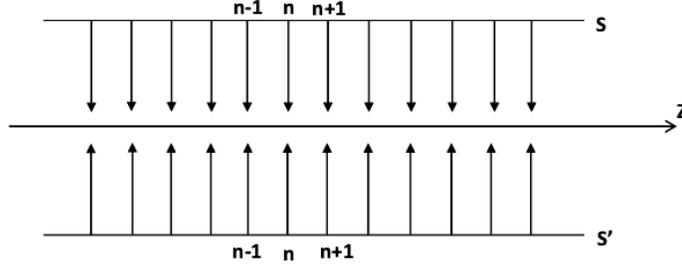


Figura 1.3: Representación esquemática del ADN como una cadena de spines acoplados anisotrópicamente.

$$S_n^x = \sin\theta_n \cos\varphi_n, \quad S_n^y = \sin\theta_n \sin\varphi_n, \quad S_n^z = \cos\theta_n \quad (1.2)$$

$$S_n'^x = \sin\theta'_n \cos\varphi'_n, \quad S_n'^y = \sin\theta'_n \sin\varphi'_n, \quad S_n'^z = \cos\theta'_n.$$

Para las n bases en las hebras S y S' , respectivamente. Se elige $z_n = z'_n$ para evitar ondas de compresión longitudinales a lo largo de la dirección del eje helicoidal, de esta manera podemos escribir (1.1) como

$$L_n^2 = 2 + 4r^2 + 2[S_n^x S_n^{x'} + S_n^y S_n^{y'} - S_n^z S_n^{z'}] - 4r[S_n^x + S_n^{x'}]. \quad (1.3)$$

Se puede ver que (1.3) tiene la misma forma del Hamiltoniano para el modelo generalizado de spin de Heisenberg. Siguiendo esta analogía podemos concebir la doble cadena del ADN como un modelo de cadenas de spines acoplados anisotrópicamente, como se puede apreciar en la Figura 1.3 donde la interacción base-base o en el caso del modelo de cadenas de spines la interacción se restringe a los vecinos más cercanos, eso quiere decir que la n -ésima base (spin) interactúa con la base (spin) $(n - 1)$ y con $(n + 1)$ y z sería el eje de magnetización.

El Hamiltoniano para dicho modelo de Heisenberg será expresado como:

$$\begin{aligned}
H = \sum_n & [-J_n(S_{n+1}^x S_n^x + S_{n+1}^y S_n^y) - K_n S_{n+1}^z S_n^z - J'_n(S_{n+1}'^x S_n'^x + S_{n+1}'^y S_n'^y) - K'_n S_{n+1}'^z S_n'^z \\
& + \lambda_n(S_n^x S_n'^x + S_n^y S_n'^y) - \mu_n S_n^z S_n'^z - h_n(S_n^x + S_n'^x) + A_n(S_n^z)^2 + A'_n(S_n'^z)^2], \quad (1.4)
\end{aligned}$$

donde los primeros cuatro términos representan la energía de apilamiento entre la n -ésima base y sus vecinas más cercanos en el plano normal al eje helicoidal, J_n y J'_n corresponden a constantes en el interior de la hebra S y S' . Cuando K_n y K'_n no son iguales a J_n and J'_n , respectivamente, se introduce una anisotropía en la interacción en el interior de la hebra. Para el caso de las dos redes de spines correspondientes a las hebras S y S' , J_n y J'_n representan integrales de intercambio ferromagnéticas debido a la interacción spin-spin.

La contribución de la energía de los enlaces de hidrógeno en el Hamiltoniano (1.4) está dada por donde λ_n y μ_n representan medidas de las interacciones entre las bases complementarias de sitios similares en cada hebra, las cuales también representan la interacción de intercambio antiferromagnética entre las redes de spines.

La contribución del campo local es con h_n siendo una constante que caracteriza el campo de energía local de la base y la base complementaria, o la energía de campo local del spin en ambos lados de la red.

La contribución de la anisotropía magnetocristalina en el sistema de spin ferromagnético. A_n y A'_n representan los coeficientes anisotrópicos (con valores positivos), esta es la causa de la rotación de las bases en un plano normal al eje helicoidal del ADN.

Con el fin de estudiar la dinámica interna del ADN en las siguientes secciones se utilizará una versión generalizada del Hamiltoniano (1.4), expresado en términos de operadores de quasi-spin. Para el caso del Hamiltoniano (1.4) la cadena del ADN es homogénea, pe-

ro puede ser agregada la inhomogeneidad como ha sido hecho [43, 54] y esto lleva a un carácter de dependencia en la secuencia del ADN. En este modelo simplificado aún no se considera la flexibilidad de las hebras dobles del ADN, este término será agregado en la sección posterior para aproximar más nuestro modelo al comportamiento real de nuestro sistema. Una vez realizadas estas aclaraciones nuestra siguiente tarea será encontrar una relación entre los efectos colectivos no lineales de un sistema quasi-cuántico y uno clásico, esto puede ser realizado si aplicamos un procedimiento de reducción.

1.4. El modelo generalizado de Takeno-Homma

El modelo matemático del ADN propuesto por Takeno y Homma [51, 52] ha tenido una amplia aceptación en el estudio de la dinámica interna de esta molécula, ya que toma en cuenta las energías principales que afectan su estructura y conformación. Usando una versión generalizada de este modelo: M. Daniel y V. Vasumathi dedicaron varios estudios a la dinámica interna del sistema molecular del ADN, la cual puede ser descrita por la ecuación de sine-Gordon y la ecuación no lineal de Schrödinger [55]; Agüero *et al*, usando el método de estados coherentes generalizados estudio la interacción del ADN con una proteína obteniendo diversas soluciones contenidas en las ecuaciones clásicas de movimiento [39, 56]; Saha y Kofané emplearon este modelo para estudiar numéricamente los efectos de las inhomogeneidades en las hebras dobles cuando el ADN interactúa con una enzima RNAP [57, 58]. El modelo 1.4 puede ser generalizado incluyendo la interacción de la proteína con el ADN y tomando en cuenta el hecho de que el sistema ADN-proteína es afectado por condiciones fisiológicas como lo es la temperatura y el medio circundante. Como hemos mencionado anteriormente, tratamos al ADN como un par de cadenas

moleculares lineales únicas acopladas y a la proteína como una cadena molecular lineal interactuando con el ADN mediante un acoplamiento lineal. Ya que la proteína es mayor en tamaño con respecto al ADN, solo consideramos una pequeña porción de la proteína, es decir, el sitio activo que es directamente interactuando con la molécula del ADN. En este trabajo consideramos al pequeño sitio activo de la proteína como una cadena lineal como ha sido considerado en los modelos previos.

Usando ideas las ideas de Takeno y Homma podemos escribir la interacción para la energía de los enlaces de hidrógeno y la energía de apilamiento de las bases de la siguiente manera

$$H_1 = - \sum_n [J(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \mathbf{S}'_n \cdot \mathbf{S}'_{n+1}) + \mu(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}'_n)],$$

donde la doble hélice del ADN es representada como el modelo de un par de cadenas de espines acopladas anisotrópicamente. Los términos proporcionales a J corresponden a la interacción de apilamiento entre la n -ésima base y sus vecinos más cercanos en las dos hebras, y los términos multiplicados por μ corresponden a la energía de los enlaces de hidrógeno entre las hebras complementarias. En equilibrio, el parámetro μ debe ser menor que cero. Como fue mencionado el ADN también es sensible a la temperatura, por tanto el átomo de hidrógeno se encuentra en un estado excitado. Es necesario introducir fonones térmicos en el sistema y esto lo conseguimos agregando

$$H_2 = \sum_n \left[\frac{p_n^2}{2m_1} + k_1(X_n - X_{n+1})^2 \right],$$

$$H_3 = \alpha_1 \sum_n (X_{n+1} - X_{n-1})(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}'_n),$$

donde $p_n = m_1 \dot{X}_n$ donde \dot{X}_n representa una derivada respecto al tiempo. El Hamiltoniano H_2 corresponde a los fonones térmicos, donde k_1 es una constante elástica y m_1 es la masa del átomo de hidrógeno atado a la base. X_n representa el desplazamiento de las bases en el n -ésimo sitio a lo largo de la dirección del átomo de hidrógeno. A su vez H_3 corresponde al acoplamiento entre oscilaciones de los átomos de hidrógeno debido a las fluctuaciones térmicas y la rotaciones de las bases.

Cuando una molécula de proteína se une al ADN este induce un largo cambio conformacional en el ADN. Aunque es sabido que la proteína es muy grande comparada con el ADN, sólo una pequeña parte de la proteína, es decir, el sitio activo está interactuando directamente con el ADN, tratamos a esta pequeña región del sitio activo de la proteína que interactúa con el ADN como una cadena lineal. Esta a su vez consiste en una colección de masas puntuales, donde cada masa puntual representa una unidad peptídica y se conectan mediante cuerdas lineales. Es asumido que exhiben un estiramiento longitudinal paralelo al eje helicoidal del ADN, el cual se acopla linealmente con los enlaces de hidrógeno entre las bases. Por lo tanto, los Hamiltonianos que representan este movimiento de estiramiento longitudinal de la proteína y el acoplamiento a la cadena del ADN pueden ser escritos de la siguiente manera, donde los índices n y $n \pm 1$ representan al n -ésimo y $n \pm 1$ -ésimo sitio de las pares de bases

$$H_4 = \sum_n \left[\frac{q_n^2}{2m_2} + k_2(y_n - y_{n+1})^2 \right], \quad (1.5)$$

$$H_5 = \alpha_2 \sum_n (y_{n+1} - y_{n-1}) S_n^z S_n'^z, \quad (1.6)$$

donde $q_n = m_2 \dot{y}_n$ y m_2 es la masa del peptido, y_n denota al desplazamiento del n -

ésimo peptido en la cadena de la proteína desde su posición de equilibrio y k_2 representa la constante elástica asociada a la oscilación de pequeña amplitud de la proteína. El Hamiltoniano (1.6) representa el cambio en la energía del enlace de hidrógeno, la cual es debida al impacto de las oscilaciones acopladas linealmente de las unidades peptídicas, α_2 es el coeficiente de acoplamiento. Ya que la proteína se desliza a lo largo de la de la cadena molecular, la energía de la interacción a lo largo de la dirección del eje helicoidal (dirección z) se espera que sea dominante por sobre la la energía en el plano xy normal.

Por lo tanto el Hamiltoniano total que describe la interacción del ADN con una proteína puede ser escrito de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
H = & \sum_n [-J(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \mathbf{S}'_n \cdot \mathbf{S}'_{n+1}) - (\mu - \alpha_1(X_{n+1} + X_{n-1}))(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}) \\
& + \alpha_2(Y_{n-1} + Y_{n+1})(S_z S'_z) + \frac{p_n^2}{2m_1} + k_1(X_n - X_{n+1})^2 \\
& + \frac{q_n^2}{2m_2} + k_2(Y_n - Y_{n+1})^2]. \tag{1.7}
\end{aligned}$$

Para continuar con el estudio de la dinámica colectiva de los pares de bases en el ADN debemos obtener las ecuaciones clásicas de movimiento a partir del Hamiltoniano generalizado (1.7). Como se mencionó previamente esto lo lograremos mediante un procedimiento de reducción para pasar de un sistema quasi-cuántico a uno clásico, en nuestro caso emplearemos el método de estados coherentes generalizados asociados a ciertos grupos por las razones mencionadas anteriormente. En la siguiente sección enmarcaremos los aspectos teóricos más importantes de este método.

Objetivos

Objetivo general

Estudiar el modelo del ADN con torsión aplicando el método de estados coherentes generalizados del grupo $SU(2)/U(1)$ para la obtención de estructuras no lineales clásicas y no clásicas como responsables de la transmisión de energía e información. Además, investigar la evolución de estructuras no lineales en este sistema molecular considerando inhomogeneidades de las hebras e interacción con medio viscoso.

Objetivos particulares

- Investigar la formación de estructuras no lineales en el sistema molecular del ADN.
- Analizar las propiedades de las soluciones analíticas o numéricas de la familia de la ecuación no lineal de Schrödinger.
- Investigar las condiciones para una eficiente formación de solitones interactuantes. Esto conllevaría a restricciones clásicas y no clásicas.

Método de estados coherentes generalizados

Los estados coherentes fueron construidos por Schrödinger en 1926 en el contexto del oscilador armónico cuántico. Schrödinger estaba interesado en estados cuánticos que restauraran el comportamiento del oscilador clásico, los cuales estaban definidos como estados de incertidumbre mínima que exhibían un comportamiento clásico [59]. Un año después P. A. M. Dirac, utilizando el concepto de luz y el oscilador cuántico, elucubró una descripción para la radiación electromagnética. Debido a la descripción inequivalente del mismo sistema, en general, las predicciones de la formulación de Dirac no empataron con la formulación de Maxwell. Además, ambos describían lados opuestos del comportamiento de la luz. En 1963, los estados coherentes fueron re-descubiertos simultáneamente por Glauber [60, 61], Klauder [62] y Sudarshan [63] en la óptica cuántica de los rayos de luz coherentes emitidos por láser. La contribución principal de Glauber fue utilizar la estructura teórica de Dirac pero logrando relacionar ambas formulaciones, la parte clásica con la parte cuántica. Estos estados cuánticos satisfacen una de las siguientes condiciones:

- saturan la desigualdad de Heisenberg,
- son vectores del operador de aniquilación con eigenvalor z ($b|z\rangle = z|z\rangle$),
- son obtenidos del estado base del oscilador armónico por la acción unitaria del grupo de Weyl-Heisenberg.

El vasto campo que cubren los estados coherentes fue motivo de generalizaciones a otras familias de estados deducibles de operadores no canónicos y no necesariamente satisfacen todas las propiedades mencionadas anteriormente. Como un ejemplo de estas generalizaciones consideremos el enfoque de Nieto y Simmons, donde se explota la primera propiedad con el fin de adaptar los estados coherentes a un potencial local [64, 65]. Otro ejemplo es la generalización propuesta por Girandello y Barut para grupos no-compactos [66], es decir que no es aplicable para todos los grupos de Lie. A su vez, Perelomov [67, 68] y Gilmore [69], explotaron la tercera condición, ellos investigaron la construcción de estados coherentes para grupos arbitrarios de Lie con el fin de formular un formalismo general y completo de estados coherentes para grupos de Heisenberg con propiedades similares a las del oscilador armónico. El resultado de estos estudios fue la conexión de los estados coherentes con el grupo dinámico de un sistema físico dado. Ya que el Hamiltoniano (1.4) está expresado en términos de generadores del grupo $SU(2)$ y debido a la simetría del problema podemos emplear la generalización de Perelomov para promediar nuestro Hamiltoniano sobre los estados coherentes generalizado del grupo $SU(2)/U(1)$, después de realizar este procedimiento nuestro problema quasi-cuántico se volverá un problema clásico.

2.1. Estados Coherentes

2.1.1. El grupo de Heisenberg-Weyl

Para describir un sistema con un grado de libertad en mecánica cuántica los operadores más simples que se utilizan son el operador de posición q y el operador de momento p . Estos operadores actúan en el espacio de Hilbert \mathcal{H} y satisfacen las relaciones de conmutación:

$$[q, p] = i\hbar\hat{I}, \quad [q, \hat{I}] = [p, \hat{I}] = 0, \quad (2.1)$$

donde \mathcal{H} es el operador identidad y \hbar es la constante de Planck. La estructura de las relaciones de conmutación (2.1) es descrita por un grupo, el llamado *Grupo de Heisenberg-Weyl*. Para el estudio del oscilador armónico cuántico resulta más adecuado presentar los siguientes operadores, definidos en términos de los operadores de posición y momento:

$$a = \frac{q + ip}{\sqrt{2\hbar}}, \quad a^\dagger = \frac{q - ip}{\sqrt{2\hbar}}, \quad (2.2)$$

donde a recibe el nombre de operador de aniquilación y a^\dagger recibe el nombre de operador de creación. Puede ser demostrado de igual manera que para las relaciones de conmutación anteriores que estos operadores satisfacen las siguientes relaciones:

$$[a, a^\dagger] = \hat{I}, \quad [a, \hat{I}] = [a^\dagger, \hat{I}] = 0. \quad (2.3)$$

Lo que indican las relaciones de conmutación, tanto (2.1) como (2.3), es que q , p y \hat{I} (a , a^\dagger y \hat{I} , respectivamente) son generadores de un álgebra de Lie, la cual será denotada por \mathcal{W}_1 . Esta será llamada *álgebra de Heisenberg-Weyl*.

En general, los elementos del álgebra \mathcal{W}_1 son escritos como

$$z = (s; x_1, x_2) = x_1 e_1 + x_2 e_2 + s e_3, \quad (2.4)$$

con

$$e_1 = i(\hbar)^{-1/2} p, \quad e_2 = i(\hbar)^{-1/2} q, \quad e_3 = i\hat{I}. \quad (2.5)$$

La construcción del grupo de Heisenberg-Weyl como es bien sabido, es posible utilizando la exponenciación:

$$\exp(z) = \exp(isI)D(\beta), \quad D(\beta) = \exp(\beta a^\dagger - \bar{\beta}a), \quad (2.6)$$

donde $z = (s; x_1, x_2)$ lo cual también puede ser representado utilizando los operadores de aniquilación y creación de la forma $z = is\hat{I} + \frac{1}{\hbar}(Pq - Qp) = is\hat{I} + \beta a^\dagger - \bar{\beta}a$ como elemento del álgebra de Heisenberg-Weyl.

Notamos que los elementos $(s, 0)$ forman el centro de W_1 , es decir, el conjunto de elementos que conmutan con cada elemento de W_1 . Por lo tanto para cada representación irreducible unitaria $T(g)$ del grupo W_1 , los operadores $T((s, 0))$ forman una representación unitaria del subgrupo $\{(s, 0)\}$, el cual es determinado por un número real λ :

$$T^\lambda((s; 0)) = \exp(i\lambda s)\hat{I}. \quad (2.7)$$

El problema fue resuelto por von Neumann y el resultado puede ser expresado por el siguiente teorema.

Teorema. Para cada valor fijo de λ ($\lambda \neq 0$) cualquier par de representaciones irreducibles unitarias del grupo W_1 son equivalentemente unitarias.

O expresado de otra manera, para cualquier par de sistemas de operadores $\{D(\alpha)\}$ y $\{\hat{D}(\alpha)\}$ existe un operador unitario U de modo que

$$\hat{D}(\alpha) = U^\dagger D(\alpha)U. \quad (2.8)$$

Un argumento análogo es válido para el par de operadores \hat{a}^\dagger , \hat{a} y a^\dagger que satisfacen la relación de conmutación (2.3)

Como se mencionó previamente los operadores p , q y a^\dagger actúan en el espacio de Hilbert. Los vectores que pertenecen a este espacio son denotados por el símbolo de Dirac $|\psi\rangle$, físicamente este vector representa cualquier estado físico que describe a nuestro sistema, el producto escalar del vector $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$ lineal en $|\psi\rangle$ y antilineal en $|\varphi\rangle$ es escrito como $\langle\varphi|\psi\rangle$, y la operador de proyección sobre $|\psi\rangle$ es escrito $|\psi\rangle\langle\psi|$. Es sabido que el llamado vector vacío $|0\rangle$ existe en \mathcal{H}

$$a|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1. \quad (2.9)$$

La acción del operador de creación a^\dagger genera un conjunto de vectores normalizados desde el vector vacío

$$|n\rangle = (n!)^{-1/2} (a^\dagger)^n |0\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

Los vectores $\{|n\rangle\}$ forman una base en \mathcal{H} . La acción de los operadores a y a^\dagger en esta base está dada por

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle. \quad (2.11)$$

2.1.2. Estados coherentes asociados al grupo de Heisenberg-Weyl

Sea $T(g)$ una representación unitaria de W_1 , y $|\psi_0\rangle$ un vector fijo en el espacio \mathcal{H} . El estado que corresponde al vector $|\psi_0\rangle$ es estable solo bajo la acción de operadores de la forma $T((s, 0))$. En otras palabras, el subgrupo isotrópico H contiene solo elementos de la forma $(s, 0)$ para cualquier estado $|\psi_0\rangle$.

Aplicando el operador de representación $T(g) = T((t, \alpha)) = \exp(it)D(\alpha)$ al vector fijo $|\psi_0\rangle$. El resultado es un conjunto de estados $\{|\alpha\rangle\}$

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|\psi_0\rangle, \quad (2.12)$$

donde α es un número complejo. Además, ya que el grupo isotrópico del estado $|\psi_0\rangle$ es $H = \{h\}$, $h = (t, 0)$, un α diferente le corresponde a diferentes estados. El sistema $\{|\alpha\rangle\}$ es solo un sistema de estados coherentes generalizados del tipo $\{T(g), |\psi_0\rangle\}$. Un caso particular es la elección del vector vacío $|0\rangle$ como el vector inicial $|\psi_0\rangle$. Este es el caso para los *estados coherentes*.

Propiedades de los Estados Coherentes

El sistema de estados coherentes generalizados tiene un número de propiedades notables enunciadas a continuación.

- Debido a que la representación $T(g)$ es irreducible, el sistema es completo. Sin embargo, los estados no son, en general, mutuamente ortogonales. De hecho,

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \psi_0 | D^+(\beta) D(\alpha) | \psi_0 \rangle = \exp(i \text{Im}\{\alpha \hat{\beta}\}) \langle \psi_0 | D(\alpha - \beta) | \psi_0 \rangle,$$

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 = |\langle \psi_0 | D(\alpha - \beta) | \psi_0 \rangle|^2 = \rho(\alpha - \beta), \quad (2.13)$$

y la función $\rho(\alpha)$ no puede ser idéntica a cero.

- El operador $D(\alpha)$ transforma cualquier estado coherente en otro estado coherente,

$$D(\alpha)|\beta \rangle = \exp(i\text{Im}\{\alpha\hat{\beta}\})|\alpha + \beta \rangle. \quad (2.14)$$

La relación (2.14) determina la acción del grupo W_1 en el plano α ,

$$(\alpha; \beta)\alpha = \alpha + \beta. \quad (2.15)$$

La acción no es efectiva, ya que el subgrupo $H = \{(t, 0)\}$ actúa como la transformación identidad en un plano α . Como se puede ver de (2.15), el grupo W_1/H es el grupo de translación del plano α . Por lo tanto, la métrica invariante en el plano α es escrita como de manera usual:

$$ds^2 = |d\alpha|^2. \quad (2.16)$$

La medida invariante correspondiente en el plano α es

$$d\mu(\alpha) = Cd^2\alpha = Cd\alpha_1\alpha_2, \quad \alpha = \alpha_1 + i\alpha_2, \quad (2.17)$$

donde C es una constante.

- La llamada resolución de unidad.

Sea $|\alpha \rangle \langle \alpha|$ el operador de proyección en el estado $|\alpha \rangle$. Consideremos el operador

$$\hat{A} = \int d\mu(\beta)|\beta \rangle \langle \beta|, \quad (2.18)$$

Es fácil ver que \hat{A} conmuta con cualquier $D(\alpha)$. Por lo tanto, de acuerdo a el lemma de Schur, este operador es el operador unitario por un número

$$\hat{A} = d^{-1} \cdot \hat{I}. \quad (2.19)$$

Para encontrar la constante d calculamos el promedio del operador \hat{A} sobre un estado coherente $|\alpha\rangle$

$$d^{-1} = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \int |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 d\mu(\beta) = \int \rho(\beta) d\mu(\beta). \quad (2.20)$$

Para un operador acotado \hat{A} la constante d no es cero, de modo que el factor en (2.17) puede ser elegido de modo que $d = 1$. La resultante "resolución de unidad" es

$$\int d\mu(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha| = \hat{I}, \quad (2.21)$$

donde $d\mu(\alpha)$ es dado por (2.17). La constante C es determinada de la condición $\int \rho(\alpha) d\mu(\alpha) = 1$.

- Como una consecuencia inmediata de la resolución de la unidad (2.21) es la dependencia lineal de los estados coherentes

$$\int d\mu(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha | \beta \rangle = |\beta\rangle. \quad (2.22)$$

Utilizando la condición de completos (2.22), no es difícil expandir un estado arbitrario $|\psi\rangle$ en estados coherentes

$$|\psi\rangle = \int d\mu(\alpha) \psi(\alpha) |\alpha\rangle, \quad (2.23)$$

donde la función $\psi(\alpha)$ está dada por

$$\psi(\alpha) = \langle \alpha | \psi \rangle. \quad (2.24)$$

- Miminizan la relación de incertidumbre de Heisenberg

Hasta ahora el vector de estado $|\psi_0\rangle$, el cual fue el origen para comenzar a construir el sistema de estados coherentes generalizados fue considerado como un elemento arbitrario del espacio de Hilbert \mathcal{H} . ¿Será posible usar esa arbitrariedad de manera que el sistema de estados coherentes resultantes tengan algunas propiedades prescritas, por ejemplo, los estados coherentes los estados coherentes podrán actuar como estados clásicos?

Consideremos la relación de incertidumbre de Heisenberg para determinar el criterio de cercanía entre los estados clásicos y los estados cuánticos

$$\Delta = \Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (2.25)$$

donde

$$(\Delta q)^2 = \langle (\hat{q} - \langle \hat{q} \rangle)^2 \rangle, \quad (\Delta p)^2 = \langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle, \quad (2.26)$$

en la última expresión $\langle \hat{q} \rangle$ representa el valor promedio del operador \hat{q} sobre el estado considerado $|\psi\rangle: \langle \psi | q | \psi \rangle$.

Entre los estados coherentes siempre hay un estado para el cual $\langle \hat{q} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$.

Facilmente puede ser visto que esta propiedad es especifica para el estado

$$|-\alpha_0\rangle = D(-\alpha_0)|\psi_0\rangle, \quad (2.27)$$

donde $\alpha_0 = \langle \psi_0 | a | \psi_0 \rangle$. De esa manera podemos asumir sin perder generalidad que $\langle \psi_0 | \hat{q} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \hat{p} | \psi_0 \rangle = 0$.

- El sistema de estados coherentes $\{|\alpha\rangle\}$ es sobrecompleto. Por lo tanto los subsistemas de Estados Coherentes deben existir y estos son completos.

Para demostrar lo anterior consideraremos la completitud para un subsistema $\{|\alpha_k\rangle\}$ que corresponde a los puntos $\{\alpha_k\}$ en el plano complejo α .

Primero consideremos que el subsistema $\{|\alpha_k\rangle\}$ no es completo. Entonces un vector $|\psi\rangle \neq 0$, que pertenece al espacio de Hilbert \mathcal{H} , es ortogonal a cualquier $|\alpha_k\rangle$: $\langle \psi | \alpha_k \rangle = 0$. Por lo tanto es claro que la función

$$\psi(\alpha) = \exp(-|\alpha|^2/2) \langle \psi | \alpha \rangle, \quad (2.28)$$

desaparece en cualquier punto del conjunto $\{\alpha_k\}$. Mientras tanto, la función $\psi(\alpha)$ es una función analítica completa de la variable compleja α que satisface la condición

$$I = \int |\psi(\alpha)|^2 \exp(-|\alpha|^2) d\mu(\alpha) < \infty. \quad (2.29)$$

En otras palabras, $\psi(\alpha)$ pertenece al espacio \mathcal{F} . Sin embargo, si el sistema $\{|\alpha_k\rangle\}$ es completo, no existe ninguna función que cumpla esas características.

De esa manera se ha probado la siguiente proposición.

Proposición 1. El subsistema de estados $\{|\alpha_k\rangle\}$ es completo si y solo si ninguna función $\psi(\alpha) \in \mathcal{F}$, $\psi \neq 0$, desapareciendo en todos los puntos del conjunto $\{\alpha_k\}$, existe.

Un número de ejemplos de subsistemas completos dentro de un sistema de estados coherentes $\{\alpha\}$ son:

1. Cualquier conjunto $\{\alpha_k\}$ con un punto limitando en la parte finita del plano α continua como subsistema completo aún después de que un número finito de estados es removido.
2. Cualquier conjunto infinito α_k el cual no contiene el origen $\alpha = 0$ y satisface la condición

$$\sum_k |\alpha_k|^{-2-\epsilon} = \infty, \quad (2.30)$$

en algún $\epsilon > 0$ es un subsistema completo. Esta condición es una consecuencia de teoremas generales que relacionan el orden de incremento de una función completa en $|\alpha| \rightarrow \infty$ a la distribución de sus ceros.

2.2. Estados coherentes generalizados

2.2.1. Definición de estados coherentes generalizados

Sea G un grupo de Lie arbitrario y $T(g)$ su representación irreducible unitaria, actuando en el espacio de Hilbert \mathcal{H} .

Tomamos un vector fijo $|\psi_0\rangle$ en el espacio de Hilbert \mathcal{H} y consideramos un conjunto $\{|\psi_g\rangle\}$, donde $|\psi_g\rangle = T(g)|\psi_0\rangle$ y g es cualquier elemento del grupo G . Es fácil ver que los dos vectores $|\psi_{g_1}\rangle$ y $|\psi_{g_2}\rangle$ corresponden al mismo estado, es decir, difieren por un factor de fase ($|\psi_{g_1}\rangle = \exp(i\alpha)|\psi_{g_2}\rangle$), ($|\exp(i\alpha)| = 1$), sólo si $T(g_2^{-1}g_1)|\psi_0\rangle = \exp(i\alpha)|\psi_0\rangle$. Supongamos que $H = \{h\}$ es un subgrupo del grupo G , de modo que sus

elementos tienen la propiedad

$$T(h)|\psi_0 \rangle = \exp[i\alpha(h)]|\psi_0 \rangle. \quad (2.31)$$

Cuando el subgrupo H es máxima, será llamado el subgrupo de isotropía para el estado $|\psi_0 \rangle$. Esta construcción muestra que los vectores ψ_g para todos los elementos del grupo g , perteneciendo a la clase lateral izquierda de G con respecto al subgrupo H , difiere solo en un factor de fase y de esa manera determina el mismo estado. Eligiendo un $g(x)$ en cualquier clase equivalente x , uno obtiene un conjunto de estados $\{\psi_{g(x)}\}$, donde $x \in X = G/H$. Una forma más concisa $\{|x \rangle\}$, $|x \rangle \in \mathcal{H}$, será utilizada para este conjunto. (El grupo G puede ser considerado como un fibrado con base $X = G/H$). Una elección de $g(x)$ es una sección transversal en el fibrado.)

Ahora tomando en consideración todo lo mencionado podemos presentar una definición de estado coherente generalizado.

Definición. El sistema de estados $\{|\psi_g \rangle\}$, $|\psi_g \rangle = T(g)|\psi_0 \rangle$, donde g son elementos del grupo G (T es una representación del grupo G , actuando en el espacio de Hilbert \mathcal{H} , y $|\psi_0 \rangle$ es un vector fijo en este espacio) es llamado sistema de estados coherentes $\{T, |\psi_0 \rangle\}$.

Sea H es un subgrupo de isotropía para el estado $|\psi_0 \rangle$. Entonces un estado coherente $|\psi_g \rangle$ es determinado por un punto $x = x(g)$ en el espacio de clase lateral G/H , correspondiente al elemento $g : |\psi_g \rangle = \exp(i\alpha)|x \rangle$, $|\psi_0 \rangle = |0 \rangle$.

2.2.2. Propiedades generales

Discutiremos la completitud como consecuencia directa de la irreducibilidad de la representación $T(g)$. Suponiendo que una medida $dy(g)$, la cual es invariante bajo los cambios en izquierda y derecha, existe un grupo G . Este induce una medida invariante dx en el espacio homogéneo $X = G/H$. Asumiendo que las condiciones de convergencia se satisfacen, consideremos el operador

$$\hat{B} = \int dx |x\rangle\langle x|, \quad (2.32)$$

donde $|x\rangle\langle x|$ es un proyector para el estado $|x\rangle$. Debido a la definición de \hat{B} , la invariancia de la medida dx se tiene

$$T(g)\hat{B}[T(g)]^{-1} = \hat{B} \quad (2.33)$$

lo anterior debido a $\beta(g_1, g) = \alpha(g_1g) - \alpha(g)$. De esamanera \hat{B} conmuta con todos los operadores $T(g)$ y debe ser igual al operador unidad por un factor numérico, ya que la representación $T(g)$ es irreducible,

$$\hat{B} = d\hat{I} \quad (2.34)$$

para fijar la constante d , es apropiado calcular el valor de expectación de \hat{B} par aun estado $|y\rangle$ (considerando la normalización $\langle y|y\rangle = 1$)

$$\langle y|\hat{B}|y\rangle = \int |\langle y|x\rangle|^2 dx = \int |\langle 0|x\rangle|^2 dx = d \quad (2.35)$$

Por lo tanto se puede ver que una condición necesaria para que \hat{B} exista es la conver-

gencia de la integral (2.35). En este caso el sistema de estados coherentes generalizados es llamado cuadrado integrables. (Los estados coherentes son cuadrado integrables para un número de casos: todas las representaciones de grupos semisimples compactos, representaciones de series discretas para grupos semisimples reales, y algunas representaciones de grupos de Lie resolubles.) Introduciendo el factor en la medida en X , $d\mu(x) = d^{-1}d(x)$, uno obtiene una identidad muy importante (la resolución de unidad)

$$\int d\mu(x)|x\rangle\langle x| = \hat{I}, \quad (2.36)$$

De esa manera cualquier estado $|\psi\rangle$ puede ser expandido en el sistema de estados coherentes,

$$|\psi\rangle = \int d\mu(x)c(x)|x\rangle, \quad (2.37)$$

donde $c(x) = \langle x|\psi\rangle$, y

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int d\mu(x)|c(x)|^2. \quad (2.38)$$

La función $c(x)$, el simbolo del estado $|\psi\rangle$, no es arbitrario, pero satisface

$$c(x) = \int \langle x|y\rangle c(y)d\mu(y) \quad (2.39)$$

Claramente, algunas dependencias lineales existen para los estados coherentes. Una consecuencia de (2.37) es

$$|x\rangle = \int \langle y|x\rangle |y\rangle d\mu(y). \quad (2.40)$$

De ese modo el sistema de estados coherentes es sobrecompleto, es decir, contiene algunos subconjuntos de estados coherentes los cuales son sistemas completos.

Hasta el momento hemos considerado sistemas de estados coherentes con un grado de libertad, pero no todos los sistemas son de este tipo a continuación veremos el caso de sistemas con muchos grados de libertad, este caso se tratará de manera similar a los sistemas anteriores.

Los operadores básicos utilizados para describir un sistema cuántico con un número finito de grados de libertad son operadores de posición \hat{q}_j y los operadores de momento \hat{p}_k ($j, k = 1, \dots, N$). Estos operadores satisfacen las relaciones de conmutación de Heisenberg:

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}\hat{I}, \quad [\hat{q}_j, \hat{q}_k] = [\hat{q}_j, \hat{I}] = 0, \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = [\hat{p}_j, \hat{I}] = 0 \quad (2.41)$$

Donde \hat{I} es el operador unidad y \hbar es la constantes de Planck.

Podemos expresar los operadores en la siguiente forma:

$$a_j = \frac{\hat{q}_j + i\hat{p}_j}{\sqrt{2\hbar}}, \quad a_k^\dagger = \frac{\hat{q}_k - i\hat{p}_k}{\sqrt{2\hbar}} \quad (2.42)$$

Las relaciones de conmutación son obtenidas de (2.41),

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k] = \delta_{jk}\hat{I}, \quad [\hat{a}_j, \hat{a}_k] = [\hat{a}_j, \hat{I}] = 0, \quad [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] = [\hat{a}_j^\dagger, \hat{I}] = 0 \quad (2.43)$$

Los operadores \hat{q}_j, \hat{p}_k , también como a_j, a_k^\dagger , actúan en el espacio de Hilbert \mathcal{H} . Es sabido que en \mathcal{H} existe un vector vacío $|0\rangle$ el cual es un vector normalizado que desaparece bajo la acción de cualquier a_j :

$$a_j|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1. \quad (2.44)$$

Los productos de operadores a_k^\dagger generan un conjunto de vectores normalizados

$$|n_1, \dots, n_N \rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_N^\dagger)^{n_N}}{\sqrt{n_1! \dots n_N!}} |0 \rangle. \quad (2.45)$$

Para expresar de manera más sucinta lo anterior introduciremos la notación:

$$[n] = (n_1, \dots, n_N), \quad [n]! = n_1! \dots n_N!$$

$$[a^\dagger]^{[n]} = (a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_N^\dagger)^{n_N} \quad (2.46)$$

re-emplazando en la ecuación (2.45) obtenemos:

$$|[n] \rangle = \frac{[a^\dagger]^{[n]}}{\sqrt{[n]!}} |0 \rangle \quad (2.47)$$

El conjunto de vectores $\{|[n] \rangle\}$ es una base en el espacio de Hilbert \mathcal{H} . La acción de los operadores a_j y a_k^\dagger en el espacio \mathcal{H} es escrita como

$$a_j |[n] \rangle = \sqrt{n_j} |[n'] \rangle, \quad a_k^\dagger |[n] \rangle = \sqrt{n_{k+1}} |[n''] \rangle,$$

$$[n'] = (n_1, \dots, n_{j-1}, n_{j-1}, \dots, n_N), \quad [n''] = (n_1, \dots, n_{k+1}, \dots, n_N). \quad (2.48)$$

Volvamos a (2.43). Estas relaciones significan que los operadores a_j , a_k^\dagger y \hat{I} forman una base del álgebra de Lie de W_N , la cual es el álgebra de Heisenberg-Weyl. Cualquier elemento del álgebra es escrito como

$$\hat{X} = s\hat{I} + \frac{1}{\hbar}(P\hat{q} - Q\hat{p}) = s\hat{I} - i(\alpha a^\dagger - \bar{\alpha} a), \quad (2.49)$$

donde s es un número real, $\alpha = (Q + iP)/\sqrt{2\hbar}$, $\bar{\alpha} = (Q - iP)/\sqrt{2\hbar}$. De nuevo introducimos la siguiente notación: $P = (P_1, \dots, P_N)$ y $Q = (Q_1, \dots, Q_N)$ son vectores reales N -dimensionales, $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$, $a = (a_1, \dots, a_N)$, $\alpha a^\dagger = \sum_{j=1}^N \alpha_j a_j^\dagger$.

El operador \hat{X} es auto-conjugado, y el operador correspondiente $exp(i\hat{X})$ es unitario,

$$exp(i\hat{X}) = exp(is\hat{I})D(\alpha), \quad D(\alpha) = exp(\alpha a^\dagger - \bar{\alpha}a). \quad (2.50)$$

Describe un elemento finito del grupo W_N con el álgebra de Lie \mathscr{W}_N .

Otra expresión para los estados coherentes es

$$|\alpha \rangle = exp(-|\alpha|^2/2) \sum_{[n]} \frac{\alpha^{[n]}}{\sqrt{[n]!}} |[n] \rangle, \quad (2.51)$$

mientras que la medida de integración es

$$d\mu(\alpha) = \pi^{-N} \prod_{j=1}^N \prod_{k=1}^N dRe\{\alpha_j\} dIm\{\alpha_k\}. \quad (2.52)$$

2.3. Estados coherentes para el grupo de rotación del espacio tridimensional

Un sistema con simetría esférica tiene un centro simétrico, elegido como el origen, y el sistema es isotrópico con respecto al origen. El sistema es invariante bajo cualquier rotación alrededor de cualquier eje a través del origen sin importar el ángulo. El grupo simétrico del sistema es el grupo de rotación tridimensional $SO(3)$. Este grupo es el grupo más simple y el más estudiado de los grupos de Lie no-abelianos y compactos. Es localmente isomorfo al grupo $SU(2)$, el grupo unitario de 2×2 matrices con determinante unitario. Para ser más preciso, $SO(3)$ es cociente de $SU(2)$ por su centro $Z_2 = \{I, -I\}$ (el centro del grupo

es el conjunto de sus elementos que conmutan con cualquier elemento del grupo), donde I es la matriz unitaria 2×2 , $SO(3) = SU(2)/Z_2$. La diferencia entre $SO(3)$ y $SU(2)$.

2.3.1. Estructura del grupo $SU(2)$

Consideremos el grupo $G = SU(2) = \{g\}$

$$g = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad \alpha = \alpha_1 + i\alpha_2, \quad \beta = \beta_1 + i\beta_2. \quad (2.53)$$

Donde α_j y β_j son números reales, y la barra arriba significa conjugación compleja. Por lo tanto uno puede ver que, en particular, G es homomorfa a la esfera tridimensional $S^3 = \{\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2 : \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \beta_1^2 + \beta_2^2 = 1\}$. Esto quiere decir que cualquier contorno cerrado en G puede ser deformado continuamente en un punto. El grupo G no es complejo, pero naturalmente se incrusta en el grupo complejo $G^c = SL(2, C)$, el cual es el grupo para todas las matrices complejas 2×2 con determinante unitario

$$g = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}, \quad \alpha\delta - \beta\gamma = 1. \quad (2.54)$$

El grupo $G = SU(2)$ contiene un subgrupo diagonal de matrices

$$H = \left\{ \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \bar{\alpha} \end{pmatrix} \right\}, \quad \alpha = (i\psi/2). \quad (2.55)$$

No es difícil ver que el espacio cociente $X = G/H$ es isomorfo al conjunto de elementos G de la forma

$$\left\{ \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix} \right\}, \quad \beta = \beta_1 + i\beta_2, \quad \alpha^2 + \beta_1^2 + \beta_2^2 = 1, \quad (2.56)$$

con la parametrización

$$\alpha = \cos \frac{\theta}{2}, \quad \beta = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}, \quad 0 \leq \theta < 2\pi, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad (2.57)$$

claramente el espacio X es la esfera bidimensional unitaria S^2 , es decir, el conjunto de los vectores tridimensionales $\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$. Cualquier elemento del espacio X puede ser escrito como

$$g_n = \exp \left[i \frac{\theta}{2} (m_1 \sigma_1 + m_2 \sigma_2) \right], \quad (2.58)$$

donde $m_1 = \sin\varphi$, $m_2 = -\cos\varphi$, σ_1, σ_2 son las matrices de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

de esa manera esta matriz describe una rotación por el ángulo θ alrededor del vector \mathbf{m} , que pertenece al plano ecuatorial de la esfera S^2 , y perpendicular al vector \mathbf{n} .

La descomposición Gaussiana para el elemento g_n indica el isomorfismo entre los espacios de la clase lateral X y X_+ ,

$$g_n \rightarrow g_\xi = (1 + |\xi|^2)^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 & \xi \\ -\xi & 1 \end{pmatrix}, \quad \xi = -\tan \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}. \quad (2.60)$$

Evidentemente, el isomorfismo es solo la proyección estereográfica familiar de la esfera desde su polo sur al plano complejo ξ . Para ser más preciso, para establecer el isomor-

fismo uno tiene que hacer el plano ξ compacto, agregándole el punto en infinito, $\{\infty\}$, correspondiente al polo sur de la esfera,

$$S^2 = C \cup \{\infty\}. \quad (2.61)$$

El isomorfismo entre X y X_- es establecido similarmente. Lo anterior introduce una coordenada compleja para la esfera S^2 , o más precisamente, para la esfera con el polo sur removido. Notamos que es imposible introducir dicho sistema coordenado en toda la esfera, ya que la estructura topológica de la esfera no es la del plano. Sin embargo, la esfera S^2 , también como cualquier órbita de la representación adjunta para un grupo de Lie compacto, es una variedad compacta conjugada, así que esta puede ser descrita con una combinación de varios sistemas coordinados, obtenidos a través de la proyección estereográfica desde el polo norte de la esfera.

La expresión para la métrica invariante G en la esfera es

$$ds^2 = d\mathbf{n} \cdot d\mathbf{n} = \frac{4d\xi d\bar{\xi}}{(1 + |\xi|^2)^2}. \quad (2.62)$$

2.4. Representación del grupo $SU(2)$

Cualquier representación irreducible unitaria $T(g)$ del grupo $SU(2)$ está dada por un entero no negativo o mitad entero j : $T(g) = T^j(g)$, $\dim T^j = 2j + 1$. En la representación del espacio \mathcal{H}^j existe la base canónica $|j, \mu\rangle$, donde μ va desde $-j$ a j y el intervalo $(-j \leq \mu \leq j)$. Los operadores infinitesimales $J_{\pm} = J_1 + iJ_2$, $J_0 = J_3$ de la representación de grupo $T^j(g)$ satisface las relaciones de conmutación

$$[J_0, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}, \quad [J_-, J_+] = -2J_0. \quad (2.63)$$

El operador J_k ($k = 1, 2, 3$) está relacionado a la rotación infinitesimal alrededor del eje k . Los vectores de representación espacial $|j, \mu\rangle$ son eigenvectores de los operadores J_0 y $\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$,

$$J_0|j, \mu\rangle = \mu|j, \mu\rangle, \quad \mathbf{J}^2|j, \mu\rangle = j(j+1)|j, \mu\rangle. \quad (2.64)$$

Respectivamente, el operador $\exp[i\omega(\mathbf{m}\mathbf{J})]$, $\mathbf{m}^2 = 1$, describe la rotación por un ángulo ω alrededor del eje dirigido a lo largo de \mathbf{m} . La acción de los operadores J_{\pm} en la base canónica está dada por

$$\begin{aligned} J_+|j, \mu\rangle &= \sqrt{(j-\mu)(j+\mu+1)}|j, \mu+1\rangle, \\ J_-|j, \mu\rangle &= \sqrt{(j+\mu)(j-\mu+1)}|j, \mu-1\rangle, \end{aligned} \quad (2.65)$$

por lo tanto

$$J_-|j, -j\rangle = 0, \quad |j, \mu\rangle = \sqrt{\frac{(j-\mu)!}{(j+\mu)!(2j)!}} (J_+)^{j+\mu}|j, -j\rangle. \quad (2.66)$$

Ahora describiremos una realización estandar de la representación $T^j(g)$. Partiendo de la expresión $g : z \rightarrow z'' = (\alpha z + \gamma)/(\beta z + \delta)$ y como consecuencia de está representación del grupo $SU(2)$ actue en el espacio \mathcal{F}^j de los polinomios de grado menor que $(2j+1)$ en el grupo Z_- . Por la linealidad, esta representación puede ser extendida á aquella del grupo $G^c = SL(2, C)$. Está dada por

$$T^j(g)f(z) = (\beta z + \delta)^{2j} f\left(\frac{\alpha z z_g + \gamma}{\beta z + \delta}\right), \quad z_g = \frac{\alpha z + \gamma}{\beta z + \delta} \quad (2.67)$$

El producto escalar correspondiente es escrito como

$$\langle f_1|f_2 \rangle = \frac{2j+1}{\pi} \int \frac{f_1(\bar{z})f_2(z)}{(1+|z|^2)^{2j+2}} d^2z, \quad d^2z = dx dy, \quad (2.68)$$

$$z = x + iy, \quad f_0 \equiv 1, \quad \langle f_0|f_0 \rangle = 1 \quad (2.69)$$

y los operadores infinitesimales son representados por los operadores diferenciales de primer orden

$$\tilde{J}_+ = -z^2 \frac{d}{dz} + 2jz, \quad \tilde{J}_- = \frac{d}{dz}, \quad \tilde{J}_0 = z \frac{d}{dz} - j. \quad (2.70)$$

Los operadores J_+ y J_- son conjugados con respecto a la norma (2.69), mientras que J_0 es un operador auto-conjugado. Los vectores de la base $|j, \mu \rangle$ son representados por los monomios $f_\mu = c_\mu z^{j+\mu}$, $c_\mu = [2j!/(j-\mu)!(j+\mu)!]^{1/2}$.

En esta representación $T^j(g)$ tiene un significado "semiclásico" simple y puede ser escrito de la siguiente manera, donde es considerado el caso general de un grupo de Lie simple compacto

$$T^j(g)f(z) = \exp[iS(g, z)]f(z_g), \quad z_g = \frac{\alpha z - \bar{\beta}}{\beta z + \bar{\alpha}}. \quad (2.71)$$

Aquí $S(g, z)$ es solo la integral de acción clásica para el movimiento libre en la esfera,

$$S(g, z) = \int_0^z (\theta - g\theta) + S(g, 0), \quad \theta = \frac{\partial F(z, \bar{z})}{\partial z} dz, \quad F = j \ln(1 + z\bar{z}). \quad (2.72)$$

La forma 1 es un análogo de la forma $\theta = \bar{z}dz$ para el caso del plano.

2.5. Estados coherentes asociados al grupo $SU(2)$

Al aplicar los operadores en la representación $T^j(g)$ a un vector fijo $|\psi_0\rangle$ de acuerdo al esquema general descrito anteriormente nos arroja un sistema de estados coherentes. Como fue visto en (2.58), el operador $T^j(g)$ puede ser escrito como

$$T^j(g) = T^j(g_n)T^j(h), \quad h \in H = U(1). \quad (2.73)$$

Por lo tanto, si un vector $|j, \mu\rangle$ es tomado como el vector fundamental $|\psi_0\rangle$, el estado coherente es determinado por el vector unitario $\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$:

$$|\mathbf{n}\rangle = e^{i\alpha(\mathbf{n})}T(g_n)|\psi_0\rangle. \quad (2.74)$$

De acuerdo con el razonamiento general, los estados coherentes corresponden a un punto de la esfera bidimensional $S^2 = SO(3)/SO(2) = SU(2)/U(1)$, el cual es la órbita de la representación coadjunta y por lo tanto puede ser considerado como el espacio fase de un sistema dinámico clásico, "el espin clásico".

El factor fase $exp(i\alpha\mathbf{n})$ puede ser elegido de tal manera que sea igual a la unidad, de esa manera

$$|\mathbf{n}\rangle = D(\mathbf{n})|\psi_0\rangle, \quad \text{donde} \quad (2.75)$$

$$D(\mathbf{n}) = T^j(g_n) = exp[i\theta(\mathbf{m}\mathbf{J})], \quad 0 \leq \theta < \pi, \quad (2.76)$$

y \mathbf{m} es un vector unitario, ortogonal a \mathbf{n} y a $\mathbf{n}_0 = (0, 0, 1)$: $\mathbf{m} = (\sin\varphi, -\cos\varphi, 0)$.

Podemos notar que esta definición de \mathbf{m} es válida para cualquier \mathbf{n} , excluyendo aquella

correspondiente al polo sur, $\mathbf{n} = (0, 0, -1)$. Aquí presentamos otra forma para el operador $D(\mathbf{n})$, análoga a (2.6),

$$D(\mathbf{n}) = D(\xi) = \exp(\xi J_+ - \bar{\xi} J_-). \quad (2.77)$$

Notamos que aunque los operadores $D(\mathbf{n})$ no forman un grupo, su ley de multiplicación puede ser escrita dentro de $SU(2)$ como

$$D(\mathbf{n}_1)D(\mathbf{n}_2) = D(\mathbf{n}_3)\exp(i\Phi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)J_0). \quad (2.78)$$

Calculos directos muestran que la cantidad $\Phi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ es solo el área de triángulo geodesico en la esfera, con los vértices en los puntos $\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$:

$$\Phi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = A(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2). \quad (2.79)$$

Este hecho revela un significado semiclásico del sistema de estados coherentes construido.

Para estos sistemas, cualquier vector $|j, \mu\rangle$ con μ arbitrario puede ser tomado como un vector fundamental $|\psi_0\rangle$. A primera vista, dichos sistemas de estados coherentes son equivalentes. Sin embargo, para los vectores $|j, \pm j\rangle$ la dispersión del operador de Casimir cuadrático $\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$ es minima. Entonces la dispersión es

$$\Delta\mathbf{J}^2 = (\Delta\mathbf{J}^2)_{min} = j, \quad (2.80)$$

de esa manera los estados $|j, \pm j\rangle$ determinan el sistema de estados coherentes, los cuales son los más cercanos a los estados clásicos. Ya sea que uno de dos estados pueda ser tomado como $|\psi_0\rangle$, ya que ambos nos conducen al mismo sistema de estados coherentes.

Dentro de nuestro formalismo el estado $|\psi_0\rangle = |j, \pm j\rangle$ es más probable. Otra posibilidad sería tomar $|\psi_0\rangle = |l, 0\rangle$ por entero $j = l$. El sistema de estados coherentes construido en esta base tiene una simetría más grande que una construida con $|\psi_0\rangle = |j, \mu\rangle$.

No es difícil ver que el subálgebra de isotropía \mathcal{B} en \mathcal{G}^c para el estado $|\psi_0\rangle = |j, -j\rangle$ es generado por los elementos J_0, J_- , y el grupo correspondiente B es aquel de las matrices triangulares

$$B_- = \{b\}, \quad b = \begin{pmatrix} \delta^{-1} & 0 \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}, \quad (2.81)$$

por lo tanto dicho estado coherente puede ser parametrizado por un número complejo ζ .

De hecho, de la descomposición Gaussiana podemos ver que

$$T(g)|\psi_0\rangle = T(z_+)T(h)T(z_-)|\psi_0\rangle = e^{i\varphi}NT(z_+)|\psi_0\rangle,$$

$$z_+ = \begin{pmatrix} 1 & \zeta \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_0\rangle = |j, -j\rangle,$$

por tanto

$$N^{-2} = \langle \psi_0 | T((z_+)^+) T(z_+) | \psi_0 \rangle, \quad N = (1 + |\zeta|^2)^{-j}, \quad (2.82)$$

de esa manera el factor de fase $\exp(i\Phi) = 1$ para los operadores $T(g)$ los cuales son $D(\mathbf{n})$ de 2.76 y entonces

$$|\mathbf{n}\rangle \rightarrow |\zeta\rangle = (1 + |\zeta|^2)^{-j} T(z_+) |j, -j\rangle,$$

$$|\mathbf{n}\rangle \rightarrow |\zeta\rangle = (1 + |\zeta|^2)^{-j} T(\zeta J_+) |j, -j\rangle, \quad (2.83)$$

$$\zeta = -\tan\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}, \quad \mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta).$$

Como se mencionó anteriormente, la relación entre \mathbf{n} y ζ está dada por la proyección estereográfica. Otra forma del operador $D(\mathbf{n})$ es

$$D(\zeta) = \exp(\zeta J_+ - \bar{\zeta} J_-), \quad \zeta = i\frac{\theta}{2}(m_1 - im_2) = -|\zeta|e^{-i\varphi}, \quad (2.84)$$

Este operador puede ser escrito en la forma normal

$$D(\zeta) = \exp(\zeta J_+) \exp(\eta J_0) \exp(\zeta' J_-), \quad \text{donde} \quad (2.85)$$

$$\zeta = -\tan\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}, \quad \eta = -2\ln\cos|\zeta| = \ln(1 + |\zeta|^2), \quad \zeta' = -\bar{\zeta}. \quad (2.86)$$

La forma antinormal del operador es

$$D(\xi) = \exp(\zeta' J_-) \exp(-\eta J_0) \exp(\zeta J_+) \quad (2.87)$$

con los parámetros dados en (2.86).

Ya que los parámetros ζ , η , ζ' involucrados en (2.85) son independientes de j , es suficiente verificar estas ecuaciones en $j = 1/2$, cuando $\mathbf{J} = 1/2\sigma$, y σ son las matrices de Pauli. Expandiendo la exponencial en (2.83) y usando (2.66) se puede obtener la descomposición de los estados coherentes sobre la base ortonormalizada

$$|\zeta\rangle = \sum_{\mu=-j}^j u_{\mu}(\zeta)|j, \mu\rangle, \quad u_{\mu}(\zeta) = \left[\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!} \right]^{1/2} (1+|\zeta|^2)^{-j} \zeta^{j+\mu}, \quad (2.88)$$

o, en variables angulares

$$|\zeta\rangle = \sum_{\mu=-j}^j u_{\mu}(\theta, \varphi)|j, \mu\rangle,$$

$$u_{\mu}(\theta, \varphi) = \left(\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!} \right)^{1/2} \left(-\sin\frac{\theta}{2} \right)^{j+\mu} \left(\cos\frac{\theta}{2} \right)^{j-\mu} \cdot e^{-i(j+\mu)\varphi}. \quad (2.89)$$

La expresión para los estados coherentes en la representación z es

$$\langle z|\xi\rangle = \psi_{\zeta}(z) = (1+|\zeta|^2)^{-j} (1+\zeta z)^{2j}. \quad (2.90)$$

Notamos que el estado coherente del espín es un eigenvector para el operador (\mathbf{nJ})

$$(\mathbf{nJ})|\mathbf{n}\rangle = -j|\mathbf{n}\rangle, \quad (2.91)$$

y además

$$(J_- + 2\zeta J_0 - \zeta^2 J_+)|\zeta\rangle = 0. \quad (2.92)$$

La ecuación (2.91) es una consecuencia directa de

$$J_0 = |\mathbf{n}_0\rangle = -j|\mathbf{n}_0\rangle, \quad \mathbf{n}_0 = (0, 0, 1), \quad (2.93)$$

debido a que

$$D(\mathbf{n})J_0D^{-1}(\mathbf{n}) = (\mathbf{nJ}), \quad (2.94)$$

Los estados coherentes del espín tienen todas las propiedades de un sistema de estados coherentes. La lista de propiedades serán presentadas a continuación.

1. Un operador $T^j(g)$ transforma cualquier estado coherente en otro estado del sistema,

$$T^j(g)|\mathbf{n}\rangle = \exp[i\Phi(\mathbf{n}, g)]|\mathbf{n}_g\rangle, \quad \text{donde} \quad (2.95)$$

$$\Phi(\mathbf{n}, g) = jA(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}, \mathbf{n}_g). \quad (2.96)$$

Para una transformación infinitesimal

$$T^j(I + \delta g)|\zeta\rangle = \exp(i\delta\Phi)|\zeta + \delta\zeta\rangle \quad y \quad (2.97)$$

$$i\delta\Phi = j\left(\frac{\partial F(\zeta, \bar{\zeta})}{\partial \zeta}\delta\zeta - \frac{\partial F}{\partial \bar{\zeta}}\delta\bar{\zeta}\right), \quad F = \ln(1 + |\zeta|^2). \quad (2.98)$$

De esa manera $\Theta = \delta\Phi$ es forma de la conexión para el fibrado unidimensional sobre la esfera S^2 , y la fibra es un círculo. Notamos que $\Theta = f\omega$, donde

$$\omega = d\Theta, \quad (2.99)$$

es el área de la forma 2.

2. Es sistema de estados coherentes de espín es completo.
3. Los estados coherentes no son mutuamente ortogonales,

$$\langle \mathbf{n}_1 | \mathbf{n}_2 \rangle = \exp[i\Phi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)] \left(\frac{1 + \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2}{2} \right)^j,$$

$$|\langle \mathbf{n}_1 | \mathbf{n}_2 \rangle|^2 = \left(\frac{1 + \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2}{2} \right)^{2j}, \quad (2.100)$$

$$\langle \xi | \eta \rangle = [(1 + |\xi|^2)(1 + |\eta|^2)]^{-j} (1 + \bar{\xi}\eta)^{2j}, \quad (2.101)$$

$$|\langle \xi | \eta \rangle|^2 = \left(\frac{(1 + \bar{\xi}\eta)(1 + \xi\bar{\eta})}{(1 + |\xi|^2)(1 + |\eta|^2)} \right)^{2j}, \quad (2.102)$$

$$\Phi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = jA(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2), \quad \Phi(\xi, \eta) = \frac{j}{2i} \ln \left(\frac{1 + \bar{\xi}\eta}{1 + \xi\bar{\eta}} \right).$$

Es completamente natural que Φ esté dado por el área de un triángulo esférico. De hecho, la esfera S^2 puede ser considerada como una variedad de fase para el espín, y el estado coherente de espín corresponde a los estados semiclásicos.

4. El estado coherente de espín minimiza la relación de incertidumbre de Heisenberg; la desigualdad

$$\langle J_1^2 \rangle \langle J_2^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle J_3 \rangle^2, \quad (2.103)$$

está saturada para el estado $|\mathbf{n}_0 \rangle$. Respectivamente, para los componentes del operador de momento angular transformado

$$\tilde{J}_k = D(\mathbf{n}) J_k D^{-1}(\mathbf{n}), \quad (2.104)$$

la relación de incertidumbre

$$\langle \tilde{J}_1^2 \rangle \langle \tilde{J}_2^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \tilde{J}_3 \rangle^2, \quad (2.105)$$

es minimizada para el estado $|\mathbf{n}\rangle$.

5. La "resolución de unidad" puede ser escrita como

$$\frac{2j+1}{4\pi} \int d\mathbf{n} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| = \hat{I}. \quad (2.106)$$

Si los puntos del plano complejo ζ son usados para parametrizar el sistema de estados coherentes, entonces

$$\int d\mu_j(\zeta) |\zeta\rangle \langle \zeta| = \hat{I}, \quad \text{donde} \quad (2.107)$$

$$d\mu_j(\zeta) = \frac{2j+1}{\pi} \frac{d^2\zeta}{(1+|\zeta|^2)^2}. \quad (2.108)$$

6. Empleando las ecuaciones de arriba, se puede descomponer un estado arbitrario sobre los estados coherentes,

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu} |j, \mu\rangle, \quad |\psi\rangle = \int d\mu_j(\zeta) \psi(\bar{\zeta}) |\zeta\rangle, \quad (2.109)$$

donde

$$\psi(\bar{\zeta}) = \langle \zeta | \psi \rangle = (1+|\zeta|^2)^{-j} \tilde{\psi}(\bar{\zeta}), \quad (2.110)$$

$$\tilde{\psi}(\bar{\zeta}) = \sum_{\mu=-j}^j c_{\mu} u_{\mu}(\bar{\zeta}), \quad u_{\bar{\zeta}} = \left(\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!} \right)^{1/2} \bar{\zeta}^{j+\mu}. \quad (2.111)$$

Aquí $\tilde{\psi}(\bar{\zeta})$ es un polinomio de $\bar{\zeta}$ de orden $m \leq 2j$.

Una consecuencia de estas ecuaciones es que para cualquier función $f(\zeta) = P_m(\zeta)/(1+|\zeta|^2)^j$, donde $P_m(\zeta)$ es un polinomio arbitrario de grado $m \leq 2j$, hay un vector de estado $|\psi\rangle$ dado por

$$f(\zeta) = \langle \psi | \zeta \rangle, \quad \int d\mu_j(\eta) \langle \xi | \eta \rangle f(\eta) = f(\xi). \quad (2.112)$$

El conjunto de dichas funciones es el espacio de Hilbert \mathcal{F}^j describiendo estados de un sistema de espín j . No es difícil probar que el subsistema $\zeta_1, \dots, \zeta_{2j+1}$ es completo para cualquier elección de puntos que no coincidan $\zeta_1, \dots, \zeta_{2j+1}$. Es evidente, ya que cualquier polinomio de grado $2j$ está determinado completamente por sus valores en los puntos $2j+1$.

7. Los operadores infinitesimales en la representación de estados coherentes son

$$\langle \zeta | J_0 | \zeta \rangle = -j \frac{1 - |\zeta|^2}{1 + |\zeta|^2}, \quad \langle \zeta | J_+ | \zeta \rangle = 2j \frac{\bar{\zeta}}{1 + |\zeta|^2}, \quad (2.113)$$

o, equivalentemente,

$$\langle \mathbf{n} | \mathbf{J} | \mathbf{n} \rangle = -j \mathbf{n}. \quad (2.114)$$

8. La representación de Estados Coherentes es apropiada para describir operadores, en particular la matriz de densidad de espín. De hecho, la matriz de densidad es determinada completamente por sus símbolos $P(\mathbf{n})$, o $Q(\mathbf{n})$, definidos por

$$\rho = \int d\mu_j(\mathbf{n}) P(\mathbf{n}) |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}|, \quad d\mu_j(\mathbf{n}) = \frac{2j+1}{4\pi} d\mathbf{n}, \quad (2.115)$$

$$Q(\mathbf{n}) = \langle \mathbf{n} | \rho | \mathbf{n} \rangle. \quad (2.116)$$

Aquí $P(\mathbf{n})$ y $Q(\mathbf{n})$ existe para cualquier operador A ya que las representaciones de $SU(2)$ son de dimensiones finitas. La descomposición de estas funciones sobre los armónicos esféricos $Y_{lm}(\mathbf{n})$ contiene solo aquellos términos con $l \leq 2j$.

Resultados

3.1. Dinámica de pares de bases del ADN interactuando con una proteína

Las ideas principales del método de estados coherentes generalizados se resumen a continuación. Con el fin de obtener la ecuación variacional es preciso considerar el Hamiltoniano \hat{H} y la funciones de onda dependiente del tiempo $|\Omega(\tau)\rangle$, y en consecuencia minimizar la acción

$$S[\Omega(\tau)] = \int d\tau [i \langle \Omega(\tau) | d\Omega(\tau)/d\tau \rangle - \langle \Omega(\tau) | \hat{H} | \Omega(\tau) \rangle]. \quad (3.1)$$

Ahora bien, se elige una forma de los estados coherentes generalizados para $|\Omega(\tau)\rangle$, de manera que las ecuaciones variacionales puedan ser escritas en la forma Hamiltoniana para cualquier Ω_j de las coordenadas que parametrizan $|\Omega(\tau)\rangle$:

$$\frac{d\Omega_j}{d\tau} = \{H, \Omega_j\}, \quad (3.2)$$

donde el término a la derecha de la ecuación (3.2) denota los corchetes de Poisson y H es el Hamiltoniano clásico representado por:

$$H(\Omega) = \langle \Omega | \hat{H} | \Omega \rangle . \quad (3.3)$$

En la siguiente sección este esquema será seguido con el fin de obtener ecuaciones variacionales clásicas de movimiento para nuestro modelo del ADN.

3.2. Ecuación no lineal de Schrödinger con no-linealidad saturable

Este procedimiento de reducción puede ser utilizado ya que nuestro Hamiltoniano de un problema de muchas partículas, i.e., el ADN, es expresado en términos de operadores de quasi-spin y contiene parámetros físicos como integrales de intercambio, constantes de anisotropía, etc. Ya que el Hamiltoniano (1.7) está expresado en términos de generadores del grupo $SU(2)$ y debido a la simetría del problema usamos la generalización de Perelomov [67, 68] para la construcción de estados coherentes. Con el fin de estudiar el Hamiltoniano de quasi-spin la idea principal es escoger una función de prueba. La mejor elección en este método es considerar un estado coherente como función de prueba. Como es bien sabido estos estados están relacionados muy cercanamente a los estados clásicos y minimizan relaciones de incertidumbre. Promediamos el Hamiltoniano sobre los estados coherentes generalizados para el grupo $SU(2)/U(1)$, después de esto el problema de quasi-spin se convierte en un problema clásico.

La parametrización de los estados coherentes generalizados en el grupo $SU(2)$ tiene la siguiente forma

$$|\psi_j \rangle = (1 + |\psi_j|^2)^{-S} e^{\psi_j \hat{S}_j^+} |S, -S \rangle_j . \quad (3.4)$$

Los operadores de espín \hat{S}_j^\pm conmutan en los sitios vecinos de la hebra del ADN (la red de espines), de esa manera el producto directo de los estados coherentes generalizados es el estado coherente para toda la red. Para nuestro sistema homogéneo las integrales de intercambio no varían de un sitio al siguiente así que el estado coherente generalizado y el Hamiltoniano (1.4) son construidos con operadores del mismo grupo.

$$|\psi\rangle = \prod_j |\psi\rangle_j; \quad j = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (3.5)$$

Por lo tanto tenemos que

$$\langle \psi | \hat{S}_j^\dagger \hat{S}_{j+1}^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi_j | \hat{S}_j^\dagger | \psi_j \rangle \langle \psi_{j+1} | \hat{S}_{j+1}^\dagger | \psi_{j+1} \rangle. \quad (3.6)$$

Siguiendo las ideas del capítulo anterior los valores promedios de los operadores de quasi-spin $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$ usando los estados coherentes asociados al grupo SU(2) pueden ser escritos en términos de las formas de sus proyecciones estereográficas

$$S^\dagger = \langle \psi | \hat{S}^\dagger | \psi \rangle = \frac{\bar{\psi}}{1 + |\psi|^2}; \quad (3.7a)$$

$$S^- = \langle \psi | \hat{S}^- | \psi \rangle = \frac{\psi}{1 + |\psi|^2}; \quad (3.7b)$$

$$S^z = \langle \psi | \hat{S}^z | \psi \rangle = -\frac{1 - |\psi|^2}{2(1 + |\psi|^2)}; \quad (3.7c)$$

con $S^\dagger = S^x + iS^y$ y $S^- = S^x - iS^y$. Las cantidades ψ_n , θ_n y ϕ_n están relacionadas de la siguiente manera

$$\psi_n = \tan(\theta_n/2) e^{i\phi_n}. \quad (3.8)$$

Una vez promediando el Hamiltoniano (1.7) con la ayuda de (3.7a), (3.7b) y (3.7c) obtenemos el siguiente Hamiltoniano clásico

$$\begin{aligned}
H = \sum_n \left\{ & -\frac{J}{2} \left(\frac{\bar{\psi}_n \psi_{n+1} + \psi_n \bar{\psi}_{n+1} + (1 - |\psi_n|^2)(1 - |\psi_{n+1}|^2)}{(1 + |\psi_n|^2)(1 + |\psi_{n+1}|^2)} \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\bar{\xi}_n \xi_{n+1} + \xi_n \bar{\xi}_{n+1} + (1 - |\xi_n|^2)(1 - |\xi_{n+1}|^2)}{(1 + |\xi_n|^2)(1 + |\xi_{n+1}|^2)} \right) \right. \\
& - \frac{1}{4} (\mu - \alpha_1 (X_{n+1} - X_{n-1})) \frac{2\bar{\psi}_n \xi_n + 2\bar{\xi}_n \psi_n + (1 - |\xi_n|^2)(1 - |\psi_n|^2)}{(1 + |\xi_n|^2)(1 + |\psi_n|^2)} \\
& + \frac{\alpha_2}{4} (Y_{n+1} - Y_{n-1}) \frac{(1 - |\xi_n|^2)(1 - |\psi_n|^2)}{(1 + |\xi_n|^2)(1 + |\psi_n|^2)} + \frac{p_n^2}{2m_1} + \frac{q_n^2}{2m_2} \\
& \left. + k_1 (X_n - X_{n+1})^2 + k_2 (Y_n - Y_{n+1})^2 \right\}. \tag{3.9}
\end{aligned}$$

En el Hamiltoniano anterior se introdujo la variable ξ para renombrar a ψ' de la hebra complementaria. La longitud de la cadena molecular del ADN es mucho más grande que la distancia entre las bases vecinas a lo largo de las hebras del ADN, incluyendo varios miles de pares de bases, por lo tanto, realizamos una aproximación continua con $z = na$ de la siguiente manera

Además, consideramos que $J = K$ y $J' = K'$, lo cual quiere decir que no hay una anisotropía en el interior de la hebra. Por lo tanto, la expresión para el Hamiltoniano se reduce a la siguiente Hamiltoniano continuo:

$$\begin{aligned}
H = \int \left[\frac{aJ}{2} \left(\frac{|\psi_z|^2}{1 + |\psi|^2} + \frac{|\xi_z|^2}{1 + |\xi|^2} \right) - \frac{1}{4a} (\mu - \alpha_1 a (X_z)) \frac{2(\bar{\psi}\xi + \bar{\xi}\psi) + (1 - |\xi|^2)(1 - |\psi|^2)}{(1 - |\xi|^2)(1 - |\psi|^2)} \right. \\
\left. - \frac{\alpha_2}{2} \frac{(1 - |\psi|^2)(1 - |\xi|^2)}{(1 + |\psi|^2)(1 + |\xi|^2)} Y_z + \frac{p^2}{2am_1} + \frac{q^2}{2am_2} + k_1 a (X_z)^2 + k_2 a (Y_z)^2 \right]. \tag{3.10}
\end{aligned}$$

Las ecuaciones clásicas de movimiento pueden ser obtenidas de (3.10) para ψ y para ξ

$$i\psi_t = -\frac{Ja}{2} \psi_{zz} + \frac{2aJ\psi_z^2 \bar{\psi}}{1 + |\psi|^2} - \left(\frac{\mu - 2a\alpha_1 X_z}{2a} \right) \left(\frac{\xi - \psi + \psi|\xi|^2 - \bar{\xi}\psi^2}{1 + |\xi|^2} \right) - \alpha_2 Y_z \left(\frac{1 - |\xi|^2}{1 + |\xi|^2} \right), \tag{3.11}$$

$$i\xi_t = -\frac{Ja}{2}\xi_{zz} + \frac{2aJ\xi_z^2\bar{\xi}}{1+|\xi|^2} - \left(\frac{\mu - 2a\alpha_1 X_z}{2a}\right) \left(\frac{\psi - \xi + \xi|\psi|^2 - \bar{\psi}\xi^2}{1+|\psi|^2}\right) - \alpha_2 Y_z \left(\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2}\right), \quad (3.12)$$

$$m_1 X_{tt} = 2k_1 a X_{zz} + \frac{\alpha_1}{2} \left(\frac{2(\bar{\psi}\xi + \psi\bar{\xi}) + (1-|\xi|^2)(1-|\psi|^2)}{(1+|\xi|^2)(1+|\psi|^2)} \right)_z, \quad (3.13)$$

$$m_2 Y_{tt} = 2k_1 a X_{zz} + \frac{\alpha_2}{2} \left\{ \left(\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2} \right)^2 \right\}_z. \quad (3.14)$$

El sistema de ecuaciones no lineales acopladas anteriores puede ser obtenido considerando el hecho de que las propiedades físicas de ambas hebras son similares (es decir, $J = J'$). El sistema de ecuaciones puede ser reducido si consideramos el hecho de que $\psi = -\xi$. Tomando en cuenta estas consideraciones sustraemos las ecuaciones (3.11) y (3.12) obteniendo:

$$i\psi_t = -\frac{Ja}{2}\psi_{zz} + \frac{2aJ\psi_z^2\bar{\psi}}{1+|\psi|^2} + \left(\frac{2\mu}{a} - (4\alpha_1 X_z + \alpha_2 Y_z)\right) \frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2}\psi, \quad (3.15)$$

y las ecuaciones (3.13) y (3.14) adquieren las siguientes formas, respectivamente

$$m_1 X_{tt} = 2ak_1 X_{zz} + \frac{\alpha_1}{2} \left\{ \frac{1+|\psi|^4 - 6|\psi|^2}{(1+|\psi|^2)^2} \right\}_z, \quad (3.16)$$

$$m_2 Y_{tt} = 2ak_2 Y_{zz} + \frac{\alpha_2}{2} \left\{ \left(\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2} \right)^2 \right\}_z. \quad (3.17)$$

Además, para (3.16) y (3.17) consideramos soluciones de onda viajera $\sigma = z - vt$ de modo que $X(z, t) \rightarrow X(\sigma)$ y $Y(z, t) \rightarrow Y(\sigma)$. Integrando una vez obtenemos:

$$X_z = \frac{\alpha_1}{2(m_1 v_1^2 - 2k_1)} \frac{1 + |\psi|^4 - 6|\psi|^2}{(1 + |\psi|^2)^2}, \quad (3.18)$$

$$Y_z = -\frac{\alpha_2}{2(m_2 v_2^2 - 2k_2)} \left(\frac{1 - |\psi|^2}{1 + |\psi|^2} \right)^2. \quad (3.19)$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.18) y (3.19) en (3.15) obtenemos:

$$i\psi_t = -\frac{Ja}{2}\psi_{zz} + aJ\frac{\psi_z^2\bar{\psi}}{1+|\psi|^2} + \left(\frac{2\mu}{a} - \beta\frac{1+|\psi|^4-6|\psi|^2}{(1+|\psi|^2)^2} - \gamma\left(\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2}\right)^2 \right) \frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2}\psi, \quad (3.20)$$

donde

$$\beta = \frac{\alpha_1}{2(m_1 v_1^2 - 2k_1)}, \quad \gamma = \frac{\alpha_2}{2(m_2 v_2^2 - 2k_2)}. \quad (3.21)$$

Con el fin de obtener soluciones analíticas hacemos un cambio paramétrico $z = s\sqrt{Ja/2}$ y asumimos que en su primera aproximación el parámetro μ , que es la integral de intercambio entre las hebras y la separación de los nucleótidos, satisface la desigualdad fuerte $\mu/a \gg 1$. Tomando en cuenta lo anterior obtenemos:

$$i\psi_t = -\psi_{ss} + \frac{2\mu}{a} \left(\frac{1 - |\psi|^2}{1 + |\psi|^2} \right) \psi - \left(\beta\frac{1+|\psi|^4-6|\psi|^2}{(1+|\psi|^2)^2} - \gamma\left(\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2}\right)^2 \right) \frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2}\psi. \quad (3.22)$$

La ecuación (3.22) es del tipo de la ecuación no lineal de Schrödinger saturable, esta describe la dinámica de las bases bajo rotación en el modelo de Takeno-Homma del modelo homogéneo de cadena doble del ADN, de la cual podemos ver facilmente que si consideramos a $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, es decir, consideramos que el ADN está libre de interacciones, la ecuación describe la dinámica interna pura de los pares de bases. Esta ecuación no es más que la proyección estereográfica de la ecuación de Landau-Lifshitz. Este caso ha sido estudiado previamente obteniendo soluciones de onda viajera que describen soluciones tipo soliton. Estas soluciones son soluciones tipo kink, soluciones de solution tipo

burbuja, soliton tipo camana, soliton tipo gota y soluciones triangulares periódicas, así como soluciones singulares [56].

La ecuación (3.22) puede ser analizada de manera cerrada considerando el caso de una aproximación donde consideremos a la ecuación debilmente saturada. Lo anterior puede ser realizado ya que la ecuación contiene términos proporcionales a $G = F(I)(1 + I)^{-1}$ con $I = |\psi|^2$. Por lo tanto, para que la ecuación no pierda propiedades de saturación, usamos la expansión $G = F(I)(1 - I)$, además redefinimos μ/a como μ . Realizando las aproximaciones anteriores obtenemos la siguiente ecuación:

$$i\psi_t + \psi_{ss} + \kappa_1\psi + k_3|\psi|^2\psi + k_5|\psi|^4\psi = 0, \quad (3.23)$$

con las siguientes relaciones de parámetros:

$$\kappa_1 = -2\mu - \beta + \gamma, \quad \kappa_3 = 4\mu - 10\beta - 6\gamma, \quad \kappa_5 = 4\mu - 34\beta - 18\gamma, \quad (3.24)$$

con los valores de β y γ definidos previamente por (3.21).

Antes de presentar las soluciones estables tipo soliton de la ecuación (3.23), es decir soluciones tipo soliton gota y soliton burbuja (o soliton brillante y oscuro), es conveniente hablar brevemente de los estados vacios contenidos en la ecuación. Estos estados vacios no representan un estado en el espacio de Hilbert sino una configuración clásica de energía mínima. De esa manera, si la configuración de campo tiene una energía finita, las soluciones de la ecuación de movimiento que nos llevan a valores asintóticos de $\psi(x)$ tienen que coincidir con los potenciales mínimos. Lo anterior puede ser visto de manera más clara si realizamos los cambios de variables y tranformaciones de parámetros siguientes

$$x = \eta s, \quad \tau = \zeta t, \quad \psi = \varrho \Phi(x, \tau), \quad (3.25)$$

siendo η , ζ y ϱ constantes; tras realizar múltiples cálculos podemos re-escribir a la ecuación (3.23) con estados vacíos explícitos de la siguiente manera

$$i\varrho_\tau + \varrho_{xx} - (3|\Phi|^2 - (2A + \rho_0))(|\varrho|^2 - \rho_0)\varrho = 0, \quad (3.26)$$

donde los nuevos parámetros A , ρ_0 , κ_1 , κ_3 y κ_5 tienen que satisfacer las siguientes relaciones

$$\zeta = \eta^2 = \frac{1}{3}\kappa_5\varrho^4, \quad \varrho^2 = \frac{3}{2(A + 2\rho_0)}\frac{\kappa_3}{\kappa_5}, \quad \frac{A}{\rho_0} = -2 - \frac{3}{4}\frac{\kappa_3^2}{\kappa_1\kappa_5} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4\frac{\kappa_1\kappa_5}{\kappa_3^2}} \right). \quad (3.27)$$

Podemos fijar el valor ρ_0 sin pérdida de generalidad debido al hecho de que las propiedades de la solución sólo dependen explícitamente de A/ρ_0 . Lo anterior puede ser demostrado fácilmente usando la transformación de escala apropiadas para cualquier solución (no necesariamente tipo soliton) de la ecuación cúbica quinta no lineal de Schrödinger (3.23). Las relaciones anteriores (3.27) son esenciales para determinar la relación entre las velocidades del átomo de hidrógeno y del péptido con las constantes de acoplamiento, como se verá posteriormente.

Con el fin de obtener más información acerca de la ecuación (3.26) consideremos el método de analogía mecánica.

3.3. Método de analogía mecánica

Podemos ver de manera sencilla que el Hamiltoniano que da origen a la ecuación (3.26) puede ser expresado de la siguiente manera [70]

$$E = \int (|\varrho_x|^2) dx + \int (|\varrho|^2 - \rho_0)^2 (|\varrho|^2 - A) dx = T + V. \quad (3.28)$$

Como puede ser visto fácilmente de la ecuación anterior la densidad $U(\varrho)$ del potencial V en dependencia del parámetro A , tiene la forma

$$U(\varrho) = \frac{1}{2}(\varrho^2 - 1)^2(\varrho^2 - A). \quad (3.29)$$

Analizaremos dos tipos de condiciones de frontera

1. Condiciones de frontera tipo gota: $x \rightarrow \pm\infty$, $\varrho \rightarrow 0$.
2. Condiciones de frontera tipo condensado: $x \rightarrow \pm\infty$, $\varrho \rightarrow cte$.

Analicemos el caso estático de la ecuación (3.26), donde se considera a ϱ , la función que describe la dinámica interna de los pares de bases producida por el desenrollamiento producto de su interacción con la proteína, como la coordenada de posición ζ de una partícula, análoga a una masa puntual $m = 1$ en el instante de tiempo t . Con lo cual tendremos $\varrho(x) \rightarrow \zeta(t)$, con lo cual el nuevo tiempo será determinado por $x = t$. Por tanto, la ecuación de movimiento para la partícula análoga será

$$\zeta'' = \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} = \frac{\partial U}{\partial \zeta}.$$

Por consecuencia, obtenemos la ecuación de Newton para la partícula ζ'' con signo cambiado en la parte derecha. La energía total de esta partícula que se conserva con el tiempo x se determina por la ecuación

$$W = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 - U(\zeta).$$

Las condiciones de frontera para ϱ ahora se convierten en condiciones temporales para el infinito pasado y futuro de la partícula :

$$x \rightarrow \infty, \quad \zeta \rightarrow 0, \quad \frac{\partial \zeta}{\partial x} \rightarrow 0,$$

por tanto

$$W \rightarrow -U(\zeta \rightarrow 0, cte) \quad si \quad x \rightarrow \infty. \quad (3.30)$$

La dinámica de la partícula análoga se determina por $W = -U$. Cuando $A = 1$ el potencial tiene un solo mínimo en $\varrho = \varrho_1 = 0$, en este caso el potencial U tiene un valor constante $-1/2$. Entonces su valor máximo se encontrará cuando $\varrho = 0$. Las condiciones de frontera (3.30) demandan que las trayectorias con energía $W = 1/2$ comiencen y terminen en el punto donde $\varrho = 0$. Lo cuál resulta imposible ya que si la partícula se desplace en el punto máximo, ya sea a la izquierda o a la derecha, su energía cinética nunca podrá ser cero y, por consecuencia, será mayor que su energía potencial. Por tanto, la partícula no podrá detenerse y después regresar. La partícula análoga no corresponde a una onda solitaria estática.

Cuando $A > 1$ el potencial W adquiere dos máximos laterales relativos, entonces la partícula puede terminar en cualquiera de estos máximos distintos de cero $\varrho^2 = \lambda = (2A + 1/3)$ para lograrlo la partícula debe descender desde cierta altura h del máximo absoluto. Resulta, hasta cierto punto, obvio el hecho de que la velocidad inicial de estas partículas de estas partículas es igual a cero. Esta partícula análoga corresponde a la solución de tipo burbuja. Si continuamos aumentando el valor del parámetro A hasta llegar a $A = 4$, conseguimos tres máximos degenerados $\varrho_1 = 0$, $\varrho_2 = \pm\sqrt{3}$ y $W = 4$.

Podemos describir el movimiento de la partícula análoga de la siguiente manera: comienza a moverse en alguno de los máximos, por ejemplo en ϱ_1 cuando $x \rightarrow -\infty$ para finalizar su movimiento en la cima de ϱ_2 . Manera análoga este mismo proceso puede empezar en ϱ_2 y terminar en ϱ_3 o en direcciones contrarias. El número de soluciones estáticas en el caso de tener n máximos es igual a $2(n - 1)$. Cuando el valor de A sigue aumentando, es decir, $A > 4$, el potencial para la partícula análoga tendrá dos máximos absolutos degenerados y uno relativo. El máximo relativo $\varrho = 0$ es el lugar donde cambiará su movimiento si cae desde una altura apropiada en el lugar de los máximos adyacentes, lo cual corresponde a las soluciones tipo gota. Si consideramos el caso en el cuál el movimiento de la partícula análoga comienza en cualquiera de los dos máximos absolutos y termina en el máximo complementario entonces a este tipo de soluciones estáticas se le conoce como kinks.

Podemos calcular las trayectorias de energía constante en el espacio base dadas por $p = \zeta$, $p = \partial_x \zeta$ obteniendo

$$p^2 = (q^2 - 1)^2(q^2 - A) + g, \quad (3.31)$$

donde g lo determina cada tipo de solución. En el caso de la región $A > 1$ tenemos que $g = -A$ correspondiente a la solución gota, la región $1 < A < 4$ es donde viven las soluciones tipo burbuja y en $A > 4$ viven los kinks, para ambas soluciones tenemos que $g = 4/27(A - 1)^3$, puede verse claramente que el valor de este parámetro no será igual para ambos.

Finalmente, las ecuaciones para las trayectorias de fase (3.31) se puede notar que a la energía mínima en el potencial para la solución le corresponde una energía máxima para la partícula análoga. Esto sucede obviamente por las diferencias de signos de la energía

potencial en los dos casos. Por este motivo, la trayectoria de la partícula análoga debe terminar en la cima de las lomas correspondientes al vacío o condensado de los solitones. Si se dibujan en el espacio fase las trayectorias para valores distintos de energía se puede apreciar que el movimiento de la partícula análoga en los valles o hacia el infinito nos muestra ciertas trayectorias llamadas separatrices. A lo largo de estas separatrices se mueve la partícula análoga correspondiente a las coluciones solitónicas estáticas.

3.4. Ecuación cúbica quinta no lineal de Schrödinger y soluciones tipo soliton

Antes de continuar con nuestro análisis de la dinámica interna del ADN descrito por la ecuación cúbica quinta no lineal de Schrödinger es conveniente hablar de las soluciones solitónicas típicas contenidas en la ecuación, para ello usaremos el método regular para encontrar estas soluciones [76]. Primero realizamos la siguiente transformación de escala $\psi = e^{ik_1 t} \phi(s, t)$ y $\phi = \varphi(\beta s, \beta^2 t)$ en la ecuación (3.23), siendo $\beta = (k_3/2)^{1/2}$ y $\alpha = -2k_5/k_3$. Con lo cual obtenemos la siguiente versión simplificada

$$i\varphi_t + \frac{1}{2}\varphi_{zz} + \varphi|\varphi|^2 - \alpha\varphi|\varphi|^4 = 0. \quad (3.32)$$

Con el fin de encontrar soluciones localizadas estacionarias introducimos el siguiente ansatz para la función de onda

$$\varphi(x) = q^{1/2}(x, t)\exp(i\sigma(x, t)), \quad (3.33)$$

con las funciones reales $q(x, t)$ y $\sigma(x, t)$. Además, consideramos las siguientes condiciones de frontera:

1. $q(x, t) = |\varphi|^2 = q_s$, $(\partial q/\partial x)_{q=q_s} = 0$, es decir, q_s es un extremo de $|\varphi|^2$.
2. $q(x, t) = |\varphi|^2 = q_0$ en $x = \pm\infty$, $(\partial^n q/\partial x^n)_{q=q_0} = 0$, $n = 1, 2, 3, \dots$, es decir q_0 es el valor asintótico de $|\varphi|^2$.
3. Para solitones tipo gota $q_0 = 0$ y para solitones tipo burbuja $q_0 \neq 0$.

Reemplazando la expresión (3.33) en (3.32) y tomando en cuenta las condiciones de frontera obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(q \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) = 0, \quad (3.34)$$

$$\pm \frac{d}{dq} \left[\frac{1}{q} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)^2 + 4q^2 \right] - \frac{8}{3} \alpha q^3 = \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)^2. \quad (3.35)$$

Considerando soluciones estacionarias $\partial q = \partial t = 0$ y realizando la integración obtenemos la expresión para la fase

$$\left(\frac{dq}{dx} \right)^2 = \frac{8}{3} \alpha q^4 - 4q^3 + 8\Omega q^2 + C_2 q - 4C_1^2, \quad (3.36)$$

donde Ω , C_1 y C_2 son constantes de integración. Asumiendo $C_1 = 0$ y $C_2 = 0$ y tomando en consideración las condiciones de frontera la solución tipo soliton gota es

$$q(x) = \frac{4\Omega}{1 + \sqrt{1 - \frac{16}{3} \alpha \Omega ch(2x\sqrt{2\Omega})}}, \quad (3.37)$$

donde

$$\Omega > 0 \quad y \quad \alpha\Omega < \frac{3}{16},$$

y $2\Omega = \tilde{q}_s$ es un extremo de la ecuación no lineal de Schrödinger,

Por tanto, función de onda adquiere la siguiente forma

$$\varphi(x, t) = \frac{\sqrt{2\tilde{q}_s} \exp(i\tilde{q}_s t/2)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{8}{3}\alpha\tilde{q}_s} \operatorname{ch}(2x\sqrt{\tilde{q}_s})\right]^{1/2}}. \quad (3.38)$$

La solución de onda viajera puede ser obtenida realizando la transformación de Galileo, obteniendo

$$\varphi(x, t) = \frac{\sqrt{2\tilde{q}_s} \exp(i v x + i(\tilde{q}_s - v^2)t/2)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{8}{3}\alpha\tilde{q}_s} \operatorname{ch}(2\xi\sqrt{\tilde{q}_s})\right]^{1/2}}, \quad (3.39)$$

donde $\xi = x - vt$.

Esta solución implica que una onda colectiva de tipo burbuja forma un estado abierto para las fluctuaciones de los ángulos ϕ y ϕ' definidos por la expresión (3.8) y debe propagarse a lo largo de la cadena debido a la interacción de la molécula de ADN con las fonones térmicos y la proteína. Esto se debe al hecho de que la onda colectiva es construida por las soluciones de ψ y ξ . Esta solución puede ser reemplazada en la ecuación (3.16) para estudiar el desplazamiento de los enlaces de hidrógeno debido a esta onda colectiva. Integrando una vez respecto a la variable $\zeta = x - v\tau$ y utilizando las condiciones de frontera que usamos para obtener la solución tipo soliton gota.

Como ha sido mencionado en secciones anteriores la solución cúbica quinta no lineal de Schrödinger contiene varios tipos de soluciones analíticas. Esto puede verse fácilmente realizando un procedimiento análogo al anterior, ahora consideremos soluciones localizadas estacionarias para (3.32) de la siguiente manera

$$\left(\frac{dq}{dx}\right)^2 = (q_0 - q)^2(1 - q_s) \left(-\frac{8}{3}\alpha q + B\right), \quad (3.40)$$

tomando en consideración las condiciones de frontera y además asumiendo ahora que $q_s \neq 0$, $C_1 \neq 0$ y $C_2 \neq 0$ obtenemos

$$B = 4 \left(1 - \frac{4\alpha q_0}{3} - \frac{2\alpha q_s}{3} \right)$$

$$\Omega = q_0 + \frac{q_s}{2} + \alpha \left(q_0^2 - \frac{2\alpha q_0 q_s}{3} + \frac{q_s^2}{3} \right)$$

$$C_1 = q_0 \sqrt{q_s \left(1 - \frac{4\alpha q_0}{3} - \frac{2\alpha q_s}{3} \right)}.$$

Para el caso particular de soluciones localizadas estacionarias tipo soliton burbuja consideramos $q_s = 0$ y por lo tanto C_1 obteniendo que

$$q(x) = \frac{q_0(1 - 4\alpha q_0/3)sh^2(\eta\xi)}{(1 - 4\alpha q_0/3)ch^2(\eta\xi) - 2\alpha q_0/3}, \quad (3.41)$$

$$\sigma(x, t) = (q_0 - \alpha q_0^2)t, \quad (3.42)$$

de igual manera que para la solución tipo soliton gota, la solución de onda viajera puede ser obtenida realizando la transformación de Galileo, por lo tanto $\xi = x - vt$.

El estudio de las perturbaciones de solitones ha sido uno de los principales problemas en las décadas pasadas debido a la importancia que adquieren en la descripción de varios problemas físicos. Dichas perturbaciones han sido estudiadas para diferentes modelos físicos partiendo de diferentes enfoques; entre los métodos que han tenido mayor aceptación están los bien conocidos métodos que toman como base al método de dispersión inversa [71, 72] y los métodos consideran aproximaciones directas [73, 74]. En estos estudios los términos perturbativos se deben al hecho de que las ecuaciones no lineales de evolución que surgen para explicar estos fenómenos, como la bien conocida ecuación KdV (Korteweg

de Vries), la ecuación de Hirota-Satsuma o la ecuación de sine-Gordon, entre otras, surgen como resultado de aproximaciones o expansiones asintóticas de una ecuación más general. Si bien, con estas ecuaciones podemos obtener un buen entendimiento del problema en la mayoría de las ocasiones, para abordar con mayor exactitud el problema debemos considerar términos de orden superior. Aunado a esto, es bien sabido que los sistemas físicos gobernados por ecuaciones diferenciales no lineales son sensibles a su interacción con su medio. Aunque, en la mayoría de los casos, esta contribución se desprecia sin una pérdida importante de generalidad sigue siendo una manera muy ideal de concebir el problema. Por ejemplo, la contribución de las perturbaciones juega un papel fundamental en el estudio de la dinámica interna del ADN, para el cual no solo la interacción con el medio juega un papel preponderante, también la inhomogeneidad en las hebras dobles del ADN actúa como una perturbación a todo el sistema bajo estudio [43]. Estas inhomogeneidades son cruciales para entender los sitios promotores en el ADN. Generalmente, estas interacciones se introducen como términos perturbativos que afectan a la ecuación original, cuya solución es conocida, que describe a todo el sistema físico. Por consecuencia, estos términos adicionales se consideran perturbaciones producidas por dicha interacción en las excitaciones no lineales que describen al sistema en un inicio.

En esta breve contribución, estudiamos la evolución de excitaciones no lineales en sistemas gobernados por la ecuación no lineal de Schrödinger y la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger con un término de amortiguamiento, para ello emplearemos el método de análisis de multi-escalas propuesto por Y. Kodoma y M. J. Ablowitz [75], usualmente conocido como método quasi-estacionario. Esta aproximación directa al estudio de perturbaciones de soluciones tipo soliton usa la identidad de Green. En esta aproximación, las

ecuaciones no lineales perturbadas son linealizadas expandiendo sus soluciones alrededor de las soluciones originales no perturbadas. Lo cual conlleva a encontrar las eigen-funciones del operador linealizado asociado a la ecuación linealizada. Estas eigen-funciones son usadas ya sea para contruir la función de Green o para invertir las ecuaciones linealizadas, o de alguna forma alternativa con el objetivo de calcular las correcciones a primer orden. El procedimiento es recursivo, por lo tanto una vez que conocemos la solución para la ecuación no perturbada podemos usar esta solución para obtener la ecuación perturbada a primer orden, una vez que obtenemos la solución para la ecuación perturbada a primer orden podemos usarla para obtener la solución de la ecuación a segundo orden y seguir así sucesivamente. Este método es resulta una herramienta particulamente útil debido a que no requiere de conocimientos avanzados del método de dispersión inversa.

3.5. Aproximación directa a la perturbación de solitones usando el método de multi-escalas

Partimos de la ecuación de onda dispersiva no lineal perturbada de la forma

$$K(q, q_t, q_x, \dots) = F(q, q_x, \dots), \quad 0 < \gamma \ll 1, \quad (3.43)$$

siendo K y F funciones no lineales de q, q_x, \dots . Para $\gamma = 0$ obtenemos la ecuación no perturbada

$$K(q_0, q_{0t}, q_{0x}, \dots) = 0, \quad (3.44)$$

donde q_0 es una onda solitaria o una solución tipo soliton. Ahora escribimos la solución en términos de variables lentas y rápidas:

$$q_0 = \hat{q}_0(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m; P_1, P_2, \dots, P_N), \quad (3.45)$$

Las variables rápidas de tiempo son denotadas por $\theta_i (i = 1, \dots, m)$ mientras que las variables lentas se denotan por $T = \gamma t$ y $P_1 (i = 1, \dots, N)$ son parametros que dependen de las variables lentas. Aqui las variables θ satisfacen $\partial\theta/\partial x = 1$, y $\partial\theta/\partial t = -P_1$ y $P_1 = P_1(T)$ con el fin de remover terminos seculares. Por lo tanto, estas soluciones son llamadas soluciones quasi-estacionarias $q = \hat{q}(\theta, T, \gamma)$. De este modo, asumimos una expresion de la siguiente forma

$$\hat{q} = \hat{q}_0 + \gamma \hat{q}_1 + \gamma^2 \hat{q}_2 + \dots \quad (3.46)$$

Sustituyendo q en la ecuacion (3.43) llegamos a las ecuaciones de primer orden

$$L(\partial_{\theta_i}, \hat{q}_0) \hat{q}_1 \equiv F(\hat{q}_0) - \frac{\partial K}{\partial q_t} \cdot q_t|_{q=\hat{q}_0} \equiv \hat{F}, \quad (3.47)$$

Donde $L(\partial_{\theta_i}, \hat{q}_0)u = 0$ es una ecuacion linealizada de $K(q, q_t, q_x, \dots) = 0$. Podemos denotar como $v_i (i = 1, \dots, M)$ a las M soluciones del problema homogeneo adjunto que satisfacen

$$L^A v_i = 0, \quad i = 1, \dots, M, \quad M \leq N, \quad (3.48)$$

donde L^A es un operador adjunto de L , tenemos que

$$(L \hat{q}_i) \cdot v_i - (L^A v_i) \cdot \hat{q}_1 = \hat{F} v_i. \quad (3.49)$$

La última ecuación puede ser integrada para dar las condiciones de secularidad, con lo cual estamos en posición de calcular la solución para \hat{q}_1 considerando las apropiadas

condiciones de frontera. Para ejemplificar de manera detallada como se emplea el método consideraremos dos ecuaciones fundamentales de la física no lineal. Como se mencionó previamente estas ecuaciones aparecen en una amplia cantidad de problemas físicos.

3.6. Un análisis perturbativo para la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger con amortiguamiento

Uno de los problemas más grandes inherentes a la ecuación la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger o CQNSE (por sus siglas en inglés) radica en su no integrabilidad, como consecuencia de la ausencia de pares de Lax. Comencemos con una forma ligeramente diferente de la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger (con parámetros renormalizados)

$$i\varphi_t + \frac{1}{2}\varphi_{xx} + \varphi|\varphi|^2 - \alpha\varphi|\varphi|^4 = -i\gamma\varphi. \quad (3.50)$$

El lado derecho de la ecuación (3.50) describe un efecto de amortiguamiento. El parámetro $0 < \gamma \ll 1$ es el parámetro de la perturbación. Con el fin de estudiar la evolución de estructuras no lineales bajo el efecto de amortiguamiento empleamos el mismo método de la sección anterior. De nuevo, cuando $\gamma = 0$ obtenemos la solución sin perturbación:

$$i\varphi_t + \frac{1}{2}\varphi_{xx} + \varphi|\varphi|^2 - \alpha\varphi|\varphi|^4 = 0 \quad (3.51)$$

que admite la siguiente solución tipo soliton gota [76]

$$\varphi = \frac{A \exp(iV(\theta - \theta_0) + i(\sigma - \sigma_0))}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}}, \quad (3.52)$$

con

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \frac{A^2}{4} + \frac{V^2}{2}, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} = -V. \quad (3.53)$$

Siguiendo el metodo quasi-estacionario escribimos la solucion tipo soliton (3.52) en terminos de variables lentas y rapidos. Por lo tanto, introducimos la variable lenta del tiempo $T = \gamma t$, y A, V, θ_0, σ_0 son funciones de esta escala de tiempo. Podemos escribir el envolvente para la solucion de un soliton como:

$$\varphi = \hat{\varphi}(\theta, T; \gamma) \exp[iV(\theta - \theta_0) + i(\sigma - \sigma_0)]. \quad (3.54)$$

Reemplazando (3.54) en (3.50) y asumiendo la quasi-estacionaridad obtenemos

$$-\frac{A^2}{4}\hat{\varphi} + \frac{1}{2}\hat{\varphi}_{\theta\theta} + |\hat{\varphi}|^2\hat{\varphi} - \alpha|\hat{\varphi}|^4\hat{\varphi} = \gamma F(\hat{\varphi}), \quad (3.55)$$

donde

$$F(\hat{\varphi}) = -i(\hat{\varphi} + \hat{\varphi}_T) + [(\theta - \theta_0)V_T - V\theta_{0T} - \sigma_{0T}]\hat{\varphi}. \quad (3.56)$$

Asumimos una expresion para $\hat{\varphi}$

$$\varphi = \hat{\varphi}_0(\theta, T) + \gamma\hat{\varphi}_1 + \gamma^2\hat{\varphi}_2 + \dots$$

Descartamos terminos de orden superior de γ , i.e., solo consideramos la perturbaci3n del soliton a primer orden de manera que

$$\varphi = \hat{\varphi}_0(\theta, T) + \gamma\hat{\varphi}_1,$$

donde

$$\hat{\varphi}_0 = \frac{A}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}}$$

y $\hat{\varphi}_1 = \phi_1 + i\psi$, siendo ϕ_1 y ψ_1 funciones reales, y sustituyendolas en las ecuaciones (3.55)

y (3.56), obtenemos el siguiente sistema

$$L_1\phi_1 \equiv \frac{1}{2}\phi_{1\theta\theta} + 3|\varphi_0|^2\phi_1 - 5\alpha|\varphi_0|^4\phi_1 - \frac{A^2}{4}\phi_1 = \text{Re}F(\hat{\varphi}_0), \quad (3.57a)$$

$$L_2\psi_1 \equiv \frac{1}{2}\psi_{1\theta\theta} + |\varphi_0|^2\psi_1 - \alpha|\varphi_0|^4\psi_1 - \frac{A^2}{4}\psi_1 = \text{Im}F(\hat{\varphi}_0), \quad (3.57b)$$

donde

$$\text{Re}F(\hat{\varphi}_0) = [(\theta - \theta_0)V_T - V\theta_{0T} - \sigma_{0T}]\hat{\varphi}_0 \quad (3.58a)$$

$$\text{Im}F(\hat{\varphi}_0) = -[\hat{\varphi}_{0T} + \hat{\varphi}_0]. \quad (3.58b)$$

Los operadores L_1 y L_2 son auto-conjugados y $L_1\hat{\varphi}_{0\theta} = 0$, $L_2\hat{\varphi}_0 = 0$. Por consiguiente, las ecuaciones (3.57a) y (3.57b) tienen soluciones localizadas alrededor del soliton. Las condiciones de solubilidad del sistema son dadas por la siguientes condiciones de secularidad

$$\frac{\partial V}{\partial T} = 0, \quad \text{and} \quad \frac{\partial A}{\partial T} = \frac{\sqrt{2}\gamma(3 - 4\alpha A^2)N}{3}, \quad (3.59)$$

donde $N = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi|^2 dx$. Si asumimos $\alpha = 0$ en las relaciones (3.59) tenemos que A es una constante. Para el caso donde $\alpha \neq 0$ obtenemos

$$V = V_0, \quad A = \sqrt{\frac{3}{\alpha}} \frac{\text{Tanh}(ce^{-\gamma T})}{1 + \text{Tanh}^2(ce^{-\gamma T})}, \quad (3.60)$$

que corresponde a la velocidad y amplitud del soliton, respectivamente. Con el fin de obtener el valor de c , consideramos $2.9999/4 = 3Tanh(c)/\alpha(1 + Tanh^2(c))$ a un tiempo $T = 0$. Lo anterior con el fin de estudiar la evolución de la solución a un valor de la anchura máxima.

3.7. Perturbaciones de primer orden para solitones tipo gota de la ecuación cúbica quinta no lineal de Schrödinger

Con el fin de encontrar las soluciones del soliton perturbada necesitamos resolver la parte homogénea de las ecuaciones (3.57a) y (3.57b).

$$\phi_{11} = \frac{-A^2 \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \sinh \sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\sqrt{2} \left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)) \right]^{3/2}}, \quad (3.61)$$

$$\begin{aligned} \phi_{12} = A \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} & \left\{ \frac{(1-2\alpha A^2) \cosh \sqrt{2}A(\theta - \theta_0) - 2(1 - \frac{1}{3})\alpha A^2 \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)) \right]^{3/2}} \right. \\ & \left. - \frac{A}{\sqrt{2}} (1 - \frac{4}{3}\alpha A^2) \frac{(\theta - \theta_0) \operatorname{Sh} \sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)) \right]^{3/2}} \right\}, \quad (3.62) \end{aligned}$$

Usando la ecuación (3.61) y (3.62), además de las condiciones de secularidad (3.59) obtenemos la siguiente solución

$$\begin{aligned} \phi_1 = & C_1 \phi_{11} + C_2 \phi_{12} + N_1 \left\{ \frac{A^4(1-2\alpha A^2)(1-\frac{4}{3}\alpha A^2)}{\frac{8}{3}\alpha A^2} - \frac{2A^4(1-\frac{1}{3}\alpha A^2)(1-\frac{4}{3}\alpha A^2)^2}{\frac{8}{3}\alpha A^2} \right\} (V\theta_{0T} + \sigma_{0T}) \\ & + (N_3 - N_2) \left\{ \frac{A^4(1-2\alpha A^2)(1-\frac{4}{3}\alpha A^2)^{3/2}}{(\sqrt{2})^2(\frac{4}{3}\alpha A^2)^{3/2}} - \frac{2A^4(1-\frac{1}{3}\alpha A^2)(1-\frac{4}{3}\alpha A^2)^{3/2}}{(\sqrt{2})^2(\frac{4}{3}\alpha A^2)^{3/2}} + \frac{A^5(1-\frac{4}{3}\alpha A^2)^{3/2}}{\sqrt{2}(\sqrt{2}A)^2 \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}} \right\} (V\theta_{0T} + \sigma_{0T}) \\ & + N_4 \left[\frac{A^6(1-\frac{4}{3}\alpha A^2)^{5/2}}{\sqrt{2}(\sqrt{2}A)^2} \right] (V\theta_{0T} + \sigma_{0T}), \quad (3.63) \end{aligned}$$

con $\frac{4}{3}\alpha A^2 > 0$ donde C_1 y C_2 son constantes arbitrarias, con N_1 , N_2 , N_3 y N_4 definida como sigue

$$N_1 = \frac{Sh^2\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\sqrt{2}\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{5/2}},$$

$$N_2 = \frac{Sh\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{3/2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} + \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}Th\frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} - \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}Th\frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{2}},$$

$$N_3 = \frac{Sh\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{3/2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} - \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} + \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}},$$

$$N_4 = \frac{Sh\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{5/2}}$$

Ahora, necesitamos resolver la parte homogenea de (3.57b) obteniendo

$$\psi_{11} = \frac{A}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}}, \quad (3.64a)$$

$$\psi_{12} = \frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0) + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\sinh\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\sqrt{2}\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}}. \quad (3.64b)$$

Construimos la solución general como antes, usando las ecuaciones (3.64a) y (3.64b) , además usando de nuevo variación de parametros. De este modo, obtenemos

$$\begin{aligned} \psi_1 = & C_3\psi_{11} + C_4\psi_{12} + \left[\frac{A^2}{\sqrt{2}\sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}}\right](M_1 - M_2) - \frac{A^2\theta_{0T}}{2\sqrt{2}}M_3 + \left[\frac{A}{2\sqrt{2}}\right]M_4 - A^5\theta_{0T}M_5 \\ & + \frac{(1 - \frac{4}{3}\alpha A^2)A^3\theta_{0T}}{2(\frac{4}{3}\alpha A^2)}M_6 + \left[\frac{A^4\theta_{0T}}{\sqrt{2}\sqrt{\frac{4}{3}\alpha}} + \frac{A}{(\frac{4}{3}\alpha A^2)^{3/2}}\right](M_7 - M_8), \end{aligned} \quad (3.65)$$

con $\frac{4}{3}\alpha A^2 > 0$. Las expresiones para $M(n)$, $n \leq 8$ están dadas por

$$M_1 = \frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0) + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\sinh\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\sqrt{2}\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\cosh(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} + \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}Th\frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} - \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}Th\frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{2}},$$

$$M_2 = \frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0) + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{Sinh}\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\sqrt{2}\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{cosh}(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} - \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} + \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}},$$

$$M_3 = \frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0) + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{Sinh}\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{cosh}(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{3/2}}, \quad M_4 = \frac{\ln(1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{cosh}(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)))}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{cosh}(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}},$$

$$M_5 = \frac{(\theta - \theta_0)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{cosh}(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{3/2}}, \quad M_6 = \frac{\text{Sh}\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{cosh}(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{3/2}},$$

$$M_7 = \frac{1}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{cosh}(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} + \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2} \text{Th} \frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} - \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2} \text{Th} \frac{\sqrt{2}A(\theta - \theta_0)}{2}},$$

$$M_8 = \frac{1}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \text{cosh}(\sqrt{2}A(\theta - \theta_0))\right]^{1/2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} - \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} + \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}}.$$

Ahora, consideremos $\theta_0 = \sigma_0 = 0$ en la ecuación (3.52), la cual representa el centro del soliton y de la fase del soliton, respectivamente, y $V_T = 0$ de las condiciones de secularidad (3.59). De esta manera, para (3.63) y (3.65), tenemos

$$\phi_1 = C_1 \phi_{11} + C_2 \phi_{12}. \quad (3.66)$$

Imponiendo las condiciones de frontera $\phi_1|_{\theta=0} = C$ y $\phi_{1\theta}|_{\theta=0} = 0$ encontramos los valores de las constantes arbitrarias

$$C_1 = 0, \quad \text{and} \quad C_2 = \frac{C \left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2}\right]^{3/2}}{A \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \left\{ (1 - 2\alpha A^2) - 2\left(1 - \frac{1}{3}\right)\alpha A^2 \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \right\}},$$

de igual manera para (3.66) obtenemos que

$$\psi_1 = C_3\psi_{11} + C_4\psi_{12} + \left[\frac{A^2}{\sqrt{2}\sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}} \right] (M_1 - M_2) + \left[\frac{A}{2\sqrt{2}} \right] M_4 + \frac{A}{\left(\frac{4}{3}\alpha A^2\right)^{3/2}} (M_7 - M_8). \quad (3.67)$$

Imponiendo las condiciones de frontera $\psi_1|_{\theta=0} = 0$ y $\psi_{1\theta}|_{\theta=0} = 0$, obtenemos

$$C_3 = \frac{1}{\left(\frac{4}{3}\alpha A^2\right)^{3/2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} - \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} + \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}} - \frac{1}{2\sqrt{2}} \ln \left[1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} \right],$$

$$C_4 = \frac{A^2}{\sqrt{2}\sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} - \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{3}\alpha A^2} + \sqrt{\frac{4}{3}\alpha A^2}}.$$

Finalmente, podemos ver que la solución general de la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schödinger está dada por

$$\varphi_1 = [\varphi_0 + \gamma(\phi_1 + i\psi_1)] \exp(iV(\theta - \theta_0) + i(\sigma - \sigma_0)), \quad (3.68)$$

con ϕ_1 y ψ_1 están dadas por (3.63) y (3.65). Podemos ver que la amplitud del soliton gota (3.68) de la ecuación (3.50), bajo ciertos efectos perturbativos, decae en a medida que el tiempo avanza como se muestra en la figura (3.4) como consecuencia de las condiciones de secularidad. Además, la velocidad permanece constante. También, podemos notar observando a las figuras que mientras mayor sea el valor del coeficiente de amortiguamiento la amplitud del soliton disminuirá con mayor rapidez.

Lo anterior puede ser comprobado en las figuras 3.4, las cuales representan los escenarios típicos de la amplificación de solitones para la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger. En estas figuras podemos demostrar que la dinámica del soliton, es completamente opuesta a la dinámica del soliton para la ecuación no lineal de Schödinger canónica, podemos ver que dos propiedades nuevas aparecen. Si los solitones de la ecuación no lineal

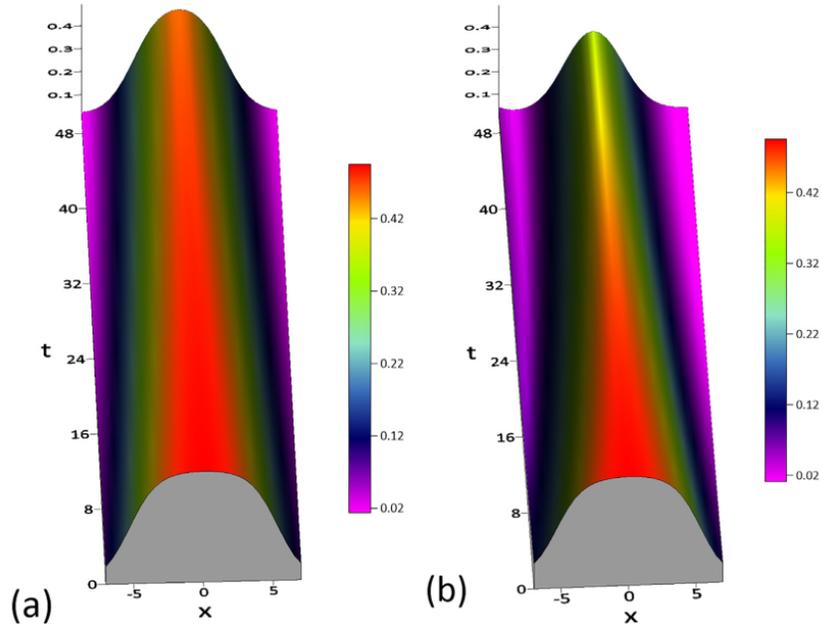


Figura 3.4: Efectos perturbativos a primer orden en una solución de la ecuación $|\varphi_1|^2$ cuando $\alpha = 1/4$ en la ecuación cúbica quinta no lineal de Schrödinger (3.50) y A) $\gamma = 0.01$, B) $\gamma = 0.02$ y C) $\gamma = 0.03$.

de Schrödinger canónica se propagan debido a la absorción y se comprimen debido a la amplificación, al contrario de estas dinámicas, se demuestran los efectos de auto-propagación en el régimen de la amplificación adiabática, como se muestra en las figuras, y al revés, los efectos de auto-compresión aparecen en el caso de la absorción de solitones de la ecuación cúbica quinta no lineal de Schrödinger.

3.8. Aspectos teóricos de la transcripción del ADN

Los resultados obtenidos en la sección anterior pueden ser aplicados al proceso de transcripción. Como es bien sabido la transcripción genera ARN mensajeros que transporta la información para la síntesis de proteínas, al igual que la transferencia, ribosomal y otras moléculas de ARN que tienen funciones estructurales y catalíticas. Todas estas moléculas

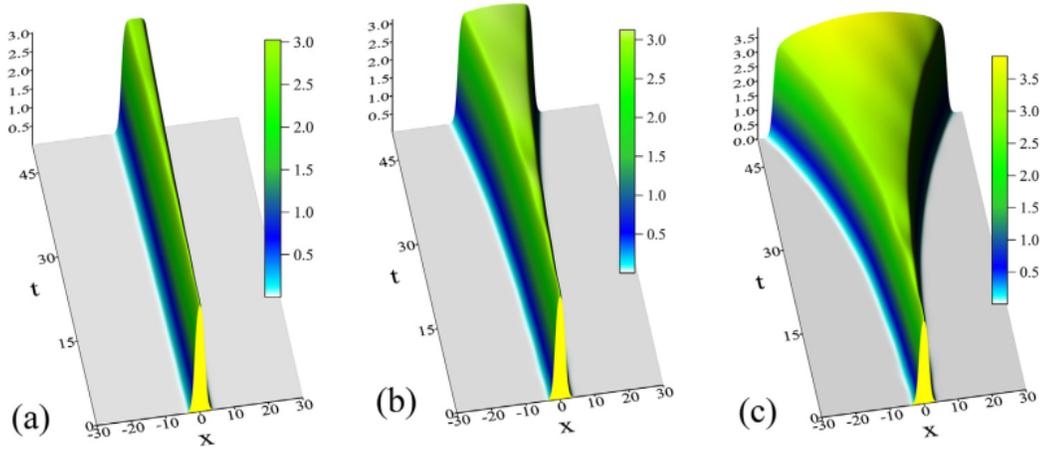


Figura 3.5: Efectos perturbativos a primer orden en una solución de la ecuación $|\varphi_1|^2$ cuando $\alpha = 1/4$ en la ecuación cúbica quinta no lineal de Schödinger (3.50) y A) $\gamma = 0.01$, B) $\gamma = 0.02$ y C) $\gamma = 0.03$.

son sintetizadas por las enzimas de ARN polimerasa, las cuales hacen una copia de ARN de una secuencia de ADN. La enzima se une a la secuencia promotora en el ADN y comienza su síntesis en un sitio de inicio dentro de un promotor. Completa su síntesis con una señal de alto (terminación) después de lo cual ambas, la polimerasa y su cadena de ARN completada son liberadas. Por lo tanto, a una cadena de ARN de 5000 nucleotidos toma cerca de 3 minutos completarse [6]. El ADN se une a un región activa de la proteína llevando a la apertura de los pares de base, lo que hace que la doble hélice del ADN se desenrolle.

Recientemente se han realizado estudios numéricos para entender la dinámica del ARN_p y el ADN tomando en cuenta el acomplamiento helicoidal y las inhomogeneidades del ADN [57, 58], en nuestro caso estamos ignorando estas contribuciones. De los estudios mencionados se obtuvieron los valores aproximados de los coeficientes de los enlaces de hidrógeno (μ) y la constante de la energía de apilamiento(J), las constantes elásticas

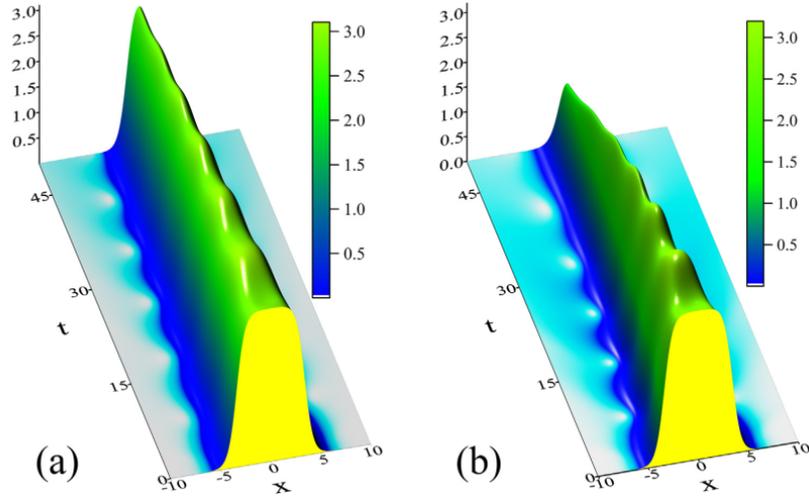


Figura 3.6: Efectos perturbativos a primer orden en una solución de la ecuación $|\varphi_1|^2$ cuando $\alpha = 1/4$ en la ecuación cúbica quinta no lineal de Schödinger (3.50) y A) $\gamma = 0.01$, B) $\gamma = 0.02$ y C) $\gamma = 0.03$.

(k_1) de la moécula ARNp y la cadena de fonones (k_2)) y sus respectivos coeficientes de acoplamiento con la molécula de ADN (α_1 y α_2), respectivamente. También los valores de la masa del átomo de hidrógeno atada a la base (m_1) y la masa del peptido (m_2) son conocidos.

$$J = 1.5 \text{ eV } \text{\AA}^{-2}; \quad K_1 = 1.5 \text{ eV } \text{\AA}^{-2};$$

$$\mu = 0.1 \text{ eV}; \quad \alpha_1 = 0.005 \text{ eV};$$

$$\alpha_2 = 0.081 \text{ eV}; \quad m_1 = 1.0079 \text{ u.m.a.};$$

$$m_2 = 300 \text{ u.m.a.}; \quad a = 3.4 \text{ \AA}$$

Las velocidades para el desplazamiento para el péptido y para el átomo de hidrógeno están dadas por la última relación en (3.27) obtenida anteriormente, la cual tiene la siguiente forma:

$$\frac{A}{\rho_0} = -2 - \frac{3}{4} \frac{k_3^2}{k_1 k_5} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4 \frac{k_1 k_5}{k_3^2}} \right),$$

sin pérdida de generalidad podemos fijar el valor $\rho_0 = 1$. Además, recordemos que para obtener información acerca de las propiedades del ADN debemos considerar el caso para el cuál $A > 1$, y el caso particular de las condiciones de frontera para el soliton tipo gota $\psi \rightarrow 0$ si $x \pm \infty$. De esa manera, nosotros podemos escojer v_1 y v_2 arbitrarias que cumplan las condiciones mencionadas previamente.

En estudios anteriores, S. Sdravković y M. V. Sataric [77] encontraron, usando el modelo del ADN de Peyrard, que los valores de la velocidad y la anchura de la solución tipo solitón eran 3750 m/s y 580 A , respectivamente, lo cual significa que 170 bases en cada hebra son cubiertas por el soliton. El número de pares de bases que participan en el proceso de apertura depende de la naturaleza del soliton. Sin embargo, es una gran ventaja una apertura de pares de bases con la participación de menos bases.

Finalmente, el valor del coeficiente de acoplamiento que corresponde al amortiguamiento viscoso ϵ depende de la temperatura fisiológica (310 K). Por tanto, tenemos que ϵ es del orden de 10^{-11} kg/s y el valor experimental es $\epsilon \approx 6 \times 10^{-11} \text{ kg/s}$.

Discusión

Una de las principales ventajas del método quasi-estacionario en el estudio de perturbaciones en un sistema físico determinado es el hecho de que las soluciones a la ecuación perturbada son soluciones localizadas alrededor de una solución solitónica conocida. Como se sabe, la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger admite varias soluciones en el espacio paramétrico como son las de tipo kink, burbuja, gota, soluciones viajeras triangulares y soluciones singulares [56]. Estas soluciones nos ayudan a entender e interpretar una larga serie de fenómenos físicos. Podemos encontrar una posible aplicación directa del método quasi-estacionario en el estudio de sitios promotores en el sistema molecular del ADN basados en la propagación de energía e información mediante excitaciones no lineales a lo largo de ciertas regiones de la cadena molecular. Esto representaría una oportunidad de ampliar nuestro conocimiento en los mecanismos de diversos procesos biológicos. Un antecedente puede ser encontrado en el trabajo realizado por S. Cuenda et al [78], inspirado a su vez por el trabajo de Salerno [15]. En este trabajo se analizó de manera cuantitativa la posibilidad de que las excitaciones no lineales de un modelo aproximado del ADN (Modelo de péndulos) predijera sitios relevantes dentro de la misma molécula sin encontrar resultados alentadores. Estos primeros intentos fueron infructuosos, en parte debido al hecho que la solución solitónica considerada (kink-antikink) abarca una cantidad muy grande de pares de bases que participan en el rompimiento de los puentes de hidrógeno.

Sin embargo, para este caso, es más conveniente tener un rompimiento de los enlaces de hidrógeno donde participen pocos pares de base. Para explicar a detalle este problema se consideraría la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger que posee soluciones tipo burbuja, ideal para estos estudios. Así mismo, se necesita considerar, para el estudio de las inhomogeneidades de las hebras y las posibles aplicaciones funcionales en el ADN, además de términos perturbativos de amortiguamiento, aquellos en forma de pulsos y periódicos. Por lo que consideramos que las ecuaciones y los análisis presentados en este trabajo son un punto de partida ideal para lograr dicho propósito. Por otro lado, una creciente área de investigación dentro de la física no lineal es el estudio de la dinámica de ondas oceánicas, las cuales pueden ser descritas en términos de soluciones solitónicas, a pesar del vasto número de esfuerzos por explicar diversos fenómenos relacionados su comprensión total sigue siendo esquiva.

Conclusiones

En la primera parte de este trabajo estudiamos el modelo de hebra doble del ADN que considera la influencia de las rotaciones de bases alrededor de las cadenas de azúcar-fosfato, como una contribución principal en su evolución dinámica. Empleando los estados coherentes generalizados asociados al grupo $SU(2)/U(1)$ se han obtenido varias soluciones de onda viajera que en la primera aproximación puede ser consideradas como precursores de comportamientos importantes de esta molécula. El método de estados coherentes generalizados asociados al grupo $SU(2)/U(1)$ nos permitió estudiar las ondas de excitaciones no lineales para este modelo de quasi-espin. La ecuación clásica de movimiento se reduce a una ecuación elíptica de primer orden extendida con una no-linealidad saturable. Esta ecuación contiene varias soluciones importantes para ciertas regiones en el espacio paramétrico. Entre estas soluciones obtenidas observamos la existencia de soluciones que representan solitones.

Estas soluciones pueden ser útiles describiendo la propagación de energía e información en términos de excitaciones no lineales a lo largo del doble hélice del ADN, pero con algunas restricciones. A pesar del considerable progreso en estudios teóricos concernientes a la dinámica del ADN, los modelos propuestos, y particularmente el empleado en este estudio, son modelos aproximados y tienen un número muy variado de limitaciones las cuales afectarían la aparición o la estabilidad de estructuras solitónicas. La primera limitación

es que no hemos considerado la inhomogeneidad del sistema molecular, respecto a los pares de bases por ejemplo. La inhomogeneidad puede ser agregada y nos debe llevar a un carácter de dependencia en la secuencia. Es sabido que la inhomogeneidad actúa como una perturbación a la ecuación que podría modificar las condiciones para el surgimiento de solitones. Aunque esto no ha sido incluido en nuestro análisis se han encontrado varios resultados analíticos de la dinámica pura de la molécula del ADN. La segunda limitación se refiere al hecho de que la interacción del ADN con el solvente no fue considerada, es decir, la influencia del medio en el cual los procesos inherentes de esta molécula toma lugar fue rechazada. De esa manera, la disipación de energía no fue incluida en la primera parte de este trabajo.

En la última sección se agrega el término perturbativo; con lo cual se considera la perturbación o el medio, la perturbación se realizó de manera general aunque puede tomar una forma particular. En trabajos previos esta perturbación tomo una forma lineal y a este término se le llamó "término de amortiguamiento" y la interpretación es la del ADN inmerso en un medio viscoso. Como se mencionó anteriormente la perturbación no solo es consecuencia del medio sino que esta perturbación es consecuencia de la inhomogeneidad de las hebras dobles del ADN, a lo largo de este trabajo se consideran homogéneas algo que no es del todo cierto aunque es una buena aproximación para entender la dinámica interna del ADN.

Comunmente se cree que los solitones se expanden debido a la absorción y que pueden ser comprimidos significativamente debido a la amplificación. A primera vista, esta aseveración se basa en la simple observación de que el pico de poder de un solitón decrece debido a las pérdidas (y se incrementa debido a la amplificación), y debido a esto,

la no linealidad decrece (o crece), respectivamente. En este trabajo se encontró que en un medio absorbente (o son comprimidos en una medio amplificador). Se demostró que estos efectos contrastantes e inusuales de la auto-expansión del soliton (o la auto-compresión) debido a su amplificación (o absorción) existen en uno de los modelos más sencillos de la ecuación cúbica-quinta no lineal de Schrödinger. Lo anterior se logró mediante experimentos directos computacionales basados en la transformada rápida de Fourier considerando pérdidas y ganancias contrastándolas con las soluciones analíticas mediante el enfoque quasi-estacionario (o la teoría de perturbación de solitones múltiples). Como se ha mencionado repetidamente este trabajo es de gran relevancia en la física no lineal.

Bibliografía

- [1] Avery, Oswald T., Colin M. MacLeod, Maclyn McCarty, Studies on the chemical nature of substance inducing transformation of pneumococcal types induction of transformation by a desoxyribonucleic acid fraction isolated from pneumococcus type III, *Journal of experimental medicine* **79** (2) (1944), 137-158.
- [2] Hershey, A., Chase, M. Independent Functions of Viral Protein and Nucleic Acid in Growth of Bacteriophage, *J. Gen. Physiol.* **36** (1) (1952), 39-56
- [3] F. H. Crick, J. D. Watson, Molecular structure of nucleic acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid *Nature* **171** (1953), 737-738.
- [4] L. Stryer *Biochemistry 4th ed.*, W.H. Freeman and Company, New York, 1995.
- [5] Mathews, C.k., Van Holde, K. F., Ahern K. G., *Biochemistry 3rd edition* Benjamin/Cumming Publishing Company, Inc., Addison Wesley Longman, 2002.
- [6] B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter, Molecular biology of the cell (6th edition), 2014.
- [7] L.V. Yakushevich, Nonlinear DNA dynamics: hierarchy of the models *Physica D* **79** (1994), 77-86.
- [8] L.V. Yakushevich, *Nonlinear physics of DNA*, Wiley-VCH, Berlin 2004.

- [9] A. S. Davydov *Solitons in molecular systems 2nd edition* Kluwer, Dordrecht, 1991.
- [10] Scott, A.C., Solitons in biological molecules *Comments Mol.Cell. Biol.* **3** (1985), 5-57.
- [11] G. Gaeta, C. Reiss, M. Peyrard, T. Dauxois, Simples models of nonlinear DNA dynamics, *Rev. Nuovo Cimento* **17** (1994), 1-48 .
- [12] Zhou, G. F., Zhang, Ch. T., A short review on the nonlinear motion in DNA. *Phys. Scripta* **43** (1991), 347-352.
- [13] Peyrard, M., *Nonlinear excitations in biomolecules*, Springer (Berlin), 1995.
- [14] S. W. Englander, N. R. Kallenbach, J. A. Hegger, S. Litwin, Nature of the open state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **77** (1980), 7222-7226.
- [15] M. Salerno, Discrete model for DNA-promotor dynamics, *Phys. Rev. A* **44** (1991), 5292–5297.
- [16] Polozov R. V., Yakushevich L. V., Nonlinear waves in DNA and regulation of transcription; *J. Theor. Biol.* 130 (1988), 423–430.
- [17] J. A. Gonzalez, M. M. Landrove, Long-range interactions of solitons in a double chain, *Phys. Letts. A* **292** (2002), 256-262 .
- [18] K. Forinash, M. Peyrard, B. Malomed, Interaction of discrete breathers with impurity modes, *Phys. Rev. E* **49** (1994), 3400 .
- [19] J. A. Wattis, S. A. Harris, C. R. Grindon, C. A. Laughton, A dynamical model of base pair breathing in a DNA chain with an impurity, *Phys. Rev. E* **63** (2001), 061903 .

- [20] A. Campa, Bubble propagation in a helicoidal molecular chain, *Phys. Rev. E* **63** (2001), 021901.
- [21] M.A. Agüero, T.L. Belyaeva, v.N. Serkin, Compacton anti-compacton pair for hydrogen bonds and rotational waves in DNA dynamics, *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat* **16** (2011), 3071-3080.
- [22] Peyrard M., Bishop A.R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989), 2755-2758.
- [23] Peyrard M., Bishop A.R. *Nonlinear coherent structures* Springer, Berlin (1990).
- [24] P. L. Christiansen, P. C. Lomdahl, V. Muto, On a Toda lattice model with a transversal degree of freedom, *Nonlinearity* **4** (1991), 477 .
- [25] A. Khan, D. Bhaumic, B. Dutta-Roy, The possible role of solitonic processes during A to B conformational changes in DNA, *Bull. Math. Biol.* **47** (1985), 783-789.
- [26] E. Balanovski, P. Beaconsfield, Solitonlike excitations in biological systems, *Phys. Rev.* **32** (1985), 3059-3064.
- [27] J. J. Ladik, S. Suhai, M. Seel, Electronic Structure of Biopolymers and Possible Mechanisms of Chemical Carcinogenesis, *Int. J. Quant. Chem. QBS Suppl.* **5** (1978), 35-49.
- [28] Alireza Sepehri, A mathematical model for DNA, *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, **14** (2017), 1750152.
- [29] H. Triki, T. R. Taha, Solitary wave solutions for a higher order nonlinear Schrödinger equation, *Mathematics and Computers in Simulation* **82** (2012), 1333–1340.

- [30] E. M. E. Zayed, Y. A. Amer, Many exact solutions for a higher order nonlinear Schrödinger equation with non-kerr terms describing the propagation of femtosecond optical pulses in nonlinear optical fibers, *Computational Mathematics and Modeling*, Vol. 28, No. 1 (2017), 118- 139.
- [31] A. D. D. Craik: Wave Interactions and Fluid Flows (Cambridge University Press, London, 1984)
- [32] A. Goulet, W. Choi, A numerical and experimental study on the nonlinear evolution of long-crested irregular waves, *Phys. Fluids* 23 (2011), 016601
- [33] M. Gedalin, T. C. Scott, and Y. B. Band, Optical Solitary Waves in the Higher Order Nonlinear Schrödinger Equation, *Phy. Rev. Lett.* Vol. 78-3 (1997), 448-451.
- [34] V. G. Kartavenko, Soliton-like solutions in nuclear hydrodynamics, *Sov. J. Nucl. Phys.*, 40 (1984), 240-246 .
- [35] F. Kh. Abdullaev, A. Gammal, L. Tomio, T. Frederico, Stability of trapped Bose-Einstein condensates, *Phys. Rev. A* 63 (2001), 043604
- [36] S. Burger, K. Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer, and K. Sengstock, Dark Solitons in Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.* 83-25 (1999),5198-5201.
- [37] C. Zhou and X. T. He, Stochastic diffusion of electrons in evolutive Langmuir fields, *Phys. Scr.* 50 (1993), 415.
- [38] I. Hacinliyan, S. Erbay, Coupled quintic nonlinear Schrödinger equations in a generalized elastic solid, *J. Phys. A: Math. Gen.* 37 (2004), 9387.

- [39] M.A. Agüero, T.L. Belyaeva, V.N. Serkin, Compacton anti-compacton pair for hydrogen bonds and rotational waves in DNA dynamics, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.* 16 (2011), 3071–3080.
- [40] A. Kumar, S. N. Sarkar and A. K. Ghatak, Effect of fifth-order non-linearity in refractive index on Gaussian pulse propagation in lossy optical fibers, *Opt. Lett.*, 11 (1986), 321-323.
- [41] Y. Peng, E. V. Krishnan, New exact solutions for the cubic-quintic nonlinear Schrödinger equation, *Commun. Math. Ci. Vol. 5, No. 2* (2007), 243–252.
- [42] J. Belmonte-Beitia, J. Cuevas, Solitons for the cubic–quintic nonlinear Schrödinger equation with time- and space-modulated coefficients, *J. Phys. A: Math. Theor.* 42 (2009), 165201.
- [43] M. Daniel, M. Vanitha, Bubble solitons in an inhomogeneous, helical DNA molecular chain with flexible strands, *Phys. Rev. E* 84 (2011), 031928.
- [44] Song, D., Graham, T. and Loparo, J. A general approach to visualize protein binding and DNA conformation without protein labelling. *Nat Commun* 7 (2016), 10976.
- [45] Gaeta, G., Results and limitations of the soliton theory of DNA transcription, *Journ. of Biol. Phys.* **24** (1999), 81-96.
- [46] Zhang, F., Collins, M. A., Model simulations of DNA dynamics, *Phys. Rev. E* **52** (1995), 4217.
- [47] Davydov, A. S., The theory of contraction of proteins under their excitation, *J. Theor. Biol.* **38** (1973), 559.

- [48] Davydov, A. S., *Biology and Quantum Mechanics*, Pergamon, New York, 1982.
- [49] Yomosa S., Soliton excitations in deoxyribonucleic acid (DNA) double helices, *Phys. Rev. A* **27** (1983), 2120.
- [50] Yomosa S., Solitary excitations in deoxyribonuclei acid (DNA) double helices, *Phys. Rev. A* **30** (1984), 474-480.
- [51] S. Takeno, Shigeo Homma, Topological solitons and modulated structure of bases in DNA double helices, *Prog. Theor. Phys.* 70 (1) (1983) 308–311.
- [52] S. Takeno, Shigeo Homma, Coupled base rotator model for structure and dynamics of DNA, *Prog. Theor. Phys.* 72 (4) (1984) 679–693.
- [53] E. T. Kool, Hydrogen Bonding, Base Stacking, and Steric Effects in Dna Replication, *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* **30** (2001), 1.
- [54] M. Daniel, V. Vasumathi, Perturbed soliton excitations in the DNA double helix, *Physica D*, 231 (2007), 10-39.
- [55] M. Daniel, V. Vasumathi, Perturbed soliton excitations in the DNA double helix, *Physica D*, 231 (2007), 10-39.
- [56] O. Pavón Torres, M. Aguero Granados, Exact traveling wave solutions in the coupled plane-base rotator model of DNA, *International Journal of Non-Linear Mechanics* 86 (2016) 8–14.
- [57] M. Saha, T.C. Kofané, DNA base pairs openings perturbed by the surrounding medium, *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat*, 23 (2015), 1-9.

- [58] M. Saha, T.C. Kofané, Inhomogeneities and nonlinear dynamics of a helical DNA interacting with RNA-polymerase, *Phys. Scr.* **89** (2014) 085003 (7pp).
- [59] Schrödinger E.S., Der stetige Übergang von der Mikro zur Makromechanik, *Naturwiss.*, 1926, Bd. 14, S.664.
- [60] Glauber R., The quantum theory of optical coherence *Phys. Rev.* **130** (1963)
- [61] Glauber R., Coherent and incoherent states of the radiation field, *Phys. Rev.* **131** (1963), 2766.
- [62] Klauder, J., Sudarshan, E. *Fundamentals of Quantum Optics* (1968) Bengamin, New York.
- [63] Sudarshan E.C. G. Equivalence of semiclassical and quantum mechanical descriptions of statistical light beams, *Phys. Rev. Lett.* **10** 277-279, (1963).
- [64] M. M. Nieto, L. M. Simmons, Jr, Coherent states for general potentials. I. Formalism, *Phy. Rev. Lett. D* **20** (1979), 1321-1331.
- [65] M. M. Nieto, L. M. Simmons, Jr, Coherent states for general potentials *Phy. Rev. Lett.* **41** (1987), 207-210.
- [66] A. O. Barut, L. Girardello, New “coherent” states associated with non-compact groups, *Commun. math. Phys.* **21** (1971), 41-55.
- [67] Perelomov A.M., Generalized coherent states and some of their applications *Sov. Phys. Usp.* **20**(9), 703 (1977).
- [68] Perelomov, A.M. *Generalized coherent states and their applications* Springer, Verlag. 2010.

- [69] Gilmore R, Geometry of symmetrized states *Ann. Phys.* **74** (1972),391-463.
- [70] M.A. Agüero-Granados, Autointeracción de sexto orden en teoría no lineal de campos, *Revista Mexicana de Física* 44 (I) (1998), 82-91.
- [71] R. L. Herman, A direct approach to studying soliton perturbations, *J. Phys. A: Math. Gen.* 23 (1990) 2327-2362.
- [72] V.I. Karpman, E. M. Maslov, Perturbation theory for solitons, *Sov. Phys. JETP* 46-2 (1977), 281-291.
- [73] J. Yan, Y. Tang, G. Zhou, Z. Chen, Direct approach to the study of soliton perturbations of nonlinear Schrödinger equation and the sine-Gordon equation, *Phy. Rev. E* 58 (1998) 1064-1073.
- [74] R. J. Flesh, S. E. Trullinger, Green's functions for nonlinear Klein-Gordon kink perturbation theory, *J. Math. Phys.* 28, 1619
- [75] Y. Kodoma, M. J. Ablowitz, Perturbations of solitons and solitary waves, *Studies in applied mathematics* 64 (1981) 225-245.
- [76] Vladimir N. Serkin, Tatyana L. Belyaeva, Igor V. Alexandrov, Gaston Melo Melchor, Novel topological quasi-soliton solutions for the nonlinear cubic-quintic Schrödinger equation, *Proc. SPIE* 4271, Optical Pulse and Beam Propagation III (2001) 292-302.
- [77] Zhravković S., Satarić M. V. The impact of viscosity on the DNA dynamics *Physica Scripta*. 2001. Vol. 64. No. 6. Pp. 612–619.

- [78] Cuenda, Sara, Sánchez, Angel, Quintero, Niurka R., Does the dynamics of sine-Gordon solitons predict active regions of DNA?, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 233, n. 2 (2006). Pp. 214-221.