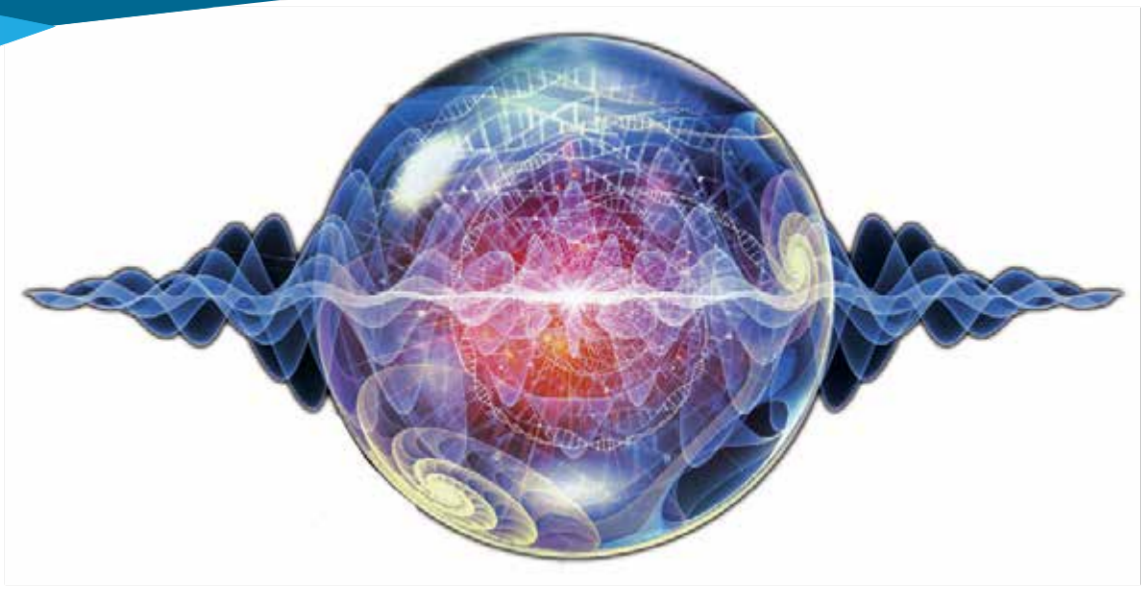


Introducción a la teoría de solitones

Máximo A. Agüero Granados
Vladimir N. Serkin

Notabilis Scientia

Introducción a la teoría de solitones

Notabilis Scientia

Introducción a la teoría de solitones

Máximo A. Agüero Granados
Vladimir N. Serkin

EDICIONES
EÓN

Introducción a la teoría de solitones

Primera edición: octubre 2020

ISBN Impreso: 978-607-8732-25-8
ISBN digital: 978-607-8732-26-5

D.R. © Universidad Autónoma del Estado de México
Instituto Literario núm. 100 Ote.
C.P. 50000, Toluca, Estado de México
http://www.uaemex.mx

© Ediciones y Gráficos Eón, S.A. de C.V.
Av. México-Coyoacán núm. 421
Col. Xoco, Benito Juárez
Ciudad de México, C.P. 03330
Tels.: 56 04 12 04, 56 88 91 12
administracion@edicioneseon.com.mx
www.edicioneseon.com.mx

El presente libro cuenta con la revisión y aprobación de dos pares doble ciego, adscritos al Sistema Nacional de Investigadores, externos a la Universidad Autónoma del Estado de México.

Expediente de arbitraje 183/2019 - Secretaría de Investigación y Estudios Avanzados.

El contenido de esta publicación es responsabilidad de los autores.

Hecho en México

Agradecimientos

La publicación de este libro fue posible gracias al patrocinio otorgado por la Universidad Autónoma del Estado de México, a través de la Secretaría de Investigación y Estudios Avanzados.

PREFACIO

El vasto número de procesos naturales y de la sociedad se estudian mediante modelos físico matemáticos que involucran ecuaciones diferenciales o integro- diferenciales no lineales. Uno de los procesos importantes es la transmisión de información, energía, o cualquier otra propiedad natural con ayuda de ondas. Comúnmente, los fenómenos complejos en muchos aspectos se describen y analizan incluso bajo un mismo esquema matemático, por ejemplo, por una misma ecuación diferencial no lineal que incluye influencias externas al sistema, generando así un camino exitoso para resolver simultáneamente problemas diversos.

La transmisión de perturbaciones, de información, de energía, de densidades, etc, ocurre como una de las formas de manifestación más común de la materia en el mundo que nos rodea. Estos fenómenos son no lineales, por lo que se necesita plantear ecuaciones diferenciales no lineales cuyas soluciones son nuevas entidades coherentes que ya no satisfacen, por ejemplo, el principio de superposición.

La ciencia no lineal se encuentra en la frontera más importante para entender la naturaleza. La interrelación de las ideas fundamentales y métodos que se utilizan en diferentes campos de la ciencia y la tecnología se ha convertido en uno de los factores decisivos en el progreso de la ciencia en general. Entre los ejemplos más espectaculares de tal intercambio de ideas y métodos teóricos para el análisis de diversos fenómenos físicos está el problema de la formación de solitones. El día de hoy el concepto de solitones proporciona un ejemplo notable en el que una solución matemática abstracta

ha producido un gran impacto en el mundo real de las altas tecnologías. Por lo tanto, durante su desarrollo el concepto de solitón ha reunido en una labor de investigación y de aplicación no sólo a matemáticos y físicos, sino también a investigadores de diferentes áreas del quehacer científico y tecnológico. Los solitones son ondas solitarias no lineales, autolocalizadas, robustas y de larga vida. Muestran un comportamiento tipo partícula. Ellos no se dispersan y preservan su identidad durante la propagación y después de una colisión; pueden surgir en cualquier sistema físico que posea dos fuerzas antagónicas que se equilibran mutuamente, por ejemplo, la no linealidad y la dispersión.

El objetivo del manuscrito consiste en dar a conocer al lector el contenido de las teorías físicas, así como también del aparato matemático moderno de solución de las ecuaciones diferenciales no lineales, entre los cuales se encuentra los métodos exactos y alternativos, para después pasar a la exposición de resultados de investigación en sistemas moleculares, óptica no lineal, nervios, entre otros.

En el libro se exponen los fundamentos y resultados sobre estructuras solitónicas y excitaciones colectivas en varios sistemas y fenómenos no lineales, sus propiedades, dinámica y surgimiento. Semejantes objetos y sus correspondientes ecuaciones se encuentran actualmente en diferentes ramas de la física y de la ciencia en general, por ejemplo, en hidrodinámica (los tsunamis, ondas interiores en los océanos), meteorología (ciclones, tornados), biofísica (cristales moleculares, ADN, nervios), magnetismo (paredes de dominio), superfluidez (remolinos, hoyos), física de altas energías (monopolos), hidrodinámica nuclear, óptica no lineal, etcétera.

científica y preferencias, por lo que en muchos aspectos derivados del entusiasmo se produjo la omisión de varios tópicos solitónicos importantes. El manuscrito está dirigido a físicos teóricos, experimentales y diversos especialistas involucrados en la investigacion científica de fenómenos no lineales, en particular solitones, en ciencias modernas.

Para todos los colegas y estudiantes quienes participaron en las discusiones pertinentes, expresamos nuestro reconocimiento, especialmente a todos aquellos que de manera voluntaria aportaron ideas y recursos para tener claridad y entendimiento oportuno. Dentro de éstos están los miembros del cuerpos académicos y grupos científicos del país y del extranjero.

Agradecemos sinceramente a Misael Erikson Maguiña Palma y Omar Pavón Torres por su aporte y valiosa ayuda en la elaboración del manuscrito. Un agradecimiento especial a Tatyana Belyaeva por sus sugerencias y discusiones de gran valor para mejorar notablemente el trabajo. Expresamos también nuestro mayor agradecimiento por sus valiosos comentarios y criticas a los revisores del libro.

Expresamos nuestra sincera gratitud a la Secretaría de Investigación y Estudios Avanzados de la Universidad Autónoma del Estado de México por su invaluable apoyo para llevar a cabo la publicación de esta obra.

Toluca, junio del 2020

Maximo A. Agüero Granados

Vladimir N. Serkin

Índice general

INTRODUCCIÓN 19

1. FUNDAMENTOS DE LA TEORÍA LINEAL DE ONDAS 23

1.1. Movimiento oscilatorio 23

1.2. Ondas y ecuación de movimiento 27

1.3. Ondas viajeras lineales. Energía 29

1.4. Principio de superposición lineal 31

2. ONDAS NO LINEALES 35

2.1. No linealidad 35

2.2. Dispersión 38

2.3. La observación de John Scott Russell 41

2.4. Problema de Tzingou-Fermi-Pasta-Ulam y la ecuación Korteweg-de Vries 45

2.5. La ecuación no lineal de Schrödinger 50

2.6. Ecuación Sine-Gordon. Transformación de Bäcklund 56

3. INTEGRABILIDAD, DISPERSIÓN INVERSA, CARGAS TOPOLÓGICAS 63
3.1. Integrabilidad 64
3.2. Método de dispersión invesa 66
3.2.1. Ley de conservación de KdV y transformación de Miura 67
3.2.2. Formalismo de Lax 73
3.3. Invariantes topológicas 75

4. SISTEMAS INTEGRABLES: ECUACIÓN NO LINEAL DE SCHRÖDINGER Y DE SINE-GORDON 83
4.1. La integrabilidad exacta de la ecuación no lineal de Schrödinger y el método de Ablowitz-Kaup-Newell-Segur 84
4.2. El par de Lax para la NLSE y el método AKNS 86
4.3. Soluciones solitónicas de la NLSE 89
4.4. Condición de autoconsistencia para la ecuación Sine-Gordon 93

5. MÉTODOS ALTERNATIVOS DE SOLUCIÓN DE ECUACIONES NO LINEALES 99
5.1. Solibricks como unidades para construir solitones 99
5.1.1. Comportamientos asimptóticos y solitones 103
5.1.2. Campos no lineales y solibricks 105
5.2. Método directo de Hirota. Operadores de evolución 108
5.2.1. La ecuación de Boussinesq mejorada 109
5.2.2. Características de las soluciones 111

5.2.3. Formación de solitones regulares, singulares o mixtos. 113
5.2.4. Ejemplo de dos y tres solitones. 115

6. SOLITONES EN ÓPTICA NO LINEAL 123
6.1. Ecuaciones de Maxwell en óptica no lineal. 123
6.2. La NLSE y modulaciones espaciales lentas. 130
6.3. Ecuación cúbica no lineal de Schrödinger 133

7. SISTEMA NO INTEGRABLE: ECUACIÓN CÚBICA QUINTA DE SCHRÖDINGER 137
7.1. Ecuación no lineal cúbica quinta de Schrödinger 138
7.2. Términos de atracción y repulsión en la ecuación no lineal de campo 143
7.3. Soluciones topológicas y no-topológicas 145
7.3.1. Solitones tipo gotas 147
7.3.2. Burbujas y escalones solitónicos 149
7.3.3. Aproximación de pequeña amplitud. 152
7.4. Analogía mecánica de las soluciones solitónicas 153

8. SOLITONES EN SISTEMAS MOLECULARES 161
8.1. Excitaciones colectivas en el ADN. 161
8.2. Modelo de partículas acopladas 166
8.3. Modelo de Peyrard-Bishop 169
8.4. Soluciones solitónicas en el modelo matemático del ADN 177

8.4.1. Condiciones de salto 178
8.4.2. Soluciones no-clásicas 180
8.4.3. Soluciones tipo pico y aglomeración. 181
8.4.4. Energías de las estructuras solitónicas 186

9. MODELOS DE TRANSMISIÓN DE PULSOS NERVIOSOS 189
9.1. Estructura de las células y pulsos nerviosos. 189
9.2. Modelo de Hodgking-Huxley 193
9.2.1. Pulsos nerviosos como ondas solitarias 198
9.3. Estructuras clásicas y no-clásicas 201
9.3.1. Estructuras no lineales con velocidad del sonido 205
9.3.2. Soluciones con velocidades distintas del sonido 208
9.4. Perturbaciones en la densidad lateral del axón. 210

10. ESTRUCTURAS SOLITÓNICAS NO-CLÁSICAS 219
10.1. Familia de ecuaciones tipo Korteweg-de Vries. 220
10.2. Ecuación no lineal de Klein-Gordon con interacción inarmónica 223
10.3. Soluciones solitónicas compactas y no-clásicas. 227
10.3.1. Gotas compactas. 228
10.3.2. Soluciones tipo picos (peakons) 230
10.3.3. Kink y pedestal compactos 231
10.4. Energía de las soluciones no-clásicas 234

11. MÉTODO DE ESTADOS COHERENTES GENERALIZADOS 237
11.1. Estados coherentes y bozonización. 238
11.1.1. Modelo ferromagnético de Heisenberg y la ecuación no lineal cúbica quinta de Schrödinger 242
11.1.2. Dinámica de los estados comprimidos de Kennard. 246
11.2. Estados coherentes generalizados 248
11.2.1. Grupo SU(2). 251
11.2.2. Grupo SU(1,1) 253
11.2.3. Propiedades de los estados coherentes generalizados. . . . 255
11.3. Aplicaciones de los estados coherentes generalizados. 257
11.3.1. El ferromagnetismo en la teoría de Heisenberg 257
11.3.2. Dinámica de interacción ADN-proteína 261

12. TEORÍA DE PERTURBACIONES. 267
12.1. Ecuación no lineal de Schrödinger perturbada 267
12.2. Dinámica adiabática de las coordenadas del solitón 269
12.3. Perturbación disipativa. 270
12.4. Solitón en el potencial de un oscilador armónico 273
12.5. Interacciones y fuerzas entre solitones de la NLSE 275

BIBLIOGRAFÍA 279

INTRODUCCIÓN

Posiblemente desde antes de que se hablara de ciencia, el hombre primitivo, motivado por su curiosidad natural, se habrá sentido atraído, quizás y maravillado cuando al acercarse a la orilla de un riachuelo vio caer una hoja al agua y al formarse las características ondas de perturbación, que aún hoy en día nos parecen un fenómeno tan singular, sintió la necesidad de saber más y comprender el por qué, el cómo, etc. Muchos años de experiencia y conocimientos adquiridos a través del desarrollo de la ciencia y en particular de la física han dejado a su paso un conocimiento incalculable y nos han dado la oportunidad de responder ésas y otras preguntas. Al paso de los años, como característica primordial de la ciencia, se han logrado descubrir fenómenos que han cautivado la imaginación de un oportuno observador que ha dedicado su vida a entender un poco más de su mundo.

En un principio se estudiaron las ondas lineales como sistemas ideales ayudando a comprender una gran cantidad de fenómenos y dejando una teoría fundamental para la comprensión de sistemas más complejos y reales. Pero todavía persistían dificultades intrínsecas al usar modelos lineales en la investigación científica; por ende, surgen después investigaciones de sistemas más completos y no lineales. Estos problemas fueron también conocidos desde

la época de Kepler (el problema de los tres cuerpos) mostrando desde el primer momento la principal dificultad de la no integrabilidad. Aunque los fenómenos no lineales fueron estudiados en sistemas mecánicos, actualmente los encontramos en todo tipo de fenómenos naturales y sociales. En el siglo XIX, un ingeniero de apellido Russell dedicó muchos años de su vida a comprender uno de los fenómenos más importantes relacionados con la no linealidad dando paso a un continuo esfuerzo por comprender una onda de transmisión conocida como solitón.

Los solitones u ondas solitarias son un tipo de ondas no lineales que podemos encontrar en diversos medios y tamaños. La propiedad más importante de los mismos es que son estructuras no lineales, los cuales en muchos aspectos se asemejan a partículas. En la naturaleza los solitones son considerados como modelos de estabilidad, jugando un papel importante en una variedad de fenómenos, como en partículas elementales, cristales líquidos, sistemas magnéticos, fibras ópticas, pulsos láser, sistemas biológicos (ADN y neuronas, en ambos como medio de comunicación), sistemas geológicos, en canales, en forma de ondas gigantes en el océano conocidas como Tsunamis, en la atmósfera de planetas (Júpiter por ejemplo) y hasta en galaxias. Estas estructuras poseen una variación importante de tamaños que van desde 10^{-7} hasta 10^{10} cm, con propiedades muy útiles en el desarrollo de la tecnología de máximo desempeño. Siendo un fenómeno tan importante, merece la atención de la ciencia con preguntas fundamentales en el estudio de procesos naturales. El aspecto esencial de los fenómenos en los cuales se involucran los solitones se ha hecho evidente por el éxito notable en materia condensada, óptica y en teoría de campos.

En la primera parte del manuscrito se exponen y revisan los aspectos relevantes de modos lineales y no lineales de las oscilaciones, presentados en diversos modelos. Seguidamente, abordamos la aparición de ciertos métodos exactos para la resolución de ecuaciones diferenciales no lineales que soportan soluciones con sus respectivas clasificaciones en solitones topológicos y no-topológicos. En las partes siguientes abarcamos el rápido desarrollo de nuevas estructuras solitónicas con soportes compactos y otros tipos. Posteriormente tenemos secciones dedicadas a la propagación de pulsos solitónicos en óptica, en sistemas moleculares y nervios.

En años recientes, se han desarrollado innumerables contribuciones fundamentales sobre solitones en todas las ramas de la física. Se pueden consultar, por ejemplo, muchos aspectos importantes del fenómeno en (Makhankov 1990, Mollenauer y Gordon 2006, Davydov 1985, Rajaraman 1987, Dodd, Eilbeck, Gibbon y Morris 1982, Scott 2009, Jang, 2010).

1. FUNDAMENTOS DE LA TEORÍA LINEAL DE ONDAS

La mayor cantidad de movimientos son oscilaciones que además pueden propagarse en el espacio. La forma más simple de movimiento oscilatorio la representamos mediante las oscilaciones de un péndulo.

1.1. Movimiento oscilatorio

En un escenario inicial consideramos la dimensión del espacio-tiempo como 1+1. Si es así, utilizaremos como coordenadas libres las coordenadas del espacio x y del tiempo t. Un péndulo simple es un sistema que consiste en una partícula de masa m, suspendido de un cordón ideal y sin efectos disipativos, es decir, que despreciamos la fricción con el medio ambiente.

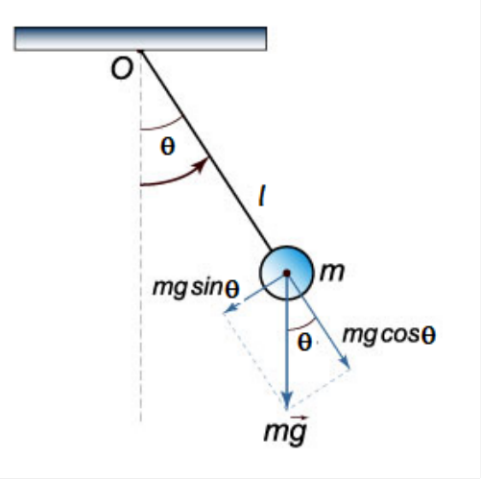


Figura 1.1. *Ejemplo típico de oscilación periódica modelado por un péndulo*

De acuerdo con la Figura (1.1) podemos tomar su trayectoria parametrizada:

$$\begin{aligned} x &= l\sin\theta, & \frac{dx}{dt} &= l\frac{d\theta}{dt}\cos\theta, \\ y &= l\cos\theta, & \frac{dy}{dt} &= -l\frac{d\theta}{dt}\sin\theta. \end{aligned} \tag{1.1}$$

La energía cinética T se calcula mediante la fórmula:

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left\{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2\right\}, \tag{1.2}$$

sustituyendo el sistema de ecuaciones (1.1) en (1.2) y simplificando las ecuaciones tenemos:

$$T = \frac{1}{2}ml^2\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2. \tag{1.3}$$

Para la energía potencial usamos la fórmula

$$U = -mgh = -mgl\cos\theta. \tag{1.4}$$

Seguidamente obtenemos la ecuación de movimiento del oscilador con el método de la mecánica clásica. De las expresiones para la energía cinética y potencial observamos que el sistema en estudio posee sólo una coordenada generalizada $q = \theta$. Por lo tanto, usando las ecuaciones (1.2) y (1.4), podemos construir el Lagrangiano:

$$L = \frac{1}{2}ml^2\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 + mgl\cos\theta, \tag{1.5}$$

y al sustituirlo en la ecuación de Lagrange

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}}\right) - \frac{\partial L}{\partial \theta} = 0, \tag{1.6}$$

simplificando obtenemos la ecuación no lineal del péndulo:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \omega^2 \sin\theta = 0, \tag{1.7}$$

donde $\omega^2 = g/l$ denota la frecuencia de oscilación.

Para integrar la ecuación de movimiento lo convertimos en un problema de Cauchy $\theta(t=0) = \theta_0, \quad \frac{d\theta}{dt}(t=0) = 0$. La ecuación diferencial de segundo orden (1.7) puede ser reducida a primer orden mediante la multiplicación por el factor integrante $\frac{d\theta}{dt}$ y así obtener la ecuación:

$$\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 - \frac{2g}{l}\cos\theta = -\frac{2g}{l}\cos\theta_0, \tag{1.8}$$

cuya solución se expresa en términos de integrales elípticas completas de primer orden

$$F(k) = \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - k^2\sin^2\alpha}}, \tag{1.9}$$

donde las nuevas y antiguas variables están relacionadas así:

$$\sin\frac{\theta}{2} = \sin\frac{\theta_0}{2}\sin\alpha = k\sin\alpha. \tag{1.10}$$

Por ejemplo, el periodo de oscilación del péndulo no lineal se calcula mediante la expresión

$$T = 4\sqrt{\frac{l}{g}}F(k). \tag{1.11}$$

Cuando se analizan oscilaciones pequeñas ($\theta \ll 1$) entonces como es obvio tenemos que $\sin\theta \approx \theta$, por lo tanto:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\theta = 0, \tag{1.12}$$

obtenemos la ecuación del oscilador armónico, cuya solución general se escribe como:

$$\theta = a_1 \sin(wt + a) + a_2 \cos(wt + a). \tag{1.13}$$

con $g/l = w^2$ y a, a_1, a_2 son constantes que se determinan de las condiciones iniciales del problema.

La misma Ec. (1.12) se puede obtener en caso general para un oscilador en las inmediaciones del punto de equilibro en un potencial. Denotamos la posición de equilibrio como x_0 y a su vez a la diferencia $x - x_0 = z$ como el desplazamiento del oscilador de su punto de equilibrio. La fuerza $\mathbf{F}$ que impide a la masa a salir de su posición de equilibrio y el desplazamiento z, están relacionadas por la Ley de Hooke: $\mathbf{F} = -\kappa\mathbf{z}$. Entonces, la dinámica de la partícula estará sujeta a la segunda ley del movimiento de Newton: $\mathbf{F} = m\mathbf{z}_{tt}$; por lo que en $1+1$ dimensiones de espacio-tiempo tenemos

$$mz_{tt} = -\kappa z. \tag{1.14}$$

Esta ecuación de movimiento tiene la solución general siguiente:

$$z = z_0 \cos(w_0 t - \alpha), \tag{1.15}$$

con $w_0^2 = \kappa/m$ y z_0, α constantes. A la función

$$\phi = w_0 t - \alpha, \tag{1.16}$$

se le llama "fase". La solución de la Ec. (1.14) con ayuda de variables complejas puede ser escrita como $z = z_0 e^{i\phi}$. Cuando uno calcula la energía se utiliza la parte real de la solución z. La energía cinética y la energía potencial tendrán la siguiente forma:

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\kappa z_0^2 \sin^2\phi; \qquad V = \frac{1}{2}\kappa z^2 = \frac{1}{2}\kappa z_0^2 \cos^2\phi, \tag{1.17}$$

y la energía total es $E = T + V = \frac{1}{2}\kappa z_0^2$. Vemos que esta magnitud es constante. Tomando el valor promedio cuando θ varía desde 0 a 2π.

$$\overline{T} = \frac{1}{2}\kappa z_0^2, \qquad \overline{V} = \frac{1}{2}\kappa z_0^2 \qquad \text{entonces} \qquad \overline{E} = \kappa z_0^2. \tag{1.18}$$

De estas expresiones se infiere que existe una distribución equitativa de energía y el valor promedio del Lagrangiano será: $\overline{L} = \overline{(T - U)} = 0$. Cuando el oscilador está sujeto a fuerzas disipativas, entonces deberá agregársele un término que modele la acción de esta fuerza en la siguiente forma: $F_r = -2m\beta z_t$. En consecuencia, la nueva ecuación de movimiento

$$z_{tt} + 2m\beta z_t + w_0^2 z = 0, \tag{1.19}$$

tiene la solución general $z = z_0 e^{-\beta t}\cos(wt - \alpha)$, con $w = (w_0^2 - \beta^2)^{\frac{1}{2}}$. Para este caso, la energía disminuye debido al término $e^{-2\beta t}$.

1.2. Ondas y ecuación de movimiento

El estudio de propagación de pulsos ondulatorios tiene gran importancia en la ciencia en general y por consiguiente en el desarrollo de tecnologías.

Obtendremos la ecuación de movimiento de propagación de ondas utilizando el sistema conocido como cuerda discretizada, es decir, dividimos a la cuerda en segmentos de cuerda de longitud pequeña. Por lo tanto, modelamos su comportamiento por medio de sistemas de partículas acopladas.

Consideramos una cuerda dividida en n segmentos y cada segmento representado por una partícula. Asignamos a cada segmento su posición q_j. La interacción para cada segmento sólo tomará en cuenta los vecinos más cercanos a la partícula que ocupa la posición j. Entonces esta partícula sentirá la influencia de la $(j-1)$-esima y de la $(j+1)$-esima partículas. La energía cinética y potencial (en la aproximación de Hooke cuyo coeficiente de "resorte" es κ) pueden ser expresados fácilmente así:

$$T = \frac{1}{2}m\sum_j \left(\frac{dq_j}{dt}\right)^2, \text{ con } j = 1, .., n, \tag{1.20}$$

$$U = -\frac{1}{2}\frac{\kappa}{\delta}\sum_j (q_{j-1} - q_j)^2, \text{con } j = 1, .., n+1. \tag{1.21}$$

Siendo δ la distancia entre las posiciones aledañas. Consideramos que todos los péndulos tienen masas iguales m. Escribimos el Lagrangiano como:

$$L = T - U = \frac{1}{2}\sum_j \left(m\left(\frac{dq_j}{dt}\right)^2 + \frac{\kappa}{\delta}(q_{j-1} - q_j)^2\right). \tag{1.22}$$

Entonces, la ecuación de Lagrange para la j-ésima partícula es:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q_j}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} &= 0, \\ m\ddot{q_j} - \frac{\kappa}{\delta}(q_j - q_{j+1}) + \frac{\kappa}{\delta}(q_{j-1} - q_j) &= 0. \end{aligned} \tag{1.23}$$

Pasando al límite continuo en la Ec. (1.23) cuando $\delta \to 0$, se obtiene

$$\frac{\partial^2 q}{\partial t^2} - a^2\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0, \quad \text{donde } \kappa/m = a^2. \tag{1.24}$$

Generalmente una onda implica la propagación de cierta perturbación. Esta ecuación pertenece a la familia de ecuaciones hiperbólicas, que están relacionadas a líneas peculiares en el espacio-tiempo x, t llamadas *características*. Esta ecuación fue descubierta en 1747 por Jean Le Rond D'Alembert y, posteriormente, estudiada por Daniel Bernoulli y Euler entre otros.

1.3. Ondas viajeras lineales. Energía

Como es conocido, la Ec. (1.24) describe a las ondas de pequeña amplitud en una cuerda homogénea. La solución general de esta ecuación está determinada por la combinación lineal de dos perfiles de onda que se mueven en direcciones opuestas en la cuerda:

$$q = f(x - at) + g(x + at). \tag{1.25}$$

Si el movimiento ondulatorio ocurre bajo una sola frecuencia $\nu = \omega/2\pi$ entonces tenemos

$$q = A\cos(kx - \omega t + \alpha) + B\sin(kx + \omega t + \beta), \tag{1.26}$$

siendo A, B las amplitudes correspondientes, α, β – constantes arbitrarias que se definen de las condiciones iniciales. A la solución anterior se le estudia como la parte real de la onda monocromática:

$$q = ae^{i(kx-\omega t)} + be^{-i(kx+\omega t)}. \tag{1.27}$$

Veamos una fase particular por ejemplo $\theta = kx - \omega t + \alpha$. Cuando el observador está ubicado junto a la onda y se mueve con velocidad

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = c, \tag{1.28}$$

siendo c una constante, la fase θ se mantiene constante con respecto al observador. Esta velocidad de fase c determina la velocidad para una sola oscilación $(\theta = 2\pi m)$, del valle $(\theta = \pi + 2\pi m)$, del nodo $\left(\theta = \frac{\pi}{2} + m\right)$ de la onda, siendo m un entero arbitrario. De esta manera;

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{dx}{dt}\frac{\partial\theta}{\partial x} = 0, \tag{1.29}$$

si $\frac{dx}{dt}$ está determinado por la Ec. (1.28). En el caso cuando exista una relación $f(\omega, k) = 0$ entre la frecuencia ω y el número de onda κ , es decir si:

$$\omega = F(k), \tag{1.30}$$

la velocidad de fase c dependerá del número de onda κ como

$$c(\kappa) = \frac{\omega}{k} = \frac{F(k)}{k}. \tag{1.31}$$

Si la velocidad de fase c es constante, entonces la onda no es dispersiva, y tendremos $F(k) = kc$. Ahora, si $c(k)$ es una función de k, entonces la onda se llama *onda dispersiva* y a la relación (1.30) se le denomina ecuación de dispersión. Cuando la onda se traslada sin dispersión, la propiedad sinusoidal no es tan importante. Cuando todas las ondas están viajando con la velocidad de fase c y en $t = 0$ se tiene $q(x, 0)$ como una función de x, entonces podemos representar a la onda por medio de integrales de Fourier como una superposición de funciones sinusoidales. Como el sistema es lineal, cada componente se trasladará con la velocidad c y su frecuencia estará determinada por $\omega = kc$

Ahora veremos un rasgo importante relacionado con la dispersión. En la Ec. (1.30) calculamos la derivada con respecto a k

$$\frac{dw}{dk} = J(k). \tag{1.32}$$

Esta expresión tiene dimensión de velocidad y por esta razón se llama velocidad de grupo, sólo porque cada porción de la envolvente de la oscilación puede ser interpretada como un grupo o como un paquete de ondas y la velocidad $J(k)$ como la velocidad del grupo. En el caso de ondas sin dispersión uno tiene $J = c$, es decir la velocidad de grupo y de fase son iguales. En el caso dispersivo, las velocidades del grupo son menores o mayores que la velocidad de fase y también pueden tener signos opuestos. La condición para que ocurran estos fenómenos es el hecho de que la longitud de onda $2\pi/k$ sea mucho menor que la dimensión promedio del paquete de ondas. Durante la propagación de ondas, la energía está definida a través de su densidad en unidades de longitud i.e. $E = T + V$, que no es más que la suma de la energía cinética y la energía potencial. La ley de conservación de energía está definida como:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} = 0, \tag{1.33}$$

siendo S el flujo de energía y la integral de $\int_{\infty}^{\infty} E dx$ es un invariante de movimiento. El valor promedio de la cantidad física K (que denotamos como $(\bar{K})$ para un periodo único es interpretada como un valor promedio con respecto a la fase (en el intervalo de 0 a 2π). En muchos casos la distribución equitativa de la energía ocurre de tal manera que $\bar{T} = \bar{V}$.

1.4. Principio de superposición lineal

La solución general de una ecuación diferencial lineal homogénea de orden n es una combinación lineal de n soluciones linealmente independientes con n constantes arbitrarias.

Esto quiere decir que si tenemos una ecuación diferencial lineal parcial con un operador lineal

$$Lu(x,t) = 0, \tag{1.34}$$

La solución general $u(x,t)$ depende de las funciones arbitrarias en vez de constantes arbitrarias como en el caso de la ecuación diferencial ordinaria. Entonces uno puede representar las soluciones generales como una serie infinita convergente

$$u(x,t) = \sum_n c_n u_n(x,t), \tag{1.35}$$

donde c_n son constantes arbitrarias. Las soluciones de ecuaciones diferenciales lineales se construyen haciendo uso de la aproximación poderosa debida a Fourier. Las líneas de esta estrategia son las siguientes. Supongamos que estamos buscando las soluciones de la siguiente ecuación diferencial lineal en derivadas parciales

$$\frac{\partial u\,(x,t)}{\partial t} = -iw\left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right)u\,(x,t)\,, \tag{1.36}$$

donde $\omega(-i\partial/\partial x)$ puede ser un polinomio de su argumento. Como se sabe, un gran número de fenómenos resultan ser modelados por la ecuación diferencial (1.36) en física y en otras ciencias naturales. Utilizamos como condiciones iniciales el siguiente perfil de la función desconocida en $t = 0$.

$$u\,(x,0) = u_o\,(x)\,, \quad -\infty < x < \infty. \tag{1.37}$$

A continuación, empleamos la transformación de Fourier $\widehat{u}\,(k,t)$ para la función $u(x,t)$:

$$\widehat{u}(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} exp(-ikx)u(x,t)dx. \tag{1.38}$$

Por lo que ahora la función $u(x,t)$ se obtendrá invirtiendo la transformada de Fourier

$$u(x,t) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} exp(ikx)\widehat{u}(k,t)dk, \tag{1.39}$$

De aquí obtenemos

$$\widehat{u_t}(k,t) = -i\omega(k)\widehat{u}(k,t). \tag{1.40}$$

Esta ecuación es fácil de integrar y se encuentra

$$\widehat{u}\,(k,t) = \widehat{u}\,(k,0)\, exp\left[-i\omega\,(k)\,t\right]. \tag{1.41}$$

En general, los tres pasos siguientes son necesarios para resolver ecuaciones lineales tipo (1.36):

1. En el tiempo $t = 0$ uno calcula la transformada de Fourier para la condición inicial $u(x,0) = u_0(x)$.

$$\widehat{u}(k,0) = \int_{-\infty}^{\infty} exp(-ikx)u(x,0)dx. \tag{1.42}$$

2. De la Ec. (1.41) encontramos la transformada de Fourier para la incógnita $\widehat{u}(x,t)$ en el tiempo $t > 0$.

3. Al final, en el tiempo t, la función $u(x,t)$ se obtiene tomando la transformación inversa de Fourier en el sistema (1.39).

2. ONDAS NO LINEALES

La diferencia fundamental entre un proceso lineal y no lineal se manifiesta en la satisfacción del principio de superposición. La adición de dos ondas no siempre da como resultado la suma de los características que poseen las ondas. En el caso de ondas nolineales la suma de dos elementos produce nuevos efectos como consecuencia de su actividad colectiva. Esta propiedad cooperativa se manifiesta en su gran mayoría como resultado de " fuerzas antagónicas", por ejemplo, de la dispersión y la nolinealidad inherentes en la ecuación no lineal del modelo en estudio.

2.1. No linealidad

Sea que inicialmente tengamos que analizar el fenómeno lineal de transporte de ondas que se puede describir mediante la ecuación lineal (1.24), el cual, podemos reescribir de la siguiente manera:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - a\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} + a\frac{\partial}{\partial x}\right) q(x,t) = 0. \tag{2.1}$$

De la Ec. (2.1) tomamos alguno de los dos factores, una ecuación lineal simple

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + a\frac{\partial}{\partial x}\right) q(x,t) = 0. \tag{2.2}$$

Ahora, se generaliza esta ecuación haciendo una suposición no lineal del movimiento ondulatorio. Por ello sea que la velocidad de fase a dependa de la amplitud de onda u, por lo que tenemos:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + a(q)\frac{\partial}{\partial x}\right) q(x,t) = 0. \tag{2.3}$$

Modelamos el proceso haciendo que la no linealidad sea débil, es decir que la velocidad de fase depende de la onda sólo de manera lineal

$$a(q) = a_0 + \alpha q + ... \tag{2.4}$$

Por lo que la ecuación no lineal simple será

$$\frac{\partial q}{\partial t} + a_0\frac{\partial q}{\partial x} + \alpha q\frac{\partial q}{\partial x} = 0. \tag{2.5}$$

Pasamos a un sistema que se mueve con velocidad a_0 es decir, hacemos un cambio de variables $x^{'} = x - a_0 t$, $t^{'} = t$ y además $q^{'} = \alpha q$. Entonces, dejando de lado los apóstrofos para las nuevas variables $x^{'}, t^{'}, q^{'}$, la Ec. (2.3) se transformará en una más simple (Whitham, 1999).

$$q_t + qq_x = 0. \tag{2.6}$$

Como se sabe, la solución general de la Ec. (2.2) se obtiene sin dificultad, es solución del tipo onda viajera ($a = a_0$):

$$q(x,t) = g(x - a_0 t). \tag{2.7}$$

Por analogía con esta solución, asignamos una condición inicial y generamos un problema de Cauchy cuando $t = t_0$.

$$q(x,t_0) = g(x). \tag{2.8}$$

Buscaremos la solución de onda viajera de la ecuación (2.6) de la forma

$$q(x,t) = g(x - qt). \tag{2.9}$$

Esta solución fue encontrada por Riemann en 1860. La veracidad la podemos comprobar directamente mediante el cálculo de las respectivas derivadas:

$$q_x = (1 - q_x t)g^{'}, \qquad q_t = -(q + q_t)g^{'}, \tag{2.10}$$

haciendo $g^{'} = dg/d\xi, \quad \xi = x - qt$. Despejamos ahora de estas relaciones q_x, q_t y obtenemos finalmente

$$q_x = \frac{g^{'}}{1 + g^{'}t}, \qquad q_t = \frac{qg^{'}}{1 + g^{'}t}, \tag{2.11}$$

que satisfacen plenamente a la Ec. (2.6).

Consideramos ahora la propagación de una perturbación con perfil inicial como se muestra en la figura (2.1). De acuerdo con la solución (2.11), sus diversas partes se mueven con diferentes velocidades proporcionales a la altura del perfil $q(x)$. Los puntos en los que $q(x) = 0$ permanecen generalmente sin cambio (recuérdese que se realizó la transición al sistema de referencia que se mueve con la velocidad a_0). Por lo tanto, en algún instante de tiempo $t_1 > 0$ tendremos un perfil similar al que se muestra las siguientes gráficas con tiempo posteriores en la figura (2.1).

Se puede ver que la inclinación del borde de ataque de la perturbación aumentó. Este fenómeno se llama reforzamiento de onda. Con el tiempo, el frente de onda se torna más empinado y pronunciado, y finalmente, q_x la derivada se vuelve infinita. Esto ocurre en ese instante de tiempo t^*, en el cual $x = x^*$,, donde el denominador de las expresiones de la Ec. (2.11) se vuelve cero. Seguidamente, la onda se inclina, el perfil se vuelve ambiguo,

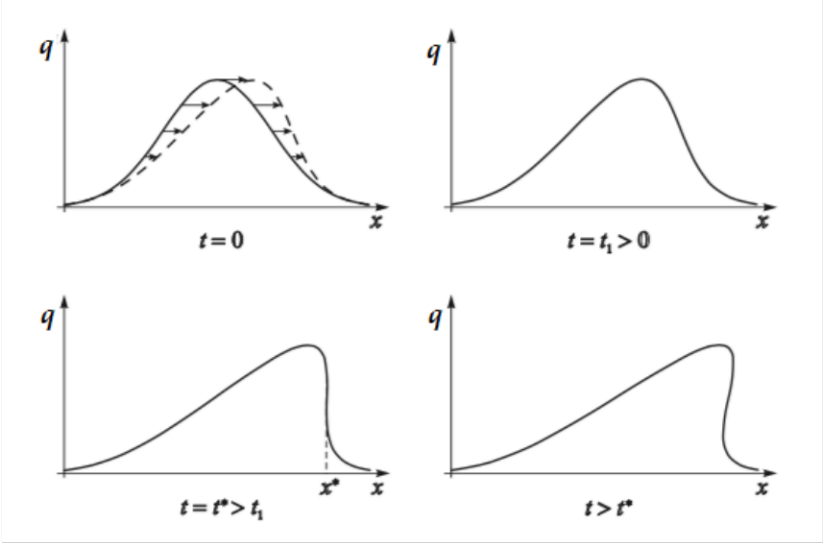


Figura 2.1. *La onda no lineal sin dispersión se deforma en la cresta debido a que esta zona viaja con mayor velocidad que sus contraparte inferior.*

y la Ec. (2.5), en términos generales, ya no es aplicable. La onda se vuelca, fenómeno que se podría apreciar en un medio acuoso como las olas del mar en las playas. Como se puede observar, algunas partes de la onda viajan más rápido que otras produciendo un rompimiento más lejano de la onda y creando ondas de choque. Esto puede ocurrir en un gas, por ejemplo, donde la formación de ondas de choque es un fenómeno observable.

2.2. Dispersión

Otro de los efectos importantes en la transmisión de ondas es la dispersión. Este efecto encontrado en prácticamente todos los medios es un gran

problema ya que ocasiona una pérdida continua de información. Este fenómeno depende de la frecuencia o de la longitud de onda; si imaginamos otra vez a un paquete de onda como un grupo de corredores, todos estos al inicio de la carrera tienen la misma velocidad; si suponemos que después de un tiempo algunos disminuyen su velocidad, entonces, cada corredor o componente de la onda viaja con velocidad de fase diferente, provocando que el paquete inicial se deforme y se disperse. La dispersión depende del medio de propagación en la mayoría de los casos.

A continuación, complicando el modelo de los procesos físicos tomamos la ecuación de onda más simple con un término adicional de tercera derivada parcial con respecto a la coordenada x

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial^3 q}{\partial t^3} = 0. \tag{2.12}$$

La solución de la ecuación lineal (2.12) se obtendrá al considerar la onda proporcional a $q(x,t) = e^{i(kx-wt)}$, con (ω, κ) satisfaciendo la "relación de dispersión": $F(w,k) = 0$. En varios problemas naturales, uno debe tomar valores reales para k, esto permite distinguir entre ondas armónicas estables $Im(w/k) < 0$ y ondas armónicas inestables para un valor particular de k cuando $Im(w/k) > 0$. De esta manera, la relación de dispersión se obtiene reemplazando este tipo de soluciones dentro de la ecuación (2.12), para obtener:

$$w(k) = k - k^3. \tag{2.13}$$

Análogamente al caso de ondas lineales podemos calcular la velocidad de la onda de cada componente o la velocidad de fase c

$$c = \frac{w}{k} = 1 - k^2, \tag{2.14}$$

el cual significa que los componentes con diferentes números de onda se propagan con diferentes velocidades (debido a derivadas lineales altas con respecto al tiempo en la ecuación estudiada), ver figura (2.2).

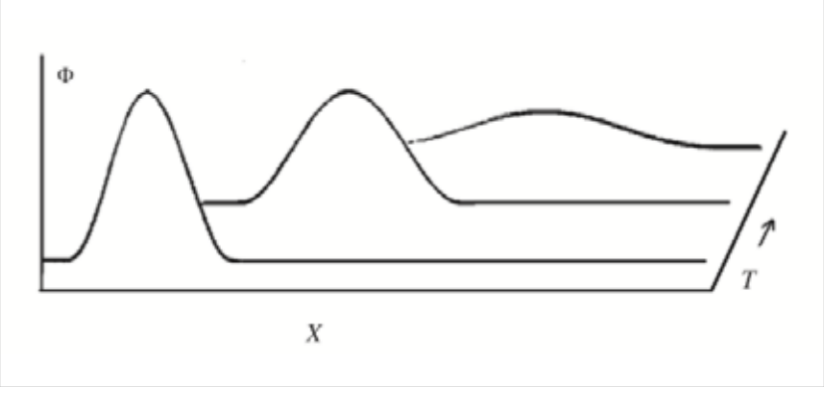


Figura 2.2. *La onda lineal al propagarse pierde identidad y se desvanece.*

La velocidad de grupo C en este caso estará dada por

$$C = \frac{dw}{dk} = 1 - 3k^2, \tag{2.15}$$

que determina la velocidad de un paquete de ondas. Si la velocidad de grupo es igual a la velocidad de fase, entonces el sistema no es dispersivo.

Para el caso general, las relaciones de dispersión tomarán la forma de funciones complejas del número de onda k. Estas fuerzas dispersivas podrían ser compensadas por fuerzas opuestas no lineales en una ecuación diferencial donde están presentes ambos ingredientes, creando así un balance que genera las soluciones solitónicas, como observaremos más adelante. Es necesario aclarar, que la dispersión no es lo mismo que la disipación de energía ya que el contenido de energía puede permanecer constante, aunque el pulso se disperse.

2.3. La observación de John Scott Russell

En la primera mitad del siglo XIX, en Europa estaban aconteciendo grandes revoluciones científicas como, por ejemplo: Oersted descubrió la relación entre electricidad y magnetismo; Michael Faraday formuló la ley de inducción electromagnética; Maxwell sintetizó en forma matemática los descubrimientos de sus predecesores. Por otro lado, en mecánica, las leyes de Newton fueron formuladas como ecuaciones diferenciales ordinarias. El matemático francés Lagrange había iniciado la teoría matemática de las ondas, que fue continuada por Hamilton y muchos más.

En esa época, John Scott Russell fue comisionado por *Channel Company* para investigar la posibilidad de navegación usando propulsores de vapor de agua en canales acuáticos. En 1834 descubrió en el Canal Unión en Hermiston que une Edimburgo con Glasgow una onda solitaria que capturó su imaginación, y posteriormente documentó en 1844 este encuentro fortuito en su manuscrito "Report on Waves" (Reporte sobre ondas) a la Asociación Británica. En su documento relata la observación hecha mientras realizaba pruebas con los botes en el canal. A continuación, presentamos un fragmento de su reporte (Filippov, 2010):

> Creo que será mejor reportar este fenómeno describiendo las circunstancias de mi primer encuentro con el mismo. Estaba observando el movimiento de un bote el cual era jalado rápidamente a lo largo de un estrecho canal por un par de caballos. Súbitamente se detiene el bote. Pero no así la masa de agua justo delante de la proa del bote

> Creo que será mejor reportar este fenómeno describiendo las circuns-
> en el canal, la cual se había puesto en movimiento en un estado de violenta agitación: repentinamente esta masa en agitación empezó a moverse hacia delante con gran velocidad, tomando la forma de una gran elevación solitaria, redonda, suave y bien definida de una masa de agua. Ésta continuó su curso a lo largo del canal aparentemente sin cambio de forma y disminución de velocidad. La seguí montado en un caballo, y aun la vi pasar a una razón de algunas ocho o nueve millas por hora, conservando su figura original unos treinta pies de largo y entre un pie y pie y medio de altura. Pasando un tiempo, su altura gradualmente disminuyó, y después de seguirla una distancia de dos millas, la perdí en unos recodos del canal. Así, el mes de agosto de 1834, fue mi primera oportunidad de encontrarme con este singular y hermoso fenómeno, el cual he llamado: Onda de Translación; un nombre que generalmente ahora se acepta.

Así, describiendo a la perturbación como un bello y singular fenómeno, J. Scott Russell narra su primer encuentro escribiendo más tarde que el día en el que observó por primera vez a la onda solitaria fue el día más feliz de su vida. De su experiencia resaltó la observación de una elevación solitaria que se propaga sin cambio alguno en su forma, dándole el nombre de "great waves of translation" (gran onda de translación), tiempo después acuñó el término de "onda solitaria" por el tipo de movimiento de la onda que permanece sola. Este descubrimiento le infundió mucha curiosidad, que lo condujo a hacer experimentos en el jardín trasero de su casa con un pequeño canal que mandó construir.



Figura 2.3. *Recreación de la onda de traslación de Russell en un canal cercano a Edimburgo.*

De acuerdo con el conocimiento de la época largamente difundido acerca de la formación y la propagación de las ondas, era imposible que existiera ese tipo de onda solitaria. A pesar de la atención negativa de parte de las autoridades científicas de esa época, George Stokes y Airy, continuó investigando y haciendo varios experimentos en el canal de Edimburgo obteniendo una cierta clasificación de ondas. En la figura (2.3) se muestra una recreación de la observación realizada por Russell ahora con dispositivos modernos. Sumando a este descubrimiento, Russell también encontró el efecto que mucho tiempo después fue llamado *efecto Doppler*.

Con la observación de Russell se descubre la existencia de ondas solitarias con un perfil localizado mientras sus velocidades dependían de sus amplitudes. Las ondas altas estaban viajando más rápido que las pequeñas. Russell observó que las amplitudes, velocidades y formas mantienen su

aspecto. Las ondas más altas pasan a través de las más pequeñas como si estas últimas no existieran. Particularmente, la velocidad de propagación de la onda con altura h y con anchura a se define como

$$v = \sqrt{g(h+a)}. \tag{2.16}$$

Donde g es la constante gravitacional. Las severas críticas realizadas por científicos de la época de Russell, no consideraron el hecho que los efectos de la no-linealidad y la dispersión pudieran compensarse durante la evolución del sistema, de hecho este malentendido llevó a falsas especulaciones sobre el descubrimiento.

Las descripciones teóricas de los descubrimientos de Russell fueron hechas independientemente por el francés Joseph Boussinesq (1871) y Lord Raleigh (1876). La contribución principal a la teoría de solitones consiste en la suposición de que el incremento de la velocidad de onda es compensado con el decremento asociado a la dispersión proveyendo la conservación de la onda. En ese tiempo, particularmente, en 1895, Diderick Johansen Korteweg y su estudiante Gustav de Vries, encontraron en 1865 una ecuación (llamada a posteriori la ecuación KdV) que describe exactamente (a la "gran onda de translación" de Russell, con el perfil clásico tipo "campana" $Sech^2(f(x,t))$. Ellos estudiaron las ecuaciones hidrodinámicas de Navier Stokes describiendo la propagación de ondas unidimensionales, para las cuales su longitud es más grande que la altura del líquido. Korteweg y De Vries encontraron una ecuación dinámica aproximada describiendo la propagación en una dirección de esas ondas (para $q = q(x,t)$):

$$q_t + qq_x + q_{xxx} = 0. \tag{2.17}$$

Un tiempo después, se estableció que la ecuación de Korteweg de Vries (2.17) puede extenderse a procesos dinámicos de gases y en física de plasmas. Desde ese tiempo el solitón descubierto por Russell ha estado jugando un papel muy importante en varios fenómenos naturales. Por ejemplo, en fisiología fueron encontradas ciertas ondas que transmitían señales de la misma manera que un solitón. Sólo en nuestra época fue posible estudiar los impulsos nerviosos estudiados anteriormente por Helmholtz, como un cierto tipo de soluciones solitónicas. En 1973 un nuevo mecanismo para la localización y movimiento de energía vibrante en las proteínas fue propuesto por Davidov (1985).

2.4. Problema de Tzingou-Fermi-Pasta-Ulam y la ecuación Korteweg-de Vries

Uno de los impresionantes cálculos numéricos que produjo una avalancha de investigaciones posteriores dedicados a las ondas no-lineales fue realizado por M. Tzingou E. Fermi, J.R. Pasta y S. M. Ulam (problema TFPU) (Fermi, Pasta y Ulam 1955). Con este reporte científico el grupo TFPU en Los Alamos National Laboratory en 1952 relacionado con el proyecto de la bomba atómica, comenzó los desarrollos modernos de la teoría de solitones. Esta fue la primera prueba para aplicar las leyes de la mecánica estadística en sistemas no lineales con un gran número de grados de libertad N. En la primera parte de este trabajo se empleó el valor de $N = 64$. Tomemos la siguiente cita de la biografía de Stanislaw Ulam, *Adventures of a mathematician*:

> Tan pronto como las máquinas fueron terminadas, Fermi con su gran sentido común e intuición, reconoció inmediatamente su importancia para el estudio de problemas en la física teórica, astrofísica y física clásica. Discutimos esto largamente y decidimos formular un problema simple, pero tal que las soluciones requirieran un extenso cálculo que no pudiera ser hecho con lápiz y papel o con las computadoras mecánicas existentes... Encontramos uno, sobre una cuerda elástica con los extremos fijos, que estaría sujeta no solo a la fuerza elástica fija de tensión proporcional al estiramiento, sino que también involucrando un término no lineal físicamente correcto. La cuestión fue encontrar cómo el movimiento entero podría eventualmente termalizarse. John Pasta un físico recién llegado, nos asistió en la tarea de un diagrama de flujo, programando y Tzingou corriendo códigos en "the MANIAC". El problema resultó ser oportuno. Los resultados obtenidos fueron completamente del agrado de Fermi, como su gran conocimiento de movimiento ondulatorio había esperado (Ulam, 1991).

Lo que Tzingou, Fermi, Pasta y Ulam estaban tratando de hacer fue verificar numéricamente un problema básico de mecánica estadística; es decir, la creencia de que en un sistema mecánico con muchos grados de libertad y cercano a un estado de equilibrio, una introducción de energía al sistema provocaría la termalización de la misma, es decir, causaría que la energía se distribuya equitativamente entre los modos normales del sistema linealizado.

La equipartición de energía entre los modos normales está relacionada con las propiedades ergódicas de dicho sistema. En 1914, Debye sugirió que

la conductividad térmica finita de una malla inarmónica se debe a las fuerzas no lineales en la malla. Esta sugerencia llevó a Tzingou, Fermi, Pasta y Ulam a creer que un estado inicial suave podría eventualmente relajarse hasta una equipartición de energía entre todos los modos de oscilación debido a la no-linealidad.

El experimento de TFPU simulaba las vibraciones de una cuerda unidimensional con extremos fijos y con fuerzas de recuperación elásticas, entonces se analizó numéricamente un número finito de ecuaciones diferenciales ordinarias. Resumiendo, ellos investigaron una malla unidimensional compuesto de N osciladores con interacciones de vecinos cercanos y aplicando condiciones de frontera triviales.

El modelo usado por el experimento TFPU para describir una malla unidimensional con longitud L consiste en $N-1$ masas iguales acopladas entre ellas y con extremos fijos de malla con la ayuda de N cuerdas no lineales de longitud h. La compresión o alargamiento (Δ) de estas cuerdas, genera la fuerza

$$F = k(\Delta + \alpha\Delta^2), \tag{2.18}$$

donde k es la constante de acoplamiento y α con signo positivo caracteriza la medida de la no linealidad. La dinámica del sistema (usando dichas restricciones) está gobernada por las siguientes ecuaciones:

$$m(y_i)_{tt} = k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})(1 + \alpha(y_{i+1} - y_{i-1}))\ i = 1, 2, ..., N-1. \tag{2.19}$$

Con condiciones en la frontera $y_0 = y_N = 0$ donde y_i es la desviación de la i-ésima-masa de su estado de equilibrio. Además, TFPU busca movimientos de la malla que comienza desde el reposo, cuando $\dot{y}(0) = 0$, tal que el

movimiento quede completamente especificado dados los desplazamientos iniciales $N-1$. La Ec. (2.19) puede ser escrita de la siguiente manera

$$(y_i)_{tt} = c^2 \left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \right) (1 + \alpha (y_{i+1} - y_{i-1})), \tag{2.20}$$

con $(c^2 = kh^2/m)$. TFPU asumen que los desplazamientos entre puntos vecinos difieren cada uno por una pequeña cantidad $0(h/L)$. Considerando esta restricción es posible introducir la variable continua $y(x,t)$. Donde $y(ih,t) = y_i$. Utilizando la expansión en series de Taylor para y_{i+1} y y_{i-1} se obtiene sin considerar las fuerzas no lineales, la ecuación de Newton que es la ecuación lineal discreta de la cuerda

$$(y_i)_{tt} = c^2 \left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \right). \tag{2.21}$$

Martin Kruskal y Norman Zabusky (ZK) de Princeton, en su artículo (Zabusky y Kruskal, 1965), estudiaron después de 10 años el mismo fenómeno de no termalización. Ellos parten de la ecuación (2.19) y emplearon cierta variante del método de diferencia finita con la expansión de Taylor para y_{i+1} y y_{i-1}, con $kh^2/m = c^2, 2\alpha h = \varepsilon$ y consideraron $h^2/12\varepsilon = \delta^2$. Finalmente obtuvieron la ecuación para el movimiento de la onda (Newell, 1985):

$$y_{tt} - c^2 y_{xx} = \varepsilon c^2 y_x y_{xx} + \varepsilon c^2 \delta^2 y_{xxxx}. \tag{2.22}$$

En la ecuación anterior se busca una solución de onda viajera perturbada

$$y(x,t) = f(\xi, T) + \varepsilon y^{(1)}(x,t) + ..., \tag{2.23}$$

donde $\xi = x - ct, \quad T = \varepsilon t$. La dependencia de f con respecto de T describe la evolución del perfil $f(\xi, T)$ a grandes distancias y tiempos del orden $1/\varepsilon$. La ecuación para $y^{(1)}$ toma la forma de

$$y_{tt}^{(1)} - c^2 y_{xx}^{(1)} = 2c f_{\xi T} + c^2 f_\xi f_{\xi\xi} + c^2\delta^2 f_{\xi\xi\xi\xi}, \tag{2.24}$$

La solución $y^{(1)}$ crecerá linealmente de acuerdo con el incremento de ξ, entonces la forma asintótica de (2.23) diverge en valores grandes del tiempo sólo si uno no escoge la dependencia de f con respecto a T de tal forma que la parte derecha de la ecuación sea igual a cero.

Haciendo $6q = f_\xi$, $\tau = cT/2$ se encuentra la ecuación KdV.

$$q_\tau + 6qq_\xi + \delta^2 q_{\xi\xi\xi} = 0, \tag{2.25}$$

que posee la solución particular solitónica, como se muestra en la figura (2.4):

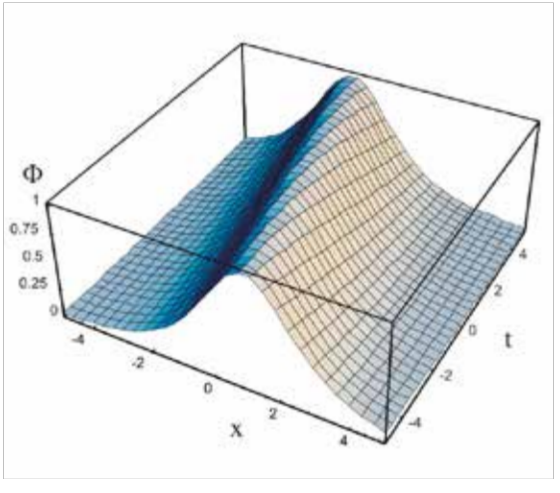


Figura 2.4. *La onda solitónica de la ecuación de Korteweg-de Vries (2.25) que emula a la onda de translación de Russell, donde:* $x_0 = 0,\ \eta = 1$.

$$q = \frac{2\eta^2}{cosh^2\eta(x - x_0 - 4\eta^2 t)}, \tag{2.26}$$

donde η y x_0 son constantes arbitrarias. La solución decae exponencialmente para un valor fijo del tiempo t y cuando $x \to \pm\infty$.

En (1967) Clifford Gardner, John Green, Martin Kruskal y Robert Miura, de "The Plasma Princeton Laboratory", notaron un vínculo inesperado y misterioso entre la ecuación de Schrödinger estacionaria para una partícula en el espacio unidimensional en mecánica cuántica y la ecuación KdV. Este vínculo les permitió utilizar el método (a principios de los 50's) de la teoría de dispersión inversa para obtener soluciones solitónicas de la ecuación KdV.

2.5. La ecuación no lineal de Schrödinger

Otra ecuación no lineal muy importante en física es la ecuación no lineal de Schrödinger conocido internacionalmente como "Nonlinear Schrödinger Equation" (NLSE). Cabe notar que este nombre le fue asignado por su similitud con los fundamentos de la mecánica cuántica. En su límite lineal, cuando las nolinealidades están ausentes, dicha ecuación matemáticamente coincide con la ecuación de Schrödinger para la función de onda de una partícula libre. La NLSE se origina al describir fenómenos no lineales con soluciones que pueden ser representadas en forma de paquetes de ondas armónicos (Makhankov, 1978, 1990).

$$\psi(x,t) = \varphi \exp\left[i(kx - \omega(k)t)\right]. \tag{2.27}$$

La no linealidad del medio se manifiesta en una acción de vuelta en la amplitud de la Ec. (2.27). Como resultado, tenemos la modulación de la onda portadora rápida (alta frecuencia) en el espacio y en el tiempo. Esto ocurre por ejemplo en óptica, cuando un pulso coherente de luz de un nanosegundo,

por decir, en la región de espectro azul, envuelve a cerca de 10 oscilaciones de ondas portadoras. Supongamos que la evolución de la onda armónica en un sistema débilmente no lineal puede ser representada por la relación de dispersión dependiente de la amplitud (como en óptica, cuando el índice de refracción puede ser representado como funciones polinomiales con respecto al campo eléctrico).

Supongamos que el sistema se caracteriza por la relación de dispersión

$$P(\omega, k) = 0. \tag{2.28}$$

Donde $P(\omega, k)$ es un polinomio con respecto a ω, k. Entonces, realizando la correspondencia de las cantidades físicas ω, k con operadores diferenciales (en realidad se esta haciendo la transformación inversa de Fourier)

$$\omega \to -i\frac{\partial}{\partial t}, \ k \to i\frac{\partial}{\partial x}, \tag{2.29}$$

se puede transformar la relación de dispersión (2.28) en una ecuación lineal diferencial para la función $q(x, t)$:

$$P\left(-i\frac{\partial}{\partial t}, i\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi(x, t) = 0. \tag{2.30}$$

El siguiente paso consiste entonces en "adivinar " a partir de conceptos físicos el tipo de no linealidad y escribir la versión generalizada de la ecuación anterior. Usualmente, dos diferentes escenarios del problema pueden ser considerados:

$$\omega = \omega(k; |\varphi|^2), \text{ problema de condicion inicial} \tag{2.31}$$

$$k = k(\omega; |\varphi|^2), \text{ problema de condiciones de frontera.} \tag{2.32}$$

El primer problema está ligado a la evolución temporal del sistema que en el espacio de Fourier se representaría por la frecuencia ω. Por tal motivo, para obtener solución aceptable se requiere la condición inicial. El segundo problema está relacionado con el perfil de la solución en el espacio determinado por las condiciones en la frontera, que en el espacio de Fourier se representa mediante la variable del número de onda k.

Seguidamente expandimos las ecuaciones (2.31) y (2.32) usando series de Taylor en la vecindad de algún valor de los parámetros iniciales $\omega_0,\ k_0,$ uno encuentra que

$$\omega-\omega_0=\left[\frac{\partial\omega}{\partial k}\right]_0(k-k_0)+\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}\right]_0(k-k_0)^2+\left[\frac{\partial\omega}{\partial(|\varphi|^2)}\right]_0|\varphi|^2+\ldots, \quad (2.33)$$

$$k-k_0=\left[\frac{\partial k}{\partial\omega}\right]_0(\omega-\omega_0)+\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 k}{\partial\omega^2}\right]_0(\omega-\omega_0)^2+\left[\frac{\partial k}{\partial(|\varphi|^2)}\right]_0|\varphi|^2+\ldots. \quad (2.34)$$

Nuevamente usamos los operadores en el espacio de Fourier (2.29), pero ahora de la siguiente forma

$$(\omega-\omega_0)\to i\frac{\partial}{\partial t};\quad (k-k_0)\to -i\frac{\partial}{\partial x};\quad (k-k_0)^2\to -\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (2.35)$$

y podemos formar la ecuación no-lineal de Schrödinger (NLSE) para la amplitud φ usando los operadores diferenciales (2.35) en (2.33) y obtener

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\alpha\frac{\partial\varphi}{\partial x}+\beta\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\gamma|\varphi|^2\varphi=0, \quad (2.36)$$

donde se definen los coeficientes

$$\alpha=[\partial\omega/\partial k]_0,\quad \beta=\frac{1}{2}\left[\partial^2\omega/\partial k^2\right]_0,\quad \gamma=-\left[\partial\omega/\partial(|\Phi|^2)\right]_0. \quad (2.37)$$

De la misma manera, reemplazando (2.35) en (2.34) obtenemos

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial x}+\rho\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\mu\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}+\nu|\varphi|^2\varphi=0. \tag{2.38}$$

con los siguientes coeficientes

$$\rho=[\partial k/\partial\omega]_0,\quad \mu=\frac{1}{2}\left[\partial^2 k/\partial\omega^2\right]_0,\quad \nu=-\left[\partial k/\partial(|\Phi|^2)\right]_0. \tag{2.39}$$

A estas ecuaciones también se les denomina *ecuaciones escalares no-lineales de Schrödinger* y representan modelos matemáticos más simples para una descripción de paquetes de onda no lineales de alta frecuencia. Entonces, estas ecuaciones describen la evolución en el tiempo de una envolvente para un paquete ancho de ondas portadoras con valores reales k. Se puede generalizar la derivación utilizando *el método de descomposición multiescalar (o dos variables de tiempo)*, donde se introducen las variables "rápidas" x,t para la onda portadora, y las variables"lentas" $X_n=\epsilon^n x, T_n=\epsilon^n t,\ (\epsilon\ll 1)$ (Dodd, Eilbeck, Gibbon y Morris, 1982; Sulem, Sulem 1999). Cabe mencionar que esta NLSE fue integrada usando un método alternativo de dispersión inversa de un problema de eigenvalores de tipo de Dirac por Zakharov y Shabat en su impresionante trabajo (Zakharov y Shabat, 1972).

¿Qué tipo de fenómeno se describe mediante la NLSE (2.36)? En particular modela autointeracciones de spin (magnones) en ferro-magnetos, excitaciones en cristales moleculares, ondas de Langmuir en plasmas, interacciones de dos cuerpos, en particular del gas de Bose a temperatura cero, controla la evolución de ondas hidrodinámicas propagándose en agua profunda, ondas ópticas en cristales no lineales y guías de luz, ondas de calor en sólidos, etc. Al mismo tiempo, para estados fuertemente no lineales, por ejemplo un estado condensado, NLSE nos provee con la expresión correcta

para excitaciones lineales (obtenidas por N.N. Bogoliubov). Uno de los rasgos más atractivos de la NLSE es que nos permite describir la evolución de los envolventes de un paquete de onda para ondas portadoras en el medio con dispersión cuadrática. Así, NLSE nos permite rehabilitar la idea de Louis de Broglie de la representación de partículas elementales como paquetes de onda, que no se ha encontrado con éxito en teorías lineales, donde los paquetes de onda decaen debido a la dispersión (Makhankov 1991, Dodd, Eilbeck, Gibbon and Morris, 1981, Lokenath 1997).

Como una generalización natural a la Ec. (2.36) se puede considerar algún sistema con otro tipo de no-linealidades, y términos más altos de dispersión. Un ejemplo explícito es el modelo phi-sexto o también llamado ecuación cubica-quinta de Schrödinger, que posee aplicaciones importantes en óptica, como podremos ver más adelante. Otra generalización consiste en considerar un sistema con interacciones entre paquetes de ondas de altas frecuencias $\psi(x,t)$ con ondas de baja frecuencia $U(x,t)$. Para este tipo de fenómenos, una función compleja $\psi(x,t)$ estará sujeta a la misma NLSE escalar

$$i\partial_t\psi + \partial_x^2\psi + U\psi + g|\psi|^2\psi = 0. \tag{2.40}$$

La Ec. (2.40) cuando $U = 0$ toma una forma que permite un análisis matemático adecuado, así:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + |\psi|^2\psi. \tag{2.41}$$

Considerando que la Ec. (2.40) es invariante ante las transformaciones de Galileo,

$$x^{'} = x - Vt, \quad t^{'} = t, \tag{2.42}$$

permite que la solución 1-solitónica de la ecuación cúbica de Schrödinger tiene la forma

$$\psi(x,t) = kSech(k(x - Vt))exp(-iVx + i(V^2 - k^2)t/2) \tag{2.43}$$

La gráfica de la solución solitónica (2.43) se puede ver en la figura (2.5) como la función envolvente.

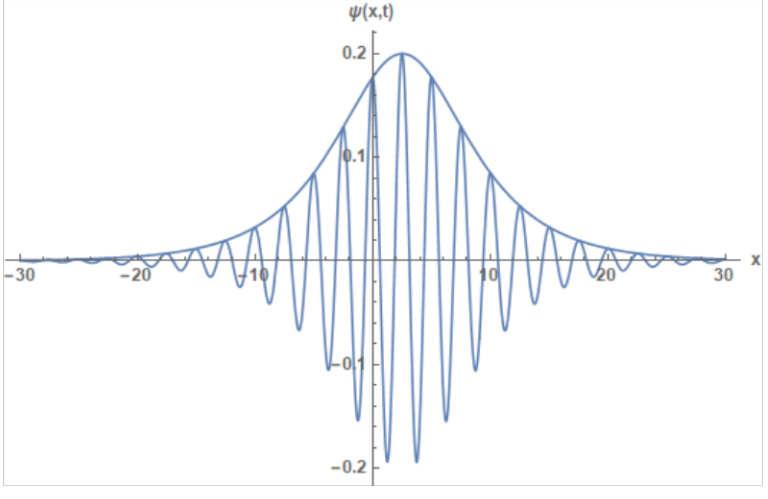


Figura 2.5. *1-Solitón como envolvente de grupo de ondas de la ecuación nolineal de Schrödinger (2.43), con* $k = 0{,}2$; $V = 2{,}5$ *en el tiempo* $t = 1$.

Por otro lado, en la Ec. (2.40) la onda de baja frecuencia $U(x,t)$ actúa como un potencial. Este último podría ser descrito por una de las siguientes ecuaciones autoconsistentes:

$$U = -\partial_x^2(|\psi|^2), \text{ Zakharov 1972;} \tag{2.44}$$

$$\partial_t U + \partial_x(U - |\psi|^2) = 0, \text{ Yajima-Oikawa 1976;} \tag{2.45}$$

$$(\partial_t + \alpha\partial_x^3)U + \partial_x(\beta U^2 - |\psi|^2 + U) = 0, \text{ Nishikawa, et al. 1974;} \quad (2.46)$$

$$(\partial_t + \alpha\partial_x^4)U + \partial_x^2(\beta U^2 + |\psi|^2) = 0, \text{ Makhankov 1974.} \quad (2.47)$$

Las ecuaciones (2.44) -(2.47), cuando se acoplan con la Ec. (2.40) si $g = 0$, pueden ser obtenidas en física de plasmas, donde se describen las ondas iónicas acústicas de Langmuir. Para los casos cuando $g \neq 0$ podrían servir como base de la descripción de ondas de spin e interacciones de fonones en ferromagnetos (Kundu, Makhankov, 1984). Los sistemas (2.44)-(2.46) describen propiamente solitones de amplitud lo suficientemente pequeña. Para solitones con una amplitud ya relativamente extensa se sugiere usar el sistema del modelo no lineal (2.47).

2.6. Ecuación Sine-Gordon. Transformación de Bäcklund

Antes de que Zabusky y Kruskal (1965) realizaran sus experimentos numéricos con la ecuación KdV , en 1953 Seeger, Donth y Kochendörfer estudiando dislocaciones en sólidos, y posteriormente en 1962 Perring y Skyrme, interesados en un modelo simple de partículas elementales con soluciones tipo kink y anti-kink, encontraron en sus experimentos numéricos las características de estructuras solitónicas. Como se sabe, la ecuación de campo escalar conocida como ecuación de Klein Gordon (KG) en 1 + 1 dimensión tiene la forma

$$\theta_{xx} - \theta_{tt} = m^2\theta, \quad (2.48)$$

derivado del siguiente Lagrangiano:

$$L = \frac{1}{2}\left(\theta_x^2 - \theta_t^2\right) + \frac{1}{2}m^2\theta. \tag{2.49}$$

En 1958, Skyrme propuso una teoría no lineal de campo para el caso escalar en una dimensión, donde en el Lagrangiano anterior intercambia a $\frac{1}{2}m^2\theta$ por $\frac{1}{2}m^2(1-\cos\theta)$ y produce

$$L = \frac{1}{2}\left(\theta_x^2 - \theta_t^2\right) + \frac{1}{2}m^2(1-\cos\theta), \tag{2.50}$$

que al sustituirlo en la ecuación de Lagrange se obtiene la ecuación de Sine-Gordon (SG):

$$\theta_{xx} - \theta_{tt} - \frac{1}{2}m^2 sen\theta = 0. \tag{2.51}$$

La ecuacion Sine-Gordon (2.51) se usa en varias ramas de la física, por ejemplo, cuando se describe la propagación de ondas electromagnéticas no lineales, teoría de partículas elementales, gravitación, teoría de superficies con curvaturas negativas constantes, en el estudio de dislocaciones, propagación de auto-rotaciones o rotaciones condicionales, en fluxones en las uniones de Josephson y la propagación de pulsos ópticos de resonancias ultracortas (Dauxois and Peyrard 2004, Dood et.al. 1982), etc.

La ecuación de movimiento (2.51) goza de simetría discreta: $\theta \to -\theta$, y la periodicidad: y $\theta \to \theta + 2\pi$. Como se puede observar, la ecuación de movimiento tiene un número infinito de soluciones constantes:

$$\theta_n = 2\pi n,\ n = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \tag{2.52}$$

esto quiere decir que la ecuación SG posee vacíos degenerados con energía nula. Para soluciones con energía finita, uno obtiene para el campo $\theta(x,t)$

la expresión asintótica $\lim_{|x|\to\infty} |\theta| = A$. Donde $A = \theta_n$ es la constante que denota los mínimos o "ceros" del potencial $U = (1 - cos\theta)$. Las soluciones de la ecuación SG con energía finita deben aproximarse a los valores de θ_n. Entonces se asocia con cada una de estas soluciones una carga especial que se llama "carga topológica" y se determina por los valores del campo en los infinitos positivo y negativo de la coordenada espacial

$$Q = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right) dx = n_1 - n_2. \tag{2.53}$$

Estas cantidades (2.53) proveen estabilidad a los solitones topológicos. Algunas de éstas soluciones se les denomina "kinks" o escalones. El flujo correspondiente de la carga Q se define de forma semejante al flujo de cargas en electrodinámica:

$$j^{\mu} = \frac{1}{2\pi} \varepsilon^{\mu\nu} \partial_{\nu} \theta, \tag{2.54}$$

con una divergencia que se hace cero: $\partial_{\mu} j^{\mu} = 0$ y donde como es usual $\varepsilon^{\mu\nu}$ es el tensor antisimétrico.

La otra forma canónica reducida de la ecuación de Sine-Gordon es la siguiente:

$$\theta_{xt} = sen\theta. \tag{2.55}$$

Un método de resolver la Ec. (2.55) fue creado por Bäcklund (1880). Esta transformación ha influido notoriamente en la teoría actual para obtener soluciones de ciertas ecuaciones diferenciales nolineales. Sea que tenemos la siguiente ecuación diferencial

$$\theta_{\xi\tau} = F(\theta), \tag{2.56}$$

expresada en las coordenadas características $\xi = (x - t)/2$ y $\tau = (x + t)/2$. La ecuación (2.56) permite la transformación de Bäcklund (TB) así como

también la auto-transformación de Bäcklund (TB). La primera relaciona soluciones de dos distintas ecuaciones y la segunda a soluciones de una misma ecuación. La Ec. (2.32) admite la TB cuando se cumple la siguiente condición

$$\dot{F(u)} + \alpha^2 F(u) = 0, \tag{2.57}$$

para algún valor de α. Los detalles de los cálculos los podemos encontrar en (Rogers y Shadwick, 1982).

Las transformaciones de Backlund se muestran simétricos para el caso particular de la ecuación de Sine-Gordon (2.56). Supongamos que tenemos dos soluciones independientes $u = u(\xi, \tau)$ y $v = v(\xi, \tau)$ de la Ec. (2.56), además consideramos el siguiente par de ecuaciones:

$$\frac{\partial u}{\partial \xi} = u_\xi = f(v), \tag{2.58}$$

$$\frac{\partial v}{\partial \tau} = v_\tau = g(u). \tag{2.59}$$

Con el objetivo de separar la ecuación de Sine-Gordon en dos ecuaciones, diferenciamos las ecuaciones anteriores con respecto a ξ y a τ

$$(u_\xi)_\tau = \frac{\partial}{\partial \tau} f(v) = \left(\frac{\partial}{\partial v} f(v)\right) \frac{\partial v}{\partial \tau} = (f(v))_v g(u), \tag{2.60}$$

$$(v_\tau)_\xi = \frac{\partial}{\partial \xi} g(u) = \left(\frac{\partial}{\partial u} g(u)\right) \frac{\partial u}{\partial \xi} = (g(u))_u f(v). \tag{2.61}$$

Después de cierta álgebra considerando la separación en dos ecuaciones independientes, se encuentra

$$f(v) = asenv, \tag{2.62}$$

$$g(u) = bcosu, \tag{2.63}$$

si $b = 1/a$, y podemos ver que:

$$F(u+v) = (f(v))_v g(u) + (g(u))_u f(v) = cos(v).cos(u) - sin(v).sin(u). \quad (2.64)$$

Si hacemos ahora que dos soluciones independientes de la ecuacion (2.56) con $F(\theta) = sin\theta$, sean $\theta = u + v$ y $\bar{\theta} = u - v$, entonces

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{2}(\theta + \bar{\theta}), \\ v &= \frac{1}{2}(\theta - \bar{\theta}), \end{aligned}$$

y se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones acopladas:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\theta + \bar{\theta})_\xi &= asin\frac{1}{2}(\theta - \bar{\theta}), \\ \frac{1}{2}(\theta - \bar{\theta})_\tau &= (1/a)sin\frac{1}{2}(\theta + \bar{\theta}). \end{aligned} \quad (2.65)$$

el cual contiene al par de soluciones relacionadas con la ecuación de Sine - Gordon (2.55). Estas ecuaciones (2.65), constituyen las transformaciones de Bäcklund.

Veamos una solución particular a la ecuación de Sine-Gordon aplicando el resultado anterior. Supongamos que $\bar{\theta} = 0$, por consiguiente obtenemos

$$\begin{aligned} \partial_\xi \theta &= 2\alpha sin(\theta/2), \\ \partial_\tau \theta &= (2/\alpha)sin(\theta/2). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Introduciendo nuevas variables

$$z = \alpha\xi + \tau/\alpha, \quad s = \alpha\xi - \tau/\tau, \quad (2.67)$$

el sistema de ecuaciones (2.66) se reescribe de la siguiente manera

$$(\partial_z + \partial_s)\theta = 2sin\frac{\theta}{2}, \quad (2.68)$$

$$(\partial_z - \partial_s)\theta = 2sin\frac{\theta}{2}. \quad (2.69)$$

Sumando y restando a los componentes del anterior sistema obtenemos:

$$\partial_z\theta = 2sin\frac{\theta}{2}, \quad \partial_s\theta = 0. \tag{2.70}$$

La integración de este sistema produce la solución

$$tan\frac{\theta}{4} = exp\left(\alpha\xi + \frac{\tau}{\alpha} + \delta\right), \tag{2.71}$$

donde δ es alguna constante de integración. Finalmente, invirtiendo la expresión anterior encontramos la solución tipo kink o escalón:

$$\theta = 4Arctan\left[exp(\gamma(x - x_0 - Vt))\right], \tag{2.72}$$

siendo $V = (1/\alpha - \alpha)/(1/\alpha + \alpha)$ la velocidad de la solución kink y $\gamma(1/\alpha + \alpha)/2 = (1 - V^2)^{-1/2}$.

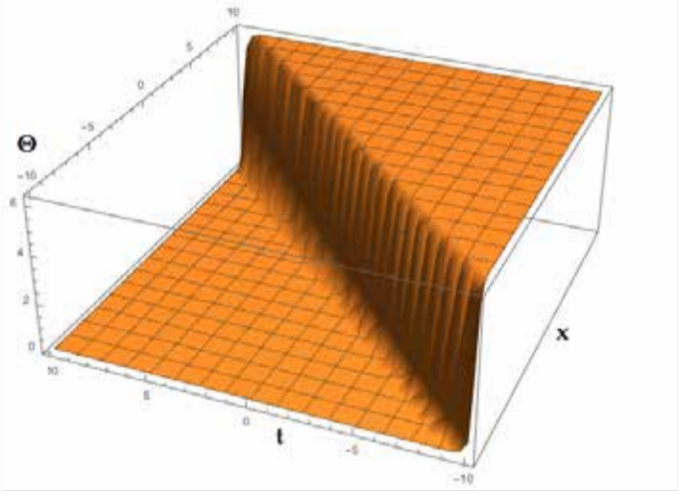


Figura 2.6. *Solucion escalon de la ecuación de SG con* $\alpha = 0{,}1; V = 0{,}5$.

Conociendo la solución kink se puede obtener la solución 2-kink, etc. En la figura (2.6) se tiene una representación gráfica de este solitón tipo kink.

3. INTEGRABILIDAD, DISPERSIÓN INVERSA, CARGAS TOPOLÓGICAS

En esta sección seguiremos la explicación propuesta por Makhankov (1990) con respecto a la integrabilidad de ecuaciones diferenciales no lineales que soportan solitones: *"Un sistema integrable"* es un sistema que posee la representación de Lax (o, en un sentido más reciente, la representación de la curvatura cero), que tiene un número contable de integrales de movimiento. Para investigar la dinámica de este sistema uno puede aplicar el método de transformada espectral inversa, el problema de Riemann, el problema $\bar{\partial}$, y el método de integración de la zona-finita". A este tipo de integrabilidad se le denomina integrabilidad-S. Hay otro tipo de integrabilidad llamada integrabilidad-N que ocurre cuando los sistemas dinámicos pueden ser resueltos por un cambio de variables conveniente o por un "*ansatz*" apropiado.

3.1. Integrabilidad

A un sistema completamente integrable lo llamaremos sistema integrable Hamiltónico, para el cual es posible encontrar las variables canónicas de acción y del ángulo y uno puede reescribir el Hamiltoniano del sistema en términos de estas variables. Explicaremos las propiedades fundamentales de las ecuaciones integrables usando como un ejemplo *la ecuación no lineal de Schrödinger* (NLSE). El formalismo de Hamilton para la ecuación de Schrödinger no lineal es simple y natural. La NLSE a la que nos referimos es

$$i\partial_t\psi + \partial_x^2\psi + 2g\,|\psi|^2\,\psi = 0, \tag{3.1}$$

donde $\psi(x,t)$ es una función en general compleja. El signo de $2g$ de esta ecuación puede representar ambos tipos de autointeracción: la interacción repulsiva $(+)$ y la atractiva $(-)$. Las variables de campo $\psi(x), \bar{\psi(x)}$, generan el conjunto de variables canónicas conjugadas. Por lo tanto, para el sistema (3.1) el corchete de Poisson (en su forma generalizada para el caso continuo) estará definido como

$$\{\psi(x),\psi(y)\} = \{\bar{\psi}(x),\bar{\psi}(y)\} = 0, \quad \{\bar{\psi}(x),\bar{\psi}(y)\} = i\delta(x-y). \tag{3.2}$$

Estas ecuaciones dan la posibilidad de definir una estructura de Poisson en el álgebra de observables en algún espacio fase M. Éstos son funcionales escalares analíticos continuos que satisfacen el corchete de Poisson. Para concretar tomamos dos observables F y G. Entonces

$$\{F,G\} = i\int_{-\infty}^{\infty}\Big(\frac{\delta F}{\delta\psi(x)}\frac{\delta G}{\delta\bar{\psi}(x)} - \frac{\delta F}{\delta\bar{\psi}(x)}\frac{\delta G}{\delta\psi(x)}\Big)dx, \tag{3.3}$$

en el cual $\frac{\delta F}{\delta\psi(x)}$, $\frac{\delta G}{\delta\bar{\psi}(x)}$ son las derivadas variacionales y son funciones generalizadas. En consecuencia, podemos decir que tenemos una estructura simpléctica en el espacio fase M cuya 2-forma no degenerada cerrada Ω (forma simpléctica) tiene la forma (Novikov 1992, Takhtajan y Fadeev, 1986)

$$\Omega = i\int_{-\infty}^{\infty} d\bar{\psi}(x)\wedge d\psi(x)dx. \tag{3.4}$$

Un observable importante y crucial es el Hamiltoniano que para nuestro caso específico es

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} dx\left\{\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2 - \mathrm{g}\left|\psi\right|^4\right\}. \tag{3.5}$$

El funcional genera el grupo paramétrico de transformación en el espacio fase M, en otras palabras, es el generador del grupo translacional en el tiempo con las ecuaciones hamiltónicas

$$\partial_t\psi = \{H,\psi\} = -i\frac{\delta H}{\delta\bar{\psi}};\quad \partial_t\bar{\psi} = \{H,\bar{\psi}\} = i\frac{\delta H}{\delta\psi}.$$

Junto con el Hamiltoniano H (3.5) uno puede usar también los funcionales

$$N = \int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi\right|^2 dx, \tag{3.6}$$

$$P = \frac{1}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\bar{\psi} - \frac{\partial\bar{\psi}}{\partial x}\psi\right). \tag{3.7}$$

Las transformaciones canónicas que generan los funcionales N y P corresponden a la transformación de fase $\psi(x)\rightarrow e^{i\phi}\psi(x)$ que tiene el significado de número de partículas y las traslaciones a lo largo de la coordenada de espacio $x\psi(x)\rightarrow\psi(x+a)$ que están relacionadas con el impulso. No es difícil demostrar las siguientes relaciones

$$\{H,P\} = \{H,P\} = 0, \tag{3.8}$$

$$\{N,P\} = 0. \tag{3.9}$$

Para definir el sistema dinámico uno debe también especificar las condiciones de frontera. Consideraremos, por ejemplo, la condición de frontera trivial:

$$\psi(x,t) \to 0 \text{ para } |x| \to \infty. \tag{3.10}$$

Asumimos que $\psi(x,t)$ es una función suave, decreciente en el infinito espacial, junto con sus derivadas, más rápido que cualquier potencia de $|x|^{-1}$. Como una consecuencia de la relación (3.6) y(3.7) los funcionales N y P reciben el nombre de integrales de movimiento, lo que significa subsecuentemente que estas integrales están en involución ya que sus corchetes de Poisson desaparecen.

3.2. Método de dispersión inversa

El método de dispersión Inversa, en general, permite resolver ecuaciones diferenciales parciales no lineales pero que son totalmente integrables. A grandes rasgos, lo que se hace es encontrar o determinar un sistema de ecuaciones espectrales asociadas a la ecuación no lineal y con base en una solución particular generar nuevas soluciones de tipo solitón. Estas ecuaciones espectrales no son otra cosa que ecuaciones diferenciales lineales, de las que se obtienen los conocidos pares de operadores de Lax, y que al ser integradas precisamente tienen como condición a la misma ecuación diferencial no lineal que se busca resolver.

Las ecuaciones no lineales diferenciales en las que se aplicó por primera vez este método fueron la ecuación de Korteweg-de Vries y la de Sine-Gordon, estas ecuaciones admiten soluciones de tipo onda solitónica. También es posible aplicar este método para resolver ecuaciones de orden superior como

en el caso de la ecuación de Einstein para gravitación (Belinski y Verdaguer, 2005).

Siguiendo la tradición histórica, las principales ideas del método de dispersión inversa se mostrarán tomando como ecuación diferencial principal a la ecuación de Korteweg-de Vries

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0. \tag{3.11}$$

Esta ecuación describe el movimiento de fluidos en medios de poca profundidad. Específicamente, describe la evolución en la transferencia de calor a través de fluidos (por convección). Cuando la dispersión de ondas de este flujo y la convección entran en un cierto equilibrio se forma una onda solitaria, admitiendo de este modo soluciones de tipo solitónico.

3.2.1. Ley de conservación de KdV y transformación de Miura

Después de casi 70 años desde su aparición, fue entre 1965 y 1967 que Gardner, Zabusky y Kruskal (Gardner, Greene, Kruskal y Miura 1967, Gardner, Greene, Kruskal y Miura, 1974) redescubrieron a la ecuación de KdV para probar que tenía soluciones con un comportamiento regular, un comportamiento como el que tienen las ondas solitarias. Se puede obtener cierta información de las propiedades de las ecuaciones de estas ondas no lineales a través del análisis de sus leyes de conservación, que son relaciones de la forma:

$$P_t + Q_x = 0. \tag{3.12}$$

Aquí, P es la densidad conservativa y Q su correspondiente flujo. El sentido físico de estas leyes de conservación, aplicadas en ondas, no es más que la conservación de la masa y el impulso. No es de extrañar que si las ondas solitarias (solitones) se caracterizan por mantener su forma después de una perturbación, éstas deban regirse por ciertas leyes de conservación. Por ejemplo, la ecuación de KdV (3.11) no es más que una ley de conservación

$$u_t + (3u^2 + u_{xx})_x = 0. \tag{3.13}$$

A mediados de 1960 se postuló que el número de leyes de conservación podría ser infinito (Miura 1968). Esta hipótesis fue corroborada por Gardner, quien introdujo la transformación

$$u = w + i\varepsilon w_x + \varepsilon^2 w^2, \tag{3.14}$$

con ε como un parámetro arbitrario. Al reemplazar la Ec. (3.14) en (3.13) se obtiene

$$w_t + 6(w + \varepsilon^2 w^2)w_x + w_{xxx} = 0. \tag{3.15}$$

Para la función w se cumplen las condiciones de frontera nulas en el infinito; por tal motivo, integrando la Ec. (3.15) en todo el eje x, se consigue la ley de conservación

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} w dx = 0. \tag{3.16}$$

Si expresamos ahora a w a través de una serie de potencias de ε:

$$w = w_0(u) + \varepsilon w_1(u) + \varepsilon^2 w_2(u) + ..., \tag{3.17}$$

entonces el sistema (3.15) posee infinitas integrales de movimiento

$$I_n = \int_{-\infty}^{+\infty} w_n dx. \tag{3.18}$$

Así, las tres primeras leyes de conservación resultan

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} u dx, \tag{3.19}$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 dx, \tag{3.20}$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} (u^3 - \frac{u_x^2}{2}) dx. \tag{3.21}$$

A la Ec. (3.13) se le considera una ecuación de un sistema hamiltónico integrable con infinitos grados de libertad. De mecánica clásica sabemos que, si el Hamiltoniano de un sistema de N grados de libertad posee N integrales de movimiento independientes entonces, ese sistema es integrable y permite una solución exacta mediante nuevas variables canónicas llamadas acción y ángulo (Novikov 1995, Rajaraman 1982). Así, esto significa entonces que existe la posibilidad de obtener las soluciones exactas analíticas de la Ec. (3.11). El método que permite la integración exacta de esta ecuación fue descubierto por Gardner, Green, Kruskal y Miura (GGKM) en 1967 y es precisamente el Método de Dispersión Inversa MDI).

Veamos ahora la siguiente transformación

$$u + \frac{1}{2\varepsilon^2} = i\frac{\psi_x}{\varepsilon\psi}, \tag{3.22}$$

al aplicarla a la ecuación KdV (3.13) ésta se transforma en

$$\psi_{xx} + (u + \lambda)\psi = 0, \tag{3.23}$$

con $\lambda = \frac{1}{4\varepsilon}^2$. Esta ecuación es análoga a la ecuación de Schrödinger estacionaria de la mecánica cuántica con el potencial $V = -u(x,t)$, que es la incógnita de la Ec. (3.13), con "energía" λ. Aquí, t juega el papel de

un parámetro más. Usando las ideas y el aparato matemático de la mecánica cuántica Gardner,Greene, Kruskal y Miura (1974) crearon un método de solución exacta de la ecuación de KdV que fue llamado *Inverse scattering transform*. Es decir, que para integrar a la ecuación no lineal de KdV, el problema espectral de valores propios que se le asocia, posee la forma de una ecuación estacionaria y unidimensional de Schrödinger para la mecánica cuántica. El siguiente paso, según el MDI, es encontrar el valor de la incógnita $V = -u(x,t)$ conociendo los datos de la dispersión del problema mecánico cuántico asociado al mismo. La analogía con la mecánica cuántica es totalmente formal; tiene un carácter matemático mas no físico. Para resolver el problema inverso en mecánica cuántica se necesita conocer a priori los *datos de la dispersión*. Éstos son los siguientes magnitudes: espectro discreto de los autovalores (valores discretos de niveles energéticos), constantes de norma para las autofunciones y el coeficiente de reflexión.

La Ec. (3.23) es parte del problema de autovalores y autofunciones para el operador

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + u(x). \tag{3.24}$$

Este problema, como se sabe, puede tener dos tipos de soluciones: cuando el espectro energético es discreto y cuando es continuo.

Sea que se tiene el espectro discreto: $\lambda = \lambda_n = -\kappa_n^2$ con $n = 1, 2, ..., N$, entonces la función de onda ψ_n, tendrá la norma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(x)dx = 1. \tag{3.25}$$

Por lo tanto, los coeficientes de norma se calculan directamente de

$$\psi \approx c_n(0)e^{8\kappa_n^3 t - \kappa_n x} = c_n(t)e^{-\kappa_n x}, \tag{3.26}$$

lo que produce

$$c_n(t) = c_n(0)e^{8\kappa_n^3 t}. \tag{3.27}$$

Considere ahora que el espectro es continuo, es decir, si $\lambda = \kappa^2 > 0$. Cuando $x \to \infty$, la solución de la ecuación de Schrödinger (3.23) es una combinación lineal de exponentes $\exp(\pm i\kappa x)$. Sea así que en las fronteras en el eje x se cumplan las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} \psi &\sim e^{-i\kappa x} + R(\kappa, t)e^{i\kappa x}, \quad x \to \infty, \\ \psi &\sim T(x, t)e^{-i\kappa x}, \quad x \to -\infty. \end{aligned} \tag{3.28}$$

La Ec. (3.27) significa que ψ es una función armónica, una onda plana que se acerca al potencial $V = -u(x, t)$ desde $x = \infty$. Alguna parte de la onda pasa a través del potencial con el coeficiente de transmisión T y otra parte se refleja con un coeficiente R de reflexión. El coeficiente de trasmisión se torna como una integral de movimiento y el coeficiente de reflexión será:

$$R(\kappa, t) = R(\kappa, 0)e^{8i\kappa^3 t}. \tag{3.29}$$

El espectro continuo corresponde a la parte no solitónica de la ecuación, que son perturbaciones débiles no lineales también llamadas colas oscilantes.

Al principio se soluciona el problema de autovalores para la Ec. (3.23) con el potencial $u_0(x)$ y se define un conjunto de magnitudes que en mecánica cuántica toman el nombre de *datos de dispersión*:

$$S = \{\lambda_n, c_n;\ n = 1, ..., N;\ R(k),\ k^2 > 0\}. \tag{3.30}$$

Después, usando (3.27) y (3.30) se obtienen los valores de $c_n(t)$, $R(k, t)$ para cualquier tiempo. Ahora queda reconstruir el potencial de la ecuación

de Schrödinger mediante los datos de la dispersión $S(t)$, es decir resolver el problema inverso. En la mecánica cuántica este problema se resuelve y para ello sólo hace falta la ecuación integral lineal de Gelfand Levitan y Marchenko (Gelfand y Levitan, 1951,1952; Marchenko 1955):

$$K(x,y;t) + B(x+y;t) + \int_x^{\infty} B(y+z)K(x,z;t)dz = 0, \tag{3.31}$$

donde

$$B(x;t) = \sum_{n=1}^{N} c_n(t)e^{-k_n x} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} R(k,t)e^{ik_n x}dk. \tag{3.32}$$

De la Ec. (3.31) usando (3.32) se encuentra la función $K(x,y;t)$ con la que, finalmente, se le da forma al potencial incógnita,

$$u(x,t) = 2\frac{d}{dx}K(x,x;t). \tag{3.33}$$

Entonces, la solución $u(x,t)$ de la Ec. (3.11), con una condición inicial $u(x,0) = u_0(x)$, se obtiene según el esquema que se muestra en la figura (3.1).

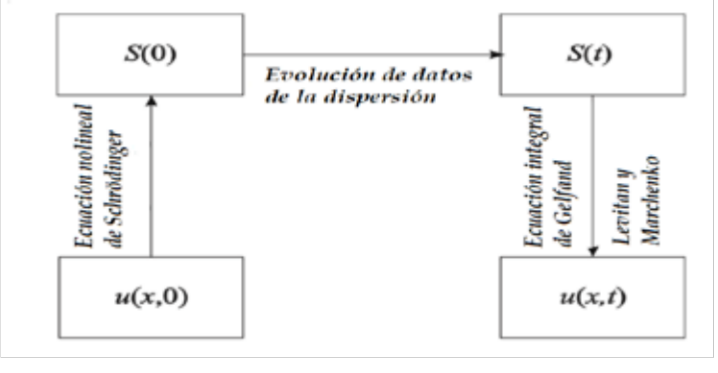


Figura 3.1. *Esquema para resolver la ecuación de evolución mediante el método de dispersión inversa, usando inicialmente* $u(x,0)$ *y datos de dispersion para llegar a obtener al potencial* $u(x,t)$.

3.2.2. Formalismo de Lax

La generalización del método del problema inverso fue realizada por Lax (1968); con el uso de unos operadores Lax simplificó significativamente todo el cálculo que involucraba al problema de dispersión inversa. Lo que sigue es mostrar la forma de estos operadores y mostrar el problema espectral completo al que pertenece (3.23). Ya se había mencionado que esta ecuación era parte del problema espectral asociado a la ecuación de KdV para un operador. Entonces, con la finalidad de representar a (3.13) en forma de una condición de compatibilidad para este problema, véase a (3.23) como un sistema de ecuaciones lineales

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi, \tag{3.34}$$

$$\psi_t = \hat{A}\psi. \tag{3.35}$$

donde los operadores lineales $\hat{L}$ y $\hat{A}$ tienen la forma

$$\hat{L} = -\hat{D}^2 + u(x,t), \tag{3.36}$$

$$\hat{A} = -4\hat{D}^3 - 3u_x - 6u\hat{D} + C, \tag{3.37}$$

con $\hat{D} = \frac{\partial}{\partial x}$ y $C = const.$ Véase que el operador $\hat{L}$ es exactamente el mismo que se había mencionado antes para la Ec. (3.23). Al diferenciar la Ec. (3.34) con respecto al tiempo, y usando (3.35), se obtiene

$$L_t\psi + \hat{L}\hat{A}\psi = \lambda\hat{A}\psi = \hat{A}\lambda\psi = \hat{A}\hat{L}\psi. \tag{3.38}$$

Reordenando términos y factorizando a ψ

$$\hat{L}_t\Psi = \left(\hat{A}\hat{L} - \hat{L}\hat{A}\right)\Psi, \tag{3.39}$$

finalmente obtenemos:

$$L_t = \left[\hat{A}, \hat{L}\right], \tag{3.40}$$

siendo $\left[\hat{A}, \hat{L}\right] = \hat{A}\hat{L} - \hat{L}\hat{A}$ el conmutador entre los operadores $\hat{L}$ y $\hat{A}$. La ecuación anterior se denomina ecuación de los pares de Lax. Más adelante se verá que esta ecuación de Lax no es más que la misma condición de compatibilidad, existencia o integrabilidad del sistema (3.34) y (3.35).

Ahora, además de la Ec. (3.37), puede haber otras formas del operador $\hat{A}$, que conserven también el espectro del operador $\hat{L}$?. Un par de Lax no es único; dado un par de operadores de Lax como ahora $\hat{A}$ y $\hat{L}$ siempre se puede construir una familia de pares de Lax. En tal caso, para cada uno de ellos, la Ec. (3.40) conllevar ía a una ecuación de n-derivadas parciales que se integrarían por el MDI.

Lax propuso un grupo de estos posibles operadores $\hat{A}$ con sus n-derivadas de la siguiente manera (Zaslavsky y Sagdeev, 1988).

$$\hat{A}_n = -C_n\left(\hat{D}^{2n+1} + \sum_{j=1}^{n}\left(b_j\hat{D}^{2j-1} + \hat{D}^{2j-1}b_j\right)\right) + C, \tag{3.41}$$

donde b_j son funciones de u y sus derivadas con respecto a x que se escogen de tal manera que la Ec. (3.40) no tenga al operador $\hat{D}$. Considérese por ahora a la constante de integración $C = 0$. En el caso más simple cuando $n = 0$ la Ec. (3.37) se reduce a

$$\hat{A} = \hat{D}. \tag{3.42}$$

Entonces, sustituyendo (3.42) en (3.40), ésta termina siendo la ecuación lineal de transporte

$$u_t + u_x = 0, \tag{3.43}$$

y si se elige a $n = 1$, $b_1 = \frac{3u}{4}$ y $c_1 = 4$, la ecuación (3.40) se transforma en la ecuación de KdV (3.11). En este último caso se comprobaría que KdV es una ecuación no lineal totalmente integrable y que por lo tanto se le puede aplicar el MDI para hallar sus soluciones. En lo sucesivo, al ir escogiendo los operadores $\hat{A}_n$ con valores superiores en n se van a ir obteniendo ecuaciones de evolución que contengan a las derivadas con respecto a x, por lo que al problema de autovalores y auto-funciones (3.34) se le asocia un grupo de ecuaciones integrables llamadas ecuaciones de la jerarquía de KdV.

Así como se utilizó a los operadores $\hat{A}$ y $\hat{L}$, de acuerdo con Lax, para representar a KdV en forma de (3.40) o viceversa para un problema de autovalores y autofunciones como el sistema (3.34) y (3.35), de forma similar se debería poder representar a cualquier otra ecuación diferencial parcial no lineal, a partir de un sistema de ecuaciones como éste, en forma de una condición de consistencia como la Ec. (3.40) para decir que la ecuación no lineal es totalmente integrable y así volverse candidata para encontrar sus soluciones exactas por el MDI.

3.3. Invariantes topológicas

El significado de características topológicas será expuesto tomando como ejemplo al sistema Sine-Gordon (SG) por su aplicación a diferentes teorías de campos (Makhankov, Rybakov, Saniuk, 1993).

Sea que tenemos un campo escalar definido de la siguiente manera

$$\varphi(x,t) = \exp(i\theta(x,t)). \tag{3.44}$$

En el caso general, el campo clásico φ que toma sus valores en un conjunto M denominado "variedad", puede ser analizado por medio de un mapeo continuo del espacio-tiempo $X = \{x, t\}$ en la variedad M. Matemáticamente esto se representa como $\varphi : X \to M$. Ahora, si $M = R^1$, donde R^1 es un eje, entonces φ es un campo escalar, pero si $M = R^n$, entonces φ es un campo vectorial, etc. En el caso del modelo SG en dimensiones $1+1$, M debe ser una circunferencia S^1. En cada instante de tiempo tenemos $X = R^1$ y $M = S^1$, entonces $\varphi : R^1 \to S^1$. El campo clásico del modelo es una función (3.44): $\varphi = exp\{i\theta(x, t)\}$. La condición de frontera: $\varphi \to const$ si $|x| \to \infty$, nos lleva a $\theta \to 0(\text{mod } 2\pi)$ si $|x| \to \infty$. En otras palabras, tenemos $\theta(2\pi) = \theta(0)+2\pi n$. Vemos claramente que θ no está definida de forma única. Para resolver este problema, igualamos los ángulos θ que se diferencian entre sí por $2\pi n$, donde "n" $\sim Q$ es un entero que nos indicará el número de veces que R^1 se enrolla alrededor de S^1. El eje real R^1, será compacta, ya que los puntos $x \to \pm\infty$ son mapeados en el polo norte de la circunferencia S^1. Debido a la vinculación de R^1 con $\pm\infty$ se obtiene la circunferencia $S^1 : R^1 U\{\infty\} = S^1$ Entonces, nuestro mapeo es del tipo: $S^1 \to S^1$. Si este es el caso, podemos obtener un cuadro útil para la descomposición del espacio del mapeo en clases homotópicas.

En teoría clásica de campos se asume que la dinámica del campo está dada por el funcional de acción S y la evolución del campo φ en el tiempo, se restringe a la ecuación de Euler-Lagrange. Asumiendo eso para cada tiempo t_1, el estado del sistema se describe por la función φ_1 y después de algún tiempo en el punto t_2 por la función φ_2. Entonces, la función de estado del sistema puede ser dada como un mapeo del espacio $R^3 = \{x/t = const\}$

dentro del espacio (variedad) M: $\varphi_{1,2} : R^3 \to M$. Una solución continua φ de la ecuación de campo liga dos estados φ_1 y φ_2 para t_1 y t_2. En términos de homotopía podemos decir que: dos mapeos φ_1 y φ_2 son homotópicos ($\varphi_1 \sim \varphi_2$) cuando existe alguna función continua φ que es la homotópica, que traslada el mapeo φ_1 a φ_2. En otras palabras, hay una deformación continua que traslada el punto φ_1 a otro punto φ_2 y puede ser representada como $\varphi : R^3 \otimes T \to M$ siendo $T\,[t_1, t_2]$ un segmento de un eje temporal (Rybakov, Sanyuk y Makhankov 1989).

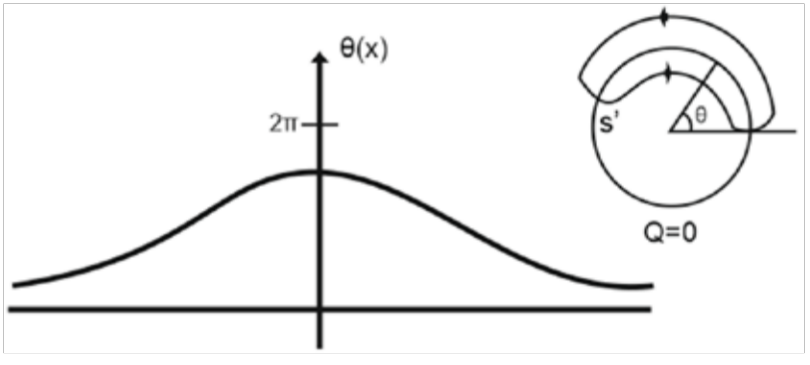


Figura 3.2. *Esquema representativo de una solución pulsón y su correspondiente esquema homotópico.*

Regresando a nuestro caso. Si la función θ toma valores iguales a cero en los puntos $\pm\infty$, entonces la solución correspondiente de la ecuación SG es del tipo de los "pulsones". La representación del eje R^1 en la variedad S^1, será un anillo cerrado que no abraza completamente la circunferencia S^1, figura (3.2). Esta cuerda puede ser transformada en forma continua hasta formar un solo punto en S^1.

Si ahora $\theta(-\infty) = 0$ y $\theta(+\infty) = 2\pi$, entonces la representación de R^1 en S^1 será una cuerda que abraza a S^1 completamente y esto no se puede en forma continua convertir en un punto de S^1. Esto corresponde a $2\pi - kink$ solución de Sine-Gordon, figura (3.3).

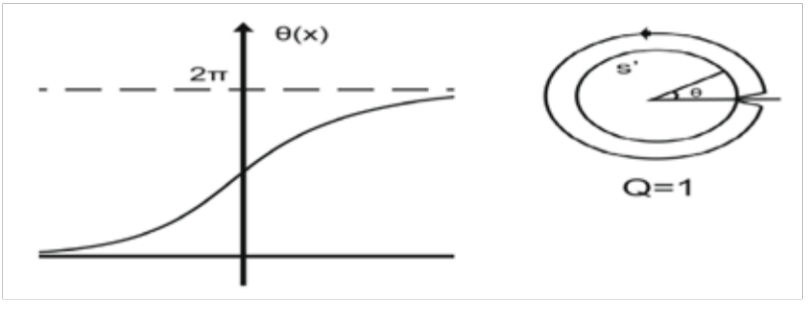


Figura 3.3. *Solitón tipo kink, R^1 abraza completamente a S^1, da una vuelta completa.*

Cuando las condiciones de frontera se toman de la siguiente manera: $\theta(-\infty) = 0$, $\theta(+\infty) = 4\pi$, entonces la representación del eje R^1 doblemente se enrosca en la configuración de campo S^1, figura (3.4).

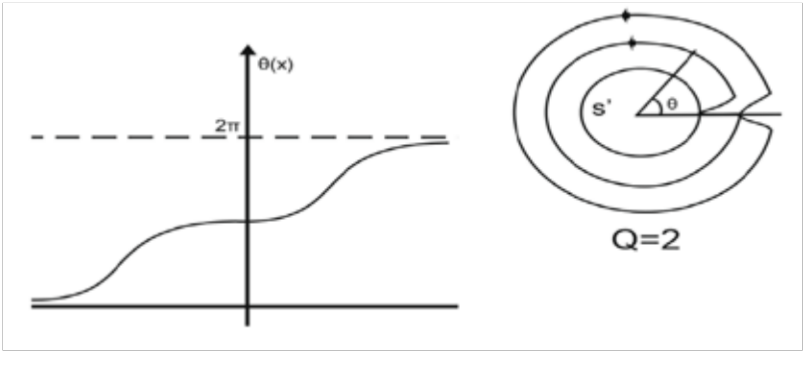


Figura 3.4. *La solución típica de doble escalón, R^1 enrolla dos veces a S^1.*

Este mapeo ya no puede ser convertido ni al primero ni al segundo caso y corresponde a las soluciones biónicas. Todos estos mapeos pertenecen a diferentes clases de equivalencia (de homotopía). En calidad de índice topológico Q (variable homotópica) tomamos entonces el número de veces que la imagen de R^1 se "enrosca" en la variedad S^1. Los mapeos con igual índice topológico son homotópicos. Así, de una manera natural, aparece en esta situación simple, la variable homotópica o índice topológico Q que es el grado de mapeo que toma valores definidos en cada uno de las clases homotópicas. Así llegamos a la idea de algebraización de problemas topológicos que llevaron a Poincaré a la creación de la topología algebraica. Entonces, a estas soluciones, con cargas topológicas distintas, es imposible transformarlas en soluciones en las que las cargas topológicas sean iguales. Para esto se necesitaría una energía semi-infinita. El "espacio" de este modelo de $1 + 1$ es una línea con dos puntos en el infinito como fronteras. La existencia de los solitones se debe a las propiedades topológicas del espacio (en particular, de su frontera que en este caso es un conjunto discreto). Este cuadro sencillo a primera vista no es tal para otros tipos de Lagrangianos, pero cualitativamente la explicación es la misma. La estabilidad de estos solitones en teorías no lineales de campo se debe a la topología de sus vacíos (mínimos de potencial). Esto significa que existe una ley de conservación. La corriente de estas cargas topológicas o índices Q no es del mismo tipo que las corrientes de Nöther. Las igualdades a cero de sus divergencias aparecen independientemente de las ecuaciones de movimiento del sistema.

En cuanto a cuestiones relacionadas con cosmología, los defectos topológicos están siendo investigados con mucho énfasis en su relación con

los procesos inflacionarios. Por mucho tiempo, los defectos topológicos y la inflación fueron considerados opuestos unos a otros incluso como excluyentes entre sí como fuentes incompatibles de perturbaciones de densidad. Pero en los últimos estudios hechos al respecto se nota una clara interrelación entre ellos. Por ejemplo, en aquellas teorías donde la inflación es posible cercana a un máximo local del potencial efectivo, los defectos topológicos se expanden y pueden copiosamente producirse durante la inflación. Es más, cada defecto topológico puede crear muchos otros defectos topológicos de inflación que fueron llamados defectos topológicos fractales (Linde y Linde 1994). Las paredes del dominio podrian encuentrarse en todos los niveles de organización del universo. En todo caso, los físicos teóricos estudian hoy "paredes" desde dimensiones pequeñas en teoría de partículas elementales hasta las más grandes como las del universo en expansión, en teorías cosmológicas.

En presencia de rozamiento, el solitón puede aminorar su movimiento, al mismo tiempo disminuir su altura para luego descomponerse. Esta degradación del solitón sucede de acuerdo con la ley exponencial. El tiempo de vida del solitón es inversamente proporcional a la fuerza de rozamiento. Sin embargo, el solitón de Frenkel-Kantorova bajo rozamientos sólo disminuye su velocidad hasta detenerse. Una vez detenido, puede vivir prácticamente para siempre. Este solitón está gobernado por la ecuación de Sine-Gordon. Por ejemplo, las dislocaciones pueden vivir hasta el final de la "vida" del cristal. Esto se debe a que su estabilidad tiene naturaleza topológica.

Finalmente mencionamos que existe un punto de vista solitónico relativo a las estrellas: cualquier estrella estable es por definición un solitón no topológico. Su configuración de equilibrio ha sido evaluada con base en

la ecuación de estado de la materia normal bajo atracción gravitatoria. Intensamente se investigan teorías en donde interactúan campos escalares (como los de Sine-Gordon) con dilatones, lo cual puede producir la formación de huecos negros a partir de solitones. El rompimiento de la simetría y el consecuente cambio de fase en la edad temprana del universo pueden producir concentraciones de energía localizada topológicamente estables conocidos como defectos. Estos defectos pueden ser puntos (monopolos), líneas (cuerdas cósmicas) o superficies (paredes de dominios). Estas variaciones dependen de la homotopía del vacío de la fase rota (Rajaraman 1987, Shin and Soh 1995, 't Hooft, 1974).

.

4. SISTEMAS INTEGRABLES: ECUACIÓN NO LINEAL DE SCHRÖDINGER Y DE SINE-GORDON

En este capítulo abordaremos dos sistemas clásicos integrables que son: ecuación no lineal de Schrödinger (NLSE) y la ecuación de Sine-Gordon (SG). La ecuación no lineal de Schrödinger es uno de los modelos "universales" en la ciencia moderna. La ecuación de Sine-Gordon aparece por primera vez en la teoría de superficies de curvatura negativa dentro de la geometría diferencial en 1870. Años más tarde se desarrolló el Teorema Fundamental de Superficies, con el que, aplicado a esta ecuación, es posible construir superficies de un solitón.

Resulta que la NSE y la SG tienen propiedades semejantes, es decir, las envolventes de sus soluciones en forma de ondas viajeras son solitones. Existen varios métodos para resolver la NLSE y la SG. Entre ellos están la IST, el método de la transformación de Bäcklund, el método de Hirota, etc.

4.1. La integrabilidad exacta de la ecuación no lineal de Schrödinger y el método de Ablowitz-Kaup-Newell-Segur

La NLSE aparece en muchas ramas de la física: en teoría de campos cuánticos no lineales, materia condensada y física de plasma, óptica no lineal, electrónica cuántica, mecánica de fluidos, teoría de la turbulencia, transiciones de fase, biofísica formación de estrella, y en matemáticas aplicadas, donde se investigan sus simetrias, por ejemplo en (Agüero y Alvarado 1999).

Como ya lo mencionamos, el concepto de solitón se desarrolló para sistemas no lineales y dispersivos que han sido autónomos (descritos por ecuaciones autónomas con coeficientes de dispersión y no linealidad constantes); es decir, el tiempo sólo ha desempeñado el papel de la variable independiente y no ha aparecido explícitamente en la ecuación de evolución no lineal.

La NLSE es una ecuación diferencial partial

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + |\psi|^2\psi = 0, \tag{4.1}$$

donde $\psi(x,t)$ es una función compleja, dependiente del tiempo t y en este caso de una coordenada espacial x, y describe la evolución espacio-temporal de un paquete de ondas plano, lentamente modulado y cuasi- monocromático que se propaga uni-direccionalmente en un medio dispersivo, no disipativo

(conservativo) y no lineal (Yang, 2010, Akhmediev y Ankiewicz, 1997, Wazwaz, 2009, Biswas y Milovic 2010).

Uno de los alcances más significativos en la teoría de ondas no lineales fue el descubrimiento hecho por Gardner, Green, Kruskal y Miura (GGKM) en 1967 del nuevo método para resolver las ecuaciones diferenciales parciales no lineales en una forma bastante general. El método fue denominado "transformación inversa de dispersión"(TID) conocido en inglés como "inverse scattering transform" (IST). Este método permitía resolver el problema de condiciones iniciales para la ecuación KdV (Gardner, Greene, Kruskal y Miura, 1967), la cual pronto se convirtió en el prototipo de las ecuaciones "solitónicas". El matemático Peter Lax en 1968 esencialmente generalizó el método de GGKM y luego se formuló la teoría rigurosa matemática por Zakharov y Shabat (Zakharov y Fadeev 1971, Zakharov y Shabat 1971) quienes mostraron que el método IST se aplica también a otras ecuaciones nolineales, como la NLSE.

Para responder a la pregunta principal: ¿cómo se puede determinar si una ecuación no lineal de evolución es integrable o no?, en el método TID se formuló un principio general de la asociación de varias ecuaciones de evolución no lineales con operadores lineales. En 1973, Ablowitz, Kaup, Newell y Segur encontraron una forma muy ingeniosa y elegante que desde entonces se llama el esquema (jerarquía AKNS) que permite encontrar las ecuaciones no lineales integrables exactamente (Ablowitz, Kaup, Newell y Segur, 1973, Newell 1985). Con cada una de estas ecuaciones se puede asociar un par de operadores matriciales diferenciales que se llama el par de Lax (1968), y desarrollar el esquema AKNS para probar su integración exacta. Si la

ecuación no lineal de evaluación tiene el par de Lax, entonces, se pueden encontrar sus soluciones solitónicas aplicando diferentes métodos, como el TID, el método de Hirota, las transformaciones de Bäcklund, etc. (Bullough y Caudrey 1980, Ablowitz y Segur 1981, Calogero y Degasperis 1982, Ablowitz y Clarkson 1991).

4.2. El par de Lax para la NLSE y el método AKNS

En el capítulo 3 también abordamos el método de dispersión inversa (MDI) pero para la ecuación KdV. El fundamento del método MDI en el esquema AKNS se basa en la siguiente observación: una ecuación no lineal de evolución aparece como resultado de la condición de compatibilidad del siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \hat{L}(x,t,\lambda)\psi, \tag{4.2}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{M}(x,t,\lambda)\psi, \tag{4.3}$$

donde

$$\psi(x,t) = \begin{pmatrix} \psi_1(x,t) \\ \psi_2(x,t) \end{pmatrix}, \tag{4.4}$$

es una función vectorial de x y t que se llama la función de dispersión. $\hat{L}$ y $\hat{M}$ son matrices 2×2 y satisfacen a la condición de compatibilidad del sistema de ecuaciones (4.2),(4.3)

$$\frac{\partial L}{\partial t} - \frac{\partial \hat{M}}{\partial x} + \left[\hat{L}, \hat{M}\right] = 0. \tag{4.5}$$

El parámetro λ es una constante compleja que se llama parámetro espectral. La forma exacta de las matrices $\hat{L}$ y $\hat{M}$ fue determinada para cada una de las ecuaciones diferenciales de evolución integrables. Siguiendo el método AKNS los escribimos de la siguiente forma

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} -i\lambda & q(x,t) \\ r(x,t) & i\lambda \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & -A \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

donde $q(x,t)$ y $r(x,t)$ son los potenciales en los cuales se realiza la dispersión de la función $\psi(x,t)$. Estos potenciales finalmente aparecen en las ecuaciones no lineales como funciones incógnitas.

Vamos a ver cómo funciona el método AKNS para la NLSE. Al sustituir las matrices (4.6), (4.7) en la ecuación matricial (4.5) obtenemos las siguientes ecuaciones para los elementos de la matriz $\hat{M}$ y los potenciales $q(x,t)$ y $r(x,t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial x} &= qC - Br, \\ \frac{\partial q}{\partial t} &= \frac{\partial B}{\partial x} + 2qA + 2i\lambda B, \\ \frac{\partial r}{\partial t} &= \frac{\partial C}{\partial x} - 2rA - 2i\lambda C. \end{aligned} \tag{4.8}$$

Usando el procedimiento estándar para la investigación del par de Lax, representamos las funciones $A(x,t,\lambda)$, $B(x,t,\lambda)$ y $C(x,t,\lambda)$ como polinomios respecto a λ

$$A = A_0 + A_1\lambda + A_2\lambda^2 + A_3\lambda^3 + ..., \tag{4.9}$$

$$B = B_0 + B_1\lambda + B_2\lambda^2 + B_3\lambda^3 + ..., \tag{4.10}$$

$$C = C_0 + C_1\lambda + C_2\lambda^2 + C_3\lambda^3 + ... \tag{4.11}$$

La NLSE se desarrolla si las series (4.9)-(4.11) se cortan en el érmino cuadrático con relación a λ.

Como sabemos, es posible obtener la ecuación KdV cuando los términos cúbicos sin términos cuadrados se toman en cuenta en las expansiones (4.9). La ecuación de Hirota (1953) se obtiene cuando las expansiones en el parámetro espectral λ se hace hasta el término cúbico. En los últimos años, las ecuaciones no lineales de orden mayor que tres (el cuarto, quinto, etc.) que pertenecen a la jerarquía AKNS han sido desarrolladas y estudiadas (Ankiewicz, Kedziora, Chowdury, Bandelow y Akhmediev 2016).

Para obtener la NLSE sustituimos las expansiones (4.9),(4.10) en las Ecs. (4.8) igualando los coeficientes de los mismos exponentes de λ, con lo cual obtenemos las siguientes ecuaciones para las componentes de los elementos matriciales:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial A_2}{\partial x} = 0,\\
&\frac{\partial A_1}{\partial x} = qC_1 - rB_1,\\
&\frac{\partial A_0}{\partial x} = qC_0 - rB_0,\\
&B_2 = C_2 = 0,\\
&\frac{\partial B_1}{\partial x} = -2qA_1 - 2iB_0,\\
&\frac{\partial C_1}{\partial x} = -2rA_1 - 2iC_0,
\end{aligned} \tag{4.12}$$

y las ecuaciones para los potenciales $q(x,t)$ y $r(x,t)$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial B_0}{\partial x} + 2qA_0, \tag{4.13}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{\partial C_0}{\partial x} - 2rA_0. \tag{4.14}$$

Utilizando las Ecs. (4.12) calculamos

$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{1}{2}\alpha_2 qr, \quad B_0 = -\frac{1}{2}\alpha_2 \frac{\partial q}{\partial x}, \\ C_0 &= \frac{1}{2}\alpha_2 \frac{\partial r}{\partial x}, \quad B_1 = iq\alpha_2, \\ C_1 &= a_2, \quad A_1 = a_1, \quad A_2 = a_2, \end{aligned} \tag{4.15}$$

donde α_1 y α_2 son unas constantes.

Aplicando la redacción aceptada en el método AKNS, $r = -q^*$, podemos reducir las Ecs. (4.12) y (4.15) de igual forma correspondiente a la NLSE

$$i\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + |q|^2 q = 0, \tag{4.16}$$

si a_1 y a_2 son constantes puramente imaginarios: $a_1 = -a_1^*$, $a_2 = -a_2^*$, para las cuales en particular tenemos $a_1 = 0$, $a_2 = -i$.

Finalmente escribimos la matriz $\hat{M}$

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \frac{i}{2}|q|^2 - i\lambda^2 & \frac{i}{2}q_x + q\lambda \\ \frac{i}{2}q_x^* - q^*\lambda & -\frac{i}{2}|q|^2 + i\lambda^2 \end{pmatrix}. \tag{4.17}$$

De la Ec. (4.17) se puede ver que el elemento matricial $C = -B^*$

4.3. Soluciones solitónicas de la NLSE

Representamos a la función incógnita de la NLSE como:

$$q(x,t) = \sqrt{\rho(x,t)}\exp\left[i\sigma(x,t)\right], \tag{4.18}$$

con $\rho(x,t)$ y $\sigma(x,t)$ siendo funciones reales. Para encontrar la solución estacionaria en t de tipo solitónico, tenemos que usar las siguientes condiciones de frontera:

(a) $|q|^2 = f(x)$ es la función exclusiva de x, tal que $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$;

(b) el valor asintótico de $|q|$ en $x = \pm\infty$ es cero.

Sustituyendo Ec. (4.18) en Ec. (4.16) obtenemos el sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho \frac{\partial \sigma}{\partial x}\right) = 0, \tag{4.19}$$

$$\frac{1}{8}\frac{d}{d\rho}\left[4\rho^2 + \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)^2\right] = \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \sigma}{\partial x}\right)^2. \tag{4.20}$$

Usando la condición de frontera (a,b) en las ecuaciones (4.19),(4.20) obtenemos:

$$\rho \frac{\partial \sigma}{\partial x} = c_1, \tag{4.21}$$

tal que

$$\sigma(x,t) = \int_0^x \frac{c_1}{\rho} dx + K_0 t + \sigma_0, \tag{4.22}$$

donde K_0 y σ_0 son constantes.

La integración de Ec. (4.20) resulta en la siguiente ecuación diferencial ordinaria para $\rho(x,t)$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)^2 = -4\rho^3 + 8K_0\rho^2, \tag{4.23}$$

Las constantes de integración $c_{1,2}$ fueron elegidas iguales a cero, de acuerdo con la condición de frontera (b). No es difícil integrar la Ec. (4.23) y encontrar su solución

$$\rho(x,t) = \kappa^2 \mathrm{sech}^2\left[\kappa(x - x_0)\right], \tag{4.24}$$

donde se introdujo la notación $K_0 = \frac{\kappa^2}{2}$ y x_0 es una constante arbitraria que representa el centro de la solución localizada.

Finalmente, la solución tiene la forma

$$q(x,t) = \kappa \text{ sech}\left[\kappa(x - x_0)\right] \exp\left(i\frac{\kappa^2}{2}t + i\sigma_0\right). \tag{4.25}$$

Ahora es posible aplicar en la solución (4.25) la transformación de Galileo

$$q'\left[T(x,t), Z(t)\right] = q(x,t)\exp\left[iS(x,t)\right], \tag{4.26}$$

con $S(x,t) = -V_0 x + V_0^2 t$, que deja a la Ec. (4.23) invariante en las nuevas variables

$$T(x,t) = x - V_0 t, \quad Z(t) = t, \tag{4.27}$$

El solitón en movimiento, llamado también solitón "brillante", tiene la forma

$$q'(T,Z) = \kappa \text{ sech}\left[\kappa(T + V_0 Z - T_0)\right] \exp\left[i\left(-V_0 T + \frac{(\kappa^2 - V_0^2)}{2}Z + \sigma_0\right)\right]. \tag{4.28}$$

Al comparar el resultado para un solitón brillante a través de la IST IST y la transformación de Bäcklund, se puede ver que la constante V_0 está relacionado con el parámetro espectral λ de tal manera que:

$$\lambda = \eta + ik = \frac{\kappa}{2} + i\frac{V_0}{2}. \tag{4.29}$$

Usando la relación (4.29), $\kappa = 2\eta_1$ y $V_0 = 2\kappa_1$, la solución (4.28) para un solitón brillante de la NLSE toma la forma:

$$q_1(x,t) = 2\eta_1(t)\text{sech}\left[\xi_1(x,t)\right]\exp\{-i\chi_1(x,t)\}; \tag{4.30}$$

$$\xi_1(x,t) = 2(x - x_0)\eta_1 + 4\eta_1\kappa_1 t, \tag{4.31}$$

$$\chi_1(x,t) = 2(x - x_0)\kappa_1 + 2(\kappa_1^2 - \eta_1^2)t, \tag{4.32}$$

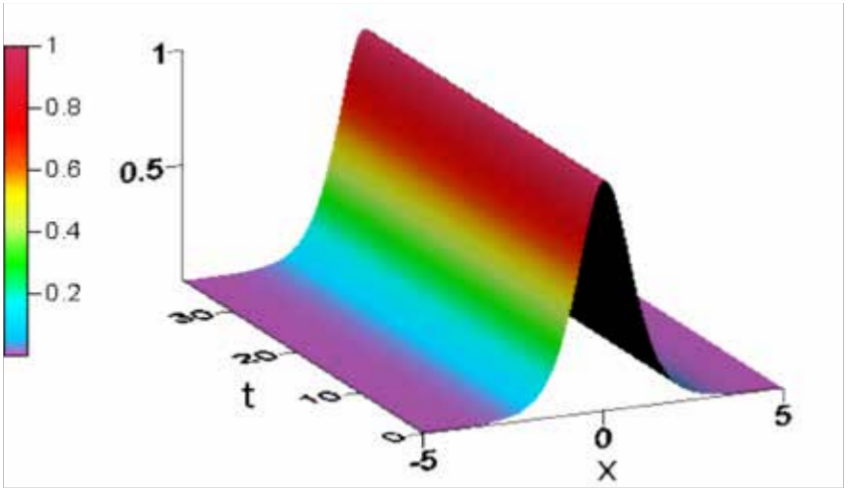


Figura 4.1. *Evolución de un solitón de la* NLSE *con amplitud inicial* $\eta_0 = 0{,}5$ *y velocidad inicial* $\kappa = 0$.

que está representada en la figura (4.1). Usando el método de transformación de Bäcklund, es posible obtener la solución para dos (y más) solitones brillantes de la NLSE que tiene la forma:

$$q_{1,2}(x,t) = 4\frac{N(x,t)}{D(x,t)}, \tag{4.33}$$

con el numerador $N(x,t)$ que viene dado por

$$\begin{aligned} N =& \eta_1 \cosh\xi_2 \exp(-i\chi_1)\left[(\kappa_2-\kappa_1)^2 + 2i\eta_2(\kappa_2-\kappa_1)\tanh\xi_2 + (\eta_1^2-\eta_2^2)\right] \\ &+\eta_2 \cosh\xi_1 \exp(-i\chi_2)\left[(\kappa_2-\kappa_1)^2 - 2i\eta_1(\kappa_2-\kappa_1)\tanh\xi_1 - (\eta_1^2-\eta_2^2)\right], \end{aligned} \tag{4.34}$$

y el denominador $D(x,t)$ esta dado por

$$\begin{aligned} D =& \cosh(\xi_1+\xi_2)\left[(\kappa_2-\kappa_1)^2 + (\eta_2-\eta_1)^2\right] \\ &+ \cosh(\xi_1-\xi_2)\left[(\kappa_2-\kappa_1)^2 + (\eta_2+\eta_1)^2\right] - 4\eta_1\eta_2\cos(\xi_2-\xi_1), \end{aligned} \tag{4.35}$$

donde $\eta_i(x,t)$, $\kappa_i(x,t)$, $\xi_i(x,t)$ y $\chi_i(x,t)$ con $i = 1$ y 2 son definidos por las Ecs. (4.30), (4.31) y (4.32) reemplazando el subíndice $'1'$ por el subíndice $'i'$.

La figura (4.2) muestra una solución de la NLSE llamada "breather" y que corresponde a dos solitones ligados.

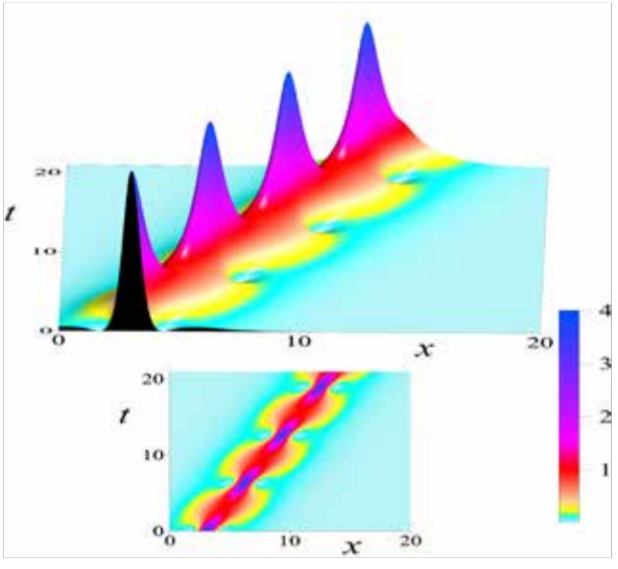


Figura 4.2. *Dinámica de la solución tipo breather (dos solitones ligados) de la* NLSE *con las amplitudes de solitones incorporados* $\eta_1 = 0{,}75$ *and* $\eta_2 = 0{,}25$. *Dinámica espacio-temporal (arriba) y la vista de contorno (abajo).*

4.4. Condición de autoconsistencia para la ecuación Sine-Gordon

En sus inicios, la ecuación Sine-Gordon fue utilizada para describir, usando un sistema de ecuaciones diferenciales, el ángulo de rotación de un péndulo

en la posición x y el tiempo t con masa y longitud definidas. Estos múltiples péndulos se extienden a lo largo de un resorte y separados entre sí una cierta distancia. Esto permitió desarrollar lo que se conoce como las transformaciones de Bäcklund, que, en cierto modo, no es otra cosa que un método para relacionar una ecuación diferencial parcial y su solución. Además de su aplicación en teoría relativista, también está presente en la física del estado sólido, en el estudio de líneas de transmisión de superconductores como la fibra óptica, entre otras aplicaciones. La versión clásica de representar a la ecuación de Sine-Gordon es:

$$u_{zz} - u_{tt} = \sin u. \tag{4.36}$$

Aquí, u es una función escalar de $(z,t)\ \epsilon\ R^2$. Si esta última ecuación la igualamos a cero resulta ser una de las formas que puede adoptar la ecuación de onda. Se puede decir entonces que la ecuación de onda, en su forma no lineal, es precisamente la ecuación de Sine-Gordon. Aquí y adelante u_{zz} y u_{tt} son derivadas parciales con respecto a la posición y al tiempo. Es posible llegar a otra forma canónica de esta ecuación usando nuevas coordenadas:

$$\xi = \frac{(z-t)}{2}, \quad \eta = \frac{z+t}{2}.$$

Entonces, la ecuación de Sine-Gordon toma la forma:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} = \sin u, \text{ también como: } \quad u_{\xi\eta} = \sin u. \tag{4.37}$$

En el capítulo 2, ya mencionamos la forma de uso de la transformación de Bäcklund y encontramos su solución. Para demostrar que en efecto esta ecuación es candidata para resolverse por el MDI , es necesario analizarla

como una consecuencia de la condición de auto consistencia para ciertas ecuaciones matriciales.

De las ecuaciones matriciales

$$\psi_\xi = U^{(2)}\psi, \quad \psi_\eta = V^{(2)}\psi, \tag{4.38}$$

se obtiene una condición de consistencia propia

$$U^{(2)}V^{(2)} - V^{(2)}U^{(2)} + U^{(2)}_\eta - V^{(2)}_\xi = 0. \tag{4.39}$$

Para la ecuación de Sine-Gordon, se proponen las matrices $U^{(2)}$ y $V^{(2)}$ de la siguiente forma:

$$U^{(2)} = i\lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + i2 \begin{pmatrix} 0 & u,\xi \\ u,\xi & 0 \end{pmatrix}, \tag{4.40}$$

$$V^{(2)} = 4i\lambda \begin{pmatrix} \cos u & -i\sin u \\ i\sin u & -\cos u \end{pmatrix}. \tag{4.41}$$

Siguiendo a la condición de consistencia se obtiene:

$$U^{(2)}_{,\eta} = \begin{pmatrix} 0 & 2iu_{,\xi\eta} \\ 2iu_{,\xi\eta} & 0 \end{pmatrix}, \tag{4.42}$$

$$V^{(2)}_{,\xi} = 4i\lambda \begin{pmatrix} -u_{,\xi}\sin u & -iu_{,\xi}\cos u \\ iu_{,\xi}\cos u & u_{,\xi}\sin u \end{pmatrix}. \tag{4.43}$$

Al realizar la resta de ambas de acuerdo con $U^{(2)}_{,\eta} - V^{(2)}_{,\xi}$, se tiene

$$U^{(2)}_{,\eta} - V^{(2)}_{,\xi} = \begin{pmatrix} 4i\lambda u_{,\xi}\sin u & 2iu_{,\xi\eta} - 4\lambda u_{,\xi}\cos u \\ 2iu_{,\xi\eta} + 4\lambda u_{,\xi}\cos u & -4i\lambda u_{,\xi}\sin u \end{pmatrix}. \tag{4.44}$$

Realizando consecutivamente las operaciones matriciales correspondientes obtenemos

$$U^{(2)}V^{(2)} - V^{(2)}U^{(2)} = \begin{pmatrix} -4i\lambda u_{,\xi}\sin u & 2i\sin u - 4\lambda u_{,\xi}\cos u \\ 2i\sin u + 4\lambda u_{,\xi}\cos u & 4i\lambda u_{,\xi}\sin u \end{pmatrix}. \tag{4.45}$$

Finalmente, de acuerdo con la condición de consistencia propia (4.39), podemos obtener

$$U^{(2)}_{,\eta} - V^{(2)}_{,\xi} + U^{(2)}V^{(2)} - V^{(2)}U^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 2iu_{,\xi\eta} - 2i\sin u \\ 2iu_{,\xi\eta} - 2i\sin u & 0 \end{pmatrix} = 0. \tag{4.46}$$

De donde fácilmente deducimos la ecuación de Sine-Gordon (4.37), demostrando así que es una ecuación apta para ser resuelta por el MDI al poder verse reducida a una condición de consistencia propia expresada en (4.46).

Ahora, para terminar de cumplir con los requisitos que el método exige, falta encontrar el sistema de ecuaciones espectrales al que debe estar relacionada la ecuación de Sine-Gordon. La función ψ puede verse como una matriz columna igual a la que se usó para el problema de KdV.

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \tag{4.47}$$

Al expresar a esta matriz columna de acuerdo con la primera de las ecuaciones en (4.40), se ve para ψ_ξ que:

$$\psi_{,\xi} = \begin{pmatrix} \psi_{1,\xi} \\ \psi_{2,\xi} \end{pmatrix} = U^{(2)}\psi = \begin{pmatrix} i\lambda & 2iu_{,\xi} \\ 2iu_{,\xi} & -i\lambda \end{pmatrix}, \tag{4.48}$$

y al desarrollar la multiplicación de matrices resulta:

$$\psi_{,\xi} = \begin{pmatrix} \psi_{1,\xi} \\ \psi_{2,\xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\lambda\psi_1 + 2iu_{,\xi}\psi_2 \\ 2iu_{,\xi}\psi_1 - i\lambda\psi_2 \end{pmatrix}, \tag{4.49}$$

Finalmente, el sistema espectral se reduce a:

$$\psi_{1,\xi} = i\lambda\psi_1 + 2iu_{,\xi}\psi_2, \tag{4.50}$$

$$\psi_{2,\xi} = 2iu_{,\xi}\psi_1 - i\lambda\psi_2. \tag{4.51}$$

Entonces, esta función matricial nos permite obtener el esquema necesario para aplicar el método de dispersión inversa de 2-componentes usando la ecuación integral de de Gelfand-Levitan-Marchenko (Scott, 2003)

$$K(\xi, z; \eta) = B^*(\xi + z; , \eta) - \int_{\xi}^{\infty} \int_{\xi}^{\infty} K(\xi, y; \eta) B(y + y^{'}; \eta) B^*(z + y^{'}; , \eta) dy dy^{'}, \tag{4.52}$$

de donde se obtienen las soluciones solitónicas de (4.37).

$$u_{,\xi} = 4K(\xi, \xi; \eta). \tag{4.53}$$

Siendo $B^*(\xi + z; , \eta)$ la función que depende de los datos de la dispersión. Como vemos, la ecuación de Sine-Gordon es candidata a resolverse mediante el método de dispersión inversa (MDI) abordado en el capítulo 3.

5. MÉTODOS ALTERNATIVOS DE SOLUCIÓN DE ECUACIONES NO LINEALES

En este capítulo se abordan dos métodos alternativos de integración de ecuaciones no lineales integrables: el método de los solibricks y el método de Hirota.

5.1. Solibricks como unidades para construir solitones

Presentamos un método propuesto por Dubrovin, Krichever, Malyanuk y Makhankov (1988)tomando como un modelo de prueba el sistema de ecuaciones de Schrödinger no lineales de evolución para dimensión $D = 1$. La ecuación no lineal de Schrödinger es una de las ecuaciones fundamentales de

la física matemática que describe la evolución de cualquier onda débilmente no lineal y de dispersión fuerte casi cromática.

Este tratamiento tiene ciertas ventajas en comparación con el popular método de dispersión inversa (MDI). Al aplicar el método, sólo usaremos una ecuación auxiliar lineal y universal de la ecuación de Schrödinger con un potencial que en general depende del tiempo: $U(x,t)$:

$$[i\partial_t + \partial_x^2 + U(x,t)]\psi(x,t,k) = 0. \tag{5.1}$$

Este método puede ser usado cuando el MDI no funciona, como por ejemplo en el caso del modelo del gas de Bose sin simetría interna compacta, en el modelo isotrópico de Landau-Lifshitz con el grupo $SU(1,1)$, los modelos σ, etc. El potencial $U(x,t)$ en la ecuación de Schrödinger no estacionaria se llama potencial integrable (asociado con una curva algebraica racional), si la Ec. (5.1) admite soluciones en la forma de ondas planas:

$$\psi(x,t,k) = [k^N + a_{N-1}(x,t)K^{N-1} + ... + a_0(x,t)]e^{ie(x+kt)}. \tag{5.2}$$

A continuación, se introducen un conjunto de números complejos k_i, la matriz compleja $\alpha_{i,j}$, $N \times N$ donde $i = 1,2,...,N$, $j = 1,2,...,N$. Para cualquier conjunto de estos datos uno puede construir únicamente la función $\psi(x,t,k)$ que tiene la forma de (5.2). La condición para la construcción es

$$\sum_{j=1}^{M} \alpha_{ij}\psi(x,t,k)_{k=k_j} = 0, \quad i = 1,2,...,N. \tag{5.3}$$

Las condiciones (5.3) que determinan el sistema de N ecuaciones algebraicas no homogéneas pueden ser resueltas si los coeficientes de las matrices $A(x,t) = [\alpha_{ij}]$ son no degenerados, y el rango de la matriz es: $rank[\alpha_{ij}] = N$.

La búsqueda del potencial $U(x,t)$ está basada en el teorema formulado a continuación: si la matriz $A(x,t)$ del sistema (5.3) no es completamente singular (en x,t), entonces la función $\psi(x,t,k)$ con la forma (5.2) bajo las condiciones (5.3) satisface la Ec. (5.1) con el potencial

$$U(x,t) = 2i\partial_x \alpha_{N-1}(x,t) = 2\partial_x^2 \ln(\det A(x,t)). \tag{5.4}$$

Se asume que $M = 2N$ y los valores $\kappa_1, ..., \kappa_{2N}$ tengan partes imaginarias diferentes a cero y estén divididas en pares complejos conjugados $\kappa_{N+i} = \bar{\kappa}_i,\ i = 1, 2, ..., N$. Asumimos ahora, sin perder generalidad, que los menores de la matriz $[b_{ij}] \equiv [\alpha^c_{ij}]$, que son columnas con números $j = N+1, ..., 2N$, no son singulares. En el caso más general este menor puede ser reducido a uno igual a la matriz unitaria. En este caso la condición (5.3) toma la forma

$$\psi(\bar{\kappa}_i) = -\sum_{j=1}^{N} b_{ij}\psi(\kappa_j),\ i = \overline{1, N}, \tag{5.5}$$

donde b_{ij} es la matriz constante $N \times N$, y para simplificar las notaciones aquí $i = \overline{1, N} = 1, 2, 3, ..., N$. La Ec. (5.2) nos da *la representación polinomial* para la función de onda de la NLSE (5.4).

Es conveniente volver a normalizar las funciones $\psi(x,t,\kappa)$ usando *el tipo de representación polar* en la forma

$$\Psi(x,t,\kappa) = \frac{\psi(x,t,\kappa)}{\prod_{i=1}^{N}(\kappa - \kappa_i)} \equiv \left\{1 + \sum_{j=1}^{N} \frac{r_j(x,t)}{\kappa + \kappa_j}\right\} \exp^{i\kappa(x-\kappa t)}. \tag{5.6}$$

A continuación, la condición (5.5) puede ser escrita como

$$\Psi(x,t,\bar{\kappa}_i) = -\sum_{j=1}^{N} c_{ij}\psi_j(x,t), \tag{5.7}$$

con

$$\psi_j(x,t) = \mathrm{res}_{k=\kappa_j}\Psi(x,t,k) = \lim_{\kappa\to\kappa_j}[(k-\kappa_j)\Psi(x,t,k)].$$

introduciendo la matriz

$$c_{ij} = b_{ij}\frac{R'(\kappa_j)}{R(\bar{\kappa}_j)},\ R' = \frac{d}{dk}R(k), \tag{5.8}$$

donde

$$R(k) = \prod_{j=1}^{N}(k-\kappa_j). \tag{5.9}$$

Ahora el potencial $U(x,t)$ de la NLSE (5.1) tiene que ser real y no singular con respecto a x,t.

Las restricciones generales para usar este método son como siguen:

1. La matriz c_{ij} en (5.7) será anti-hermitiana i.e. $[c_{ij}] = -[c_{ij}]^\dagger$

2. En la suposición que los parámetros κ_i satisfagan las condiciones $Im\ \kappa_i > 0$ para $i = \overline{1,p}$ y $Im\ \kappa_j < 0$, para $j = \overline{p+1,N}$, entonces la matriz hermitiana $\frac{1}{i}[c_{ij}]$ para $i,j = \overline{1,p}$ tiene que ser definida positiva, al mismo tiempo con $\frac{1}{i}[c_{ij}]$ para $i,j = \overline{p+1,N}$ tiene que ser definida negativa κ_i.

Si estas condiciones se satisfacen, adicionalmente la función $\psi(x,t,k)$ será una función real de (x,t) para cada $k = \kappa_j$ que satisface la Ec. (5.1) con el potencial real $U(x,t)$. Por lo que tenemos,

$$\psi(x,t,k) = \frac{\det\hat{M}(x,t,k)}{\det M(x,t)}e^{ikx+ik^2t}, \tag{5.10}$$

$$U(x,t) = 2\partial_x^2\ln(\det M(x,t)), \tag{5.11}$$

donde

$$\widehat{M}_{ij}(x,t) = c_{ij} + \frac{e^{i(\overline{w}_i - w_1)}}{\overline{\kappa}_i - \kappa_i}, \quad \omega_i = \kappa_i x + \kappa_i^2 t, \quad i,j = 1,...,N, \tag{5.12}$$

$$\widehat{M}_{ij} = M_{ij} : \ i,j = 1,...,N; \ \ \widehat{M}_{\infty} = 1, \widehat{M}_{io} = e^{i\overline{w}_i}, \tag{5.13}$$

$$\widehat{M}_{oi} = (k - \kappa_i)^{-1} e^{-iw_i}, \ \ i = 1,...,N. \tag{5.14}$$

Entonces la función $U(x,t)$ será el potencial solitónico.

5.1.1. Comportamientos asimptóticos y solitones

En el caso simple $N = 1, \quad \kappa = \alpha + i\beta$ el potencial $U(x,t)$ toma la forma solitónica:

$$U(x,t) = -2\beta^2 \mathrm{ch}^{-2}[\beta(x - x_0 + 2\alpha t)], \tag{5.15}$$

y la función de onda es

$$\psi = \left\{ 1 + \frac{i\beta}{k - \kappa} \left[1 + \tanh \beta(x - x_0 + 2\alpha t) \right] \right\} e^{ik(x+kt)}, \tag{5.16}$$

y se asume que

$$2i\beta c = -e^{2\beta x_0}. \tag{5.17}$$

Para $N > 1$ y para κ_i con $Im\ \kappa_i > 0$ y $Re\ \kappa_i \neq Re\ \kappa_j$ para $i \neq j$, el potencial decae asintóticamente en la suma directa de potenciales (5.15). De aquí que los potenciales para el caso $N = 1$ pueden ser considerados como *materiales de construcción o bricks*[1] para complejos con $N > 1$. Por esta simple razón fueron llamados *solibricks*.

Se demuestra que otro tipo de soluciones pueden aparecer, por ejemplo los *breathers (pulsones)*, o cuerdas como soluciones que aparecen cuando $N > 1$,

[1] *Cuya traducción al español es "ladrillos"*

cuando $Re\ \kappa_i = Re\ \kappa_j$. Ellos son soluciones periódicas o casi periódicas con respecto al tiempo.

Adicionalmente, las soluciones denominadas *bion* también pueden aparecer y están definidas por la matriz $[c_{ij}]$. Por ejemplo, para $N = 2$ tenemos

$$[c_{ij}] = \begin{pmatrix} 0 & c \\ -\overline{c} & 0 \end{pmatrix} \tag{5.18}$$

La función de onda ahora será:

$$\psi = \left(1 + \frac{c_3 \cos(q\xi + \Omega x + \theta_3) + c_4 e^{\beta\xi}}{c_2 + \cosh(\beta\xi + \theta_2) + c_1 \cos(q\xi + \Omega x + \theta_1)}\right) e^{ik(\xi + k't)}. \tag{5.19}$$

Con $\xi = t + vx$. Los coeficientes son dependientes de las magnitudes α_j, β_j. Las cantidades α_i pueden ser interpretadas como velocidades de los componentes (i.e. biones) , y los β_i como sus masas.

En estos estudios se ha observado que las soluciones biónicas (5.19), también como los pulsones, están formados por dos solibricks y ambos son soluciones periódicas (o casi periódicas). Sorpresivamente, la naturaleza de los biones y los pulsones son completamente diferentes. Los pulsones pueden ser fragmentados en sus componentes, al contrario de los biones que no poseen esta propiedad. Por esta razón, los componentes de los pulsones pueden ser considerados como similares a los "quarks" y los biones como "mesones". Podemos sostener que tres tipos de soluciones pueden existir en dichos modelos: *solibricks, pulsones y biones.* Obviamente no excluye otro tipo de soluciones que el sistema pueda sostener, y simbó licamente podemos escribir

$$U(x,t)_{t\to\infty} = \sum solibricks + \sum pulsones + \sum bions + ... \tag{5.20}$$

Este esquema podría ser generalizado también para las soluciones estudiadas en el espacio-tiempo múltiple $(2+1)$ como en las ecuaciones de Kadomtsev-Petviashvili (KP) y Davey-Stewartson-I (DS-I), Tirring, Dirac, etc. (para mayores detalles ver (Dubrovin, Krichever, Malanyuk y Makhankov, 1987).

5.1.2. Campos no lineales y solibricks

El problema consiste en buscar las condiciones autosostenibles para resolver las ecuaciones de los potenciales $U(x,t)$ en relación con la función de onda $\psi(x,t,k)$ (o sus residuos $\psi_i(x,t)$). Aplicando teoremas a los residuos, podemos formar una función racional $E(k)$ que nos permita encontrar condiciones autosuficientes calculando los residuos de algunas funciones auxiliares

$$\Omega = E(k)\overline{\psi(x,t,\overline{k})}\psi(x,t,k). \tag{5.21}$$

Particularmente especificamos a $E(k)$ como polinomios

$$1.\ E_1 = k, \tag{5.22}$$

$$2.\ E_2 = k^2 + ak, \tag{5.23}$$

$$3.\ E_3 = k^3 + 2bk^2 + 2dk, \tag{5.24}$$

las conexiones entre las funciones: $U(x,t)$, $\psi(x,t,k)$ serán

$$1.\ U = -2F(x,t), \tag{5.25}$$

$$2.\ \partial_t U + a\partial_x U = 2\partial_x F(x,t),$$

$$3.\ \left(\partial_t^2 - \frac{1}{3}\partial_x^4\right)U + 2\partial_x^2 U^2 + \frac{8}{3}U = -\frac{8}{3}\partial_x^2 F(x,t).$$

donde $F(x,t)$ es

$$F(x,t) = \sum_{i,j=1}^{N} \overline{\psi} E_{ij} \Psi_j, \tag{5.26}$$

con la matriz hermitiana

$$E_{ij} = \{E(\overline{\kappa}_j) - E(\kappa_j)\} c_{ij}. \tag{5.27}$$

La matriz (5.27) con los polos κ_i define completamente las soluciones de las ecuaciones no lineales

$$[i\partial_t + \partial_x^2 + U(x,t)]\psi_i(x,t) = 0, \tag{5.28}$$

con las condiciones correspondientemente autoconsistentes (5.25). El papel de los campos no lineales en la Ec. (5.28) actuarán los residuos ψ_i de las funciones $\psi(x,t,k)$, con los comportamientos asintóticos correctos

$$\psi_i(x \to \pm\infty) \to 0. \tag{5.29}$$

Esta es la condición asintótica trivial (CAT). Para otros tipos, el resto de ψ_i crece indefinidamente y podemos descartarlo.

Para el caso de condiciones a la frontera no triviales o el caso condensado (CFT)

$$|\phi_i(t, x \to \pm\infty)| \to const, \tag{5.30}$$

en lugar de (5.27) uno puede considerar $E = \tilde{E}$ como

$$\tilde{E} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\epsilon_i b_i^2}{k - k_i} + E_i, \quad i = 1,2,3, \tag{5.31}$$

con $\epsilon = \pm 1$, b_i and k_i constantes arbitrarias. Calculamos el "residuo" de la función Ω, en (5.21), de nuevo tenemos que encontrar las condiciones (5.25), donde ahora en lugar de $F(x,t)$ tendremos

$$\tilde{F}(x,t) = \sum_{i,j=1}^{N} \overline{\psi} E_{ij} \Psi_j + \sum_{m=1}^{n} \epsilon(|\Phi_m|^2 - b_m^2), \tag{5.32}$$

con campos no lineales

$$\phi_i(x,t) = b_i \psi(x,t,k=k_i), \tag{5.33}$$

que representa las funciones de onda en los puntos fijos $k = k_i$. El estudio de comportamientos asintóticos cuando $x \to \pm\infty$ muestra que $\psi(t,k,x \to \pm\infty) = 1$, y como resultado tendremos CFT (5.30) para las ondas no lineales $\phi_i(x,t)$.

Como ejemplo obtengamos la solución multisolitónica de la (NLSE) para el caso de presencia de la atracción. Tomamos $E(k) = k$ para la matriz (c_{ij}) con rango 1. Entonces, la matriz c_{ij} tomará la siguiente forma

$$c_{ij} = \lambda \frac{\gamma_i \bar{\gamma}_j}{\bar{\kappa}_i - \kappa_j}, \quad i,j = 1,...,N, \tag{5.34}$$

con constantes arbitrarias γ_i que satisfacen

$$|\gamma_i|^2 + ... + |\gamma_N|^2 = 1, \tag{5.35}$$

y λ es un número real. La condición para que la matriz c_{ij} sea positiva es equivalente a la desigualdad $\lambda > 0$. Después de algunos cálculos algebraicos obtenemos la función

$$\phi(x,t) = \sqrt{|\lambda|} \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \psi(x,t) = \sqrt{|\lambda|} \frac{\det \hat{M}(x,t)}{\det M(x,t)}, \tag{5.36}$$

con la matriz $N \times N$

$$M_{ij}(x,t) = \frac{\lambda \overline{\gamma}_i \gamma_j + e^{i(\overline{\omega}_i - \omega_j)}}{\overline{\kappa}_i - \kappa_j}, \tag{5.37}$$

$$\widehat{M_{ij}} = (x,t) = M_{ij}(x,t), \quad i,j = 1,...,N, \tag{5.38}$$

$$\widehat{M_{00}} = 0, \quad \widehat{M_{i0}} = e^{i\overline{\omega}_i}, \quad \widehat{M_0 i} = \gamma_i. \tag{5.39}$$

y que es una solución decreciente con $|x| \to \infty$ de la NLSE

$$i\varphi_t = \varphi_{xx} + |\varphi|^2 \varphi. \tag{5.40}$$

5.2. Método directo de Hirota. Operadores de evolución

La idea fundamental para usar este método es la hipótesis de que una ecuación diferencial no lineal podría ser linealizada mediante un cambio efectivo de variables.

Entonces la idea consiste en que la ecuación no lineal se transforme en un tipo de ecuación diferencial bilineal llamado el "tipo de Hirota" por lo que ya no se requiere el uso del par de Lax o el de dispersión inversa. Aquí abordaremos la solución de la ecuación no lineal de Boussinesq usando el método de Hirota. Este método ha sido usado en varias otras importantes ecuaciones diferenciales que pueden verse en el libro de Hirota donde el lector encontrara más amplitud de detalle de este método importante (Hirota, 2004).

La esencia del método es la construcción de los operadores bilineales. Sea que tenemos un par de funciones $a(x)$ y $b(x)$. Los operadores bilineales se

definen de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} D_x^n(a,b) &= \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y}\right)^n a(x)b(y)|_{y=x} = \\ &= \frac{\partial^n}{\partial y^n} a(x+y)b(x-y)|_{y=0}, \qquad (5.41) \\ D_t^m D_t^n(a,b) &= \frac{\partial^m}{\partial s^m}\frac{\partial^n}{\partial y^n} a(t+s,x+y)b(t-s,x-y)|_{s=0,\,y=0}, \qquad (5.42) \end{aligned}$$

con $m, n = 0, 1, 2, 3, ...$, de tal manera que estos operadores tienen las siguientes propiedades

$$D_t G \bullet F = G_t F - G F_t, \qquad (5.43)$$

$$D_x G \bullet F = G_x F - G F_x, \qquad (5.44)$$

$$D_x^3 G \bullet F = G_{xxx} F - 3G_{xx} F_x + 3G_x F_{xx} - G F_{xxx}, \qquad (5.45)$$

$$D_x^3 F \bullet F = 2(F_{xx} F - F_x^2). \qquad (5.46)$$

5.2.1. La ecuación de Boussinesq mejorada

Seguidamente obtendremos las soluciones solitónicas de la ecuación de Boussinesq aplicando el bien conocido método de Hirota (2004). Es necesario mencionar que la ecuación estándar de Boussinesq:

$$u_{tt} - u_{xx} - 6(u^2)_{xx} - u_{xxxx} = 0. \qquad (5.47)$$

admite soluciones que se construyen en vacío inestable. Los cálculos numéricos son imposibles de realizar debido a la inestabilidad del espectro lineal $w^2 = k^2(1 - k^2)$. Esta dificultad se supera mediante la obtención de una ecuación mejorada de Boussinesq desarrollada por Makhankov (1990):

$$L\varphi = (\partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_t^2 \partial_x^2)\varphi = (\varphi^2)_{xx}, \qquad (5.48)$$

Ahora obtengamos la ecuación correcta de Boussinesq, analizando las perturbaciones al estado fundamental determinado por el mínimo local $|\Psi_0|^2 = \frac{2A+1}{3}$, del potencial ψ-sexto

$$U = \left(|\Psi|^2 - 1\right)^2 \left(|\Psi|^2 - A\right) \tag{5.49}$$

en la ecuación cúbica quinta de Schrödinger

$$i\Psi_t + \Psi_{\xi\xi} - \left(3|\Psi|^2 - (2A+1)\right)(|\Psi|^2 - 1)\Psi = 0, \tag{5.50}$$

Que será ampliamente discutida en el capítulo VII. Escribamos $\Psi = \sqrt{\beta} - \gamma(\xi, \tau)$. Considerando que: $\gamma(\xi, \tau)$ es del mismo orden que $(\beta - 1)$ y además cambiando al nuevo par de funciones desconocidas $\Phi = (\gamma + \bar{\gamma})$ y $\Sigma = i(\gamma - \bar{\gamma})$ uno puede obtener el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \Sigma_\tau &= \Phi_{\xi\xi} - 6\beta b\Phi + 6\beta^{3/2}\Phi^2, \\ \Phi_\tau &= -\Sigma_{\xi\xi}. \end{aligned} \tag{5.51}$$

De este sistema uno encuentra fácilmente la siguiente relación

$$\Phi_{\tau\tau} + \left(\Phi_{\xi\xi} - 6b\beta\Phi + 6\beta^{3/2}\Phi^2\right)_{\xi\xi} = 0. \tag{5.52}$$

Por escalamiento apropiado en el espacio dimensional $1+1$ tenemos

$$t = (6b\beta)\,\tau, \quad x = \left(\sqrt{6b\beta}\right)\xi, \quad \Phi = \left(6\sqrt{\beta}^{-1}\right)\Gamma. \tag{5.53}$$

Finalmente, la ecuación de Boussinesq será (Agüero, Espinoza y Martínez, 1997,)

$$\Gamma_{tt} - \Gamma_{xx} + 6(\Gamma^2)_{xx} + \Gamma_{xxxx} = 0. \tag{5.54}$$

Para las ondas transónicas, la Ec. (5.54) puede reducirse a la conocida ecuación de ondas no lineales, la ecuación de KdV.

5.2.2. Características de las soluciones

Busquemos las posibles soluciones que soportan la Ec. (5.54). Usaremos el método directo de Hirota (Hirota 1973, Hirota 2004). Se conoce bien que el método directo es construido para ecuaciones que podrían integrarse con la ayuda del método de dispersión inversa y, a veces también en tales casos cuando el problema de dispersión inversa sea desconocido. Las soluciones solitónicas que buscamos las podemos representar como

$$\Gamma(x,t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln f(x,t). \tag{5.55}$$

Sustituyendo la relación anterior en la Ec. (5.54) obtenemos

$$-\left(f_t\right)^2 + f f_{tt} + \left(f_x\right)^2 - f f_{xx} + 3\left(f_{xx}\right)^2 - 4 f_x f_{xxx} + f f_{xxxx} = 0. \tag{5.56}$$

Esta ecuación es una forma cuadrática bilineal. Como es conocido, estas formas aparecen bajo un cambio bien definido de variables de la ecuación. Para el análisis posterior, es conveniente usar el siguiente operador de Hirota

$$D_x^m D_t^n a.b = (\partial_x - \partial_{x'})^m (\partial_t - \partial_{t'})^n |a(x,t) b(x',t')|_{x'=x \;\; t'=t}. \tag{5.57}$$

Las diversas propiedades de este operador D_x^m se pueden encontrar en la literatura, por ejemplo, en (Hirota 2004) y citas en ella. Al usar esta definición y sus propiedades, la Ec. (5.54) podría reescribirse como

$$(D_x^2 - D_t^2 + D_x^4) f.f = 0. \tag{5.58}$$

Después de algunos cálculos, podemos encontrar soluciones a la manera de Hirota como

$$f(x,t) = \sum_{\mu=0,1} exp' \left[\sum_{i=1}^{N} \mu_i \eta_i + \sum_{i \le i < j}^{N} \mu_i \mu_j A_{ij} \right], \tag{5.59}$$

$$\eta_i = q_i\chi - \epsilon_i\Omega_i t - \eta_i^0, \quad \epsilon_i = +1, \quad \epsilon_i = -1, \tag{5.60}$$

$$\Omega_i = q_i\left(1 - q_i\right)^{1/2}. \tag{5.61}$$

Aquí la notación exp' significa: $exp'[.] = \epsilon.exp[.]$, $\epsilon = \pm$. La velocidad de cada solitón, antisolitón se puede denotar por $v_i\frac{\Omega_i}{q_i}$. Aquí q_i y η_i son dos constantes reales relacionados con la amplitud y fase, respectivamente, de i-esimo solitón. Los coeficientes principales para obtener soluciones son: (Agüero, Espinoza, Martínez, 1997).

$$exp\left[A_{ij}\right] = \left|\frac{\left(\epsilon_i v_i - \epsilon_j v_j\right)^2 - 3\left(q_i - q_j\right)^2}{\left(\epsilon_i v_i - \epsilon_j v_j\right)^2 - 3\left(q_i + q_j\right)^2}\right| = \left|a_{ij}\right|. \tag{5.62}$$

Como se puede ver en la última expresión, el parámetro a_{ij} podría tomar valores positivos y negativos; por esta razón, presentamos el apóstrofo en la Ec. (5.59). Esta propiedad constituye la diferencia fundamental entre nuestras soluciones obtenidas aquí y las otras soluciones clásicas que se reportaron en la literatura. Es fácil comprobar que la velocidad del i-esimo solitón determina la manera en que podrían viajar a lo largo del medio unidimensional. Mientras que la solución habitual de solitón de la ecuación de KdV viaja más rápido de lo normal porque su amplitud es más grande que la del otro, nuestro solitón se comporta de manera contraria. En otras palabras, el pequeño solitón viaja más rápido que uno más alto. Esto porque la velocidad de cada solitón toma la forma $v_i^2 = 1 - q_i^2$.

Reemplazando las soluciones (5.55) en la Ec. (5.54) y usando las propiedades del operador D, uno encuentra que el lado izquierdo de la Ec. (5.54) es una exponencial

$$\exp\left[\sum_{i=1}^{N}\eta_i + \sum_{i=n+1}^{m}2\eta_i\right], \tag{5.63}$$

con un coeficiente adecuado que desaparece, lo que demuestra que la función $\Gamma(x,t)$ es la solución de (5.54).

La masa del solitón es fácil de encontrar utilizando la solución solitónica y en forma general para solitones singulares y brillantes

$$M = \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(x,t)dx = \left[\frac{f_x}{f}\right]_{-\infty}^{+\infty}. \tag{5.64}$$

El centro de masa también se obtiene calculando

$$x_{CM} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\Gamma(x,t)dx = \frac{1}{M}\left[-2x\frac{f_x}{f} + \ln f^2\right]_{-\infty}^{+\infty}. \tag{5.65}$$

Donde usualmente f satisface la Ec. (5.58). Por ejemplo cuando uno tiene el caso de N-solitones la masa obtenida de la Ec. (5.64) tiene la forma siguiente:

$$M = \sum_{i=1}^{N} |q_i|. \tag{5.66}$$

5.2.3. Formación de solitones regulares, singulares o mixtos

Demostremos que la solución dada por la Ec. (5.55) se divide en N-solitones regulares o singulares o en una mezcla de ellos en el límite $|M| \to \infty$. (Agüero, Alvarado, 2000). Con este procedimiento podemos calcular el cambio de fase de un i-esimo solitón arbitrario inducido por una colisión con $N-1$ solitones. Para hacer esto, colocamos el sistema de coordenadas vinculado al i-esimo. Definamos $\xi = x - v_i t$. Los exponentes que surgen si expandimos la solución (5.59) deberían tomar dos formas

$$\Psi = \exp\left[q_i\xi + \eta_i^0\right], \tag{5.67}$$

$$\Psi = \exp\left[q_j(\xi + v_i t - v_j t) + \eta_i^0\right]. \tag{5.68}$$

Aquí $i = 1, ..., N, \quad j = 1, ..., N$, pero $i \neq j$. Arreglemos ξ y tratemos de ver qué pasa cuando $t \to \pm\infty$.

Primero tomemos $t \to +\infty$. Haciendo ξ finito, la función Ψ sigue limitada, pero al mismo tiempo $\Psi \to 0$. Estas condiciones conducen a obtener el siguiente tipo de soluciones asintóticas

$$\Gamma \approx \frac{q_i^2}{4} \operatorname{sech}^2 \left(\ln \lambda_i + q_i \left(x - v_i t \right) /2 \right), \tag{5.69}$$

si el parámetro $\lambda_i = \prod \epsilon_m \exp[A_{im}] = \prod_{m=1}^{N} \epsilon_m a_{im} > 0, \quad m \neq i$, y

$$\Gamma \approx -\frac{q_j^2}{4} Co \sec h^2 \left(\ln |\lambda_j| + q_j \left(x - v_j t \right) /2 \right), \tag{5.70}$$

si $\lambda_i < 0$. Ahora, consideramos al mismo tiempo cuando $t \to \infty$ la variable $\xi \approx v_i t - v_j t$. la función Ψ_i se torna finita y la función $\Psi_j \to 0$. Entonces, podemos encontrar que el solitón asintótico toma la forma

$$\Gamma \approx \frac{q_i^2}{4} \, sech^2 \left(q_i \left(x + v_i t \right) /2 \right). \tag{5.71}$$

Resumiendo, concluimos que los solitones a $t \to \infty$, debería tomar la forma de un solitón regular representado por las ecuaciones (5.69) y (5.71), y del solitón singular (5.70). La posible mezcla de soluciones es obvia y además el índice j varía de 1 a N.

Analicemos ahora el caso opuesto cuando $t \to -\infty$. Haciendo ξ finita, la función Ψ_i resulta también finita al mismo tiempo que $\Psi \to 0$. Para este caso, las soluciones asintóticas se convierten en

$$\Gamma_I \approx \frac{q_i^2}{4} \, sech^2 \left(q_i \left(x - v_i t \right) /2 \right). \tag{5.72}$$

Pero considerando que $\xi \approx v_i t - v_j t$ y tomando el límite $t \to -\infty$ en una manera que ψ_j se vuelve finita $\Psi_i \to \infty$, uno puede obtener dos tipos de solitones

$$\Gamma_{II} \approx \frac{q_j^2}{4} sech^2 \left(\ln \lambda_j + q_j \left(x + v_j \epsilon_j t \right) /2 \right), \tag{5.73}$$

si el parámetro $\lambda_j = \prod \epsilon_m \exp[A_{jm}] = \prod_{m=1}^{N} \epsilon_m a_{jm} > 0, \quad m \neq j$, y

$$\Gamma_{III} \approx -\frac{q_j^2}{4} cosech^2 \left(\ln |\lambda_j| + q_j \left(x + v_j \varepsilon_j t \right) /2 \right), \tag{5.74}$$

si $\lambda_j < 0$. Como se puede notar fácilmente, aquí hemos obtenido las características similares en cuanto al tiempo positivo.

De la misma manera, uno puede obtener m solitones regulares más $(N - m)$ solitones singulares. El método para obtener estas soluciones es bastante similar al descrito arriba. En el sector no singular, después de la interacción elástica, estas soluciones sólo cambian su fase, lo que significa que interactúan como partículas. Esto significa que el desplazamiento de fase relativo inducido por múltiples colisiones con $(N - 1)$ otras soluciones es la suma de la fase relativa de los cambios inducidos por la colisión independiente con cada uno de $(N - 1)$ otros solitones. Esto implica la ausencia de efecto de muchos cuerpos en el sector no resonante del parámetro de amplitud q_i. El i-ésimo solitón cambia su fase de a_i a $a_i + \ln |\lambda_i|$, mientras que el cambio de fase total de los otros solitones $(N - 1)$ es $\ln |\lambda_i|$

5.2.4. Ejemplo de dos y tres solitones

Mostramos el comportamiento de una colisión simple para obtener la imagen de muchas colisiones de solitones. Por ejemplo, para $N = 2$ la solución bi-solitónica obtenida de acuerdo con el método general mostrado

anteriormente tiene la siguiente forma

$$f(x,t) = 1 + \epsilon_1 \exp(\eta_1) + \epsilon_2 \exp(\eta_2) + \epsilon \exp(\eta_1 + \eta_2 + 2\theta) \tag{5.75}$$

Donde $\epsilon = \pm 1$, y como usualmente $i = 1, 2, 3, .\ \eta_i = q_i(x_i + \epsilon_i v_i + \eta_i'),\ \eta_i' = \frac{\eta_i^0}{q_i}$. Después de reemplazar la función $f(x,t)$ en la Ec. (5.55), se obtienen para la solución desconocida $\Gamma(x,t) = \frac{u_1}{u_2}$ de la Ec. (5.54), las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} u_1 =& \frac{\epsilon_1 q_1^2 \exp(\eta_1)}{(1+\epsilon_1 \exp(\eta_1))^2} + \frac{\epsilon_2 q_2^2 \exp(\eta_2)}{(1+\epsilon_2 q_2^2 \exp(\eta_2))^2} + (\epsilon_1\epsilon_2\epsilon_3 \exp(2\theta) - 1) \\ & \times \frac{\epsilon_1 \exp(\eta_1)}{(1+\epsilon_1 \exp(\eta_1))^2} \frac{\epsilon_2 \exp(\eta_2)}{(1+\epsilon_2 \exp(\eta_2))^2} \cdot G, \\ u_2 =& \left[1 + \frac{\epsilon_1 \exp(\eta_1)}{(1+\epsilon_1 \exp(\eta_1))^2} \frac{\epsilon_1 \exp(\eta_2)}{(1+\epsilon_2 \exp(\eta_2))^2} (\epsilon_1\epsilon_2\epsilon_3 \exp(2\theta) - 1)\right]^2, \\ G =& (q_1+q_2)^2 + \varepsilon_1 q_2^2 \exp(\eta_1) + \varepsilon_2 q_1^2 \exp(\eta_2), \end{aligned} \tag{5.76}$$

que toma una forma más cómoda de función solitónica siguiente:

$$\begin{aligned} \Gamma(x,t) =& \frac{4q_1^2 sech^2(\eta_1/2) + 4q_2^2 Sech^2(\eta_2/2)}{[4 + (\alpha-1)(1+tanh(\eta_1/2))(1+tanh(\eta_2/2))]^2} \\ & + \frac{(\alpha-1)\, sech^2(\eta_1/2).sech^2(\eta_2/2)\,[B(p_1,p_2)]}{[4 + (\alpha-1)(1+tanh(\eta_1/2))(1+tanh(\eta_2/2))]^2}, \end{aligned} \tag{5.77}$$

donde $B(q_1,q_2) = [2q_1q_2 + q_2^2(1+e^{\eta_1}) + q_1^2(1+e^{\eta_2})]$ y

$$a = \frac{(\epsilon_1 v_1 - \epsilon_2 v_2)^2 - 3(q_1 - q_2)^2}{(\epsilon_1 v_1 - \epsilon_2 v_2)^2 - 3(q_1+q_2)^2}, \tag{5.78}$$

con

$$\eta_1 = q_1(\xi - \epsilon_1 v_1 t), \tag{5.79}$$

$$\eta_2 = q_2(\xi - \epsilon_2 v_2 t), \tag{5.80}$$

donde $\epsilon = \pm 1$, y $v_i^2 = 1 - q_i^2$.

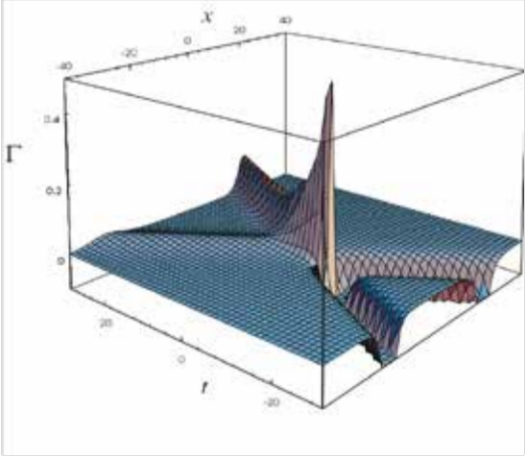


Figura 5.1. *Solución bi-solitónica. Se muestra la mutua transformación de solitones regulares a singulares y viceversa, segun la ecuacion (5.77), con* $q_1 = 0{,}3;\ q_2 = 0{,}7;\ \epsilon_1 = -1;\ \epsilon_2 = +1.$

La representación gráfica del solión se muestra en la figura (5.1). En el caso particular, la solución de un solo solitón se obtiene de la Ec. (5.77) haciendo $q_i = q_2$. Entonces, tenemos en coordenadas normales (x, t)

$$\Gamma(x,t) = q^2\beta^{3/2}\mathrm{sech}^2[q\beta^{-3/2}(x \pm Vt)]. \tag{5.81}$$

Con la ecuación para determinar la velocidad del solitón

$$V^2 = 6b\beta - 4q^2. \tag{5.82}$$

La última relación de velocidad da lugar a las poderosas restricciones a los valores de amplitud de los solitones. Los solitones de mayor amplitud se mueven más lentamente que las de menor amplitud. Este comportamiento es bastante diferente al de las soluciones de la ecuación de KdV y de otras ecuaciones no lineales populares.

La clasificación de solitones en regulares y singulares lo podemos obtener analizando el valor α de la Ec. (5.78):

i) $a > 1$ Solitones regulares. Su comportamiento es estándar y similar a otras soluciones de solitón sobre interacciones. La única diferencia que existe aquí consiste en el exótico comportamiento de que los solitones más cortos se mueven más rápido que los solitones altos.

ii) $a < 1$ Solitones singulares. Tenemos aquí además del solitón regular uno singular u oscuro. Los solitones singulares viven en la parte negativa del campo, es decir, en el mar negativo del condensado. En el semiplano positivo o "mundo real" no hay solitones singulares. Después de las colisiones las soluciones singulares podrían surgir como solitones regulares y viceversa, este comportamiento está representado en la figura (5.1). Esta imagen nos da el recuerdo de la creación y la aniquilación de solitones regulares singulares y viceversa. Si se están desplazando en la misma dirección, la imagen es muy similar.

Las soluciones resonantes ocurren cuando $a = 0$. En consecuencia, los parámetros de amplitud satisfacen las siguientes relaciones

$$q_1^2 + q_2^2 + \frac{1}{2}\epsilon_1\epsilon_2\sqrt{1-q_1^2}\sqrt{1-q_2^2} \pm \frac{3}{2}q_1q_2 = \frac{1}{2}. \tag{5.83}$$

El signo de $\epsilon_1\epsilon_2$ determina el tipo de movimiento para los solitones que interactuan. Si es positivo $\epsilon_1\epsilon_2 = +1$ tenemos ondas que viajan en la misma dirección y para valores negativos $\epsilon_1\epsilon_2 = -1$ tenemos solitones moviéndose en la dirección opuesta. El hecho de que la posición de los dos solitones después de la colisión no coincida con la posición que puedan tener si el otro solitón no existiriera se justifica con el cambio de fases que cada uno

de ellos experimenta. El máximo en la colisión no es igual a la suma de los dos máximos de cada solitón individual antes de las colisiones. Esta es una secuela de la no linealidad de la ecuación. Cuando ambos solitones se mueven en dirección opuesta o en la misma dirección, después de la colisión entre ellos, no se producen cambios de formas, ellos aparentemente intercambian energías y momento.

Escribimos ahora las soluciones para tres solitones. La función $f(x,t)$ que determina la solución para $N=3$ de acuerdo con la expresión (5.56) es.

$$\begin{aligned} f(x,t) &= 1+\delta_1 e^{\eta_1}+\delta_2 e^{\eta_2}+\delta_3 e^{\eta_3}+a_{12}e^{\eta_1+\eta_2}+a_{23}e^{\eta_2+\eta_3}+a_{13}e^{\eta_1+\eta_3} \\ &\quad +a_{12}a_{23}a_{31}e^{\eta_1+\eta_2+\eta_3}, \end{aligned} \tag{5.84}$$

donde, como más arriba, los deltas son todos iguales a $a\pm 1$ y a_{ij} están definidas por la Ec. (5.62) (Agüero, Alvarado 2000). En la figura (5.2) se representa la interacción de tres solitones.

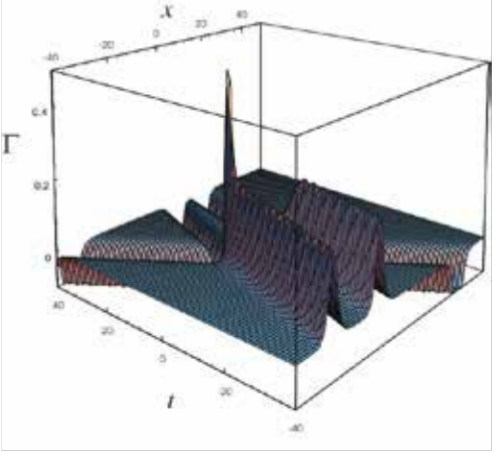


Figura 5.2. *Interacción de tres solitones, dos regulares y uno singular, con los parámetros* $v_1=0{,}3;\ v_2=-0{,}8;\ v_3=0{,}4; \epsilon_i=-1,\ i=1,2,3.$

Como se puede ver, desde estas figuras, dos solitones regulares moviéndose en la misma dirección con diferentes velocidades y otro solitón singular que viaja en dirección opuesta al movimiento de los dos solitones anteriores. Después de múltiples interacciones de 2-solitones emergen dos solitones singulares con diferentes velocidades además de un solitón singular moviéndose en dirección opuesta. Por supuesto, se espera que después de algún tiempo estos dos singulares solitones pudieran interactuar entre sí de la misma manera que la interacción de dos solitones como en la figura (5.2) si las velocidades correspondientes les permiten encontrarse en el futuro. Podemos inferir que estos solitones en un caso general, interactúan por pares.

Como en el caso de dos solitones, la expresión que es responsable de los solitones singulares emergentes es la combinación definida como: $\gamma = a_{12}a_{23}a_{31}$. De manera similar para N solitones tendremos $\gamma = \prod_{i<j,\ i,j=1}^{n} a_{ij}$. Como se puede observar, en el caso límite de obtención de soluciones singulares o regulares, el signo del coeficiente a_{ij} véase Ec. (5.78) jugará un papel crucial. Para el caso de tres soluciones de solitón podemos construir las siguientes 8 combinaciones del signo para el parámetro γ : MMM, MNN, NNM, NMN, MMN, MNM, NMM, NNN, donde N y M representan el signo negativo o positivo de $aij(i \neq j = 1, 2, 3)$. Las primeras cuatro combinaciones son positivas, eso significa que los solitones para estas combinaciones son sólo de tipo regular y las últimas cuatro son todas negativas. Estas últimas combinaciones son responsables de la aparición de solitones oscuros o singulares y para N solitones tendremos 2^N combinaciones.

Para el caso general, veamos las condiciones para cada coeficiente a_{ij} por ser positivo o negativo. Este parámetro depende en los valores de un par de velocidades. Cuando $a_{ij} > 0$, la velocidad los parámetros satisfacen las siguientes desigualdades:

$$\begin{aligned} v_i^2 + v_j^2 - \frac{1}{2}\epsilon_i\epsilon_j v_i v_j - \frac{3}{2} > 0, \\ v_i^2 + v_j^2 - \frac{1}{2}\epsilon_i\epsilon_j v_i v_j - \frac{3}{2} < 0. \end{aligned} \tag{5.85}$$

Si $a_{ij} < 0$, los valores de q_i satisfacen: $q_i q_j > 0$ y $q_i q_j < 0$, siendo como de costumbre $q_i = \pm\sqrt{1 - v_i^2}$. Significando entonces que estos parámetros deben tener cualquier valor pero con la condición de que sus correspondientes velocidades deberían vivir fuera de las regiones determinadas por las desigualdades (5.85).

Cuando $\gamma = 0$, la formación de solitones virtuales podría obtenerse también aquí, pero sólo para solitones regulares o solitones brillantes, porque $a_{ij} = 0$. Efectivamente, para el caso de triple colisión de solitones se puede observar, como lo muestra la imagen en (5.2), la condensación de solitones regulares mientras el solitón singular interactúa con ellos elásticamente. La condensación de múltiples solitones regulares es menos probable que ocurra que la interacción de un par de solitones brillantes formando un solitón virtual brillante.

6. SOLITONES EN ÓPTICA NO LINEAL

El uso de solitones ópticos fue propuesto en 1973 por Akira Hasegawa y Fred Tappert del laboratorio Bell de la empresa AT&T, para mejorar el rendimiento de las transmisiones en las redes ópticas de telecomunicaciones (Hasegawa y Tappert 1973a, 1973b). Históricamente, fue siete años después de la predicción teórica de Hasegawa y Tappert que la transmisión de un solitón se demostró con éxito experimentalmente en una fibra óptica por Mollenauer, Stolen y Gordon (1980). Exponemos la teoría relativa al surgimiento de ondas solitónicas en óptica y sus principales características.

6.1. Ecuaciones de Maxwell en óptica no lineal

En 1988, Linn Mollenauer y su equipo del mismo laboratorio transmitieron solitones a más de 4,000 km usando el efecto Raman (nombrado en honor de un científico indio que describió una forma de amplificar las señales en una

fibra óptica). En 1991, también en el laboratorio Bell, un equipo transmitió solitones a más de 14,000 km utilizando amplificadores de Erbio. En 1998, Thierry Georges y su equipo del centro de investigación y desarrollo de France Telecom combinaron solitones de longitudes de ondas diferentes para realizar una transmisión a razón superior a 1 terabit por segundo (10^{12}bits / segundo). En 2001, los solitones encontraron una aplicación práctica con el primer equipo de telecomunicaciones, que los utilizaba para transporte de tráfico real de señales sobre una red comercial (Mollenauer y Gordon 2006, Hasegawa 2000, Hasegawa y Matsumoto 2003, Taylor 1992, Hasegawa y Kodama 1995, Bass 1995, Agrawal 2001).

Básicamente el medio de transmisión es un elemento a través del cual se envía la información del emisor al receptor. Por ejemplo una radiodifusora transmite la información vía ondas de radio (microondas) a través de la atmosfera; una estación de comunicaciones basada en fibra óptica envía información por pulsos en el infrarrojo a través de la fibra óptica. El científico Charles Kao (el Premio Nobel de Física 2009) fue quien sugirió que fibras ópticas eficientes podrían competir en la transmisión de información. En la década de los setenta la empresa Corning Glass Works reportó una fibra óptica con un nivel de pérdida de unos 10 dB/km haciendo factible su empleo en cuestiones industriales (Agrawal 2001). En el año 1989 fue instalado el primer cable de fibra óptica submarino en el océano Pacífico, TPC-3, que va de Japón a Estados Unidos con una capacidad de 280 Mbit/s por par de fibra. Para 1999 ya se tenía registro de velocidades de transmisión de 160 Gbit/s e incluso de 1 Tbit/s (Bass 1995), esto fue posible gracias a los desarrollos tanto técnicos como teóricos de los pulsos no lineales llamados solitones.

En el ámbito de la óptica, las ecuaciones de Maxwell se usan para describir la propagación de ondas electromagnéticas a través de diferentes medios. Sin embargo, los materiales tales como fibras ópticas son dispersivos, no lineales y no homogéneos, y el campo eléctrico de la misma onda manifiesta una respuesta no-lineal en su constante dieléctrica.

Para describir la propagación de ondas electromagnéticas a través de estos medios dispersivos, no lineales y no homogéneos, se usan las ecuaciones diferenciales no lineales. Estos estudios pertenecen al ámbito de óptica no-lineal. Los trabajos pioneros de (Chiao, Garmire y Townes 1964, Kelley 1064, Talanov 1964), y muchos otros físicos en el inicio de los años sesenta del siglo XX construyeron la base de óptica no lineal. En particular, el comportamiento de ondas electromagnéticas en medios ópticos de respuesta no lineal fue investigado mediante la ecuación no lineal de Schrödinger (NLSE) introducida en los trabajos de Chiao, Garmire y Townes (1964), Kelley (1064), y de Talanov (1964) en los cuales demostraron la conexión de la NLSE con los fenómenos de autoenfoque ("self-focusing") de ondas electromagnéticas. Se mostró que los "paquetes" de ondas electromagnéticas preservan su forma a manera de una envolvente o modulación lenta al propagarse en medios no lineales y dispersivos.

La propagación de la luz está gobernada por las ecuaciones de Maxwell

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \tag{6.1}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \tag{6.2}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_f, \tag{6.3}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0. \tag{6.4}$$

Las densidades de flujo eléctrico $\vec{D}$ flujo magnético $\vec{B}$ en un medio están dados por:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}, \tag{6.5}$$

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \vec{M}, \tag{6.6}$$

donde $\vec{P}$ es la polarización y $\vec{M}$ es magnetización, ϵ_0 y μ_0 son los coeficientes de permisividad y permeabilidad.

Un material común en la construcción de las fibras ópticas es el silicio gracias a sus propiedades electromagnéticas óptimas para la transferencia de pulsos lumínicos dentro de rangos específicos de longitudes de onda. Para una onda electromagnética monocromática con longitud de onda en el rango (0, 5-2 μm), y la densidad de corriente $\vec{J}$ se anulan, $\rho_f = 0$, $\vec{J} = 0$; igual que la polarización magnética M (dado que la fibra no es un material magnético), $M = 0$. Además, se preserva la polarización del frente de onda. La polarización eléctrica del medio P está dada de la siguiente forma:

$$P = \epsilon_0(\chi^{(1)}E + \chi^{(2)}EE + \chi^{(3)}EEE + ...), \tag{6.7}$$

donde $\chi^{(i)}, i = 1, 2, 3, ...$ son las susceptibilidades eléctricas del primer orden, segundo orden, etc. El término con $\chi^{(2)}$ no es considerado ya que el silicio es una molécula simétrica y como consecuencia $\chi^{(2)} = 0$.

Así el campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ queda descrito por la ecuación de Maxwell resultante (Agrawal 2001):

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2}, \tag{6.8}$$

donde $\epsilon_0 \mu_0 = 1/c^2$.

La polarización eléctrica del medio isotrópico $P = P_L + P_{NL}$ en la Ec.(6.8) contiene las componentes lineal y no lineal, relacionadas con el campo eléctrico a través de las susceptibilidades eléctricas de primer y tercer orden, $\chi^{(1)}$ y $\chi^{(3)}$, respectivamente, bajo las aproximaciones de respuesta local al campo eléctrico aplicado y debilidad relativa de los efectos no lineales. Esto permite tratar a P_{NL} como una pequeña perturbación a P_L, quedando expresada como el producto tensorial:

$$P_{NL} = \epsilon_0 \chi^{(3)} EEE. \tag{6.9}$$

La solución a la Ec. (6.8) para una fibra en forma de guía de onda plana y bajo la aproximación de modulaciones lentas, es un campo con la polarización fija en una dirección transversal x y en la de propagación z dado por:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \frac{1}{2}\big\{E(x,z,t)exp[i(\beta_0 z - \omega_0 t)] + cc\big\}, \tag{6.10}$$

donde cc denota el campo complejo conjugado. Esta condición hace posible el tratamiento escalar del campo que se desplaza a una frecuencia central ω_0, la frecuencia portadora, en torno a la cual el espectro de frecuencias presentes en el paquete se encuentra altamente concentrado debido a la condición de mono cromaticidad, es decir, $\omega_0 >> \delta\omega$. Esto permite pasar al espectro de frecuencias y trabajar con un campo $\mathcal{E}(\vec{r},\omega-\omega_0)$ que se define como la transformada de Fourier de $\vec{E}(\vec{r},t)$ centrada en ω_0:

$$\mathcal{E}(\vec{r},\omega-\omega_0) = \int_{\infty}^{\infty} E(\vec{r},t)exp[i((\omega-\omega_0)t)]dt. \tag{6.11}$$

El campo $\mathcal{E}(\vec{r}, \omega - \omega_0)$ satisface la ecuación de Helmholtz homogénea para la propagación de la onda en el medio descrito

$$\vec{\nabla}^2 \mathcal{E} + \epsilon(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \mathcal{E} = 0, \tag{6.12}$$

donde el factor $\epsilon(\omega)$ es la constante dieléctrica que representa la respuesta no lineal del medio ante la presencia de campos de altas intensidades.

La constante dieléctrica $\epsilon(\omega)$ es una función compleja y depende del espectro de frecuencias presentes, es decir presenta dispersión cromática. Su parte real está relacionada al índice de refracción modificado $\tilde{n}$ y su parte imaginaria al de absorción $\tilde{\alpha}$, a través de la definición:

$$\epsilon(\omega) = \left[\tilde{n}(\omega) + i \frac{\tilde{\alpha} c}{2\omega} \right]^2, \tag{6.13}$$

donde

$$\tilde{n}(\omega, |\vec{E}|) = n_0(\omega) + n_2 |\vec{E}|^2. \tag{6.14}$$

La Ec. (6.14) viene de la definición del efecto Kerr óptico, en el cual el índice de refracción total del medio $\tilde{n}$ varía con respecto al índice natural y lineal $n_0(\omega)$ debido a las oscilaciones no armónicas de los electrones ligados al material, lo cual constituye la respuesta no-lineal y adiabática (instantánea) del medio a la intensidad del campo aplicado. El coeficiente n_2 es conocido como el coeficiente de Kerr, determinado a partir de la susceptibilidad eléctrica de tercer orden del medio.

En los medios ópticos con la no linealidad de Kerr las pérdidas por los efectos de absorción descritos por $\tilde{\alpha}$ son considerablemente bajas, hasta el punto de poder ser ignoradas en comparación con la parte real de

$\epsilon(\omega)$ e incorporadas posteriormente como una perturbación a la evolución conservativa del frente de onda.

Tomando en cuenta estas aproximaciones, la ecuación de Helmholtz (6.12) se reduce a una forma simplificada que contiene sólo el término de no linealidad de Kerr:

$$\vec{\nabla}^2\mathcal{E} + \tilde{n}^2(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\mathcal{E} = 0, \tag{6.15}$$

Cuando el frente de onda que se propaga por la fibra se puede describir inicialmente como un pulso "ultracorto", con un ancho inicial T_0 desde lo 10 ns (10×10^{-9} seg) hasta los 10 fs (10×10^{-15} seg.) (Taylor, 1992) la solución general de Ec. (6.14) se puede expresar como una onda portadora, con número de onda $\beta_0 = n_0\omega_0/c$. La onda portadora se compone de una distribución de modos transversales soportados por la guía, $F(x, y)$, y la envolvente Ψ de lenta variación que modula la amplitud de los modos a lo largo de la propagación del pulso por la fibra:

$$\mathcal{E}(\vec{r}, \omega - \omega_0) = F(x, y)\Psi(z, \omega - \omega_0)exp(i\beta_0 z). \tag{6.16}$$

Sustituyendo la Ec. (6.16) en la Ec. (6.10) para el campo eléctrico del perfil de onda, se ve que éste adopta la forma

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2}\big\{F(x, y)\psi(z, t)exp[i(\beta_0 z - \omega_0 t)] + cc\big\}, \tag{6.17}$$

con

$$\psi(z, t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(z, \omega - \omega_0)exp[-i(\omega - \omega_0)]. \tag{6.18}$$

La función $\psi(z, t)$ representa la transformada de Fourier de $\Psi(z, \omega - \omega_0)$ en base a la frecuencia central ω_0, y se le conoce como la envolvente temporal

que se modula lentamente. La envolvente $\psi(z,t)$ se encuentra confinada en las direcciones transversales con respecto a la propagación z debido a las restricciones impuestas por la guía de onda, descritas por la distribución $F(x,y)$. La evolución de $\psi(z,t)$ a lo largo de la fibra es lo que determina el comportamiento de los pulsos "auto-confinados" que dan origen a los solitones del tipo temporal.

6.2. La NLSE y modulaciones espaciales lentas

Vamos a demostrar que la evolución de $\psi(z,t)$ obedece a la NLSE en $1+1$ dimensiones, bajo las siguientes condiciones: (i) monocromaticidad del frente, (ii) modulaciones espaciales lentas, y (iii) no linealidad débil de Kerr. Para esto, reemplazamos la función (6.16) en la ecuación de Helmholtz (6.12) y obtenemos la ecuación para la envolvente $\psi(z,t)$

$$2i\beta_0 \frac{\partial \psi}{\partial z} = -[\beta^2(\omega) - \beta_0^2]\psi, \tag{6.19}$$

en la cual se ignoró el término de segundo orden sobre ψ por su pequeña magnitud en comparación con la variación de primer orden, dada la aproximación de variación lenta de la envolvente

$$\left|\beta_0 \frac{\partial \psi}{\partial z}\right| >> \left|\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}\right|.$$

En la Ec. (6.19) se define la función de dispersión no lineal $\beta(\omega)$, que debido a la condición de monocromaticidad, $\omega_0 >> \Delta\omega$, es posible expandir en una serie de Taylor en torno a la frecuencia central ω_0,

$$\beta(\omega) = \beta_0 + (\omega - \omega_0)\beta_1 + \frac{1}{2}(\omega - \omega_0)^2\beta_2 + \beta_{NL}, \tag{6.20}$$

con

$$\beta_M = \frac{d^m\beta(\omega)}{dw^m}, \quad en \quad \omega = \omega_0. \tag{6.21}$$

Por su parte, la debilidad relativa de los efectos no lineales del medio de Kerr permite tratar a los términos superiores en la expansión de $\beta(\omega)$ como perturbaciones al número de onda natural y no dispersivo β_0

$$\beta(\omega) = \beta_0 + \Delta\beta(\omega), \tag{6.22}$$

además

$$\beta^2(\omega) - \beta_0^2 \approx 2\beta_0\Delta\beta(\omega). \tag{6.23}$$

Por otro lado, las características del medio de Kerr permiten encontrar una expresión para el término β_{NL} basado en la definición de la constante dieléctrica $\epsilon(\omega)$ 6.13:

$$\epsilon(\omega) \approx n_0^2(\omega) + 2n_0(\omega)\Delta n, \tag{6.24}$$

obteniendo

$$\beta_{NL} = 2n_0(\omega)\Delta n\frac{\omega^2}{c^2}, \tag{6.25}$$

donde

$$\Delta n = n_2|E|^2 + i\frac{\tilde{\alpha}c}{2w}. \tag{6.26}$$

Pasando nuevamente al dominio del tiempo para describir la dinámica de $\psi(z,t)$, y reemplazando los factores $(\omega - \omega_0)$ por el operador $i(\partial/\partial t)$

equivalente en la transformada de Fourier, el factor $\Delta\beta$ queda finalmente expresado como:

$$\Delta\beta = i\beta_1\frac{\partial}{\partial t} - i\frac{\beta_2}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma|\psi|^2 + i\frac{\tilde{\alpha}}{2}, \tag{6.27}$$

resultando

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} = -i\beta_1\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{\beta_2}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \gamma|\psi|^2 + i\frac{\tilde{\alpha}}{2}, \tag{6.28}$$

donde

$$\gamma = \frac{\omega_0 n_2}{cA_{eff}} = \frac{2\pi n_2}{\lambda_0 A_{eff}}. \tag{6.29}$$

El factor A_{eff} es conocido como área efectiva de la estructura interna de la fibra y es un parámetro característico de la misma. El parámetro A_{eff} se adapta artificialmente para producir la intensidad promedio del pulso apropiada para la formación de los solitones temporales. A_{eff} depende de las características físicas del medio, principalmente del radio de la fibra y la diferencia de índices de refracción entre el centro y su revestimiento ("core-cladding index difference") y por tanto de la distribución de modos $F(x, y)$ que soporta la fibra (Mollenauer y Gordon, 2006, Hasegawa, 2000, Hasegawa y Matsumoto 2003, Taylor 1992, Hasegawa y Kodama 1995, Bass 1995, Agrawal 2001). De esta forma, el coeficiente de la no-linealidad de Kerr del medio γ queda definido como la relación entre su índice de refracción no lineal n_2 y el producto entre la longitud de onda λ_0 del pulso y el área efectiva A_{eff}.

Se pueden hacer dos simplificaciones importantes en la Ec. (6.27) que describe la diná mica de la envolvente. Primero, tomamos en consideración el caso de disipación despreciable durante la propagación del pulso, como se consideró en la ecuación de Helmholtz reducida (6.15) donde $\epsilon(\omega) \approx \tilde{n}$, y el

factor de disipación $\tilde{\alpha}$ es igual a cero. Segundo, se puede transformar a la Ec. (6.28) del sistema de laboratorio con la variable t a un sistema que se mueve con el pulso a la velocidad de grupo V_g correspondiente a la frecuencia central ω_0, conocido como un sistema retardado. En el sistema retardado se introduce una nueva variable temporal τ:

$$T = t - \frac{\tau}{V_g}, \tag{6.30}$$

que permite cancelar el término $\partial\psi/\partial t$

6.3. Ecuación cúbica no lineal de Schrödinger

Finalmente, la dinámica de la envolvente obedece la NLSE, la cual describe su evolución a medida que se propaga en el eje axial z de una fibra de Kerr con coeficiente de nolinealidad γ a un tiempo retardado T:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} - \frac{\beta_2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial T^2} + \gamma|\psi|^2\psi = 0. \tag{6.31}$$

En las aplicaciones ópticas, la Ec. (6.31) presenta las variables temporal y espacial invertidas con respecto a la forma más común de la NLSE

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + |\psi|^2\psi = 0. \tag{6.32}$$

Los coeficientes β_1 y β_2 son de gran importancia en la evolución del pulso, porque dependen de las características del medio y caracterizan los efectos de dispersión lineal. El coeficiente β_1 se relaciona con el índice de refracción de grupo $n_g = c/V_g$,

$$\beta_1 = \left[\frac{d\beta(\omega)}{d\omega}\right]_{\omega=\omega_0} = \frac{n_g}{c} = \frac{1}{V_g}, \tag{6.33}$$

y por eso la Ec. (6.30) queda escrita como

$$T = t - \beta_1 z. \tag{6.34}$$

Análogamente β_2 se relaciona con las variaciones en esta velocidad con respecto a los diferentes componentes espectrales presentes en el ancho de banda $\Delta\omega$

$$\beta_1 = \left[\frac{d^2\beta(\omega)}{d\omega^2}\right]_{\omega=\omega_0} = \left[\frac{d\beta_1}{d\omega}\right]_{\omega=\omega_0} = \frac{1}{c}\left[2\frac{d\tilde{n}(\omega)}{d\omega} + \frac{d^2\tilde{n}(\omega)}{d\omega^2}\right]. \tag{6.35}$$

Vemos que, debido a la dispersión temporal del pulso, las diferentes componentes espectrales se propagan a diferentes velocidades de grupo (efecto de dispersión cromática). Por esta razón, a β_2 se le reconoce como el parámetro de dispersión de velocidad de grupo o GVD (group velocity dispersion) por sus siglas en inglés. El fenómeno GVD actúa expandiendo o contrayendo el pulso en el tiempo, modificando así el perfil de intensidad de la envolvente $|\psi|$ y cambiando la fase de cada componente espectral durante su propagación.

El tipo de dispersión, normal o anómala, que se presenta en el medio, determina el signo de β_2, positivo o negativo, respectivamente. Para un λ_D caracter ístico a una fibra particular, conocido como longitud de onda de dispersión cero, el parámetro β_2 correspondiente es igual a cero, pasando a ser positivo para longitudes de onda $\lambda < \lambda_D$ y negativo cuando $\lambda > \lambda_D$ (para fibras de vidrio, $\lambda \approx 1{,}3\nu m$).

En sus trabajos pioneros, A. Hasegawa y F. Tappert (1973a, 1973b) propusieron la existencia de soluciones tipo solitones temporales en fibras de Kerr con una distribución $F(x, y)$ uni-modal y en el régimen de dispersión anómala y normal basando en la NLSA normalizada

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} \pm \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + |\psi|^2\,\psi = 0, \tag{6.36}$$

donde el signo ($\pm$) corresponde a dos tipos de GVD: negativo $\beta_2 < 0$ (en la ecuación (6.32) el signo +), o positivo $\beta_2 > 0$ (en la Ec. (6.32) el signo –). Basándose en los estudios de Zakharov y Shabat (1972), Hasegawa y Tappert mostraron que la Ec. (6.32) describe la propagación de solitones brillantes ("bright solitons") que se forman en el régimen de dispersión anómala $\beta_2 < 0$ y solitones oscuros ("dark solitons") que se forman en el régimen de dispersión normal $\beta_2 > 0$. Los primeros son pulsos electromagnéticos de intensidad positiva y los segundos son huecos de intensidad en un fondo continuo de radiación electromagnética. Cuando se investiga al sistema con nolinealidad de Kerr más allá de la cúbica, por ejemplo, surge la ecuación cúbica quinta nolineal de Schrödinger (c-qNLSE, por sus siglas internacinales).

7. SISTEMA NO INTEGRABLE: ECUACIÓN CÚBICA QUINTA DE SCHRÖDINGER

La ecuación no lineal cúbica quinta de Schrödinger (c-qNLSE) aparece en varios contextos físicos de fenómenos no lineales, como, por ejemplo, en la teoría del ferromagnetismo de interacción atractiva de 2 cuerpos y de interacción repulsiva de 3 cuerpos; en hidrodinámica nuclear con "Skyrme forces" (Kartavenko 1984, Makhankov 1991); en la descripción del calentamiento electromagnético del plasma (Friedberg, 1987); en el estudio de transiciones de fase (Agüero, 1991, Makhankov 1991).

Este modelo es extensamente utilizado en óptica no lineal en el estudio de la propagación de rayos estacionarios de luz en el medio con no-linealidad débilmente saturada (Biswas y Milovic 2010, Bullough y Caudrey 1980) y otras aplicaciones concernientes con el estudio de diversos sistemas biológicos (Davydov 1985).

7.1. Ecuación no lineal cúbica quinta de Schrödinger

Veamos una manera de obtener la ecuación no lineal cúbica quinta (c-qNLSE) de Schrödinger al realizar un estudio del modelo ferromagnético de Heisenberg de eje simple. Este procedimiento se basará en el uso del método de estados coherentes que será expuesto con mayor detalle en su capítulo correspondiente y en Makhankov (1991), Perelomov (2010) en los que uno puede encontrar más detalles.

El modelo ferromagnético de Heisenberg correspondiente al caso del eje simple puede ser descrito mediante el Hamiltoniano en 1+ 1 dimensiones, que tiene en cuenta la interacción entre los spines y fonones y se da en términos de los operadores de spin $\hat{S}$ con campo magnético externo $B = (0, 0, h)$, como sigue:

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{T} + \hat{V}, \tag{7.1}$$

$$\hat{H}_s = -\frac{1}{4}\sum_{i\sigma}\left[J_{ii+\sigma}\left(\hat{S}_i^+\hat{S}_{i+\sigma}^- + h.c.\right) - 2J_{ii+\sigma}\hat{S}_i^z\hat{S}_{i+\sigma}^z\right] - \mu h\sum_i \hat{S}_i^z, \tag{7.2}$$

$$T = \frac{m}{2}\sum_i \dot{x}_i^2,\ V = \frac{mu_0^2}{2a_0^2}\left[x_{i+1} - x_i - a_0\right]^2 + \frac{V_3}{3!}\left[x_{i+1} - x_i - a_0\right]^3. \tag{7.3}$$

Siendo T la energía cinética de las oscilaciones de la malla y V es la energía potencial con términos inarmónicos, u_0 es la velocidad del sonido, m es la "masa" del spin, que se considera igual para todos, a_0 la distancia entre vecinos, $J_{ii+\sigma}$ las constantes de acoplamiento y μ representa la susceptibilidad magnética.

Expresamos el Hamiltoniano (7.2) en términos de operadores Bose usando las bien conocidas expresiones de Holstein-Primakov (1940). Seguidamente utilizamos a los estados coherentes del grupo de Heisenberg-Weyl

$$|\Phi>= e^{\varphi a^{+}-\bar{\varphi}a}|0>= e^{\frac{1}{2}|\varphi|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\varphi^n}{\sqrt{n!}}|n> . \tag{7.4}$$

para promediar el Hamiltoniano H_s de la relación (7.2) y obtenemos el Hamiltoniano cuasi-cásico

$$H_{cl} =< \Phi|\hat{H}_s|\Phi > . \tag{7.5}$$

El análisis de la ecuación de movimiento en el límite continuo usando (7.5) nos produce la siguiente ecuación diferencial [1]:

$$i\varphi_{\zeta} + \varphi_{zz} - \lambda\varphi + \left(|\varphi|^2 - \nu|\varphi|^4\right)\varphi = 0, \tag{7.6}$$

en la variedad espacio temporal (z, ζ) con las siguientes relaciones entre sus parámetros principales

$$\lambda = \mu h - \frac{s(J_0 - J_1)(1-\rho)}{4(J_1 s^2(1-\rho)^2)/c + \frac{1}{2}sJ_0}, \tag{7.7}$$

$$\mu = 4sJ_2(\rho - 1)/\sqrt{c}, \qquad c = mu_0^2. \tag{7.8}$$

A la Ec. (7.6), como ya lo mencionamos, se le denomina ecuación no lineal cúbica quinta de Schrödinger (c-qNLSE). Pasamos a analizar la c-qNLSE y a encontrar soluciones de tipo solitónico. Para ello escribamos la ecuación

[1] mayores detalles en el Cap.XII

anterior en una forma ligeramente diferente considerando los minimos del potencial:

$$i\psi_\tau + \psi_{\xi\xi} - (3|\psi|^2 - (2A - \rho_0))(|\psi|^2 - \rho_0)\psi = 0, \tag{7.9}$$

con

$$\frac{A}{\rho_0} = -2 + \frac{3}{4}\frac{1}{\lambda\mu}(1 + \sqrt{1 - 4\lambda\mu}). \tag{7.10}$$

La Ec. (7.9) fue obtenida re-escalando las variables de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \psi(\xi,\tau) &= \sqrt{3}\sqrt{2\mu(A+2\rho_0)^{-1}}\varphi(z,\zeta), \\ \zeta &= \frac{9}{8\mu}(A+2\rho_0)^{-2}\tau, \\ z &= \frac{3}{2}\frac{1}{\sqrt{2\mu}}(A+2\rho_0)^{-1}\xi. \end{aligned} \tag{7.11}$$

Sin pérdida de generalidad, podemos fijar el valor de $\rho_0 = 1$, ya que las propiedades de las soluciones sólo dependen de la relación paramétrica: A/ρ.

En adelante, a las variables ξ y τ las trataremos como si ahora fuesen las variables de costumbre x y t. Si analizamos a la expresión (7.9) como una ecuación diferencial producto de un cálculo variacional, entonces, el Hamiltoniano que da origen a esa ecuación se expresa como

$$E = \int |\psi_x|^2 dx + \int \big(|\psi|^2 - \rho_0\big)^2\big(|\psi|^2 - A\big)dx = T + U. \tag{7.12}$$

Exigiendo que la energía del sistema sea finita, se obtiene que el campo ψ en el infinito debe de satisfacer

$$\lim_{|x|\to\infty} |\psi|^2 = \sigma, \tag{7.13}$$

donde $\sigma = 0, 1, \dfrac{2A+1}{3}$ es una constante que nos denotará los "vacíos" (estables e inestables) del potencial, es decir los valores del campo en donde

$\psi = \pm\sqrt{\sigma}$. El potencial tiene una serie finita de vacíos degenerados. El término vacío, no significa un estado en el espacio de Hilbert, sino que es una configuración clásica con mínima enería. Entonces, si la energía es finita, las soluciones de la ecuación de movimiento conllevan que los valores asintóticos de $\psi(x)$ deben de coincidir con los ceros del potencial.

La parte potencial de la energía

$$U = (|\psi|^2 - 1)^2(|\psi|^2 - A), \tag{7.14}$$

exhibe un mínimo cuando $A > 1$ en el punto $|\psi|^2 = 2A + 1/3$. La representación del potencial $U(\psi)$ para diferentes valores del parámetro A se muestra en la Figura (7.1)

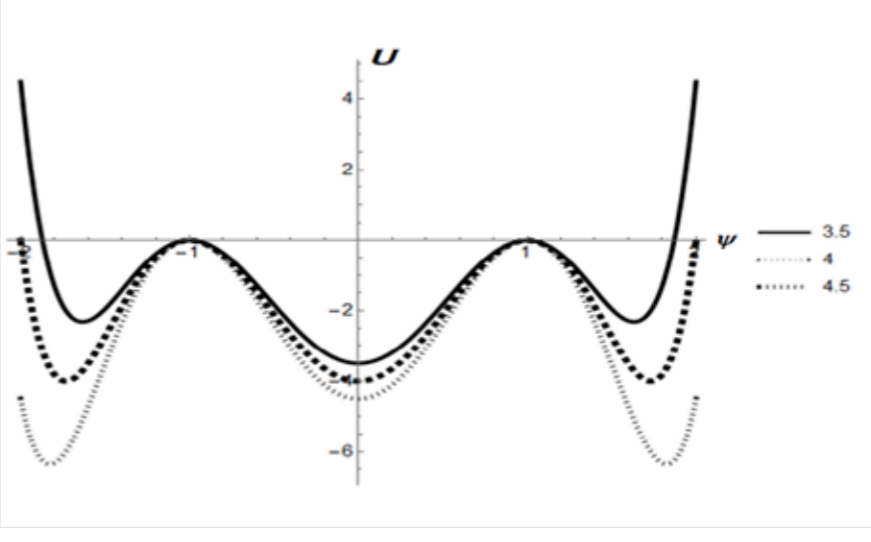


Figura 7.1. *El potencial ψ^6 para valores del parámetro $A = 3{,}5;\ 4;\ 4{,}5$.*

Otra integral de movimiento del modelo es el llamado "número de partículas" que se escribe como

$$N = \int dx\{|\psi|^2 - \sigma\}. \tag{7.15}$$

A continuación, usamos la linealización de la ecuación no lineal (7.9). Como es bien conocido, las perturbaciones del modo normal con frecuencia ω y el número de onda k son tomadas proporcionales al factor:

$$e^{-i\omega t+ikx}.$$

El campo cerca del punto $\beta = \sqrt{1+2A/3}$ se podrá escribir como

$$\psi = \sqrt{\beta} + \xi(x,t), \tag{7.16}$$

donde

$$\xi(x,t) = \eta_1(x,t)e^{i(kx-\omega t)} + \eta_2(x,t)e^{-i(kx-\omega t)}. \tag{7.17}$$

La siguiente expresión para la dispersión se obtiene fácilmente y es:

$$\omega^2 = k^4 + k^2(4/3)(A-1)(1+2A). \tag{7.18}$$

Esta es la ley de dispersión de Bogoliubov, de la cual encontramos la "velocidad del sonido" o la velocidad de fase

$$v_s = \lim_{k\to 0}\frac{\omega}{k} = \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)\sqrt{(A-1)(2A+1)}. \tag{7.19}$$

De la última ecuación vemos que el condensado considerado es estable para $A \geq 1$. Cuando el sistema se aproxima al valor de $A = 1$, la velocidad del sonido alcanza el valor $v_s = 0$.

7.2. Términos de atracción y repulsión en la ecuación no lineal de campo

En la literatura se menciona que la Ec. (7.9) representa la dinámica de bosones con interacción par puntual de atracción y una interacción repulsiva de tres partículas. Veamos el por qué de la asignación calificativa de repulsión y atracción. Obtendremos el significado implícito que tienen los signos de los componentes no lineales de la ecuación no lineal cúbica-quinta de Schrödinger. Se pueden extrapolar los resultados obtenidos hacia otras ecuaciones no lineales.

Sea que se tienen dos cargas eléctricas Q_1 y Q_2 que interaccionan entre sí. Entonces, el potencial de interacción de estas dos cargas se escribe como (haciendo que la constante de Coulomb sea igual a la unidad):

$$U(r_1, r_2) = \pm \frac{Q_1 Q_2}{|r_1 - r_2|}, \tag{7.20}$$

siendo r_1 y r_2 los vectores de posición de las cargas. Como se sabe el signo del potencial U determina el tipo de interacción entre las dos cargas así, el signo $+$ determina la atracción y el signo $-$ la repulsión.

Empleamos el método semiclásico para el espacio $1+1$ dimensional. La evolución del sistema será descrita por la función de onda $\psi(x,t)$, es decir por su amplitud de probabilidad. Entonces, la magnitud $|\psi(x_1,t)|^2$ es la correspondiente densidad de probabilidad de la partícula de situarse en el

punto x en el momento t. Por lo tanto, de la ley de Coulomb se puede deducir la forma de densidad de probabilidad para la energía potencial de dos partículas interactivas

$$\sigma(x_1, x_2) = \frac{Q_1|\psi(x_1,t)|^2 Q_2|\psi(x_2,t)|^2}{|x_1 - x_2|}. \tag{7.21}$$

Obviamente la energía potencial total de dos partículas interactivas estará dada por la integral

$$V = \int dx_1 dx_2 \sigma(x_1, x_2). \tag{7.22}$$

Ahora generalicemos el esquema arriba mencionado cuando el potencial arbitrario (clásico) de dos partículas interactivas este representado como $U(x_1, x_2)$. Entonces, la densidad de probabilidad de la energía potencial de dos partículas interactivas será

$$w(x_1, x_2) = |\psi(x_1)|^2 |\psi(x_2)|^2 U(x_1, x_2), \tag{7.23}$$

y para la energía total tendremos

$$W_{12} = \int dx_1 dx_2 w(x_1, x_2). \tag{7.24}$$

Si ahora la interacción es del tipo puntual entonces con ayuda de las δ-funciones de Dirac podemos escribir

$$U(x_1, x_2) = U_{12}\delta(x_1 - x_2), \tag{7.25}$$

por tanto de (7.23) tenemos

$$W_{12} = U_{12} \int dx |\psi|^4, \tag{7.26}$$

el signo de U_{12} determina el tipo de interacción: el signo $-$ determina la respulsión y a su vez el signo $+$ nos representa la atracción. Cuando en la

escena comienzan a interactuar tres partículas, el potencial de esa interacción se escribirá como $U(x_1, x_2, x_3)$. Si la interacción entre las particulas es del tipo puntual, entonces como antes

$$U(x_1, x_2, x_3) = U_{123}\delta(x_1 - x_2)\delta(x_2 - x_3). \tag{7.27}$$

Para la densidad de probabilidad de la energía potencial tenemos

$$w(x_1, x_2, x_3) = |\psi(x_1)|^2|\psi(x_2)|^2|\psi(x_3)|^2 U(x_1, x_2, x_3),$$

y donde la energía potencial total será:

$$W_{123} = \int w(x_1, x_2, x_3)dx_1dx_2dx_3 = U_{123}\int dx|\psi(x)|^6. \tag{7.28}$$

El signo de la magnitud U_{123} en (7.28) determina el tipo de interacción idénticamente como en el caso de interacción par puntual.

De aquí deducimos que los términos proporcionales a $|\psi|^4$ y a $|\psi|^6$ pueden representar atracciones o repulsiones en dependencia del signo de sus respectivos coeficientes. El potencial tendrá entonces los siguientes términos

$$U_{12}|\psi|^4 + U_{123}|\psi|^6, \tag{7.29}$$

que corresponden a la interacción par y triple. Para el caso de la Ec. (7.6) los coeficientes serán $U_{12} = 1$ y $U_{123} = -\nu$, siendo $\nu > 0$. Resumiendo, la ecuación no lineal (7.6) representa un sistema bosónico con interacción par puntual de atracción y de interacción repulsiva de tres particulas.

7.3. Soluciones topológicas y no-topológicas

Los solitones de la ecuación no lineal cúbica quinta de Schrödinger están agrupados en dos grandes clases como: a) Soluciones topológicas, b)

Soluciones no-topológicas. Para el caso no relativista del modelo ϕ^6 tenemos a la Ec. (7.6), (para obtener la teoría relativista se hace el reemplazo de $i\phi_t$ por ϕ_{tt}). Existe una vasta literatura sobre solitones topológicos y no topológicos, ver por ejemplo Shnir (2018).

Las soluciones solitónicas no-topológicas son aquellas cuyas condiciones de frontera en el infinito son las mismas que para el estado del vacío. En cambio las soluciones topológicas poseen condiciones de frontera distintas del estado del "vacío" trivial. Esto quiere decir que podrían existir estados de vacíos degenerados, por ejemplo el solitón estará "amarrado" por sus condiciones de frontera. Un ejemplo de solución solitónica topológica es un escalón o kink del modelo ϕ^6.

Las soluciones solitónicas con energía finita contienen propiedades topológicas que las estabilizan. Entonces se introduce un nuevo tipo de "invariante del movimiento" pero topológico, que se conserva con el tiempo. Al igual que otras magnitudes invariantes, ésta juega el papel de "número cuántico" del estado del sistema. Estos números cuánticos son distintos a las invariantes comunes como energía, impulso, carga, etc. Como es conocido, estas últimas provienen de la existencia de simetrías continuas del Lagrangiano del sistema, como son los desplazamientos temporales, espaciales, de "grupos internos", etc. A diferencia de éstos, los "números topológicos" aparecen de las condiciones de frontera que permiten al sistema tener energía finita.

Entonces estas leyes de conservación son distintas a las leyes de conservación de tipo Noether. A menudo, estos números están ligados con una clase definida de rompimiento de simetría. Las soluciones se dividen en

sectores. Para la obtención de sectores es necesario tener dos o más mínimos degenerados. Este fenómeno tiene gran significado en la física actual y se le denomina "rompimiento espontáneo de la simetría". Es importante entonces analizar el enlace de los sectores no triviales topológicos con la existencia de mínimos degenerados del potencial y que está relacionado con el rompimiento de la simetría.

En caso general, para estudiar el problema de índices o números topológicos de movimiento, es necesario investigar la "ligadura" del espacio de fase del sistema (en el espacio de fase se introducen sólo aquellos puntos en los cuales el Hamiltoniano es finito). Claro está que la trayectoria de un sistema mecánico clásico todo el tiempo se encuentra en el "sector" del espacio de fase en el cual ella estaba en el momento inicial. Dos puntos pertenecerán a un mismo sector del espacio de fase, si estos pueden unirse mediante una línea continua, que comience en uno de ellos y termine en el otro. En otras palabras, el número del sector del espacio de fase se puede considerar como una integral de movimiento. Estas integrales se llaman "integrales topológicas de movimiento". Después de la cuantización del sistema, éstas también se conservan.

Apliquemos ahora estos argumentos al caso de las soluciones regulares de la c-qNLSE en $1+1$ dimensiones del espacio-tiempo, Ec. (7.9). Esta versión unidimensional permite obtener soluciones solitónicas en forma explícita.

7.3.1. Solitones tipo gotas

Las soluciones tipo gotas las podemos obtener si $x \to \pm\infty$ por lo que $\psi \to 0$. Entonces las cargas topológicas correspondientes serán: $Q_g = 0$. Una solucion

$$\psi_g = e^{i\zeta}\left\{ -4\alpha \Big/ \left(1+\sqrt{1+\frac{16}{3}\alpha}Cosh[\sqrt{x-x_0}]\right)\right\}^{1/2}. \tag{7.30}$$

Donde

$$\alpha = -\frac{3}{4}\frac{1+2A}{(A+2)^2}. \tag{7.31}$$

La solución tipo gota (representado en la figura (7.2)) en movimiento se obtendrá al realizar las transformaciones de Galileo respectivas, :

$$\begin{aligned} \theta_0 &\rightarrow \frac{v}{2}x - \frac{v^2}{4}t + \theta_0 \\ cosh[\sqrt{-\alpha}(x-x_0)] &\rightarrow cosh[\sqrt{-\alpha}(x-vt-x_0)]. \end{aligned} \tag{7.32}$$

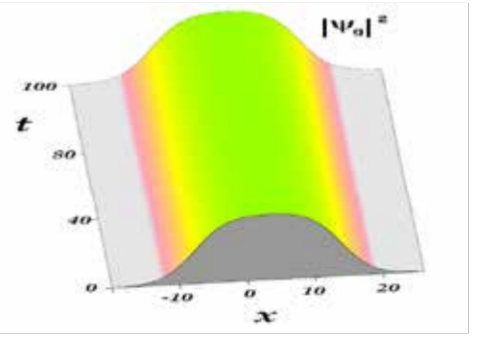


Figura 7.2. *Esquema del solitón tipo gota cuando* $A = 4{,}5;\ v = 1;\ x_0 = 0$. *Su amplitud no crece tan rápido como su anchura.*

El nombre se deriva de la siguiente situación. Si calculamos la integral de movimiento llamada "número de partículas"

$$N = \int dx|\psi_g|^2,$$

obtenemos (Makhankov 1991, Agüero, Espinoza, 1993).

$$N = \sqrt{3} Arch \left[\left(1 - 4 \left(\frac{1+2A}{(A+2)^2} \right) \right)^{-\frac{1}{2}} \right]. \tag{7.33}$$

Cuando $\alpha \to -\dfrac{3}{16}$, es decir, si el parámetro A tiende a su valor crítico $A \to 4$ en $A > 1$ (análogamente si $A \to 0$ en la región $A < 1$), esta solución crece rápidamente a lo ancho en comparación al crecimiento en altura, como si se tratara de una gota. Por esta razón es que adquiere ese nombre de solución solitónica tipo gota.

7.3.2. Burbujas y escalones solitónicos

Por otro lado, si los vacíos degenerados del potencial no son absolutos, entonces las soluciones son del tipo *burbujas* y son soluciones no-topológicas. Para el caso de dos vacíos degenerados absolutos, las soluciones correspondientes se llaman kinks o escalones. Trataremos de encontrar estas dos soluciones para la Ec. (7.9) utilizando el ansatz

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\rho(x,t)} e^{i\theta(x,t)} = \sqrt{\rho(\xi)} e^{i\theta(\xi)}, \tag{7.34}$$

y haciendo uso de las soluciones de onda viajera: $\Psi(x,t) = \varphi(\xi), \quad \xi = x - vt$, la C-QNLSE se divide en dos ecuaciones

$$\frac{\rho''}{2\rho} - \frac{\rho'^2}{4\rho^2} - \theta_\xi(\theta_\xi - v) - 3(\rho - 1)(\rho - \beta) = 0, \tag{7.35a}$$

$$\frac{v}{2\rho}(\rho - \beta) = \theta_\xi, \tag{7.35b}$$

con $\beta = \dfrac{2A+1}{3}$. Reemplazando (7.35b) en (7.35a) y denotando

$$r = \rho - \beta, \qquad a = [6\beta(\beta - 1) - v^2]/4 = (v_s^2 - v^2)/4,$$

uno puede encontrar que las fórmulas anteriores (7.24) se reducen a la siguiente expresión para obtener soluciones tipo burbuja

$$\pm\,(\xi-\xi_0)=\int\frac{1}{r\sqrt{r^2+(5A-2)r/3+a}}dr. \tag{7.36}$$

Invirtiendo la integral anterior en el segmento $1<A<4$ se obtiene la solución solitónica (Agüero, Espinoza 1993), ver figura (7.3).

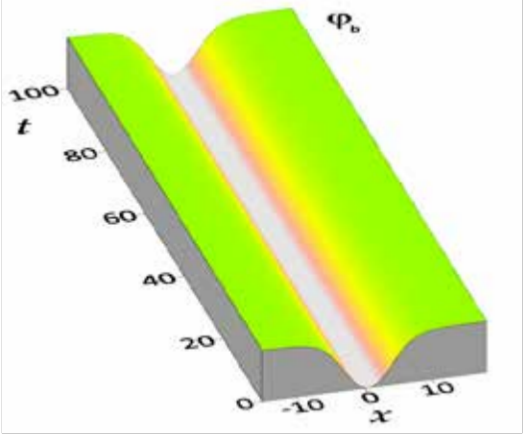


Figura 7.3. *Representación solitón tipo burbuja con enrarecimiento del campo con los valores* $A=3{,}5,\ v=1{,}2,\ x_0=0,\ \theta=0.$

$$\varphi_b=e^{i\theta}\frac{\sqrt{(4-A)/3}\;Cosh(y)}{\sqrt{1+(4-A)/(2A+1)\;Sinh^2(y)}}, \tag{7.37}$$

con $y=(v_s/2)(\xi-\xi_0)$. La condición para que existan soluciones solitónicas es $v_s-v>0$. De la fórmula anterior (7.37) vemos que φ_b es una función par de la variable y.

Esta solución describe una burbuja en el condensado. La amplitud de esta burbuja depende del valor de: 4-A. Cuanto más pequeño es el valor de este

parámetro, más pronunciado es el enrarecimiento de la burbuja. Es decir el anrarecimiento del campo es mayor si A tiende a uno.

Para el segemento $A > 4$ la solución toma la siguiente forma

$$\Phi_k = \sqrt{(A-4)/3}e^{i\theta}\frac{Sinh(y)}{\sqrt{1+(A-4)/(2A+1)Cosh^2(y)}}. \tag{7.38}$$

Esta solución se muestra en Figura (7.4) y posee una forma de kink o escalón.

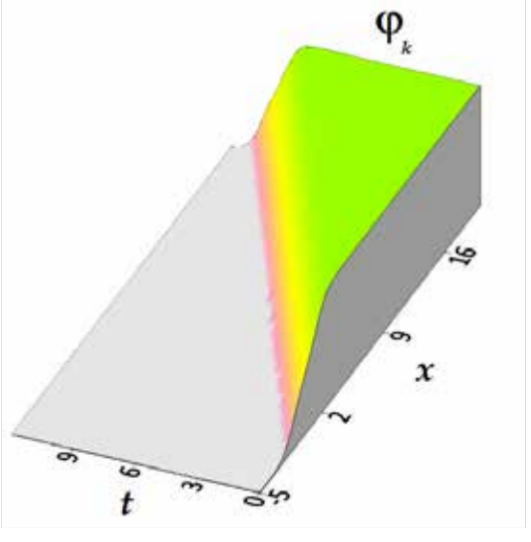


Figura 7.4. *Típica solución tipo escalón o llamado tambien kink, para los valores paramétricos* $A = 5,5;\ v = 1{,}1;\ x_0 = 0;\ \theta = 0.$

Resumiendo podemos decir que el signo de $A - 4$ determina el tipo de soluciones que soporta el sistema en ese momento: solución solitónica kink o burbuja. Las fluctuaciones alrededor del condensado podrían causar la aparición de kinks y pasar a través de un vacío inestable a otro vacío estable y simétrico. Si el kink es muy pequeño, lo ganado en energía de volumen

por formarse una región de vacío verdadero podría no ser suficiente para compensar la pérdida de energía en la superficie.

Una vez obtenida la solución solitónica podemos calcular las otras integrales de movimiento como el "número de partículas" N y la energía E para solitones tipo burbujas (b) y tipo kink (k).

$$N_{k,b} = -Arch\left\{\frac{b}{\sqrt{b^2-4a}}\right\}, \tag{7.39}$$

$$E_{k,b} = \sqrt{a}(A/2+1) + [A + (v^2 - A^2)/4]N_{k,b}. \tag{7.40}$$

con $b = (5A-2)/3$.

7.3.3. Aproximación de pequeña amplitud

Para el caso límite de pequeñas amplitudes, derivamos la ecuación no lineal de KdV. Consideremos sólo ondas transónicas, es decir, esas ondas débilmente dependientes de coordenadas transversales. Para este propósito usamos la "teoría de perturbación reductiva" usando las nuevas variables definidas por: $\xi = \epsilon^{1/2}(x - v_s t)$, $\tau = \epsilon^{3/2}t$, donde ϵ es un parámetro pequeño. A continuación expandimos el campo ρ y $W = \partial_x\theta$, en términos de potencias de ϵ cerca del condensado $\rho = \beta$, $W = 0$,

$$\rho = \beta + \varepsilon\rho_1 + \varepsilon^2\rho_2 + \dots\,, \qquad W = \varepsilon W_1 + \varepsilon^2 W_2 + \dots, \tag{7.41}$$

En el sistema de ecuaciones (7.35a) y (7.35b) para el primer orden de magnitud ϵ se produce la ecuación de Korteweg-de Vries:

$$\partial_\sigma\rho_1 - \partial_\eta^3\rho_1 + 3\partial_\eta\rho_1^2 = 0. \tag{7.42}$$

Con las relaciones entre las variables: $\xi = (5\beta-3)^{-1/2}\eta$, $\tau = 2v_s(5\beta-3)^{-3/2}\sigma$. La solución expresada en términos de las variables originales toma la forma

$$\sqrt{\rho} = \left\{\beta - \frac{2b}{5\beta-3} sech^2\left[\sqrt{b}(x - v_s t + 2b/(v_s)t - x_o)\right]\right\}^{1/2}, \qquad (7.43)$$

con $4b = g(5\beta - 3) > 0$, siendo g la velocidad del solitón. Esta solución se mueve en el condensado con una velocidad cercana, pero menor que la velocidad del sonido. Esta solución describe una onda localizada de enrarecimiento de campo y puede ser llamada también "solitón burbuja". Para dimensiones mayores que uno, por ejemplo, para $D = 2$, la Ec. (7.42) se transforma en la ecuación de Kadomtsev-Petviashvilli (KP). La importancia de la "jerarquía" de KP se debe a su conexión con la gravedad-2D acoplada a la materia (Zakharov, Manakov, Novikov y Pitaevsky 1984).

7.4. Analogía mecánica de las soluciones solitónicas

Para una mejor exposición, nos concentraremos en soluciones estáticas o sea en aquellas que no dependen del tiempo. La Ec. (7.9) para el caso más general en espacios con dimensiones $D >1$ adquiere la forma

$$\Phi'' + \frac{D-1}{r}\Phi' - k^2\Phi + \Phi^3 + \Phi^5 = 0. \qquad (7.44)$$

Como de costumbre $\mathbf{r} = (x, y, z)$ y $r = |\mathbf{r}|$. El apóstrofe encima de la función de campo significa derivada parcial con respecto a r. El parámetro k de esta ecuación se relaciona con el parámetro α de la Ec. (7.6) por: $\lambda = k^2$. Las condiciones de frontera que se toman en cuenta son de dos tipos.

1. Condiciones de frontera tipo gotas: $x \to \pm\infty$, $\phi \to 0$.

2. Condiciones de frontera tipo condensado: $x \to \pm\infty$, $\phi \to cte$.

Colocando el segundo término de la Ec. (7.44) en la parte derecha y multiplicando la ecuación por ϕ' uno obtiene:

$$\frac{1}{2}\left(\Phi'^2 - k^2\Phi^2 + \frac{1}{2}\Phi^4 - \frac{1}{3}\Phi^6\right)' = \frac{D-1}{r}(\Phi')^2, \tag{7.45}$$

Luego denotamos

$$U_p = \frac{1}{2}\left[- k^2\Phi^2 + \frac{1}{2}\Phi^4 - \frac{1}{3}\Phi^6\right]. \tag{7.46}$$

Entonces la ecuación para la energía de la "partícula" será

$$E_p = \frac{1}{2}(\Phi')^2 + U_p. \tag{7.47}$$

Ahora consideramos al campo ϕ como una coordenada de "posición" ξ de una partícula-análoga puntual con masa $m = 1$ en el instante de "tiempo" τ, $|r \to \tau|$ que evoluciona en el potencial externo $U(\xi)$ bajo la acción de una fuerza de fricción $-\frac{D-1}{\tau}\xi_\tau$. Entonces la solución $\phi(r)$ de la Ec. (7.45) describe la trayectoria de la partícula $\xi(\tau)$

Analicemos el caso dimensional $D = 1$. La Ec. (7.44) no es más que la ecuación de Newton y la Ec. (7.47) es justamente la ley de conservación de la energía para la partícula con coordenada ξ. Además, esta relación se considera como el teorema virial para la partícula análoga. El potencial $U(\Phi)$ que usaremos para la mecánica de la partícula análoga es la misma que el potencial

$$U(\phi) = (\phi^2 - 1)^2(\phi^2 - A). \tag{7.48}$$

Sea que la dinámica del campo escalar se determina por la densidad del Lagrangiano invariante con respecto a las transformaciones de Lorentz.

$$L = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 - U(\phi). \tag{7.49}$$

El potencial $U(\phi)$ tiene mínimos igual a cero y otros para ciertos valores de ϕ . Como es conocido, la ecuación de Euler-Lagrange que se obtiene del Lagrangiano (7.49) tiene la forma

$$\ddot{\Phi} - \Phi'' = -\frac{\partial U}{\partial \Phi}. \tag{7.50}$$

En la Ec. (7.50), el punto de encima del campo significa derivada parcial por el tiempo. Si la solución del campo es estática, la ecuación de movimiento para la "partícula análoga ξ" será

$$\xi'' = \frac{d^2\xi}{dx^2} = \frac{\partial U}{\partial \xi}. \tag{7.51}$$

Por ende, para la ecuación de la "partícula ξ" tenemos la ecuación de Newton pero con signo contrario en su parte derecha. La solución de campos $\phi(x)$, $(r = x)$ describe el movimiento de esta partícula análoga. La "energía total" de esta partícula que se conserva con el "tiempo x" se determina por la ecuación

$$W = \frac{1}{2}\left(\frac{d\xi}{dx}\right)^2 - U(\xi). \tag{7.52}$$

Las condiciones de frontera para el campo Φ se establecen como ya se mencionó de la siguiente manera

$$x \to \pm\infty, \quad \phi \to 0, \quad cte, \quad y \quad \frac{\partial\phi}{\partial x} \to 0, \tag{7.53}$$

por lo cual

$$W \to -U(\phi \to 0, cte) \quad si \quad x \to \pm\infty. \tag{7.54}$$

Con esta analogía mecánica vamos a analizar cualitativamente la dinámica de la partícula análoga bajo el potencial $-U|\phi|$ (figura (7.1)). Sea que se tiene un solo mínimo en el potencial U para $\phi = \phi_1 = 0$. En este mínimo el potencial tiene un valor constante $g = 1/2$. No es difícil de percatarse que este cuadro corresponde al caso $A = 1$. Entonces el potencial $-U|\phi|$ tiene un máximo cuando $\phi = 0$. Las condiciones de frontera exigen que las trayectorias con energía constante igual a $1/2$ comiencen y terminen en este punto es decir en $\phi = 0$. Pero realizar esto es imposible, porque si la partícula se movió un poco estando en este punto máximo, sea a la izquierda o derecha, su energía cinética no será nunca cero y será mayor que su energía potencial. Por lo tanto, la partícula no podrá detenerse y después regresar. Esto quiere decir que la partícula análoga no corresponde a una onda solitaria estática. Cuando el parámetro A aumenta de valor $A > 1$, el potencial de la partícula análoga adquiere dos máximos laterales relativos. Ahora la partícula debe de terminar su movimiento en cualquiera de los dos máximos distintos de cero: $\phi^2 = \lambda = \dfrac{2A+1}{3}$ para ello la partícula análoga descenderá desde cierta altura h del má ximo absoluto. Como es obvio la velocidad inicial de estas partículas será iguales a cero. Esta partícula análoga corresponde a la solución tipo burbujas (figura 7.3).

Si seguimos aumentando el valor del parámetro A hasta llegar a $A = 4$, conseguimos tres máximos degenerados. $-U = 4$, $\phi_1 = 0$, $\phi_2 = -\sqrt{3}$, $\phi_3 = \sqrt{3}$. Ahora la solución puede empezar en uno de los máximos digamos en ϕ_1 cuando $x \to -\infty$ para finalizar su movimiento en la otra lomita ϕ_2. Este mismo proceso puede empezar en ϕ_2 y terminar en ϕ_3 o en direcciones contrarias. El número total de soluciones estáticas para n máximos es igual

a $2(n-1)$. Por ejemplo, la solución que va desde ϕ_1 hasta ϕ_2 tiene la forma (para $A > 1$)

$$\varphi = e^{i\theta}\sqrt{\lambda}\left(1 + (\lambda - 1)\exp\left(\pm 2\lambda\left(x - x_0\right)\right)\right)^{\frac{-1}{2}}. \tag{7.55}$$

Al aumentar el valor del parámetro $A > 4$, el potencial para la partícula-análoga tendrá dos máximos absolutos degenerados y uno relativo. El máximo relativo $\phi = 0$ es el lugar en donde terminará su movimiento la partícula análoga si va cayendo desde cierta altura apropiada en las faldas de los máximos adyacentes y que corresponderá en el campo clásico a las soluciones no topológicas tipo gotas (Figura (7.2)).

El movimiento de la partícula análoga que empieza en uno de los dos máximos absolutos y termina en la otra corresponde a las soluciones solitónicas estáticas tipo kinks. Estas son soluciones topológicas, porque sus condiciones de frontera generan la correspondiente carga topológica (figura 7.4) descrita más arriba.

Las trayectorias con energía constante en el espacio de fase ($q = \xi,\ \ p = \xi'$) se obtienen usando la ecuación de la energía (7.52). Para el campo clásico estacionario el plano fase es (Φ, Φ').

Usando las condiciones de frontera (7.53) para el campo en el infinito "x" para la partícula análoga con coordenadas canónicas (q, p) tenemos sus trayectorias de fase donde existen estas partículas:

$$p^2 = \left(q^2 - 1\right)^2\left(q^2 - A\right) + g. \tag{7.56}$$

El valor de la constante g está determinado para cada tipo de solución calculando los valores del campo en el infinito, en la ecuación de sus energías.

Por ejemplo en la región $A > 1$ tenemos para las soluciones correspondientes el valor del parametro:

$$g = \frac{4}{27}(A-1)^3 . \tag{7.57}$$

Los valores del parámetro relevante g para los kinks y burbujas son diferentes. Esto se debe a que los valores del parámetro $A > 1$ son distintos para ellos. Así, los kinks viven en la región $A > 4$ y las burbujas en el sector $1 < A < 4$.

Una de las trayectorias de fase para la gota se muestra en la figura (7.5).

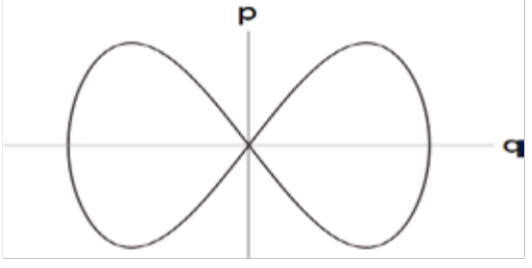


Figura 7.5. *Trayectoria fase correspondiente a la partícula análoga del solitón tipo gota, con* $A = 4{,}5$.

De las ecuaciones para las trayectorias de fase se puede notar que a la energía mínima en el potencial para el solitón le corresponde una energía máxima para la partícula análoga. Esto sucede obviamente por la diferencia de signos de la energía potencial en los dos casos. Por este motivo, la trayectoria de la partícula análoga debe de terminar en la cima de las lomas correspondientes al vacío o condensado de los solitones. Las gotas comparten su "existencia" con los kinks en $A > 4$ (cuando $A < 1$, el sector análogo es $-\frac{1}{2} < A < 0$).

Las trayectorias de fase para la burbuja y el escalón tipo solitón se exhiben en las figuras (7.6), (7.7).

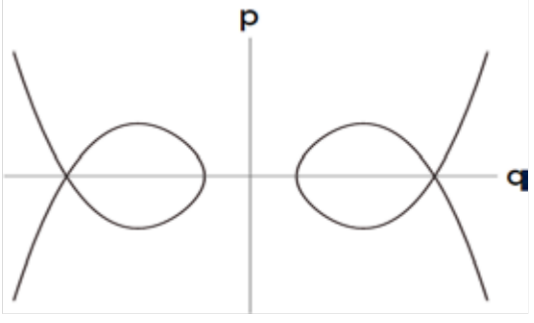


Figura 7.6. Trayectoria fase de las burbujas solitónicas con $A = 3{,}2$.

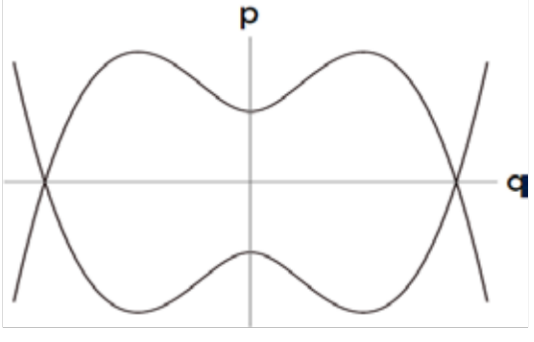


Figura 7.7. *Trayectoria fase correspondiente a la solución tipo escalón con* $A = 4{,}7$.

En el espacio de 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 líneas se mueve la partícula análoga correspondiente a las soluciones solitónicas estáticas del modelo.

Como se puede ver de la Ec. (7.44), para espacios con dimensiones $D > 1$, aparecen fuerzas de fricción que alteran drásticamente las trayectorias de la partícula originando disipación de energía. Por este motivo, las trayectorias de las partículas en el espacio de fase se transformarán. En la región de los kinks aparecerán soluciones tipo vórtices. Como es conocido, esto quiere decir que la partícula análoga tarde o temprano ocupará un lugar en el mínimo de su potencial o en el máximum central. Entre otras propiedades ciertas soluciones en estos espacios poseen nudos (Rybakov 1985).

8. SOLITONES EN SISTEMAS MOLECULARES

La introducción del concepto de excitaciones colectivas, caracterizadas por un mutuo y coherente movimiento de un gran número de partículas, ha sido extremadamente fructífera. Recientemente se ha reconocido que un mecanismo ideal para el transporte de excitaciones colectivas en un medio se realiza con la ayuda de ondas no lineales localizadas más comúnmente llamadas excitaciones sobre el nivel básico del modelo, las cuales se propagan como entidades únicas sin deteriorar su forma y velocidad.

8.1. Excitaciones colectivas en el ADN

Davydov y Kislukha (1973) propusieron un modelo para el transporte y almacenamiento de energía a través de solitones de la ecuación de Schrödinger no lineal en macromoléculas biológicas en 1973. Posteriormente, Scott (1983) sugirió la presencia de los solitones de Davydov en moléculas proteicas alpha-helix. Con ello, se demostró una eficiencia en la transferencia de la energía vibracional en sistemas biológicos por medio de solitones. En

1980, Englander y colaboradores sugieren por primera vez una teoría de excitaciones solitónicas como explicación a la naturaleza de los estados abiertos en polinucleótidos largos de doble hélice (Englander, Kallenbach, Heeger, Krumhansí y Litwin, 1980). Últimamente, (Herrera, Maza, Minzoni, Smyth y Worthy 2004) realizan un estudio de evolución del solitón de Davidov en un medio no homogéneo adicionando ingredientes ondulatorios. Se muestra que el solitón es relativamente estable e incluso que el gradiente de temperatura del medio podría inducir movimiento de reversa del solitón.

La transmisión de los caracteres hereditarios de todos los seres vivos se realiza a través de la molécula del ADN. Es conocido que el ADN se conforma por dos bandas o ramas entrelazadas entre sí, formando una doble hélice a manera de una escalera de caracol. Sin embargo, para llegar a estas conclusiones se necesitó un largo tiempo de investigación y discusión. El estudio principal y más relevante en cuanto a la estructura del ADN fue llevado a cabo por Watson and Crick (1953), a quienes su investigación realizada en los primeros años de la década de 1950 les valió el Premio Nobel. Su aporte se basó principalmente en las siguientes investigaciones ya existentes:

i) Los estudios bioquímicos mostraban que la molécula del ADN o ácido desoxirribonucleico era una molécula "gigante" compuesta únicamente por seis clases de moléculas: moléculas de ácido fosfórico, una azúcar llamada desoxirribosa y cuatro bases nitrogenadas. Estas bases se clasifican en purinas, compuestas por dos anillos, uno de cinco átomos y otro de seis, y en las pirimidinas, compuestas únicamente por un anillo de seis átomos, lo que hace que las bases purínicas sean ligeramente de mayor tamaño que las

bases pirimidínicas. Las bases purinas presentes en el ADN son la Adenina (A) y Guanina (G), por el otro lado las bases pirimidinicas presentes son la Timina (T) y Citosina (C).

ii) En investigaciones posteriores se mostró que estás seis moléculas están ordenadas en forma específica, donde las bases nitrogenadas se encuentran unidas a la desoxirribosa y ésta misma se une a la molécula de fosfato. Este conjunto de base-azúcar-fosfato se denomina *nucleótido*.

A pesar de que el ADN está conformado únicamente por cuatro clases distintas de bases, la molécula de ADN es una estructura muy larga (estudios más recientes muestran que el ADN posee una longitud de alrededor de dos metros para el ser humano e incluso de kilómetros para la salamandra). A pesar de su longitud es imposible observar el ADN con un microscopio óptico.

Los modelos más simples que simulan a una molécula de ADN corresponden a un filamento o conjunto de masas unidas por un resorte. En este caso se supone que la molécula de ADN puede ser modelada por un arreglo de (N+1) granos encadenados a lo largo de un eje, separados una distancia aproximada de 3.4Å para la hélice de Watson-Crick, indizados de O a N. Se supone que los (N+1) granos están unidos por N resortes torsionales idénticos, los cuales tienen una rotación de equilibrio tal que en el equilibrio resulta una hélice.

En los estudios correspondientes se toman en cuenta tres tipos de desplazamientos: los longitudinales a lo largo de la cadena, los rotacionales y los de flexión en la cadena. La interacción con el medio se analiza en otro modelo importante que considera la cuerda delgada inmersa en un líquido

viscoso en equilibrio térmico. La mejora a estos tratados se da al considerar ahora dos cadenas tipo grano-resorte unidas por resortes en cada par de granos, como se muestra en la figura (8.1).

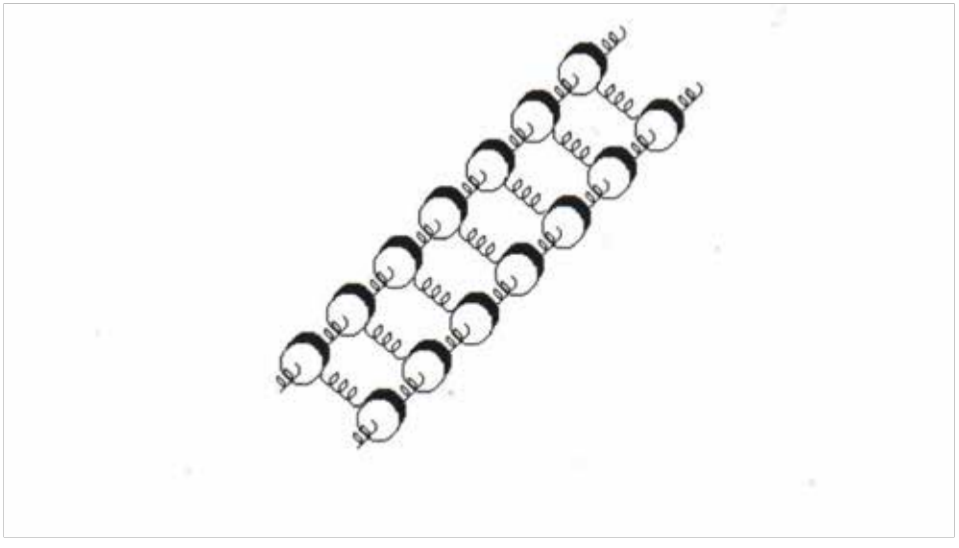


Figura 8.1. *Una doble cadena tipo grano resorte unida por resortes que simbolizan los puentes de hidrógeno.*

Englander *et al.* (1980) sugirieron por primera vez una teoría de excitaciones solitónicas como explicación a la naturaleza de los estados abiertos (horquillas) en polinucleótidos largos de doble hélice. Posteriormente, Yomosa (1983) hace una propuesta interesante al demostrar que la separación de las bases se puede presentar por efecto de un desplazamiento de rotación en la base apareada con la primera cuyo potencial es armónico o de tipo Hooke.

En contraste con el modelo de Yomosa, en el modelo de Peyrard y Bishop (1989) y sus múltiples variantes con influencias del tipo armónico externo se asume que la principal contribución al proceso del ensanchamiento local de los pares de bases (o separación de la doble hélice) se hace por medio de "estiramiento" de los puentes de hidrógeno. El modelo incluye, además de éste, otros dos tipos de movimientos internos: los desplazamientos transversales de las bases de su posición de equilibrio a lo largo de la dirección del puente de hidrógeno que conectan a los pares de base.

El potencial para el puente de hidrógeno es un potencial de Morse, el cual tiene un mínimo de energía determinando las posiciones de equilibrio en los desplazamientos y un acoplamiento armónico debido al apilamiento que tiene con las bases vecinas. Las soluciones a este tipo de modelos son solitones que pueden ser interpretados como distorsiones locales que se mueven a lo largo de la molécula del ADN.

La dinámica de desnaturalización reversible e irreversible del ADN bajo la acción de un potencial armónico no estacionario fue considerada por (Villagran, Morales Peña y Serkin, 2006). Para investigar el proceso de desnaturalización, se crea el modelo que imitaba las dos cadenas de polinucleótidos unidas por medio de puentes de hidrógeno. Como en los dos casos previos, para simplificar los cálculos, la estructura helicoidal de la molécula de ADN se desprecia y entonces el modelo es un sistema de masas y resortes como el que se muestra en la figura (8.1).

Cada una de las masas representa una base. Los resortes longitudinales que conectan a las masas de la misma cadena son los que representan por un potencial de Van der Waals entre bases adyacentes; Los resortes transversales

representan los puentes de hidrógeno que conectan las bases en pares y son modelados mediante un potencial de Lennard-Jones. En este caso, se realiza un análisis numérico de las soluciones del sistema obtenido.

8.2. Modelo de partículas acopladas

Las bandas de ADN pueden ser consideradas como cadenas unidimensionales con un arreglo de partículas manteniendo una distancia constante a lo largo de la cadena. Estas se encuentran unidas por medio de resortes, que les permiten una interacción directa con los primeros vecinos únicamente. Estas redes son del tipo Klein-Gordon, caracterizadas por mantener un potencial en sitio, es decir, un potencial asociado a cada sitio de las partículas; en nuestro caso se trata del potencial creado por los puentes de hidrógeno. Además, el sistema se conforma por un número N de partículas en un arreglo periódico, es decir, $X_{n+N} = X_n$. Así que nos enfrentamos a un problema de una cadena discreta donde la n-ésima partícula interacciona con las partículas de los lugares $(n-1)$ y $(n+1)$. Seguidamente se puede pasar al límite continuo y obtener la ecuación diferencial que modela el sistema.

Los movimientos del ADN son de muchos tipos, los estudiados con mayor profundidad son la torsión y el pliegue de la molécula, las transiciones conformacionales y las aperturas de la hélice. Dado que la cadena de ADN se encuentra torcida y enredada en sí misma por cuestiones de empaquetamiento,su conformación y estructura mantiene muchos grados de libertad, más o menos 100 por cada par de bases, por esta razón un estudio completo de la dinámica del ADN tomando en cuenta todos los grados de

libertad es casi imposible. De manera que, al igual que en la mayoría de los modelos físico-matemáticos de sistemas dinámicos, una simplificación sobre los grados de libertad es lo más adecuado, manteniendo aquellos que sean de mayor relevancia o dominantes en la separación de las cadenas de ADN.

Como ya se mencionó, la apertura de la hélice se debe al rompimiento de los puentes de hidrógeno que forman los pares de bases, y pueden existir aperturas locales como la de la burbuja de transcripción. Los modelos principales que describen la dinámica de la apertura del ADN se dividen principalmente en dos, de acuerdo al origen de apertura:

a) Modelos de rotación de bases. En este tipo de modelos las bases son consideradas como péndulos y la ruptura de las mismas se produce por la rotación de éstas. El modelo más representativo es el de Yakusevich (1958).

b) Modelos de desplazamientos transversales de las bases. Este tipo modela únicamente los movimientos transversales de las bases sin tomar en cuenta los longitudinales de la cadena, ya que no son los predominantes en la ruptura de los puentes de hidrógeno, que son modelados por potenciales de corto alcance. Este tipo de modelo fue el adoptado por Peyrard y Bishop (1989).

Aunque el modelo de Peyrard-Bishop parece ser una sobre simplificación de la estructura del ADN, ha sido una plataforma muy importante en las investigaciones sobre la dinámica de esta cadena molecular, además ha predicho las temperaturas de fusión y descripción de la curva de fusión en la desnaturalización del ADN con una muy buena aproximación.

Con anterioridad se explicó que los enlaces entre los pares de bases son puentes de hidrógeno, es decir, del tipo covalente, donde los enlaces A-T se mantienen con dos puentes de hidrógeno mientras que los C-G con tres.

Las energías de estos enlaces son:

$$E_{A-T} = 7{,}00\frac{kcal}{mol}, \tag{8.1}$$

$$E_{C-G} = 16{,}79\frac{kcal}{mol}. \tag{8.2}$$

Uno de los potenciales más exitosos en describir enlaces del tipo covalentes, en particular de puentes de hidrógeno, es el potencial nolineal de Morse, (figura (8.2)) llamado así por su creador.

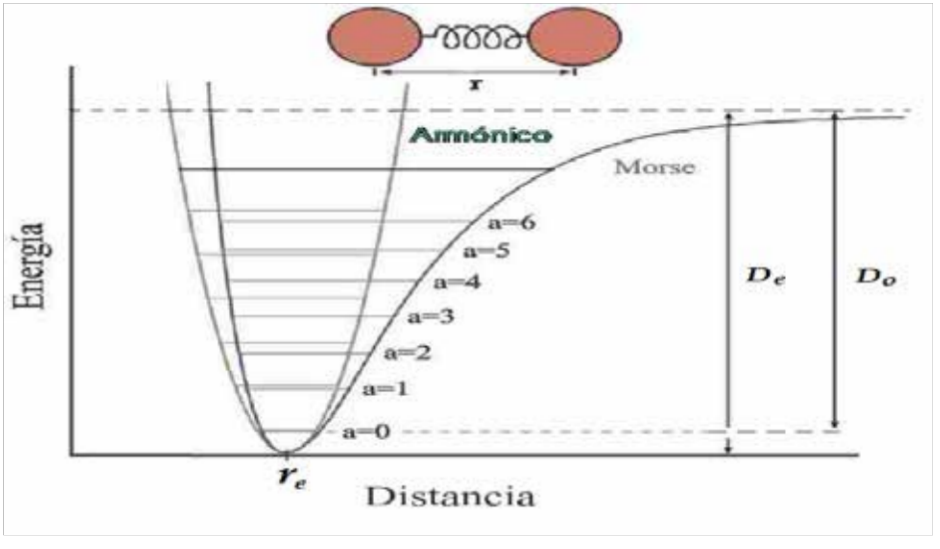


Figura 8.2. *Representación del potencial de Morse en función de la distancia r, donde D_e, D_o son las profundidades del pozo para valores específicos de la distancia intermolecular r , a - es el ancho del pozo, r_e, es el punto donde el potencial posee un mínimo.*

Este potencial mantiene una pendiente muy pequeña a grandes distancias, es decir, que la fuerza de atracción entre las partículas lejanas es muy pequeña, por el contrario, la fuerza de repulsión para partículas cercanas crece exponencialmente. Este potencial viene descrito por la expresión:

$$V = D(1 - e^{-a\ r})^2. \tag{8.3}$$

En el cual a D se le conoce como el potencial de disociación de la molécula o profundidad del pozo de potencial, r es la distancia intermolecular y a es el parámetro que controla el ancho del pozo.

La derivada del potencial de Morse tiende a cero cuando y tiende al infinito, esta es una condición necesaria en los potenciales que modelan fuerzas a largas distancias. El pozo del potencial está determinado por su anchura y el parámetro D.

8.3. Modelo de Peyrard-Bishop

El modelo de Peyrard-Bishop fue introducido en 1989 para el estudio del proceso de transcripción del ADN y para realizar un análisis estadístico de la desnaturalización del ADN. Este modelo se basa en los movimientos transversales existentes entre los pares de bases, (*stretching)* también simplifica la estructura del ADN, considerando la cadena helicoidal como una escalera recta, en donde las bandas del ADN son los "pasamanos" de la escalera y cada uno de los"peldaños" son los puentes de hidrógeno que unen las bases.

El modelo original de Peyrard-Bishop considera un potencial armónico de apilamiento entre los pares de bases adyacentes y de interacción a primeros

vecinos. El modelo es considerado homogéneo, dado que no considera la variación de la fuerza entre los dos tipos de enlace lineal y no lineal y tampoco considera la diferencia de las masas de los nucleótidos, ya que esta diferencia es de sólo un 3 %.

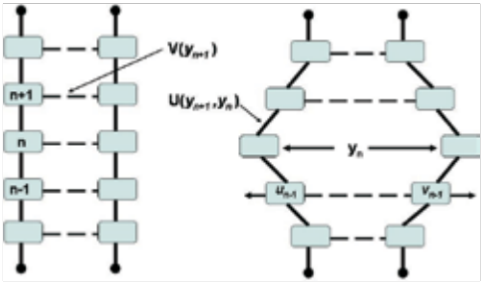


Figura 8.3. *Representación esquemática de un trozo del modelo de* ADN*, propuesto por Peyrard y Bishop, consistente de dos bandas o ramas paralelas sin torsión helicoidal.*

La interacción en la red de los nucleótidos se debe a una fuerza que une a las partículas vecinas y decae rápidamente con partículas lejanas. Esta fuerza puede ser modelado por medio de un tipo de resorte que mantenga las cualidades necesarias a estudiar, sin ser forzosamente un *resorte ideal*, ver figura (8.3). En el modelo de Peyrard-Bishop estos resortes mantienen cualidades no lineales tanto por el potencial de Morse como por el apilamiento de bases vecinas. Los resortes permiten que únicamente los movimientos de las partículas desde su posición de equilibrio sean los relevantes para la construcción de las ecuaciones de movimiento. En este caso los movimientos de las partículas están descritos por variables que apuntan en direcciones opuestas a la unión de los puentes de hidrógeno. El cambio de posición de

las moléculas no sólo provoca la separación entre los pares de bases, sino que también produce una tensión en las bases adyacentes, la cual es controlada por un potencial armónico (usado por Peyrard y Bishop), o un potencial inarmónico, como es utilizado en este trabajo (Agüero, Nájera & Carrillo, 2008).

Bajo estas características, se construye el Hamiltoniano de redes del tipo Klein-Gordon:

$$H = \sum_n \frac{m}{2}(\dot{u}^2 + \dot{\nu}^2) + U(u_n, \nu_n, u_{n\pm1}, \nu_{n\pm1}) + W(u_n, \nu_n), \qquad (8.4)$$

en donde u_n y ν_n son los desplazamientos respecto a las posiciones de equilibrio de la n-ésima partícula de cada una de las cadenas, $\dot{u}_n$ y $\dot{\nu}_n$ son los momentos de cada uno de los desplazamientos, m es la masa de las bases y U es el potencial inarmónico debido a las desviaciones desde la posición de equilibrio de los desplazamientos u_n y ν_n. Este tipo de potencial no es arbitrario y es usado en una gran variedad de sistemas dinámicos en diversos campos de la Física, las cuales presentan estructuras solitónicas. Este potencial inarmónico fue el presentado por Fermi-Pasta-Ulam, y es conocido como el modelo β-FPU (Fermi, Pasta, Ulam, 1955), donde el sistema de osciladores es análogo al propuesto en este trabajo. El potencial U de (8.4) tiene la forma:

$$\begin{aligned} U(u_n, \nu_n, u_{n\pm1}, \nu_{n\pm1}) &= \frac{k_1}{2}\left[\left(u_n - u_{n-1}\right)^2 - \left(\nu_n - \nu_{n-1}\right)^2\right] + \\ &+ \frac{k_{11}}{2}\left[\left(u_n - u_{n-1}\right)^4 - \left(\nu_n - \nu_{n-1}\right)^4\right], \end{aligned} \qquad (8.5)$$

con k_1 y k_{11} constantes de acoplamiento y W el potencial de Morse entre los pares de bases adyacentes tiene la forma:

$$W(u_n, \nu_n) = \delta(exp[-a(u_n - \nu_n)] - 1)^2. \tag{8.6}$$

Considerando ahora la siguiente transformación de coordenadas,

$$z_n = \frac{u_n + \nu_n}{\sqrt{2}}; \quad y_n = \frac{u_n - \nu_n}{\sqrt{2}}, \tag{8.7}$$

de manera que z_n describa sólo los movimientos en fase de las bases, y_n describe los desplazamientos fuera de fase del n-ésimo par de bases. Observemos que y_n es el único desplazamiento que describe la separación (stretching) de las ramas del ADN. Cuando se analiza el potencial inarmónico en el nuevo sistema de coordenadas tenemos que:

$$\begin{aligned}(u_n - u_{n-1})^4 + (\nu_n - \nu_{n-1})^4 &= \frac{1}{2}(z_n - z_{n-1} + y_n - y_{n-1})^4 + \\ &+ \frac{1}{2}(z_n - z_{n-1} - (y_n - y_{n-1}))^4. \end{aligned} \tag{8.8}$$

Haciendo la transformación

$$g = z_n - z_{n-1} = \frac{u_n - u_{n-1}}{\sqrt{2}} + \frac{\nu_n - \nu_{n-1}}{\sqrt{2}}, \tag{8.9}$$

$$h = y_n - y_{n-1} = \frac{u_n - u_{n-1}}{\sqrt{2}} + \frac{\nu_n - \nu_{n-1}}{\sqrt{2}}, \tag{8.10}$$

por lo que

$$(u_n - u_{n-1})^4 + (\nu_n - \nu_{n-1})^4 = \frac{1}{2}(g^4 + h^4 + 6g^2h^2). \tag{8.11}$$

Considerando que la suma de la diferencia de los desplazamientos es mayor que la resta de la diferencia de los desplazamientos, es decir, $g > h$ tenemos:

$$(u_n - u_{n-1})^4 + (\nu_n - \nu_{n-1})^4 \approx \frac{1}{2}(g^4 + h^4), \tag{8.12}$$

El Hamiltoniano resultante bajo este cambio se puede separar en dos partes: el Hamiltoniano que representa la parte acústica o fonónica y la parte óptica,

$$\begin{aligned} H = H(x) + H(y) &= \\ &= \sum_n \left(\frac{1}{2} p_n^2 + U(z_{n+1}, z_n) \right) \\ &+ \sum_n \left\{ \frac{1}{2} q_n^2 + U(y_{n+1}, y_n) + \delta \left[exp(-\sqrt{2} a y_n) - 1 \right]^2 \right\}, \end{aligned} \tag{8.13}$$

donde $p_n = \dot{u}_n$ y $q_n = \dot{\nu}_n$. Para estudiar el comportamiento de la separación de bases usamos la parte óptica del Hamiltoniano

$$U(y_{n+1}, y_n) = \frac{k_1}{2}(y_{n+1} - y_n)^2 + \frac{k_2}{4}(y_{n+1} - y_n)^4, \tag{8.14}$$

haciendo $k_2 = \dfrac{k_{11}}{2}$, la parte óptica del Hamiltoniano (8.14) resulta de la forma:

$$\begin{aligned} H(y) &= \sum_n \left\{ \frac{1}{2} p_n^2 + \frac{k_1}{2}(y_{n+1} - y_n)^2 \right. \\ &+ \left. \frac{k_2}{4}(y_{n+1} - y_n)^4 + \delta \left[exp(-\sqrt{2} a y_n) - 1 \right]^2 \right\}. \end{aligned} \tag{8.15}$$

La ecuación de movimiento para la n-ésima partícula será:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 y}{dt^2} &- C_1(y_{n+1} + y_{n-1} - 2y_n) - C_2 \left[(y_{n+1} - y_{n-1})^3 - (y_n - y_{n-1})^3 \right] \\ &- 2\sqrt{2} a \; D \; [exp(-\sqrt{2} a y_n) - 1] exp(-\sqrt{2} a y_n) = 0, \end{aligned} \tag{8.16}$$

con los parámetros $C_1 = (k_1/m)d^2, C_2 = (k_2/m)d^4, D = \delta/m$ que controlan el potencial entre la misma cadena y denotan la fuerza del acoplamiento lineal y no lineal respectivamente.

Hacemos un análisis del sistema en el límite continuo en donde y_n varía lentamente de un sitio a otro, ya que estamos interesados en la distribución de ecuaciones a lo largo de la cadena, por lo que ésta se puede considerar como una cuerda continua. La aproximación estándar continua se hace sobre $y_n \to y(x,t)$ y se realiza una expansión de Taylor sobre los sitios $y_{n\pm1}(t) = y(x \pm d, t)$, en donde x es la posición de la perturbación, y es la coordenada temporal y d la distancia entre las bases adyacentes en el arreglo de la cadena:

$$y_n \approx y(x,t), \tag{8.17}$$

$$y(n \pm 1, t) \approx y(X,t) \pm \frac{\partial y(X,t)}{\partial X} + \frac{\partial^2 y(X,t)}{\partial X^2}, \tag{8.18}$$

en donde se ha introducido la variable adimensional $X = x/d$, con el propósito de simplificar las expresiones. Introduciendo estas aproximaciones en las ecuaciones de movimiento (8.16) y simplificando obtenemos :

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - \left[C_1 + 3C_2\left(\frac{\partial y}{\partial X}\right)^2\right]\left(\frac{\partial^2 y}{\partial X^2}\right) - 2\sqrt{2}aDe^{-\sqrt{2}ay}(e^{-\sqrt{2}ay} - 1) = 0. \tag{8.19}$$

Aquí se han tomado en cuenta únicamente los términos de segundo orden, por lo que se ha despreciado el término $\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2 y}{\partial X^2}\right)^3$.

Finalmente, dado que nuestro objetivo es encontrar soluciones en forma de ondas viajeras con un perfil permanente, se introduce la variable s como la coordenada de desplazamiento con una velocidad de propagación arbitraria,

$$y(s) = y(X - \nu t) \tag{8.20}$$

por lo tanto:

$$\left(\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}\right) = \nu^2 \frac{\partial^2 y}{\partial s^2}, \tag{8.21}$$

$$\frac{\partial y}{\partial X} = \frac{\partial y}{\partial s}. \tag{8.22}$$

Entonces, la ecuación de movimiento para las soluciones tipo ondas viajeras se reduce a:

$$(\nu^2 - C_1)y_{ss} - 3C_2 y_{ss} y_s^2 - 2D\alpha e^{-\alpha y}(e^{-\alpha y} - 1) = 0, \tag{8.23}$$

Con $\alpha = \sqrt{2}a$ y $y_s = \dfrac{\partial y}{\partial s}$. Multiplicando por $\dfrac{dy}{ds}$ e integrando para reducir el grado de la ecuación se obtiene:

$$\frac{(\nu^2 - C_1)}{2} y_s^2 - \frac{3}{4} C_2 y_s^4 - D\alpha e^{-\alpha y}(e^{-\alpha y} - 2) + C = 0, \tag{8.24}$$

siendo C una constante arbitraria. Haciendo el cambio de variable:

$$\phi = exp(-\alpha y), \tag{8.25}$$

tenemos:

$$y = -\frac{1}{\alpha} ln(\phi), \quad y_s = -\frac{1}{\alpha}(\phi_s/\phi). \tag{8.26}$$

Introduciendo estas expresiones y multiplicando por ϕ^4 en la Ec. (8.24), obtendremos:

$$\frac{(\nu^2 - C_1)}{2} \frac{1}{\alpha^2} \phi_s^2 \phi^2 - \frac{3}{4} \frac{1}{\alpha^4} C_2 \phi_s^4 - D\phi^5(\phi - 2) + C\phi^4 = 0. \tag{8.27}$$

Ahora, reescribiendo la expresión con los parámetros

$$B = \frac{(\nu^2 - C_1)}{2\alpha^2}, \; A = \frac{3}{4} \frac{C_2}{\alpha^4}, \tag{8.28}$$

llegamos a la ecuación diferencial ordinaria:

$$A\phi_s^4 - B\phi_s^2\phi^2 - D\phi^5(\phi - 2) + C\phi^4 = 0. \tag{8.29}$$

Para obtener las características esenciales de soluciones físicamente aceptables en el modelo presentado, debemos imponer ciertas condiciones de frontera: triviales y las condiciones del tipo condensado asi como también las propiedades paramétricas del sistema. En la figura (8.4) se representa un esquema de los puentes de hidrogeno y sus caracteristicas energeticas.

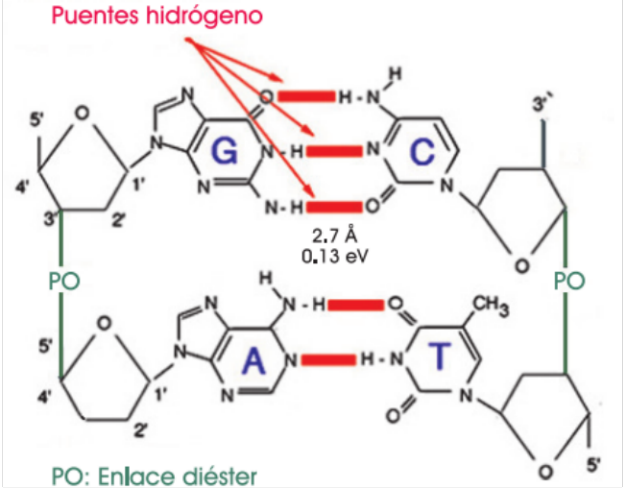


Figura 8.4. *Esquema de los puentes de hidrógeno que unen las bases del* ADN *donde se muestra la energía y distancia de enlace.*

Gracias a la simplicidad del modelo de Peyrard-Bishop, únicamente es necesario conocer el valor de cuatro parámetros: el valor del pozo del potencial de Morse, que en este caso es $D = 0{,}03eV$, siendo éste un valor ligeramente arriba de k_bT a temperatura ambiente (siendo k_b la constante de Boltzmann); el parámetro que define la anchura del pozo es $a = 4{,}5A^{-1}$, la

masa de los nucleótidos m se considera de 300 uma, por último, la constante correspondiente al enlace lineal entre las bases adyacentes k_1. El valor de esta constante oscila entre los $0{,}01\frac{eV}{A^2}$ y $10\frac{eV}{A^2}$, debido a que la constante se mide experimentalmente tomando en cuenta diversos factores como la torsión, el plegado o el estiramiento, por lo que se puede considerar como un resultado válido el tomar en cuenta algún valor que sea aceptable entre estos límites, como es indicado en Peyrard y Bishop (1989). Hemos considerado a $k_1 = 0{,}06\frac{eV}{A^2}$. Se ha tomado en cuenta un acoplamiento lineal entre las bases, además de un enlace inarmónico, cuya fuerza se encuentra limitada por la constante $k_2 = -0{,}026\frac{eV}{A^2}$.

De acuerdo con los experimentos, la velocidad con la que viaja la burbuja de desnaturalización es de entre 20 a 40 pares de base por segundo. La fuerza promedio de rompimiento es de alrededor de 13 pN. Los enlaces de hidrógeno son mucho más débiles que los enlaces covalentes, por ejemplo, un enlace típico covalente C-C tiene una longitud de $1{,}54A$ y energía de enlace de $3{,}6eV$. Mientras que un enlace de hidrógeno con un oxígeno mantiene una longitud de $2{,}75eV$ con una energía de enlace de entre $0{,}13 - 0{,}26eV$ y puede ser *estirado* alrededor de $0{,}1A$ con un gasto mínimo de $0{,}004\ eV$.

8.4. Soluciones solitónicas en el modelo matemático del ADN

Antes de comenzar con el análisis de nuestra expresión integro-diferencial, que determina las soluciones resultantes, debemos comenzar con el estudio de las condiciones de salto. Algunas soluciones obtenidas son físicamente aceptables tal y como surgen de las ecuaciones diferenciales. Sin embargo, en ocasiones

las soluciones, o partes de ellas, deben sufrir un "pegado" en algún punto, para la construcción final de la única estructura admisible. Estos trozos de solución son llamados ramas o brazos. El pegado de ramas es esencialmente un traslado de pedazos de las soluciones sin modificar las propiedades de éstas, ya que ambas ramas viajan con la misma velocidad.

8.4.1. Condiciones de salto

El desplazamiento necesario para unir las soluciones, se da en términos de las condiciones de frontera y corresponde a algún valor s_0 del espacio s. El término s_0 está determinado por el valor de la función $\phi(s)$ evaluado en algún punto, según sea el caso determinado por el salto. Las condiciones de salto son aproximaciones utilizadas principalmente en el estudio de fluidos complejos. Estas condiciones de salto dan la pauta para el pegado de las soluciones en puntos, donde existe una discontinuidad en la que se cumple la relación:

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{\partial \phi}{\partial x}|_{x_0-\Delta x}^{x_0+\Delta x} \neq 0. \tag{8.30}$$

Esta relación nos indica el cambio de la derivada al cruzar por el punto x_0, si es diferente a cero entonces la derivada puede ser discontinua y las ramas pueden ser pegadas en ese punto.

Partiendo de nuestra ecuación general:

$$(\nu^2 - C_1)y_{ss} - 3C_2 y_{ss} y_s^2 - 2D\alpha e^{-\alpha y}(e^{-\alpha y} - 1) + C = 0, \tag{8.31}$$

debemos integrar alrededor de un punto s_0 donde se pretenda realizar el pegado:

$$\int_{x_0-\Delta x}^{x_0+\Delta x} \{(\nu^2 - C_1)y_{ss} - 3C_2 y_{ss} y_s^2 - 2D\alpha e^{-\alpha y}(e^{-\alpha y} - 1) + C\} ds = 0. \tag{8.32}$$

Así se obtiene,

$$(\nu^2 - C_1)y_s|_{x_0-\Delta x}^{x_0+\Delta x} - C_2 y_s^3|_{x_0-\Delta x}^{x_0+\Delta x} - \int_{x_0-\Delta x}^{x_0+\Delta x}[2D\alpha e^{-\alpha y}(e^{-\alpha y}-1)+C]ds = 0, \tag{8.33}$$

Tomando el límite de integración alrededor del punto s_0.

$$\begin{aligned}\lim_{\Delta s\to 0}(\nu^2 - C_1)y|_{s_0-\Delta s}^{s_0+\Delta s} &- \lim_{\Delta s\to 0} C_2 y_s^3|_{s_0-\Delta s}^{s_0+\Delta s} \\ &- \lim_{\Delta s\to 0}\int_{s_0-\Delta s}^{s_0+\Delta s}[2D\alpha e^{-\alpha y}(e^{-\alpha y}-1)+C]ds = 0.\end{aligned} \tag{8.34}$$

La tercera integral en el límite es cero, entonces:

$$(\nu^2 - C_1)[y_s] - C_2[y_s^2] = 0, \tag{8.35}$$

donde

$$lim_{\Delta s\to 0} y_s|_{s_0-\Delta s}^{s_0+\Delta s} = [y_s], \quad lim_{\Delta s\to 0} y_s^3|_{s_0-\Delta s}^{s_0+\Delta s} = [y_s^3].$$

Supongamos ahora que:

$$y_s|^{s_0+\Delta s} = f(s_0+\Delta s), \tag{8.36}$$

$$y_s|_{s_0-\Delta s} = f(s_0-\Delta s). \tag{8.37}$$

Haciendo una expansión de Taylor para las funciones, $f(s_0\pm\Delta s)$ y $f^3(s_0\pm\Delta s)$, obtenemos

$$f(s_0+\Delta s) = f(s_0) + f'(s_0)\Delta s, \quad f(s_0-\Delta s) = f(s_0) - f'(s_0)\Delta s,$$

$$f^3(s_0+\Delta s) = f^3(s_0) + 3f^2(s_0)f''(s_0)\Delta s,$$

$$f^3(s_0-\Delta s) = f^3(s_0) - 3f^2(s_0)f''(s_0)\Delta s.$$

Las ecuaciones anteriores reemplazamos en la expresión (8.35) y simplificando, se obtiene:

$$f^2(s_0) = \frac{\nu^2 - C_1}{3C_2}, \quad f(s_0) = \pm\sqrt{\frac{\nu^2 - C_1}{3C_2}}. \tag{8.38}$$

Finalmente, el valor de la derivada en el punto de pegado,

$$y_s = \pm\sqrt{\frac{\nu^2 - C_1}{3C_2}} = \pm\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{B}{2A}}, \tag{8.39}$$

donde A, B se definen por la relación (8.28). De igual manera, como sabemos que $\phi = exp(-\alpha y)$, entonces:

$$\phi_s = -\alpha\phi y_s = \mp\alpha\phi\left(\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{B}{2A}}\right) = \mp\phi\sqrt{\frac{B}{2A}}. \tag{8.40}$$

Estos valores corresponden a los puntos de pegado superior o inferior, dependiendo el tipo de estructura a obtener, los cuales se determinan por las condiciones de frontera.

8.4.2. Soluciones no-clásicas

Para obtener soluciones analíticas de la ecuación (8.31) sometemos a las soluciones a una restricción nula a grandes distancias de la perturbación cuando $x \to \pm\infty$. Las posiciones de las bases están definidas por $y \to 0$ y por lo tanto su derivada $y_s \to 0$. De igual forma, usando la expresión $\phi = e^{-\alpha y}$ y aplicando las condiciones de frontera triviales obtenemos que $\phi = 1$, $\phi_s = 0$ cuando $s \to \infty$. Introduciendo estas condiciones en la Ec. (8.31) se obtiene que $D = C$ y la nueva relación queda

$$A\phi_s^4 - B\phi_s^2\phi^2 - D\phi_4(\phi - 1)^2 = 0. \tag{8.41}$$

Primero busquemos soluciones para el caso más simple cuando $B = 0$. Esto lleva a considerar que la velocidad de las perturbaciones no lineales que podrían aparecer dentro de la cadena, tenga un valor constante determinado a partir de $V^2 = C_1$. Cuando esto ocurre, la integración de (8.41) nos proporciona la siguiente expresión para las desviaciones

$$y(s) = \frac{1}{\alpha} ln\{1 + tan^2[\sqrt[4]{\gamma}(s - s_0)]\}, \tag{8.42}$$

donde s_0 es la ubicación inicial de la onda que viaja y $\gamma = \dfrac{D}{16A}$. Esta estructura es una solución de onda viajera con velocidad $V = \pm\sqrt{C_1}$ y pertenece a la clase de soluciones de solitón no-clásicas. Cuando ambos C_1 y C_2 están presentes, una solución de onda viajera puede existir y está representada por la Ec. (8.42). Esta solución podría interpretarse como una onda que permite que los nucleótidos se atraigan entre sí, pero en este caso especial, la discontinuidad muestra alguna situación no física de fusión de nucleótidos.

8.4.3. Soluciones tipo pico y aglomeración

Analicemos ahora el caso cuando $B \neq 0$. Comenzamos desde la expresión (8.41). Para resolverla introducimos el cambio de variables

$$\kappa(\phi - 1) = \pm sin\xi, \tag{8.43}$$

simplificando se obtiene:

$$\frac{cos\xi}{(\beta sin\xi + \kappa)\sqrt{1 + \nu cos\xi}} = \pm\sqrt{\frac{B}{2A}} ds, \tag{8.44}$$

donde $\beta = \pm 1$ y $\nu = \pm 1$.

De aquí se obtiene una familia de soluciones de perfil solitónico por segmentos dependiendo de los valores de β y ν, así como también del valor de κ, se define el parámetro

$$\kappa = -4AD/B^2. \tag{8.45}$$

Mostramos una posible solución analítica y físicamente aceptable al usar los siguientes valores de los parámetros del sistema. $\beta = 1$ y $\nu = -1$ y $\kappa = -\frac{5}{2}$. La solución que se obtiene es:

$$-\frac{1}{10}\frac{\sqrt{-\zeta+1}\sqrt{1-\zeta^2}}{(\zeta-1)\sqrt{1+\zeta}}M(\zeta)-N(\zeta)+P(\zeta)-Q(\zeta) = \pm\sqrt{\frac{B}{2A}}(s-s_0). \tag{8.46}$$

Donde las diferentes funciones involucradas satisfacen las ecuaciones que se mencionan a continuación:

$$\begin{aligned}
M(\zeta) &= \sqrt{7}ln\left(\frac{7+2\zeta-2\sqrt{7}\sqrt{1+\zeta}}{7+2\zeta+2\sqrt{7}\sqrt{1+\zeta}}\right) - 2\sqrt{3}arctan\left(\frac{1}{3}(2\sqrt{1+\zeta}-\sqrt{7})\sqrt{3}\right) \\
&- 2\sqrt{3}arctan\left(\frac{1}{3}(2\sqrt{1+\zeta}+\sqrt{7})\sqrt{3}\right) + \\
&+ 4\sqrt{2}arctan\left(\frac{1}{2}\sqrt{1+\zeta}\sqrt{3}\right) \qquad (8.47)\\
N(\zeta) &= \frac{1}{10}\sqrt{7}ln(-2\zeta+7-2\sqrt{7}\sqrt{-\zeta+1}) \qquad (8.48)\\
R(\zeta) &= \frac{1}{5}\sqrt{3}\left(\frac{1}{6}(4\sqrt{-\zeta+1}-2\sqrt{7})\sqrt{3}\right) \qquad (8.49)\\
P(\zeta) &= \frac{1}{10}\sqrt{7}ln(-2\zeta+7+2\sqrt{7}\sqrt{-\zeta+1}) \qquad (8.50)\\
Q(\zeta) &= \frac{1}{5}\sqrt{3}\left(\frac{1}{6}(4\sqrt{-\zeta+1}+2\sqrt{7})\sqrt{3}\right). \qquad (8.51)
\end{aligned}$$

Esta solución trascendental representa una estructura tipo pico como esquemáticamente presentamos en la figura (8.5)

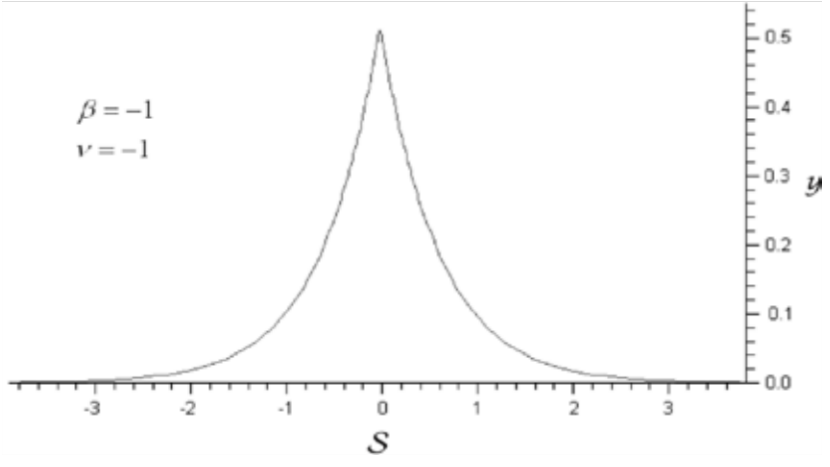


Figura 8.5. *La gráfica de una estructura tipo pico como solución del caso* $\beta = -1$, $\nu = -1$ *y* $\kappa = -\frac{5}{2}$.

Las soluciones obtenidas pertenecen a la clase de soluciones solitónicas no-clásicas. Aquí s_0 define la posición del centro de las soluciones. También es posible encontrar soluciones tipo cúspides, pero al calcular sus energías se obtienen valores divergentes. Cuando esta onda viajera va recorriendo la cadena, varios pares de bases pueden ser rotos y la excitación continuará viajando. Mientras la perturbación de onda viaja a lo largo de la cadena, esta excitación realiza la separación de los pares de bases. Sin embargo, la ruptura de los pares de base podría suceder a una distancia menor a la representada por el punto de pegado entre las dos ramas que conforman la solución, ya que esto únicamente muestra la separación máxima de las dos cadenas del ADN, por lo que el proceso de desnaturalización de la cadena se podría llevar a

cabo con este tipo de solución. Cuando $\nu^2 \to C_1$, el parámetro $\sqrt{\frac{B}{2A}} \to 0$ haciendo que nuestra solución se estreche.

Sustituyendo los valores de los parámetros en la Ec. (8.45), llegamos a:

$$4\left(\frac{3C_2}{4\alpha^4}\right)D/\left(\frac{v^2-C_1}{2\alpha^2}\right)^2 = -\kappa, \tag{8.52}$$

de donde obtenemos el valor de las velocidades de las estructuras no lineales:

$$v^2 = C_1 \pm 2\kappa\sqrt{\frac{3DC_2}{\kappa}}. \tag{8.53}$$

Lo que nos indica que el parámetro C_2 debe ser negativo.

Veamos ahora otro caso importante. Si los valores parámetricos son tomados como $\beta = 1$ y $\nu = -1$, entonces la solución es

$$-\frac{\sqrt{1-\zeta^2}}{\sqrt{1+\zeta}\sqrt{-\zeta+1}}M(\zeta) - N(\zeta) = \pm\sqrt{\frac{B}{2A}}(s-s_0), \tag{8.54}$$

con

$$M(\zeta) = \sqrt{2}ArcTanh\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{-\zeta+1} + ln\frac{\sqrt{-\zeta+1}-1}{1+\sqrt{-\zeta+1}}\right), \tag{8.55}$$

$$N(\zeta) = 2ArcTanh(\sqrt{1+\zeta}). \tag{8.56}$$

Seguidamente, usando la relación

$$\xi = arcsin(\phi - 1) = arcsin(e^{-\alpha y} - 1), \tag{8.57}$$

uno puede obtener fácilmente que la función inversa $y(s)$ tenga dos ramas.

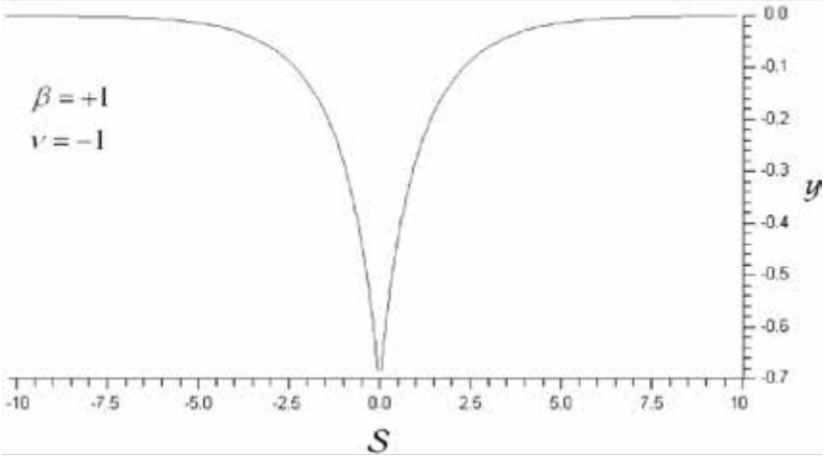


Figura 8.6. *Estructura tipo anti-pico o "crowdon" cuando* $\beta = 1$, $\nu = -1$ *y* $\kappa = 1$.

El signo $\pm$ en la Ec. (8.54) corresponde a las dos ramas que forman juntas una solución de pico solitónica invertida, donde el signo positivo describe la parte donde $s \leq s_0$, y el signo negativo es para el caso cuando $s \geq s_0$. Por y se entiende como la diferencia de desplazamientos de los pares de base desde su posición de equilibrio, como se muestra en la figura (8.6).

Como se puede notar, este desplazamiento de tipo negativo representa la atracción entre pares de bases. Este solitón pico podría darnos una indicación de que no solamente los precursores de desnaturalización surgen en la cadena, sino que también ciertas soluciones duales o complementarias que se oponen al rompimiento de los enlaces de hidrógeno.

Esta solución representaría la antípoda de la solución pico, es decir, sería el solitón llamado "crowdon". Para este modelo simple de ADN, esta estructura "crowdon" tomaría parte en el proceso de "curación" de enlaces rotos de los puentes de hidrógeno.

Del análisis de la ecuación diferencial para el caso de condiciones de frontera no triviales o del tipo de condensado, es decir, que cuando $s \to \pm\infty$ las partículas se encuentran a una distancia constante $y = y_0$ de la posición de equilibrio y por lo tanto $y_s = 0$. De igual forma, para la variable ϕ tenemos $\phi \to \phi_0$ y $\phi_s \to 0$ cuando $s \to \pm\infty$.

Usando esas restricciones se obtiene la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{d\phi}{ds} = \pm\sqrt{\frac{B}{2A}}\phi\sqrt{1\pm\sqrt{\mu}(\phi - 1)}. \tag{8.58}$$

Donde

$$\mu = \frac{4AD}{B^2}. \tag{8.59}$$

La solución de la ecuación (8.58) es matemáticamente semejante a la expresión (8.46). La estructura surgida después de realizar la unión de las ramas es una estructura tipo burbuja compacta centrada en s_0 semejante a la figura (8.6). La aparición de esta estructura es sumamente interesante, ya que nos describe un fenómeno en el cual existe una aglomeración de los pares de base en cierta región del espacio. Esta solución va uniendo los pares de base mientras continúa viajando a lo largo de la cadena. De manera similar a las soluciones anteriores, el área de la estructura depende del valor de $\sqrt{\frac{B}{2A}}\sqrt{\sqrt{\mu} - 1}$, es decir, de las constantes C_2, C_1, D y C. Si se considera $\frac{1}{\mu} + \frac{C}{D} = 1$, la velocidad que se obtiene para las estructuras clásicas será

$$v^2 = C_1 \pm 2\sqrt{3C_2(D - C)}. \tag{8.60}$$

8.4.4. Energías de las estructuras solitónicas

Podemos obtener la energía de cada una de las estructuras obtenidas a partir de la densidad del Hamiltoniano que describe al sistema:

$$H = \frac{m}{2}\left(\frac{dy}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}k_1\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + \frac{1}{4}k_2\left(\frac{dy}{dx}\right)^4 + \delta(e^{-\alpha y} - 1)^2. \tag{8.61}$$

en donde debemos ahora redefinir a nuestra variable independiente $s(x,t) = (X - vt)$, por lo que obtenemos:

$$E_T = \int_{s_1}^{s_2} \left\{ \frac{m\mathbf{v}^2}{2}\left(\frac{dy}{ds}\right)^2 + \frac{1}{2}k_1\left(\frac{dy}{ds}\right)^2 + \frac{1}{4}k_2\left(\frac{dy}{ds}\right)^4 + \delta(e^{-\alpha y} - 1)^2 \right\} ds. \tag{8.62}$$

donde s_1 y s_2 definen la región donde se encuentra la perturbación.

Como vimos en la sección de las soluciones triviales, la velocidad se encuentra restringida por los valores de los parámetros, como se muestra en la expresión (8.60). Por lo que podemos calcular los valores de la energía para cada una de estas estructuras para esta velocidad en particular. Por ejemplo, la energía para la solución tipo pico se puede calcular directamente y se obtiene: $E_p = 0{,}0840eV$. Obtenemos la energía para la burbuja compacta:

$$\begin{aligned} E_T &= (mv^2 + 2k_1)\frac{1}{\alpha^2}\sqrt{\frac{B}{2A}} + \left\{ 2 - 2\sqrt{\sqrt{\mu} - 1}\, Arctan\left[\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\mu} - 1}}\right] \right\} + \\ &+ \frac{2k_2}{\alpha^4}\left(\frac{B}{2A}\right)^{3/2}\left\{ \frac{2}{3}(4 - 3\sqrt{\mu}) + 2(\sqrt{\mu} - 1)^{3/2} ArcTan\left[\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\mu} - 1}}\right] \right\} + \\ &+ 2\sqrt{\frac{B}{2A}}\delta\left\{ \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\mu} - 1}} ArcTan\left[\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\mu} - 1}}\right] - \frac{2}{3\mu}(3\sqrt{\mu} + 2) \right\}, \end{aligned} \tag{8.63}$$

con μ definido en la Ec. (8.59). Para realizar la comparación de los valores de energía debemos tomar en cuenta el valor de la constante C.

Las energías mostradas como ejemplo de algunas soluciones concuerdan con el gasto de energía presentado por el estiramiento de las bases

correspondiente a cada una de sus soluciones, tomando en cuenta que varios pares de base se encuentran fuera de su punto de equilibrio. Mientras que la energía reportada en resultados experimentales Peyrard y Bishop (1989), fue de $E = 0{,}26eV$ para la burbuja de transcripción. Esta discrepancia, es debido a los valores de los parámetros, sobre todo de k_2, ya que no existen datos experimentales de su valor y su elección fue arbitraria de acuerdo con el valor de k_1, y el valor de este parámetro puede ser diferente al que fue tomado en cuenta al realizar los cálculos.

9. MODELOS DE TRANSMISIÓN DE PULSOS NERVIOSOS

En este capítulo se abordarán principalmente modelos no lineales de pulsos nerviosos en el axón. Se hará énfasis en el modelo propuesto por Heimburg y colaboradores en Copenhague (Heimburg y Jakson 2005). Esta propuesta surge como contraparte al modelo clásico de Hodgkin y Huxley(1952) al representar a los pulsos nerviosos como estructuras nolineales que pertenecen a la familia de solitones.

9.1. Estructura de las células y pulsos nerviosos

Los nervios son las células transmisoras de información desde el cerebro hasta órganos y viceversa. El sistema nervioso de vertebrados y humanos ha evolucionado a lo largo del tiempo, con la aparición de una compleja

red de información, cuyos procesos se basan en reacciones de naturaleza química. Los componentes más importantes de este sistema son las células especializadas llamadas neuronas. Éstas consisten en un cuerpo con un núcleo y organelos. Una representación esquemática se muestra en la figura (9.1).

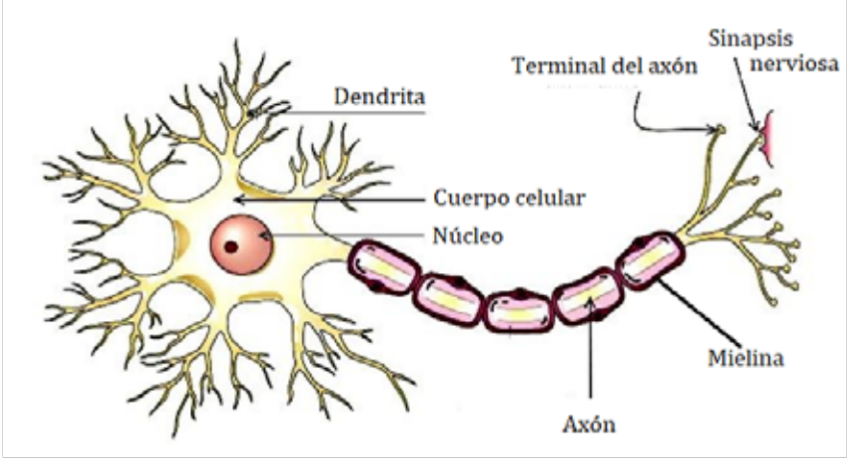


Figura 9.1. *Esquema de una neurona típica, con sus caracteristicas principales.*

De la neurona salen apéndices de dos tipos: varias dendritas cortas y ramificadas y un axón largo. Las dendritas son receptores de señales de otros receptores sensoriales o de otras neuronas, y el axón transmite señales en la red neuronal. La información que pasa de una neurona a otra se transmite a través de la sinapsis, que es una unión entre los botones terminales de la neurona emisora y la dendrita de la célula receptora.

Para comprender la transmisión de los impulsos nerviosos, es importante conocer la envoltura de mielina alrededor del axón. Éstas son células específicas, que forman el caparazón de un axón en forma discontinua con interrupciones (Muñoz, Martínez y García, 1990).

El pulso nervioso es una onda de excitación que se propaga a través de la fibra nerviosa y sirve para transferir información desde el periférico hacia las terminaciones del receptor (sensibles) de los centros nerviosos, de ahí a los centros de ejecución de comandos como músculos esqueléticos, músculos lisos de las vísceras y los vasos sanguíneos, glándulas de secreción externa e interna de receptor periférico (sensible), etc. El paso de pulsos se acompaña de procesos eléctricos transitorios que pueden registrarse con electrodos extracelulares e intracelulares. Así el pulso nervioso pasa a través del sistema nervioso central y desde ella al dispositivo de ejecución.

Cuando el estímulo se aplica a la fibra nerviosa, el potencial de la membrana en este lugar se altera bruscamente. En el inicio de la excitación, la permeabilidad de la membrana para los iones de potasio aumenta, y tienden a entrar a la célula. Durante 0.001 segundos, la superficie interna de la membrana neuronal se carga positivamente. Entonces podemos representar al impulso nervioso como una recarga a corto plazo de una neurona o un potencial de acción de 50-170 mV. La onda del potencial de acción se propaga a lo largo del axón, como un flujo de iones de potasio. La onda despolariza las secciones del axón y el potencial de acción se mueve con ella.

El pulso nervioso se desarrolla como respuesta a una estimulación eléctrica de cierta magnitud mínima, llamada umbral. También se le conoce como potencial de acción. Las neuronas son capaces de generar potenciales de

acción con frecuencias muy diversas, desde al menos uno hasta varios cientos de disparos por segundo, figura (9.2).

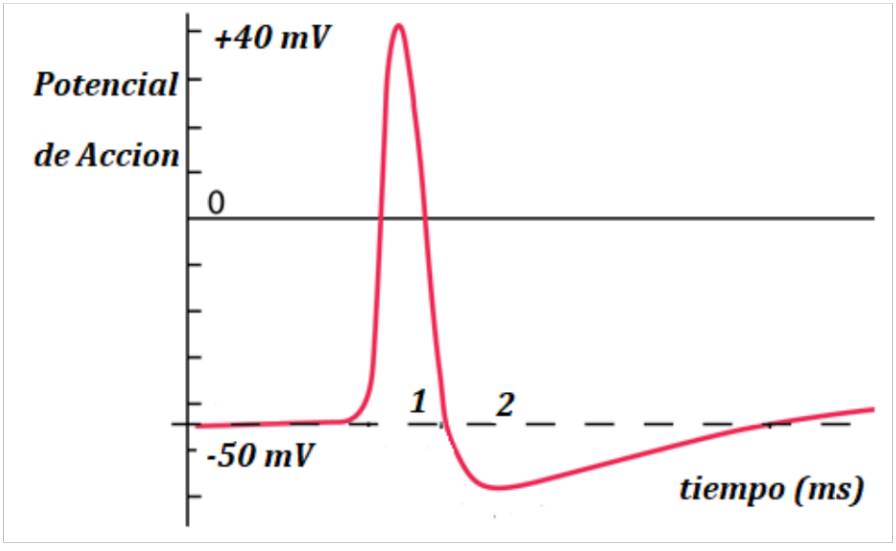


Figura 9.2. *Potencial de acción esquemático según el trabajo original de Hodgkin A.L., Huxley (1954).*

Suele originarse en el cuerpo celular como respuesta a la actividad de las sinapsis dendríticas. Hay diferentes formas de potenciales de acción, pero lo que tienen todos en común es el efecto todo o nada en la despolarización de su membrana. Es decir, si el voltaje no excede un valor particular denominado umbral, no se iniciará ninguna señal y el potencial regresará a su nivel de reposo. Si el umbral es excedido, la membrana realizará una trayectoria del voltaje que refleja las propiedades de la membrana, pero no las del impulso. Se observa que al aplicar secuencialmente estímulos breves (suprarrenales) que están suficientemente espaciados en el tiempo, la membrana responde

cada vez produciendo idénticos potenciales de acción. Si el lapso entre los estímulos se va reduciendo, es imposible excitar a la membrana por segunda vez. Este lapso crítico se llama período refractario y se divide en período refractario absoluto y relativo. En el primero, a pesar de la intensidad de la estimulación, es imposible desencadenar señal alguna, mientras que en el segundo se puede provocar una espiga de menor tamaño con despolarizaciones mayores que el umbral.

Entonces, la información que transmite una neurona se encuentra representada por el número de señales por segundo que produce. En respuesta a una corriente constante aplicada, las células nerviosas pueden responder con un tren de potenciales de acción que se repite periódicamente. Se observa experimentalmente que la frecuencia de la respuesta es una función creciente de la intensidad del estímulo aplicado.

9.2. Modelo de Hodgking-Huxley

Uno de los problemas ligado a la propagación de pulsos nerviosos consiste en conocer los mecanismos moleculares para la generación del flujo iónico y los cambios de permeabilidad. A esta investigación se sumaron Alan Hodgkin y Andrew Huxley (1952), (HH) en Cambridge y establecieron un modelo que hasta ahora es uno de los principales en la biofísica celular. Hodgking y Huxley realizaron estudios en el axón del calamar por tener un diámetro que se puede considerar gigante comparado con otros axones (medio milímetro). Encontraron tres tipos de iones diferentes los cuales son sodio, potasio y una corriente que se compone principalmente de iones de cloro Cl^-. Mostraron

que la membrana celular tiene asociada una capacitancia eléctrica; se sabe que la membrana celular separa soluciones de diferentes concentraciones iónicas; por tanto, hay una diferencia de potencial entre el interior y el exterior de la célula: una mayor concentración de potasio K en el interior y menor en el exterior, y lo opuesto para el sodio Na. Además, demostraron que Na y K realizan importantes contribuciones a las corrientes iónicas. Ellos predijeron y probaron que la amplitud del potencial de acción depende de la concentración externa de sodio.

A la onda viajera de la excitación eléctrica le denominaron "potencial de acción". Estos potenciales de acción son cortos en la naturaleza y viajan a velocidades constantes de cerca a $100m/s$ y son de amplitudes constantes. Basado en la obra de Baltasar Van der Pol, Fitzhugh propone un modelo simplificado neuronal de Hodgkin-Huxley (Fitzhugh 1961). Por su parte, Nagumo (Nagumo, Arimoto, Yoshizawa, 1964) sugiere como análogo neuronal un circuito no lineal eléctrico, controlado por un sistema de ecuaciones también similares a las corrientes de Van Der Pol. Este modelo permite una comprensión cualitativa del fenómeno de la excitabilidad, desde el punto de vista de los sistemas dinámicos y constituye un modelo clásico de la neurofisiología.

La hipótesis principal que el modelo HH proponía probar era: la membrana tiene canales que permiten el paso de iones en la dirección que determine su potencial electroquímico. Este movimiento iónico produce corrientes eléctricas y el cambio conocido como potencial de acción, se debe a un aumento en la conductancia al ion sodio (G_{Na}) que le permite entrar a la célula haciendo positivo el interior, lo que a su vez aumenta la (G_{Na})

aun más. Esa conductancia también cambia como función del tiempo y empieza a disminuir aproximadamente hacia el máximo del potencial de acción, por lo que la conductancia de sodio depende del voltaje (V), es decir, $(G_{Na}) = f(V, t)$. Simultáneamente, la conductancia a los iones potasio también cambia como función del voltaje y del tiempo y, por lo tanto, $(G_K) = f(V, t)$. El circuito básico de la membrana está dibujado en la figura (9.3).

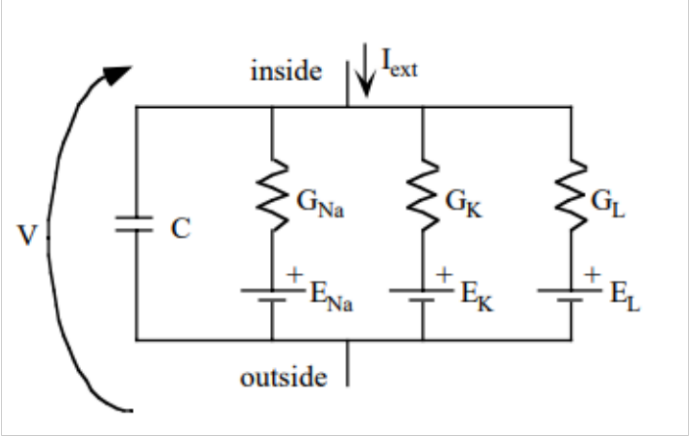


Figura 9.3. *Circuito eléctrico equivalente del modelo de Hodgkin-Huxley.*

Este circuito es apropiado para sistemas simples de membrana como el axón gigante del calamar y otras membranas axónales, donde sólo se ven dos canales dependientes del voltaje. En el modelo hay un condensador C, para representar la capacitancia de la membrana, una conductancia de sodio (G_{Na}), conductancia de potasio (G_K) y una conductancia de fuga (G_L). El potencial de membrana V es el potencial dentro de la celda menos el potencial fuera y allí puede inyectarse una corriente I_{ext} hacia la célula desde un electrodo o desde otras partes de la célula.

A continuación, utilizaremos la versión del modelo HH que originalmente fuera introducido por Hodgkin y Huxley (1952) para estudiar el comportamiento del axón gigante del calamar y luego adoptado por la comunidad como un punto de referencia para modelar la actividad nerviosa. A saber, consideramos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} C\frac{\delta V}{\delta t} &= \frac{a}{2\rho}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + g_{Na}m^3h(V_{Na}-V) + \\ &\quad g_K n^4(V_K - V) + g_l(V_l - V) \qquad (9.1) \\ \frac{\partial m}{\partial t} &= \alpha_m(V)(1-m) - \beta_m(V)m, \\ \frac{\partial h}{\partial t} &= \alpha_h(V)(1-h) - \beta_h(V)h, \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= \alpha_n(V)(1-n) - \beta_n(V)n. \end{aligned}$$

Aquí, la Ec. (9.1) se llama también ecuación de la cuerda para el potencial de membrana V, con capacitancia C por unidad de área, $a = 238\mu m$ es el radio del axón y $\rho = 35{,}4s.cm$ es la resistividad del espacio intracelular, $g_{na} = 120ms/cm^2$ son las conductancias de los canales abiertos de sodio y de potasio por unidad de área, $V_{Na} = 115mV$ y $V_K = -12mV$ son los potenciales de equilibrio de sodio y potasio y $V_l = 10{,}6mV$ el potencial de fuga respectivamente, $g_l = 0{,}3ms/cm^2$ es la conductancia de fuga por unidad de área. Las variables adimensionales n, m, h toman valores entre 0 y 1. Los parametros m y h son las variables de activación y desactivación de los canales de sodio, mientras que n es la correspondiente al canal de potasio. Las razones $\alpha_{m.h,n}$ y $\beta_{m.h,n}$ son funciones del potencial v a temperatura t.

Obtener las soluciones de este sistema de ecuaciones es una tarea importante e intrigante. En el caso más simple cuando la conductividad del potasio y del sodio se torne igual a cero, el sistema se reduce a la siguiente

ecuación

$$\frac{dV}{dt} = \frac{1}{C_m}[I - g_l(V - E_l)]$$

Esta ecuación diferencial ordinaria se puede resolver analíticamente usando el método de separación de variables para un problema de condiciones iniciales de Cauchy de voltaje inicial $V_0 = -60mV$. La solución que se obtiene es

$$V = \frac{1}{g_t}\left[-exp\left(-\frac{g_l}{C_m}t\right)(I + 60g_l + g_l E_t) + I + g_l E_l\right]. \tag{9.2}$$

El modelo presentado por Hodgkin y Huxley admite hacer comparaciones cuantitativas con los resultados experimentales debido a que contiene información detallada sobre la cinética dependiente de voltaje del Na + y K + canales. Naturalmente, esto hace que los modelos sean bastante complejos e intratables analíticamente. Hasta ahora, la herramienta básica para estudiar el modelo HH son las simulaciones numéricas. Con el advenimiento de computadoras muy rápidas, las simulaciones del modelo de HH se pueden hacer ahora rutinariamente. Pero todavía es altamente deseable hacer estudios analíticos que proporcionarían dependencias funcionales de las principales magnitudes como los potenciales de acción con respecto a los parámetros del modelo. Haciendo uso de un análisis aproximativo de las ecuaciones (9.1), Muratov (2000) encontró una solución numérica tipo onda solitaria para el potencial de acción.

9.2.1. Pulsos nerviosos como ondas solitarias

Recientemente, Heimburg y colaboradores en Copenhague han desarrollado un modelo para los pulsos nerviosos con el apoyo de soluciones solitónicas clásicas (Heinburg y Jakcson 2005, Lautrup, Appali, Jakcson, y Heinburg, 2011, Appali, Petersen y Rienen, 2010). Este modelo es alternativo al presentado anteriormente por HH, en el cual los pulsos nerviosos se describen como ondas de densidad localizada (solitón) en la membrana del axón. Bajo este esquema se pueden predecir las velocidades de propagación de los pulsos en los nervios mielanizados, dado que éstos están relacionados con las velocidades del sonido lateral de las membranas del nervio. En el modelo se observó que bajo las condiciones necesarias para la propagación de pulsos las fluctuaciones en la membrana lipídica pura conducen a los canales iónicos.

Veamos las características principales de esta teoría (Heinburg y Jackson 2005, Lautrup, Appali, Jackson y Heinburg 2011, Villagran, Ludu, Hustert, Gumrich, Jakcsom y Heinburg 2011, Contreras, Ongay, Pavón, y Agüero 2013). La observación de que los pulsos nerviosos no sólo pueden ser activados por el voltaje sino también por estímulos mecánicos y enfriamiento local sugiere que el potencial de acción se acompaña de calor y cambios mecánicos. De hecho, ambos cambios de calor y los mecánicos se han observado experimentalmente y parecen estar exactamente en fase con los cambios de voltaje observados.

Se considera al axón del nervio como un cilindro unidimensional, con excitaciones de densidad lateral mostrando el conocido aspecto de transición de fase de los lípidos ligeramente por debajo de temperaturas fisiológica.

Entonces la idea se basa en que en la membrana al comprimirse el fluido de la misma, alcanza gradualmente estado de gel denso, a una temperatura ligeramente por debajo de la temperatura corporal. Entonces es suficiente una presión-compresión ya sea en el área de membrana o del volumen para llegar a una transición del estado líquido al estado de gel. Esta transición se asocia con la liberación de calor. Surge entonces una onda de densidad viajera que podría ser solitónica. Dando valores medidos al módulo de compresión como una función de densidad lateral y de frecuencia, las propiedades de los solitones pueden determinarse por la velocidad de las ondas que se desplazan. Los efectos de no linealidad y de la dispersión producirán un pulso de densidad localizada (solitón) en un segmento de la membrana del nervio en el estado de gel, ver figura (9.4).

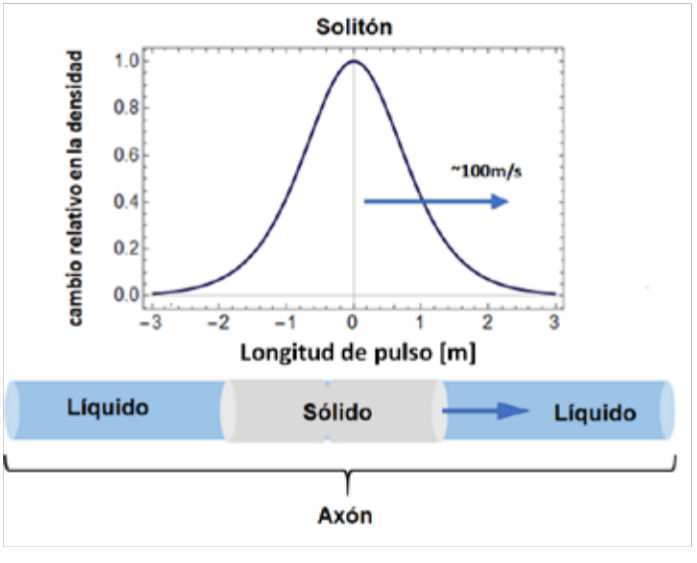


Figura 9.4. *Modelo esquemático de la propagación del pulso nervioso en la membrana lipídica.*

Por lo tanto, se considera al potencial de acción en nervios como una propagación de pulsos de voltaje a través de la membrana axonal con una amplitud de $100mV$.

Partimos de la ecuación de propagación del sonido en ausencia de dispersión:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(c_0^2 \frac{\partial U}{\partial x}\right), \tag{9.3}$$

donde $U(x,t) = \rho^A - \rho_0^A$, es el cambio en la densidad de área de la membrana como una función de las variables independientes x, t. El valor de ρ_0^A se toma comúnmente de datos experimentales para $\rho_0^A = 4{,}035 \times 10^{-3} g/m^2$. Las excitaciones colectivas están moviéndose a lo largo del eje x. Tenemos a $c_0 = \left(\kappa_s^A \rho^A\right)^{-1/2}$, como velocidad del sonido, donde κ_s^A es el índice de compresibilidad.

Al considerar efectos dispersivos se añade el término adicional a la ecuación anterior $-h\partial^4 U/\partial x^4$. Este término aparece debido a la evidencia experimental de la relación entre las frecuencias y velocidades. Para obtener una dispersión real no lineal posible, el siguiente término después de la segunda derivada con respecto a la variable x, debe ser la correspondiente cuarta derivada.

A continuación, dado que la compresibilidad depende del "campo" U en forma similar del efecto Kerr de óptica no lineal, entonces la velocidad de las ondas viajeras se puede representar en términos de una serie de potencias en torno a la velocidad del sonido y que dependaraá del "campo" U como sigue:

$$c^2 = c_0^2 + pU + q\left(U\right)^2 + r\left(U\right)^3 + ... \tag{9.4}$$

Finalmente, se puede concluir que la ecuación diferencial parcial (9.3) de propagación se puede representar como:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left\{\left(c_0 + pU + qU^2\right)\frac{\partial U}{\partial x}\right\} - h\frac{\partial^4 U}{\partial x^4}. \tag{9.5}$$

Esta ecuación está estrechamente relacionada con la ecuación de Boussinesq. Aunque en frecuencias altas las mediciones de la velocidad del sonido indican que el coeficiente de dispersión h debe ser positivo. Ni la magnitud del coeficiente h, ni la forma específica de este término se han verificado experimentalmente (el signo del término de dispersión es opuesta a la que muestra la ecuación de Boussinesq y la de KdV). En la práctica, el coeficiente h influye en el tamaño lineal del solitón y será elegido de tal manera, por ejemplo, que la anchura del solitón sea comparable a la conocida para los impulsos nerviosos.

9.3. Estructuras clásicas y no-clásicas

Ahora es necesario vislumbrar algunas soluciones de la ecuación diferencial nolineal (9.5). Se propone la existencia de soluciones del tipo de ondas viajeras para las cuales usamos la nueva variable independiente $z = x - vt$. Entonces la Ec. (9.5) puede ser transformada como:

$$h\frac{d^2 U}{dz^2} = (c_0^2 - v^2)U + \frac{p}{2}U^2 + \frac{q}{3}U^3 + C. \tag{9.6}$$

Donde C es la constante de integración. A grandes distancias del lugar de excitación, las diferencias se desvanecen así como también sus derivadas, una integración subsecuente produce

$$h\left(\frac{\partial U}{\partial z}\right)^2 = \left(c_0^2 - v^2\right)(U)^2 + \alpha\,(U)^3 + \beta\,(U)^4 + CU + V_0, \qquad (9.7)$$

con $\alpha = p/3$, $\beta = q/6$, siendo p y q los parámetros que aparecen en el desarrollo de potencias. Esta ecuación podría interpretarse como la segunda ley de Newton para una partícula análoga sometido a un campo potencial externo $-V(U)$.

$$h\left(\frac{\partial U}{\partial z}\right)^2 + V(U) = V_0, \qquad (9.8)$$

donde

$$V(U) = CU + \left(v_0^2 - c^2\right)U^2 - \alpha U^3 - \beta\,U^4\,. \qquad (9.9)$$

Heimburg y colaboradores obtienen la solución solitónica pasando la ecuación de movimiento a su versión adimensional (Heimburg y Jackson 2005). Para las variables adimensionales se tiene

$$u = \frac{\Delta\rho^A}{\rho_0^A}, x = \frac{c_0}{\sqrt[2]{h}}z, t = \frac{c_0^2}{\sqrt[2]{h}}\tau, B_1 = \frac{\rho_0}{c_0^2}p, B_2 = \frac{\rho_0^2}{c_0^2}q,$$

con lo cual se llega a una ecuación de la forma

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(B(u)\frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \qquad (9.10)$$

con $B(u) = 1 + B_1 u + B_2 u^2$.

Las características básicas de los módulos de compresión empíricos requieren que $B_1 > 0$ y $B_2 < 0$ (se adoptan los valores $B_1 = -16{,}6$ y $B_2 = 79{,}5$). La forma analítica de estos solitones se puede obtener suponiendo

la existencia de ondas viajeras y considerando a u como una función de $\xi = x - \beta t$ lo que reescribe la Ec. (9.10) como:

$$\beta^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} = \frac{\partial}{\partial \xi}\left(B(u)\frac{\partial u}{\partial \xi}\right) - \frac{\partial^4 u}{\partial \xi^4}. \tag{9.11}$$

Tomando en cuenta que a grandes distancias u se anula, e integrando se obtiene

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \xi}\right)^2 = \left(1-\beta^2\right)u^2 + \frac{1}{3}B_1 u^3 + \frac{1}{6}B_2 u^4. \tag{9.12}$$

La solución crecerá desde cero hasta que alcance su valor máximo en donde $\frac{\partial u}{\partial \xi} = 0$. La parte derecha de la Ec. (9.4) tiene dos raíces reales $u = a\pm$ que son:

$$a\pm = -\frac{B_1}{B_2}\left(1 \pm \sqrt[2]{\frac{\beta^2 - \beta_0^2}{1-\beta_0^2}}\right), \tag{9.13}$$

con lo que se arrriba a que la solución solitónica deseada de la Ec. (9.10) tiene la forma analítica (Lautrup, B., Appali, R., Jackson, A.D., Heimburg, T. 2011):

$$u\left(\xi\right) = \frac{2a_+ a_-}{\left(a_+ + a_-\right) + \left(a_+ - a_-\right)\cosh\left(\xi\sqrt[2]{1-\beta^2}\right)}. \tag{9.14}$$

La densidad de energía estará dada por:

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)^2 + \left[\frac{1}{2}u^2 A(u) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right], \tag{9.15}$$

con:

$$A(u) = 1 + + \frac{1}{3}B_1 u + \frac{1}{6}B_2 u^2. \tag{9.16}$$

Para lo anterior se introduce el desplazamiento a dimensional $s(x,t)$ definida como $u = \frac{\partial s}{\partial x}$.

Estas soluciones se muestran en la figura (9.5) para una selección de velocidades de solitones.

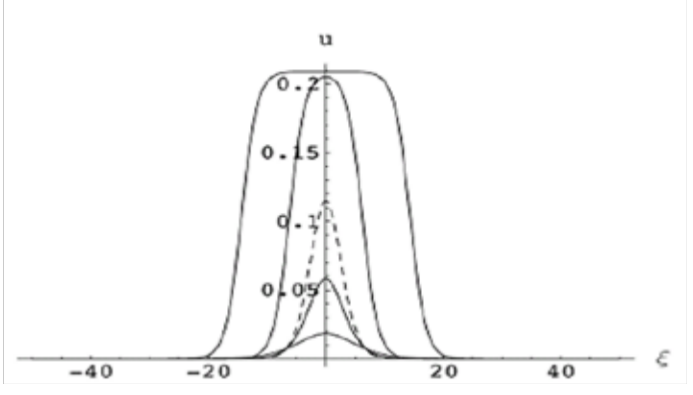


Figura 9.5. *Perfiles del solitón para las velocidades* $\beta = \beta_0 + 4{,}10^{-9}, \beta_0 =$ 0,65, 0,73, 0,85, 0,95. *A mayor velocidad menor el valor de la amplitud.*

La integral de esta densidad de energía se conserva en todo el espacio y es independiente del tiempo, los dos términos de la Ec. (9.15) representan las densidades de la energía cinética y la energía potencial respectivamente. Esta densidad de energía conduce a la observación importante, la densidad de energía se simplifica si u describe un solitón y está dado por la Ec. (9.14), o sea, la densidad puede ser escrita como $\varepsilon_{sol} = u^2 A(u)$.

9.3.1. Estructuras no lineales con velocidad del sonido

Ahora estudiaremos en forma más general la ecuación de movimiento Ec. (9.15) de la diferencia de densidades en la membrana del axón. En primer lugar consideraremos el caso $c_0^2 = v^2$ cuando la onda solitaria viaja a la misma velocidad del sonido a lo largo del eje z. En el análisis de las posibles consecuencias de esta reducción, uno puede encontrar que en el valor máximo de la amplitud de las ondas solitarias el lado derecho de la ecuación (9.12) la condición de frontera trivial tiene tres soluciones, es decir, tendremos una ecuación algebraica cúbica.

En el caso más sencillo cuando $C = 0$ es posible encontrar la siguiente solución para los desplazamientos $u(z)$.

$$u(z) = \frac{4\alpha}{\alpha^2 (z - z_0)^2 - 4\beta}. \tag{9.17}$$

Para evitar los comportamientos singulares, el parámetro β tomará valores negativos. Estas soluciones (9.17) son menos localizadas que sus contrapartes hiperbólicas, debido a sus colas decaen algebraicamente (Contreras, Cervantes, Agüero y Nájera, 2013).

Cuando $C \neq 0$ produce soluciones solitónicas solamente bajo condiciones de frontera no triviales. Para este caso, cuando a largas distancias de la zona principal excitada del axón, el pulso de perturbación no desaparece mientras que su primera derivada tiende a cero, tenemos

$$\text{if} \quad z \to \infty \quad \text{then} \quad U \to U_0 \quad \text{and} \quad \frac{dU}{dz} \to 0. \tag{9.18}$$

Aplicando esta restricción (9.18) las constantes V_0 y U_0 satisfacen la siguiente relación

$$V_0 = U_0[(v^2 - c_0^2)U_0 - \alpha U_0^2 - \beta U_0^3 - C]. \tag{9.19}$$

Entonces una integración del sistema (9.10) produce

$$\pm\sqrt{\frac{\beta}{h}}(z - z_0) = \int \frac{1}{r\sqrt{r^2 + \alpha' r + M}}dr, \tag{9.20}$$

con

$$M = 3a^2 - \alpha' a + \frac{V_0'}{a^2}, \tag{9.21}$$

y $\alpha' = \frac{\alpha}{\beta}$, $V_0' = \frac{V_0}{\beta}$ donde el parámetro a necesita satisfacer la ecuación algebraica cúbica

$$a^3 - \frac{3}{4}a^2\alpha' - \frac{C}{4\beta} = 0. \tag{9.22}$$

Mas detalles se muestran en (Contreras, Ongay, Pavón y Agüero, 2013). El discriminante de esta ecuación nos da la relación:

$$\Delta = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2, \tag{9.23}$$

donde $p = -3\alpha'^2/16$ and $q = -\alpha'^3/32 - C/4\beta$.

$$\Delta = \frac{C}{64\beta}\left(\frac{C}{\beta} + \frac{\alpha'^3}{4}\right). \tag{9.24}$$

Después de invertir la integral (9.20) se obtiene la solución

$$U = \frac{2M}{2\sqrt{-D}Cosh\left(\sqrt{\frac{\beta}{h}}(z - z_0)\right) - \alpha/\beta} - \frac{\alpha}{2\beta}. \tag{9.25}$$

Esta solución se puede visualizar tomando valores concretos para los parámetros. Por ejemplo, para obtener una buena presentación de la solucion haremos una suposición con respecto al parametro libre $\beta = 2$ y tomando los valores paramétricos de acuerdo con el trabajo (Villagran, Ludu, Hustert, Gumrich, Jackson y Heimburg, 2011) para DPPC vesículas unilaminares, el valor $\alpha = -7$. Por lo tanto, los otros parámetros importantes usados son $C = 6,\ D = -1,\ M = \frac{3}{4}$. La imagen resultante se muestra en la figura (9.6).

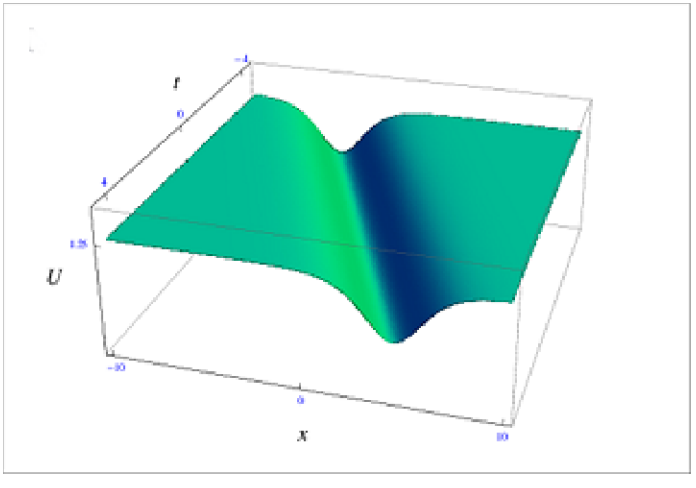


Figura 9.6. *Solitón tipo burbuja que viaja con la misma velocidad de sonido a lo largo del axón. Los parámetros usados en este caso son* $C = 6,\ D = -1,\ M = \frac{3}{4}, \alpha = -7, \beta = 2$.

Esta solución representa un solitón burbuja. Como podemos cerciorarnos, su existencia se debe a la manifestación de un mínimo relativo del "falso vacío" de la parte potencial de la energía en el método de analogía mecánica.

9.3.2. Soluciones con velocidades distintas del sonido

Ahora podemos mostrar otro tipo de soluciones que apoyan el modelo termodinámico de transmisión de pulsos nerviosos. Es decir obtendremos soluciones que tienen velocidades diferentes a las del sonido. Una vez más se utiliza la Ec. (9.7), pero con $c_0^2 \neq v_0^2$.

Aplicando condiciones de frontera del tipo condensado Ec. (9.18) como en el caso de ondas sónicas se obtiene una solución solitónica tipo pedestal (Contreras, Ongay, Pavón y Agüero, 2013), figura (9.7).

$$U = \frac{\Gamma + \ Sinh^2\sqrt{a}(\xi - \xi_0)}{\sigma + Cosh^2(\sqrt{a}(\xi - \xi_0))}, \tag{9.26}$$

donde $\Gamma = 2a + U_0(m^2 + \sqrt{-\Delta})$, $\quad \sigma = m^2 - \sqrt{-\Delta}$, y $z - z_0 = 2\sqrt{h}(\xi - \xi_0)$.

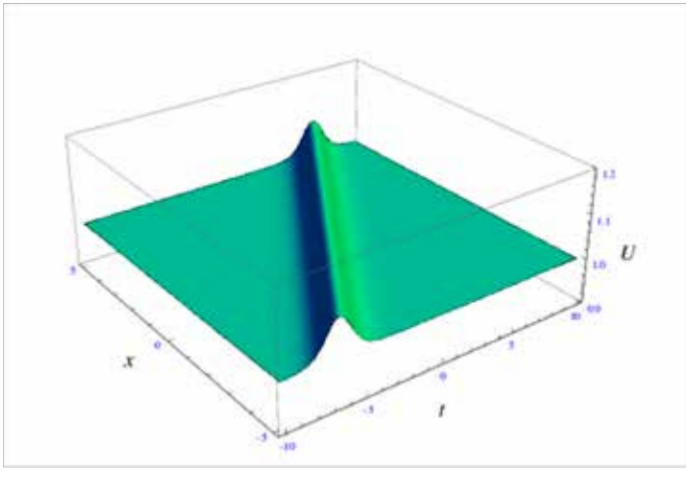


Figura 9.7. *Solitón pedestal, también conocido como solitón anti-dark, sobre el estado base no trivial, con valores de los parámetros:* $\sigma = 0,\ \Gamma = 1{,}4,\ h = 1.$

Hemos obtenido solitones tipo burbujas y solitones pedestales encima de un valor constante de la diferencia de densidades. Los extremos de la energía potencial en la relación (9.9), es la responsable del surgimiento de estructuras solitónicas diferentes. Como se puede observar, las soluciones burbuja y pedestal surgen del mínimum relativo del potencial, pero con diferentes valores paramétricos y con una velocidad constante a lo largo del axón. Por lo tanto, la meseta del pulso largo en el nervio podría ser perturbada por burbujas y solitones brillantes o pedestales en el fondo. Por lo tanto, en ambas direcciones del eje, por ejemplo, a largas distancias desde la zona activa, los desplazamientos de densidad mantendrán su valor, formando la condición de frontera de tipo condensado. La parte de la energía potencial se representa en la figura (9.8).

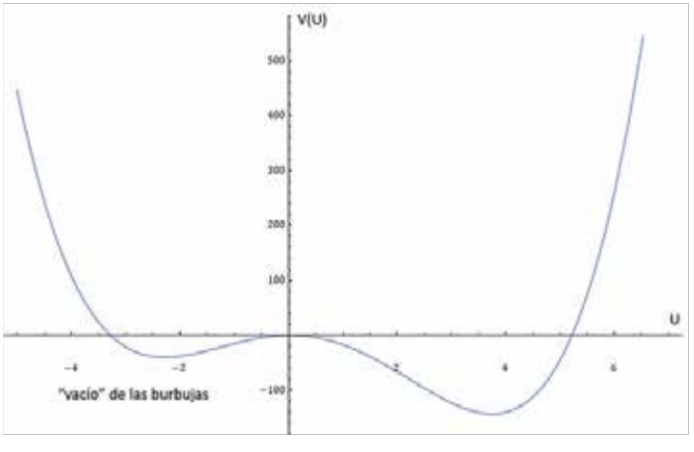


Figura 9.8. *El potencial $V(U)$ de la ecuación (9.9) en donde se aprecia los mínimos absoluto y relativo de donde sugen soluciones pedestal y burbujas.*

Los valores de la energía para las soluciones solitónicas se calculan mediante la fórmula:

$$E = \int_{-z_0}^{+z_0} \frac{W}{U} h dz, \tag{9.27}$$

con la densidad de la energía potencial

$$W(U) = \left(c_0 - v^2\right) U^2 + \frac{p}{3} U^3 + \frac{q}{6} U^4 + CU, \tag{9.28}$$

siendo U la solución clásica o no-clásica de tipo solitón, de acuerdo con las fórmulas respectivas. Como es obvio, estas energías dependerán de las velocidades v de cada solución solitónica. Para el caso del primer solitón algebraico que se mueve con la misma velocidad del sonido, la energía en dependencia de los principales parámetros p y q se expresa como

$$E_s = \frac{\sqrt{6}\pi \left(-(p^2/q)^{5/2}\right)}{p^2} + \frac{\sqrt{5}\pi \left(-(p^2/q)^{3/2}\right)}{\sqrt{6}q}. \tag{9.29}$$

Estos cálculos podrían efectuarse adecuadamente y están en cierta concordancia con datos experimentales. Para los pulsos nerviosos en el axón gigante del calamar existen estudios que ya son aceptados por la mayoría de los fisiólogos, como el mencionado arriba que es del modelo de HH.

9.4. Perturbaciones en la densidad lateral del axón

De la Ec. (9.10) no es posible obtener n-soluciones solitónicas, ya que esta ecuación no es integrable. Sin embargo, dado que se evoca el potencial de acción dentro del axón del nervio después de alcanzar un umbral específico,

no se puede requerir una transición de fase del 85 % de la membrana para soportar tal pulso. Por lo tanto, se puede asumir que ocurre pequeños cambios de la densidad lateral U de la membrana. En en tal caso, tendremos un solitón de baja amplitud pero con suficiente energía para superar el umbral requerido y evocar el potencial de acción en la membrana. Esto porque los cambios de volumen en las transiciones de lípidos son significativamente menores que los cambios de área.

Debido a que la densidad de la membrana cambia en el solitón, el espesor de la membrana también debe cambiar. Para las membranas lipídicas, el cambio de área es proporcional al cambio de volumen y al cambio de grosor. El cambio de volumen al ocurrir la transición es 4,7 % para DPPC, el cambio de área correspondiente es 24,6 % y el cambio de espesor es 16 % (correspondiente a 7,4$\mathring{A}$). Si los solitones al máximo muestran un cambio de densidad de área del 21 % (que corresponde al 85 % de la transición), el cambio de grosor debe ser del orden 6,4$\mathring{A}$. Esta distorsión produce un cambio en el espesor de un cilindro de membrana de 12,8$\mathring{A}$. los cambios de voltaje y los cambios de espesor deben ser proporcionales.

Por otro lado, se ha demostrado la naturaleza electromecánica del potencial de acción, mediante el uso de microscopía de fuerza atómica y técnicas de electrofisiología en (Gonzalez-Perez *et-al.* 2016). Se mide un desplazamiento mecánico (DM) del axón de $2-12$ Angstroms en fase con el potencial de acción. Por otro lado, el ancho (W) de un pulso de $3ms$ es de unos pocos cm. Si comparamos ambos, observamos que el ancho del pulso es mucho mayor que el desplazamiento mecánico $W >> DM$ que nos sugiere utilizar la aproximación de pequeñas amplitudes.

Así, en este caso, para la densidad lateral a partir de la Ec. (9.7) tendremos en la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{p}{2} \frac{\partial^2 (U)^2}{\partial x^2} + h \frac{\partial^4 U}{\partial x^4} = 0. \tag{9.30}$$

La expresión (9.30) representa el caso bien conocido de la ecuación especial de Boussinesq. Introducimos los siguientes cambios de variables

$$U = \frac{c_o^2}{h^2} u \quad z = \frac{c_0}{\sqrt{h}} x \quad \tau = \frac{c_0^2}{\sqrt{h}} t,$$

Entonces la Ec. (9.30) se convierte en

$$u_{\tau\tau} - u_{zz} + \lambda (u^2)_{zz} + u_{zzzz} = 0. \tag{9.31}$$

con $\lambda = p/2h^2$ sin perder la generalidad podemos hacer que $\lambda = 6$ y usamos la notación $u_z = \partial u / \partial z$.

Ahora introduciendo una perturbación a la solución trivial $u = 0$, con la ayuda de ondas planas

$$\delta u = exp(i\,(kz + w\tau))$$

y reemplazarlo en (9.31), obtenemos en esta aproximación lineal la relación de dispersión con los parámetros iniciales

$$\omega^2 = c_0^2 k^2 + h k^4 > 0. \tag{9.32}$$

Esta relación indica que el espectro ω^2 no tiene valores negativos para todo el intervalo $k \in (-\infty, +\infty)$. Por lo tanto, para cualquier t tenemos una oscilación que no daña el vacío $u = 0$, eso significa que la estabilidad de este estado fundamental no colapsa en contraposición a lo que se ha demostrado

para la ecuación normal de Boussinesq (Makhankov 1991).La Ec. (9.32) se toma como el equivalente (en el espacio configuracional de Fourier) de la ecuación operacional que actúa en $u(x,t)$ y produce la Ec. (9.31), pero ahora sin el término no lineal.

Seguidamente se puede aplicar el método de Hirota que fue ampliamente expuesto en el capítulo 5 y obtener explícitamente las n-soluciones. Por otro lado, en varias líneas de investigación sobre la propagación del pulso nervioso, se muestra que el potencial de acción puede pasar uno por encima del otro. La colisión y la subsequente aniquilación de los pulsos nerviosos se observan en experimentos reales. Incluso hay una "prueba de colisión" estandar para la identificación de neuronas en neurofisiología cerebral (Shrivastava y Schneider 2014).

En síntesis, cuando los impulsos nerviosos colisionan pueden aniquilarse dejando como residuo otros tipos de patrones no lineales. Por lo tanto en la aproximación de pequeños desplazamientos con las soluciones peculiares de la ecuación especial de Boussinesq se pueden tener pulsos nerviosos que se comportan como partículas macroscópicas y pueden aniquilar o conservar su configuración inicial después de mutuas colisiones.

Como se sabe, las soluciones de la ecuación especial de Boussinesq (Agüero, Alvarado 2000), específicamente las ondas viajeras, pueden aniquilar y también conservar su integridad durante los choques mutuos. Estos solitones podrían representar al menos un intento de resolver este problema crucial (Villagrán, Collantes, Agüero, 2018). Para el caso de 1-solitón y 2-solitones, el método de Hirota nos provee de soluciones analíticas explícitas, cuyas características describen de forma muy precisa

la propagación de pulsos simples bi - y tri - solitones.

Estos últimos podrían tener su contraparte en dobletes y tripletes de los pulsos nerviosos en crustáceos y neuronas de saltamontes, encontradas recientemente en experimentos y propuestas como código neuronal. Por ejemplo la solución bi-solitónica que representarían a los dobletes tiene la forma analítica en la Ec. (5.77) y sus representación gráfica se muestra en la figura (5.1). Asimismo se puede obtener la forma analítica de la interacción de 3 solitones, figura (9.9).

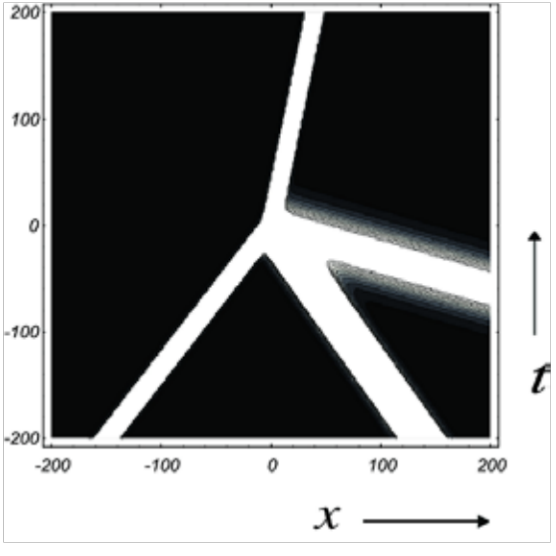


Figura 9.9. *Interacción de 3 solitones regulares que dan origen a otro solitón virtual. Las franjas anchas representan solitones de pequeña amplitud. Las velocidades son:* $v_1 = -0{,}25, v_2 = 0{,}75, v_3 = -0{,}31$.

La interacción de tres solitones, probablemente podrían emular la conversión de 3 solitones en uno solo, una interacción tripleta donde los pulsos se aniquilan y dan origen a otros.

Para enfatizar la característica novedosa de nuestra aproximación para el doblete 2SS, que establece que cuanto mayor es la amplitud del par, más corta es la separación entre ellos, lo comparamos con los datos experimentales obtenidos por (Villagran, A. Ludu, R. Hustert, P. Gumrich, A. D. Jackson, y T. Heimburg, 2011). Las mismas caracteristicas uno puede observar en la actividad natural en los nervios crustáceos.

La primera figura (9.10) muestra la actividad espontánea de cuatro neuronas en el nervio N3 en el tórax del cangrejo de río *Cherax quadricarinatus*.

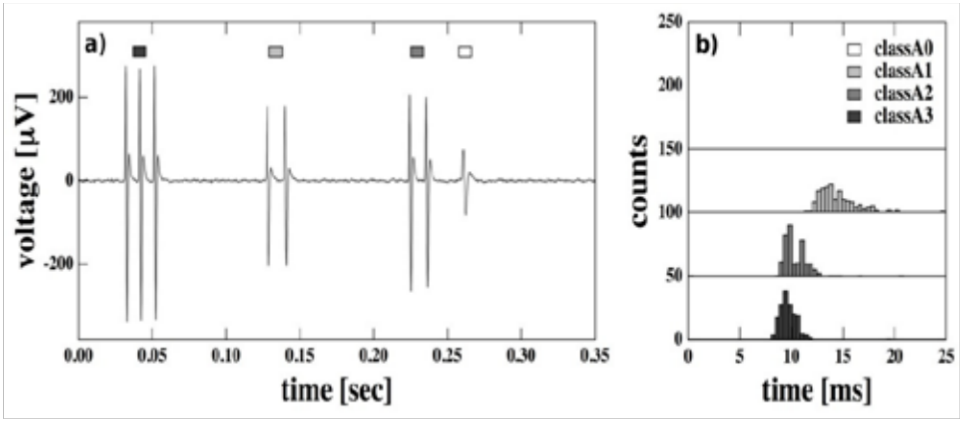


Figura 9.10. *Actividad espontánea de cuatro neuronas en el nervio 3 en el cangrejo de río (Cherax quadricarinatus). La unidad de clase A3 muestra un triplete, mientras que las unidades clase A1 y clase A2 presentan dobletes. b) Histogramas de Distribución del Intervalo de Interpulsos (*IPI*) para las unidades clase A1, clase A2 y clase A3 (Villagrán-Vargas et. al. 2013).*

De izquierda a derecha uno observa un triplete de pulsos de amplitud más grandes etiquetados como clase A3; un doblete en la clase de neuronas A1; un doblete en la clase de neuronas A2 y un solo pico en la clase de neuronas A0. De acuerdo con la regla de Pearson, cuanto mayor sea el diámetro del axón del nervio, mayor es la amplitud del pulso.

Ahora, enfocamos nuestra atención en las tres neuronas que exhiben trenes de impulsos: clase A1 que tiene los pulsos de amplitud más pequeños; clase A2, los pulsos medianos y A3 los pulsos de amplitud más grandes. La segunda figura (9.10) muestra los histogramas para la distribución del intervalo de tiempo (separación) para dobletes en neuronas clase A1, clase A2 y clase A3. Por inspección visual uno puede notar que el intervalo de tiempo promedio para la clase de neurona A1 es de 14 ms mientras que para las neuronas clase A2 y A3 es de 12 y 9 ms respectivamente. Por lo tanto, cuanto mayor sea la amplitud del pulso, menor será el intervalo de tiempo (separación) entre los pulsos de un doblete. Esta relación es independiente de la velocidad de conducción. Parece ser que este hallazgo experimental confirma nuestra predicción teórica.

Es posible que exista una pequeña inmersión de burbuja y excitación de solitón en el fondo que se ejecutan con velocidad constante a lo largo del nervio. Por lo tanto, la meseta de pulso largo en el nervio podría ser perturbada por burbujas y solitones brillantes en el fondo. Entonces, en ambas direcciones del eje del axón, a largas distancias de la zona activa, los desplazamientos de densidad mantendrán su valor formando la condición de límite que no desvanece, de condensado. Estas soluciones podrían ser responsables de varios procesos fundamentales dentro del nervio,

especialmente aquellos que involucran algún tipo de transición de fase paramétrica. Esto debido a la interpretación realista de burbujas como núcleo de algunas fases estables en el vacío o meta estables.

Además, las dos soluciones, la burbuja y el pedestal como solitones particulares para valores específicos de parámetros, podrían ser utilizados por el sistema nervioso para mejorar la confidencialidad en la tarea de comunicación. Por ejemplo, a medida que la amplitud del solitón de burbujas desaparece o se minimiza durante la propagación a lo largo del nervio, esta onda podría usarse para realizar la transmisión de comunicación con seguridad, mientras que la información requerida se puede recuperar mediante la conversión de solitón oscuro/brillante en el fondo; es decir, podrían conformar algunas estructuras informáticas de código para preservar información válida a lo largo del nervio.

10. ESTRUCTURAS SOLITÓNICAS NO-CLÁSICAS

Las ondas solitarias con colas infinitas o solitones son soluciones tradicionales de varias ecuaciones diferenciales nolineales de procesos naturales. Sin embargo, soluciones con soporte compacto llamados también compactones surgen como soluciones de ecuaciones diferenciales parciales dispersivas no lineales (EDPD). Estas soluciones notables se parecen a esferas duras que son profusamente usadas en todas las ramas de la física teórica. Inicialmente estas estructuras fueron obtenidas para una clase especial de la ecuación de tipo Kortweg y de Vries (KdV) con dispersión no lineal (Rosenau y Hyman 1993).

10.1. Familia de ecuaciones tipo Korteweg-de Vries

Tomemos una ecuación integrable con solitones (KdV):

$$u_t + \left(u^2\right)_x + u_{xxx} = 0. \tag{10.1}$$

Un solitón de la ecuación anterior es proporcional a $sech^2(f(x,t))$ y está altamente localizado en el espacio, pero tiene una anchura infinita. Los modelos con no linealidad débil no pueden describir fenómenos del mundo real con no linealidades fuertes como las ondas de choque, rompimiento de ondas, ondas con amplitudes extremas, etc. Por ejemplo, al tomar en cuenta la dispersión no lineal en la formación de patrones en gotas líquidas se introducen modelos que dejan de lado la dispersión débil para dar paso a modelos no lineales con componentes dispersivos fuertes. Para este objetivo uno de los más simples modelos que se estudia es la ecuación del tipo KdV completamente no lineal $K(m,n)$:

$$u_t + \left(u^m\right)_x + \left(u^n\right)_{xxx} = 0, \quad m > 0, 1, \quad 1 < n \leq 3. \tag{10.2}$$

Estas ecuaciones $K\left(m,n\right)$ tienen la propiedad de que para ciertos valores de m y n, sus soluciones de ondas solitarias poseen un soporte compacto. Es decir, estas soluciones se desvanecen fuera del núcleo de la región definida sin colas infinitas.

Analicemos el caso de la Ec. (10.2) cuando $K\left(2,2\right)$,

$$u_t + \left(u^2\right)_x + \left(u^2\right)_{xxx} = 0. \tag{10.3}$$

Esta ecuación modela ondas dispersivas en un régimen totalmente no lineal. La solución tipo onda viajera $u(\xi = x - vt)$ con velocidad v, para la Ec. (10.3) satisface:

$$-vu_{\xi} + (u^2)_{\xi} + (u^2)_{\xi\xi\xi} = 0. \tag{10.4}$$

La ecuación anterior puede ser integrada dos veces mediante procedimientos convencionales y se obtiene

$$u^2(u_{\xi})^2 = -\frac{1}{4}u^4 + \frac{1}{3}u^3 + Au^2 + B. \tag{10.5}$$

Donde A y B son constantes de integración. La solución (10.5) no es analítica sino que posee un soporte compacto (Rosenau y Hyman, 1993). Las soluciones compactas se construyen parchando una porción compacta de una solución periódica que es cero en ambos extremos con una solución que se desvanece fuera de la región compacta para dar una solución débil a la ecuación. Así, la solución explícita será:

$$u_c(x,t) = \frac{4v}{3}cos^2\left[(x - vt)/4\right], \tag{10.6}$$

donde $|x - vt| \leq 2\pi$ y $u_c = 0$ fuera de este intervalo. Las principales características de estas soluciones son las siguientes: no poseen colas infinitas como los solitones comunes, son similares a esferas duras y son estables durante interacciones y son elásticas, interactúan al hacer contacto solamente. Las transformaciones $u \to -u$ y $t \to -t$ producen anti-compactones. Un ejemplo de la aparición de compactones en la naturaleza es la forma delta que se observa en el vuelo de aves migratorias.

Después de varios experimentos numéricos con arriba de cinco compactones, fue observada su estabilidad, sin radiaciones u otras pérdidas.

En teoría clásica de solitones la integrabilidad está completamente relacionada a las interacciones elásticas, estos conceptos algunas veces son utilizados como sinónimos. En este sistema no integrable tenemos interacciones elásticas. Entonces el mecanismo de elasticidad no debe ser probablemente la integrabilidad. Los compactones pueden jugar el papel de funciones bases no lineales de datos iniciales y por lo tanto cualquier función puede ser descompuesta en compactones y anticompactones.

La velocidad del compactón depende de su altura, pero, a diferencia del solitón KdV que se ensancha conforme la amplitud (velocidad) se incrementa, su ancho es dependiente de la velocidad. Ya que la dispersión aumenta con la amplitud, en valores altos de amplitud hay mayor dispersión que en la KdV y más eficientemente puede contrabalancear el efecto no lineal. La invariancia de la Ec. (10.5) cuando $u \to -u$ y $t \to -t$ nos lleva a la aparición de anti-compactones propagándose en dirección opuesta. A causa de su estructura compacta, los compactones y anti-compactones no interaccionan entre sí, hasta el momento de colisión.

Las leyes de conservación para la Ec. (10.2) se expresan de la siguiente manera:

$$D_1 = u, \quad \phi_1 = u^2 + \left(u^2\right)_{xx}, \tag{10.7}$$

$$D_2 = u^3, \quad \phi_2 = \frac{3}{2}u^4 + 6u^3 u_{xx}, \tag{10.8}$$

$$D_{3,4} = u\cos\left(\beta + x\right), \tag{10.9}$$

$$\phi_{3,4} = \sin\left(\beta + x\right)\left(u^2\right)_x + \cos\left(\beta + x\right)\left(u^2\right)_{xx}, \tag{10.10}$$

que satisfacen la ley de continuidad

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0. \tag{10.11}$$

Las ecuaciones $K(m,n)$ surgen en la búsqueda de entender el papel de la dispersión no lineal en la formación de estructuras no lineales dentro de gotas líquidas. Para derivar $K(2,2)$ se considera una cadena inarmónica densa con muchas interacciones vecinas. Las primeras correlaciones para el caso continuo nos dirigen a una ecuación de la forma

$$u_{tt} = f(u)_{xx} + h^2 g(u)_{xxxx}. \tag{10.12}$$

donde f y g son funciones no lineales que modelan una interacción particular específica y h es la distancia entre partículas en equilibrio (Rosenau y Hyman, 1993). En este trabajo original u es pequeña, f fue aproximada por una función lineal. Si en lugar de esto asumimos f y g como funciones monótonas para u pequeña pero en algún valor u^*, la función g se suaviza y tiene un extremo local (por ejemplo $g = u/(1+u^2)$), entonces expandiendo en $w = u - u^*$ resulta una ecuación de Boussinesq para w con un término cuadrático de dispersión en el orden más bajo.

10.2. Ecuación no lineal de Klein-Gordon con interacción inarmónica

En el sistema de muchas partículas, por ejemplo, en materia condensada se estudian sus propiedades cristalinas, geométricas, eléctricas, etc. Un modelo simple para estudiar el comportamiento colectivo de un conjunto de átomos se representa como una cadena de partículas clásicas a lo largo de una línea recta. Este conjunto de partículas puede estar sometido a un potencial periódico del sustrato en cada sitio y se ha convertido en los últimos años en

uno de los modelos fundamentales y universales de la física no lineal de baja dimensionalidad.

Gran cantidad de problemas que involucran la dinámica de cadenas discretas no lineales se basan en la formulación clásica introducida en los trabajos de de Frenkel y Kontorova (1938), Frenkel (1972). Ellos sugieren utilizar este tipo de cadena no lineal para describir, en su forma más sencilla, la estructura y la dinámica de una red cristalina en las proximidades del núcleo de dislocación o del defecto. De hecho, este es uno de los primeros ejemplos en la física de estado sólido en que la dinámica de un defecto de mayores dimensiones como el bidimensional extendido en una masa se modela mediante una cadena simple unidimensional. Existen varias versiones del modelo Frenkel-Kontorova donde se estudian y se obtienen soluciones con directa aplicación en una gran variedad de campos de la física y ciencia en general (Braun y Kivshar 2004). Los modelos más notables en tal dirección son el de Sine-Gordon y los sistemas $\Phi-$cuatro. Por ejemplo, han atraído mucha atención las soluciones topológicas de estos modelos por sus importantes características y aplicaciones, ver (Kaup 1987, Wattis 1998, Peyrard y Kruskal 1984). En estos trabajos se muestran claras evidencias, de que los kinks con modos internos no sólo son limitados al caso de interacción armónica entre partículas, sino que además tales soluciones surgen cuando se incluye la interacción inarmónica entre partículas vecinas en las cadenas discretas.

Como se sabe, la ecuación clásica de Klein-Gordon toma la siguiente forma (Kaup 1987, Wattis 1998 y Peyrard 1984)

$$u_{tt} - u_{xx} + V'(u) = 0, \qquad -\infty < x,\ t < +\infty, \tag{10.13}$$

con un potencial $V(u)$ suficientemente continuo. La Ec. (10.13) se obtiene del principio variacional

$$\delta \int dt \int dx \mathcal{L}(u, u_x, u_t) = 0, \tag{10.14}$$

con la densidad de Lagrange

$$\mathcal{L} = 2^{-1}(u_t^2 - u_x^2) - V(u). \tag{10.15}$$

Para encontrar soluciones tipo ondas viajeras $u(z) = u(x - ct)$, con velocidad constante $c = const$, pasamos de la Ec. (10.13) a otra ecuación diferencial ordinaria cuya variable independiente será $z = x - ct$

$$(c^2 - 1)u_{zz} + V'(z) = 0. \tag{10.16}$$

Esta última realción es la ecuación de Newton para una "partícula análoga" de masa puntual con "coordenada espacial u" y que evoluciona en el "tiempo" z. Entonces, analizando la ecuación (10.16) se pueden obtener varias características fundamentales de las soluciones en dependencia de la forma que tenga el potencial $V(z)$.

Analicemos un modelo simple discreto consistente de un conjunto de partículas para las cuales el comportamiento está modelado por una ecuación no lineal similar a un sistema de Klein-Gordon (Dusuel, Michaux y Remoissenet 1998). Supongamos partículas acopladas por el potencial de interacción $U(\Phi_{n+1} - \Phi_n)$ y restringidas por un potencial no lineal del sustrato en cada punto $V(\Phi_n)$ (aquí "n" representa el sitio o las coordenadas de la partícula en estudio). La magnitud $\Phi_n(t)$ es el grado de libertad en cada punto que representa los resultados de la influencia de las otras partículas y

de agentes externos. Consideremos ahora el potencial no lineal del sustrato en la forma

$$V(\Phi_n) = \frac{V_0}{2}\left(1 - \Phi_n^2\right)^2, \tag{10.17}$$

y el potencial de interacción entre partículas vecinas

$$U\left(\Phi_{n+1} - \Phi_n\right) = \frac{C_1}{2}\left(\Phi_{n+1} - \Phi_n\right)^2 + \frac{C_2}{4}\left(\Phi_{n+1} - \Phi_n\right)^4. \tag{10.18}$$

Donde V_0, C_1 y C_2 son constantes de acoplamiento que controlan los dos pozos de potencial y las fuerzas acopladas lineales y no lineales respectivamente. El potencial descrito por la Ec. (10.17) tiene dos mínimos degenerados que nos dan la posibilidad de encontrar soluciones tipo kink que conecten estos estados base.

La ecuación de movimiento en el caso general se representa como

$$\frac{d^2\Phi}{dt^2} - \left[U'\left(\Phi_{n+1} - \Phi_n\right) - U'\left(\Phi_{n-1} - \Phi_n\right)\right] + V'\left(\Phi_n\right) = 0. \tag{10.19}$$

Donde los apóstrofos significan derivadas con respecto a los argumentos. Ahora, sustituyendo aquí las expresiones de los potenciales para la partícula en el sitio, tenemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi}{dt^2} &= C_1\left(\Phi_{n+1} + \Phi_{n-1} - 2\Phi_n\right) + +C_2\left[\left(\Phi_{n+1} - \Phi_n\right)^3 + \left(\Phi_{n-1} - \Phi_n\right)^3\right] + \\ &+ 2V_0\left(\Phi_n - \Phi_n^3\right). \end{aligned} \tag{10.20}$$

Ahí donde las interacciones U' entre partículas sean lineales, las soluciones tipo kinks pueden ser calculadas exactamente en el límite continuo (Rubinstein 1970). De la ecuación discreta (10.20) los kinks pueden ser obtenidos por aproximaciones perturbativas o por métodos numéricos. Cuando U' incluye interacciones inarmónicas pueden ser creados ciertos

modos de oscilación específicos. Para el caso cuando C_2, Φ_n varían lentamente entre sitios, uno puede usar la aproximación continua estándar $\Phi_n(t) \to \Phi(X,t)$ y extender $\Phi_{n\pm1}$. Bajo estas condiciones, haciendo $x = \frac{X}{a}$ (que es la medida de la distancia X en unidades de distancia entre los puntos discretos en la malla a) y asumiendo $3C_2\Phi_x^2\Phi_{xx} >> (\frac{C_1}{12})\Phi_{xxxx}$,en la Ec. (10.20), se obtiene

$$\Phi_{tt} - C_1\Phi_{xx} + 3C_2\Phi_x^2\Phi_{xx} - 2V_0(\Phi - \Phi^3) = 0, \tag{10.21}$$

en el cual, C_1 representa el valor cuadrático de la velocidad de la onda lineal, C_2 es el parámetro que controla la longitud del acoplamiento no lineal. Para $C_2 = 0$, la ecuación se reduce al modelo continuo de Φ^4 con acoplamiento lineal, que contiene soluciones tipo kinks en la forma de tangente hiperbólica.

10.3. Soluciones solitónicas compactas y no-clásicas

Ahora, veamos la dinámica de soluciones tipo ondas viajeras. Para ello usamos la variable independiente nueva $\zeta = x - vt$ y las ondas como funciones $\Phi(\zeta) = \Phi(x - vt)$ con velocidad constante v. La condición trivial o condición de frontera tipo gota se determina por:

$$\Phi \to 0,\ \Phi_\zeta \to 0 \text{ cuando } \zeta \to \pm\infty, \tag{10.22}$$

Uno puede simplificar la Ec. (10.21) usando las relaciones anteriores (10.22) y considerando

$$\Phi_t = -v\Phi_\zeta, \quad \Phi_x = \Phi_\zeta, \tag{10.23}$$

que después de integrar uno obtiene

$$\left(\Phi_{\varsigma}\right)^{4} - F\left(\Phi_{\varsigma}\right)^{2} + G\left(\Phi^{4}/2 - \Phi^{2}\right) = 0, \tag{10.24}$$

siendo $F = 2\left(C_1 - v^2\right)/3C_2$, $G = 4V_0/3C_2$. Cuando los parámetros del modelo satisfacen la relación:

$$\left(v^2 - C_1\right)^2 + 6V_0C_2 = 0, \tag{10.25}$$

entonces, uno puede obtener las siguientes soluciones no-clásicas: gota compacta, solitón tipo pico, escalón o kink compacto.

10.3.1. Gotas compactas

Introducimos el nombre de "gotas compactas" para designar a soluciones que poseen la forma de campana pero acotados en sectores del espacio-tiempo que en cierto sentido nos recuerda esferas duras. Por lo tanto, fuera de este sector espacio-tiempo, el campo se desvanece. Esta propiedad hace que la solución no tenga colas infinitas como los solitones regulares (Agüero, Paulin 2001). La ecuación para definir la forma matemática de la gota compacta es la siguiente:

$$\Phi_{\zeta}^{2} = H\left(1 - \Phi^{2}/2\right), \tag{10.26}$$

de donde obtenemos la solución

$$\Phi = \pm\sqrt{2}\sin\left(\sqrt{H/2}(\zeta + \zeta_0)\right). \tag{10.27}$$

Siendo $H = V_0/(v^2 - C_1)$. Debido a las condiciones de frontera impuestas por la restricción (10.22), es razonable considerar que las estructuras solitónicas posibles son aquellas para las cuales se implanta la condición inicial para

centrarlas: $\sqrt{H/2}\zeta_0 = \pi/2$. Cuando la variable independiente ζ sólo abarca el siguiente segmento

$$-\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{H}{2}}\,\zeta \leq \frac{\pi}{2}, \tag{10.28}$$

se puede obtener la solución (10.27) para diferentes valores paramétricos de C_1. Si hacemos que la velocidad cumpla esta condición: $v^2 \to C_l$ y con valor fijo de V_0, el volumen de la gota compacta decrece debido al incremento de H pero su amplitud permanece constante y al revés, si H decrece la velocidad no se hace cercana a C_l pero el volumen aumenta, ver figura (10.1).

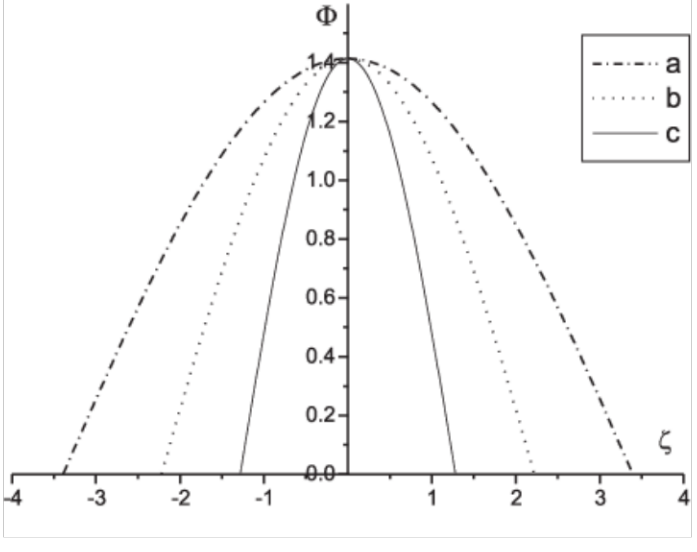


Figura 10.1. *Soluciones tipo gotas compactas, con ($V_0 = 1$, $u^2 = 10$) en tres versiones, cuando: a) $C_1 = 2$, b) $C_1 = 5$, c) $C_1 = 8$.*

10.3.2. Soluciones tipo picos (peakons)

Al resolver la ecuación general (10.24), usando la ecuación restricción (10.25) y aplicando las condiciones de frontera (10.22) se obtiene:

$$\Phi(\zeta) = \exp\left(\pm\sqrt{\frac{F}{2}}(\zeta - \zeta_0)\right), \tag{10.29}$$

que es una solución llamada "peakon". El signo positivo (+) de la rama exponencial corresponde al caso cuando $\zeta \leq \zeta_0$ y el negativo (-) cuando $\zeta \geq \zeta_0$, mientras que el valor de ζ_0 se determina naturalmente de la condición inicial. Cuando los valores de F aumentan ($u^2 \to C_1$) la forma del peakon se transforma a la forma de una función delta. La gráfica de esta solución se presenta en la figura (10.2).

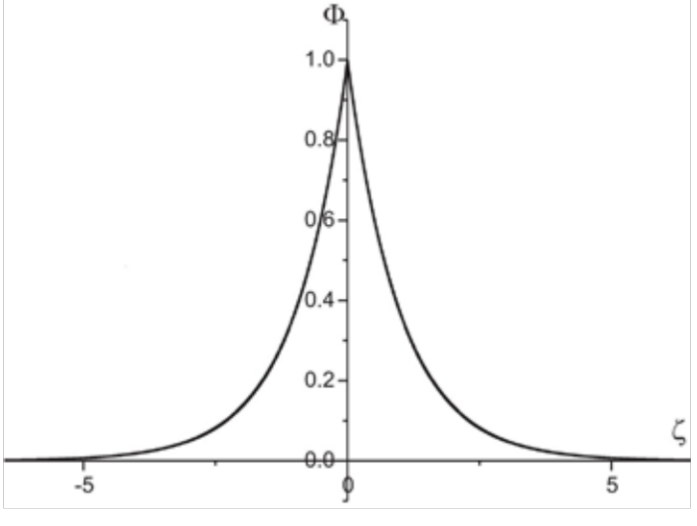


Figura 10.2. *Solución tipo pico, donde :* $F = 1.,\ \zeta_0 = 0{,}5.$

Una onda solitaria inusual similar fue encontrada en Camasa y Holm (1993) para un tipo diferente de ecuación no lineal de evolución.

10.3.3. Kink y pedestal compactos

La Ec. (10.19) fue tratada analíticamente para varios casos importantes (Dusuel, Michaux y Remoissenet 1998, Agüero y Paulin 2001) y se encontraron soluciones no clásicas con soporte compacto. Veremos ahora la aparición de kink compacto en el mismo modelo inarmónico ϕ-cuatro de campo. Para el caso de onda viajera escribimos la forma estándar de la condición de frontera tipo condensado:

$$\Phi(\zeta) = \Phi(x - vt), \text{ tal que } \Phi \to \pm 1 \ , \Phi_{_\zeta} \to 0 \text{ cuando } \quad \zeta \to \pm\infty, \quad (10.30)$$

donde ζ es la nueva variable dependiente de la velocidad de propagación v.

Regresando a la Ec. (10.19), si utilizamos la condición de frontera (10.30) y consideramos $\Phi_t = -v\Phi_{_\zeta}$ y $\Phi_x = \Phi_{_\zeta}$, obtenemos

$$\left(v^2 - C_1\right)\Phi_\zeta^2 - 3C_2\Phi_\zeta^4 + \frac{V_0}{2}\left(1 - \Phi^2\right)^2 = 0. \quad (10.31)$$

La Ec. (10.31) puede ser integrada facilmente cuando $v^2 - C_1 = 0$, de la cual se obtienen las velocidades de las soluciones para diferentes valores del parámetro C_1. En nuestro tratamiento hecho para gotas compactas no hemos considerado esta relación, debido a que su respectivo uso implicaría la divergencia de la energía para las estructuras localizadas obtenidas. Para este caso simple la solución que se obtiene es la siguiente

$$\Phi(x) = \pm Sin\left[\left(\frac{V_0}{6C_2}\right)^{1/4}(\zeta - \zeta_0)\right], \quad (10.32)$$

que existe en el segmento $(V_0/6c_{nl})^{\frac{1}{4}}\,|x - \sqrt{C_1}t| < \pi/2$ y toma el valor de $\Phi = \pm 1$ fuera de este intervalo, x_0 define la posición del centro del kink. Esta

solución representa al solitón tipo kink-compacto. De la Ec. (10.32) podemos calcular el ancho de la onda, que es igual a $L = \pi \left(\frac{C_2 6}{V_0}\right)^{\frac{1}{4}}$.

En consecuencia, cuando se presenta un acoplamiento no lineal podemos encontrar soluciones estáticas y cuando ambos acoplamientos lineal y no lineal coexisten, podemos descubrir la existencia de la solución dinámica del solitón con velocidad $\sqrt{C_1}$ $\left(-\sqrt{C_1}\right)$, ver figura (10.3).

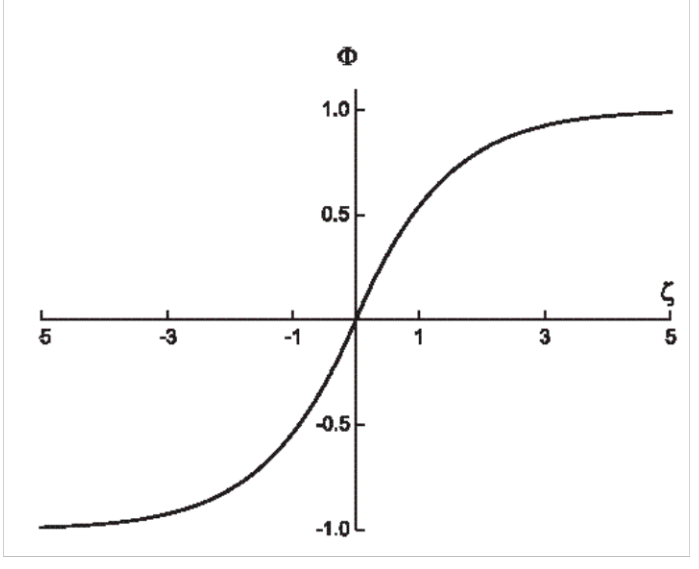


Figura 10.3. *Solución kink-compacto Ec. (10.32) que se obtiene cuando las condiciones de frontera son del tipo de condensado y* $V_0 = C_2$.

Cuando la velocidad del solitón satisface $v^2 - C_1 \neq 0$, la ecuación (10.31) se integra si se cumple la relación paramétrica (10.25) que produce la siguiente ecuación trascendental inversa con respecto a las variables de la ecuación:

$$\pm\sqrt{A}(\zeta_{lmn} - \zeta_0) = Arc\sin\left(\frac{l\Phi}{\sqrt{2}}\right) + \ln\left[m\sqrt{1 - \frac{\Phi^2}{2}} + \frac{n\Phi}{\sqrt{2}}\right]. \qquad (10.33)$$

Donde $l, m, n = +, -$, indican el signo de las variables a las que multiplican. Esta expresión nos puede producir cierta cantidad de posibles soluciones interesantes de acuerdo con estos signos (Paulin y Agüero 2001). Como se puede apreciar, invertir la Ec. (10.33) es complicado analíticamente, por lo que nos queda la posibilidad de invertirlo en forma gráfica y así producir múltiples soluciones de las que algunas son catalogadas como exóticas o no-clásicas. Nosotros mostramos una de las posibles soluciones que podrían existir con ese delicado balance de los parámetros de la Ec. (10.25).

Para el caso de condición de frontera no trivial de tipo condensado una solución físicamente aceptable es la que obtenemos a partir de la Ec. (10.33), mostrado en la figura (10.4).

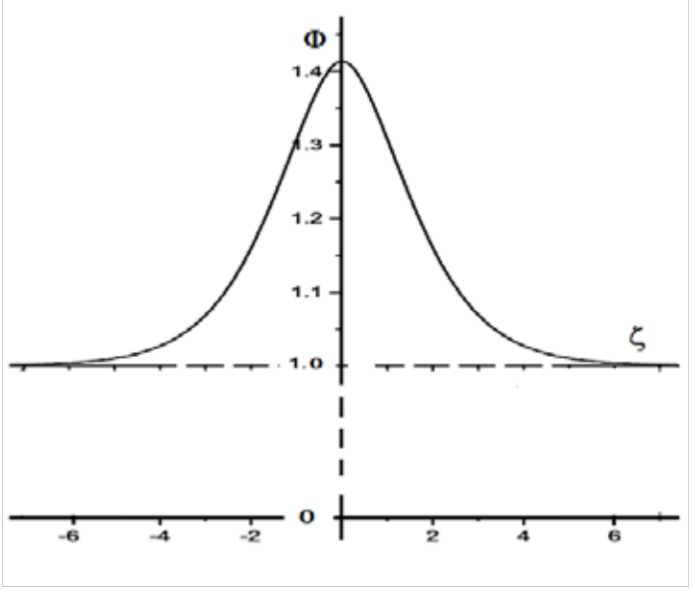


Figura 10.4. *Perfil del solitón tipo pedestal. Se ubica sobre el estado base no trivial con* $A = 1$ *y que satisface la Ec. (10.33).*

Esta solución de construye con las siguientes ramas posibles:

$$\begin{array}{c} \sqrt{A}\left(\zeta_{++-}-\pi/2\right) \text{ si } \sqrt{A}\zeta \in (-\infty, 0] \text{ y} \\ \text{-}\sqrt{A}\left(\zeta_{++-}-\pi/2\right) \text{ si } \sqrt{A}\zeta \in [0, \infty). \end{array} \tag{10.34}$$

Su representación gráfica muestra un solitón escalón compacto, que existe encima del condensado en forma de una estructura tipo campana, llamado tambien "solitón pedestal".

10.4. Energía de las soluciones no-clásicas

Como es fácil probar, el Hamiltoniano discreto que origina la ecuación de movimiento (10.19) es

$$H = \sum_n \frac{1}{2}\left(\frac{d\Phi}{dt}\right)^2 + U\left(\Phi_{n+1} - \Phi_n\right) + V\left(\Phi\right). \tag{10.35}$$

En la aproximación continua podemos calcular la energía total localizada en la onda viajera con velocidad v por medio de la siguiente ecuación

$$E_{total} = \int_{x_i}^{x_f} \left[\frac{1}{2}\Phi_t^2 + \frac{1}{2}C_1\Phi_x^2 + \frac{1}{4}C_2\Phi_x^4 + \frac{1}{2}V_0\left(1-\Phi^2\right)^2\right] dx, \tag{10.36}$$

donde x_i y x_f determinan la región de existencia de la estructura solitónica del campo Φ.

Veamos los valores de energía para algunas soluciones reportadas en esta sección. Por ejemplo, cuando se usa las condiciones de frontera trivial se obtienen gotas compactas y peakons. Para las soluciones de tipo gota compacta y peakon la expresión de sus energías es

$$E_{g,p} = \mu_{g,p}\sqrt{\frac{V_0}{u^2 - C_1}}, \tag{10.37}$$

siendo

$$\mu_g = \frac{\pi\left(3C_1 + v^2\right)}{2\sqrt{2}},\ \mu_p = \frac{\left(11C_1 + u^2\right)}{6\sqrt{2}}.$$

Como es fácil de notar, estas soluciones no pueden viajar a velocidades $u_0 = \pm\sqrt{C_1}$ Cuando usamos condiciones de frontera de tipo condensado, la energía de todas las soluciones expresadas por la fórmula (10.33) se calculan mediante la siguiente expresión dependiente de los parámetros del modelo v, C_1, V_0:

$$\begin{aligned} E &= \alpha\frac{\left(u^2 + C_1\right)\sqrt{C_1 - u^2}}{2\sqrt{V_0}} - \beta\frac{\left(u^2 - C_1\right)^2\sqrt{\left(C_1 - u^2\right)^3}}{48V_0^2\sqrt{V_0}} + \\ &+ 2\gamma V_0\sqrt{\frac{V_0}{C_1 - u^2}}, \end{aligned} \tag{10.38}$$

siendo α, β and γ ciertos valores numéricos para cada solución posible de la ecuación (10.33). Por ejemplo, para el caso del pedestal compacto tenemos los valores siguientes

$$\alpha = (\pi/8 - ln2/2),\quad \beta = \frac{1}{16}(5/2 + 9\pi/4),\quad \gamma = (3\pi/8 + 3/4).$$

Como se sabe, un kink con sus brazos largos o colas infinitas puede interactuar a largas distancias con un anti-kink. En el caso de un compactón, la interacción es más local, eso quiere decir que interactúan con un anti-compactón si sólo existe un contacto directo en la misma dirección. Este fenómeno es muy similar cuando dos esferas duras impactan y que está bien estudiado en mecánica clásica o en física estadística. Los kink compactos determinados por la fórmula (10.32) se mueven con velocidades $v_0 = \pm\sqrt{C_1}$, pero estas velocidades son inaccesibles a las gotas compactas debido a su energía (10.37).

Entonces estas soluciones no pueden coexistir en el mismo sector del espacio paramétrico delimitado por sus velocidades. Consecuentemente este valor crucial de velocidad puede ser considerado como punto de bifurcación. Este comportamiento del sistema sugiere la aparición de cambio de fase de segundo orden. Esto debido a que fuera del valor de v_0, el sistema se encuentra en un primer estado y soporta gotas compactas, picos, pedestal, etc., pero exactamente en el valor de v_o los kinks compactos hacen su aparición determinando el segundo estado del sistema.

11. MÉTODO DE ESTADOS COHERENTES GENERALIZADOS

En 1926, Schrödinger construyó los estados cuánticos para el oscilador armónico (Schrödinger 1926). Un año después, Dirac, usando el concepto de oscilador cuántico de Maxwell, encontró una descripción de la radiación electromagnética. Debido a las descripciónes no equivalentes del mismo sistema, en general, las predicciones de la formulación de Dirac no consiguió satisfacer a las de Maxwell. Estaban describiendo lados opuestos del comportamiento de la luz. Éstos fueron retomados por Glauber (Glauber 1963), asícomo también por Klauder y Sudarshan (1968), entre otros, en estudios sobre óptica cuántica (Sudarshan 1963, Klauder y Skagerstam 1985). La principal contribución de Glauber, quien se basó en los trabajos pioneros de Dirac y Schrödinger, fue encontrar un modelo que relaciona ambas formulaciones; la estructura teórica del trabajo de Dirac, pero logrando las mismas predicciones desde la teoría clásica. De esta manera, el rayo láser desempeñó un papel principal, y le debemos su comprensión básica a Roy

J. Glauber. Fue quien acuñó el nombre oficial de *estados coherentes* a los estados cuánticos de los láseres, cuyas fluctuaciones en sus amplitudes y fases se descartan simultáneamente (Glauber 1963). Desde ese momento, los estados coherentes han sido ampliamente estudiados como una herramienta fundamental de la física-matemática. El interés por dichos estados se ha extendido a varias ramas de la física para modelar múltiples sistemas no lineales y también para sistemas conectados con otros grupos (incluyendo a supergrupos). Los estados coherentes se pueden determinar para grupos cuánticos, así como para usar varias generalizaciones exponenciales o deformaciones (Comberscure y Robert 2012, Borzov y Damanskinsky 2006).

11.1. Estados coherentes y bozonización

Una de las características más importantes de los estados coherentes es que están sobre-completos. Como se sabe, los sistemas ortogonales completos de vectores base en el espacio complejo de Hilbert (análogo cuántico del espacio-fase clásico, asíun punto en el espacio-fase clásico tendría su analogía en un vector del espacio de Hilbert) es un alucinante concepto de física matemática. En la física cuántica podemos usar sistemas de vectores de estado sobre-completos y no-ortogonales para resolver algunos problemas. Un sistema sobre-completo significa, en palabras simples, que si al menos eliminamos un vector en el sistema, éste permanecerá completo. Entonces, el sistema contendrá más estados de los necesarios para expresar un vector de estado arbitrario. Además, estos estados parecen ser un puente natural para estudiar la correspondencia entre la mecánica cuántica y la mecánica clásica.

Estos estados minimizan las relaciones de incertidumbre de Heisenberg (Malkin y Manko 1979).

El sistema de estados coherentes se relaciona con el grupo Heisenberg-Weyl. Sin embargo, el grupo Heisenberg-Weyl no es el grupo de simetría dinámica universal. Entonces, se puede extender este concepto a una más general que sería: Estados Coherentes Generalizados (ECG). Estos estados se aplican en diferentes escenarios físicos, proporcionando una herramienta poderosa de investigación (Perelomov 2010, Konstant 1970). Haremos uso de los estados coherentes clásicos y generalizados en varios temas importantes como la teoría del ferromagnetismo de Heisenberg, el teorema de Ehrenfest, el modelo de Hubbard, la dinámica del ADN, entre otros, y mostraremos la importancia del papel que desempeñan estos estados cuánticos en la física no lineal.

Comencemos con los operadores más simples que se usan para describir un sistema cuántico con un grado de libertad. Estos operadores son el operador de coordenadas canónicas q y el momentum o impulso p que actúan en el espacio de Hilbert además del operador de identidad $\hat{I}$ y que satisfacen las relaciones de conmutación,

$$[q, p] = i\hbar\hat{I}, \quad [q, \hat{I}] = [p, \hat{I}] = 0, \tag{11.1}$$

donde $\hbar$ es la constante de Planck, I es el operador de la unidad. Los operadores de creación a^+ y destrucción (o aniquilación) a pueden ser expresados a través de los operadores canónicos así:

$$a = \frac{q + ip}{\sqrt{2\hbar}}, \qquad a^+ = \frac{q - ip}{\sqrt{2\hbar}}. \tag{11.2}$$

A continuación, se construye el álgebra de Heisenberg-Weyl cuyos elementos z se representan de la siguiente manera :

$$z = (s; x_1, x_2) = x_1 e_1 + x_2 e_2 + s e_3, \tag{11.3}$$

con

$$e_1 = i(\hbar)^{-1/2} p, \quad e_2 = i(\hbar)^{-1/2} q, \quad e_3 = i\hat{I}. \tag{11.4}$$

Cuando se incluyen los operadores de creación y aniquilación, el operador de identidad y el operador de conservación numérica como generadores, el sistema de oscilador armónico posee la dinámica de grupo Heisenberg-Weyl H_4. Schrödinger construyó estos estados como paquetes de ondas para determinar el enlace entre los mundos cuántico y clásico. Es natural, por eso, construir los estados coherentes por correspondencia uno a uno con el espacio geométrico $H(4)/U(1) \otimes U(1)$. Así, los paquetes de ondas no se dispersan y sus centros se mueven a lo largo de la trayectoria clásica.

El siguiente paso es construir el grupo de Heisenberg-Weyl. Como es conocido, esto se logra mediante la siguiente fórmula

$$exp(z) = exp(isI) D(\beta), \quad D(\beta) = exp(\beta a^+ - \bar{\beta} a), \tag{11.5}$$

donde $z = (s; x_1, x_2)$ es el elemento del álgebra de Heisenberg-Weyl que también se puede representar usando los operadores de creación y aniquilación

$$z = is\hat{I} + \frac{i}{\hbar}(Pq - Qp) = is\hat{I} + (\beta a^+ - \bar{\beta} a). \tag{11.6}$$

Cuando el estado fundamental del oscilador cuántico se define por la condición

$$a|0 >= 0, \tag{11.7}$$

los estados coherentes (EC), $|\beta>$ se obtienen de la siguiente manera

$$|\beta>= D(\beta)|0> . \tag{11.8}$$

Estos estados coherentes se pueden representar como una serie en términos de estados estacionarios del oscilador armónico (Perelomov 2010, Gilmore 2006):

$$|\beta>= exp\left(-\frac{|\beta|^2}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}|n> . \tag{11.9}$$

El producto escalar entre dos estados coherentes será

$$|<\beta|\alpha>|^2 = exp(-|\alpha-\beta|^2). \tag{11.10}$$

Es decir que los estados coherentes no son ortogonales entre sí y cada estado cuántico $|\psi>$ se puede descomponer en términos de estados coherentes

$$|\psi>=\int_{-\infty}^{+\infty}|\beta><\beta|\psi> d^2\beta, \tag{11.11}$$

donde $d^2\beta$ está relacionado con el elemento del volumen de fase $\pi^{-1}d^2\beta = 2\pi\hbar^{-1}dpdx$.

Cualquier operador $\hat{O}$ también puede descomponerse usando el sistema EC como

$$\hat{O} = \pi^{-2}\int |\alpha>\tilde{O}(\alpha^*,\beta)<\beta|exp(-\frac{|\alpha|^2+|\beta|^2}{2})d^2\alpha d^2\beta, \tag{11.12}$$

y el promedio del operador como $\tilde{O}(\alpha^*,\beta) =<\alpha|O|\beta>$.

El producto de las incertidumbres (dispersión) de la posición y el momento en este estado recibe un valor mínimo posible dentro de la relación de incertidumbre de Heisenberg. Es decir, se cumple la condición

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2}. \tag{11.13}$$

Por lo tanto, el estado coherente podría interpretarse como una condición lo más cercana posible al estado clásico. Estas propiedades y sus generalizaciones pueden encontrarse en las referencias Sudarshan (1963), Perelomov (2010), Ali, Antoine, Gazeau y Mueller(1995), Klauder y Skagerstam (1985), Zhang y Gilmore (1990), por mencionar algunos.

11.1.1. Modelo ferromagnético de Heisenberg y la ecuación no lineal cúbica quinta de Schrödinger

Como primer ejemplo del uso de EC como herramienta para problemas no lineales, consideremos el modelo ferromagnético de Heisenberg de la interacción de spines con fonones (Makhankov 1990) con el siguiente Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_L, \qquad H_L = T + V, \tag{11.14}$$

con

$$\hat{H}_s = -\frac{1}{4} \sum_{t\sigma} \left[J_{ii+\sigma} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+\sigma}^- + h.c.) - 2\bar{J}_{ii+\sigma} \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+\sigma}^z \right] - h\mu \sum_t \hat{S}_t^z. \tag{11.15}$$

Donde T y V representan las energías cinéticas y potenciales de las oscilaciones del enrejado, respectivamente y μ la susceptibilidad magnética. El Hamiltoniano se da en términos de los operadores de spin $\hat{S}$. Además, las magnitudes de acoplamiento $J_{ii+\sigma} \equiv J(|x_{i+\sigma} - x_i|)$ poseen las propiedades de simetría $J_{ij} = J_{ji}$ y el vector de campo magnético externo aplicado al sistema viene dado por $\vec{B} = (0, 0, h)$. Pasamos de la representación cuántica del

Hamiltoniano especificada por los operadores de spin $\hat{S}$ a la representación semiclásica, de índices (φ clásicos): los índices son las variables canónicas complejas conjugadas en el espacio-fase del sistema clásico.

Para analizarlo bebemos expresar al Hamiltoniano en función de los operadores de creación $a^\dagger$ y operadores de aniquilación a (conocidos como operadores Bose). Es conveniente recordar que el estado base viene dado por la elección del eje oz como eje de cuantización. Con este objetivo, usamos la transformación Holstein y Primakov (1940).

$$\begin{aligned} \hat{S}_j^+ &= \sqrt{2s-\hat{n}_j}\; a_j, \quad \hat{S}_j^- = a_j^+ \sqrt{2s-\hat{n}_j}, \\ \hat{S}_j^z &= s-\hat{n}_j, \quad \hat{n}_j = a_j^+ a_j. \end{aligned} \tag{11.16}$$

Siendo s el valor del spin. Una vez que hemos bosonizado al Hamiltoniano, es posible emplear los estados coherentes del grupo Weyl en función de los operadores de creación y aniquilación (11.2),

$$|\psi>= e^{\varphi a^\dagger - \bar{\varphi} a}|0>= e^{-\frac{1}{2}|\varphi|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi^n}{\sqrt{n!}}|n>, \tag{11.17}$$

donde $|n>= \sqrt{n!}(a^\dagger)^n|0>$.

Promediando el Hamiltoniano (11.15) por los estados coherentes (11.17), se obtiene la versión clásica del mismo

$$\begin{aligned} H &= H_0 - \sum_i J_{n+1}\left[s(\bar{\varphi}_i\varphi_{i+1}+\bar{\varphi}_{i+1}\varphi_i) - \rho s(|\varphi_i|^2+|\varphi_{i+1}|^2)\right] - \\ &- \sum_i \rho J_{n+1}\left[|\varphi_i|^2|\varphi_{i+1}|^2 - \frac{1}{2\varphi}\bar{\varphi}_{i+1}\varphi_i(|\varphi_i|^2|+\varphi_{i+1}|^2)\right] - \\ &- \mu\sum_i |\varphi_i|^2, \end{aligned} \tag{11.18}$$

como

$$T = \frac{m}{2}\sum_i \dot{x}_i^2, \tag{11.19}$$

y la energía potencial V expresado con términos inarmónicos

$$V = \frac{mu_o^2}{2a_o^2}\sum_i (x_{i+1} - x_i - a_o)^2 + \frac{V_m}{3!}\sum_i (x_{i+1} - x_i - a_o)^3, \tag{11.20}$$

siendo u_o la velocidad del sonido en el cristal, a_0 la distancia entre partículas en estado de equilibrio. Descomponemos a las constantes de acoplamiento en serie de Taylor y conservamos términos hasta segundo orden de aproximación:

$$J_{u+\sigma} \cong J_0 - J_1(X_{i+\sigma} - X_i - a_0) + J_2(X_{i+\sigma} - X_i - a_o)^2, \tag{11.21}$$

$$\text{con}: \quad J_k = -\partial^k J/(\partial X_i)^k|_{x_i = x_{i-1} - a_0} \qquad k = 1, 2. \tag{11.22}$$

La versión continua del modelo la conseguimos haciendo

$$\varphi_j = \varphi(ja_0) \equiv \varphi(\chi), \tag{11.23}$$

donde a_0 es la distancia entre dos partículas cercanas en la red y j es la posición en el enrejado. Por lo tanto, para las coordenadas tendremos la expansión también en series de Taylor

$$x_{i\pm1} = x \pm x_\chi a_o + \frac{1}{2}x_{\chi\chi}a_o^2 \pm \frac{1}{6}x_{\chi\chi\chi}a_o^3 + \frac{1}{4!}x_{\chi\chi\chi\chi}a_o^4 + ... \tag{11.24}$$

La dinámica de la red se estudiará en el "espacio-tiempo" (χ, t). Como la distancia entre dos puntos cercanos es pequeña, entonces despreciamos términos mayores a $\varphi_{\chi\chi}$ y suponemos que φ tiene el mismo orden, que $x_{\chi\chi}$. Estas aproximaciones usadas con respecto al Hamiltoniano (11.14) después

de ciertos cálculos algebraicos nos provee de las siguientes ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned} i\varphi_t &= -\alpha\varphi_{\chi\chi} - \bar{\mu}\varphi + gx\chi\varphi + c_1(x\chi)^2 - \lambda|\varphi|^2\varphi, \\ mx_{tt} &= cx_{\chi\chi} + c_1(x\chi|\varphi|^2) - g(|\varphi|^2)\chi, \end{aligned} \tag{11.25}$$

siendo

$$\alpha = \frac{1}{2}J_0 s a_0^2, \quad \tilde{\mu} = s(J_0 - J_1)(1-\rho) - b\mu, \quad g = -J_1 s(\rho-1)a_0,$$

$$c_1 = 4sJ_2(\rho-1), \quad \lambda = 2J_o(\rho-1), \quad c = u_o^2, \quad c_1 = 4sJ_2(\rho-1).$$

En el límite quasistacionario $|mx_{tt}| << |cx_{tt}|$ del sistema de ecuaciones (11.25) obtenemos

$$i\varphi_t = -\alpha\varphi_{\chi\chi} - \tilde{\mu}\varphi - p\frac{|\varphi|^2\varphi}{1+b|\varphi|^2}, \tag{11.26}$$

con

$$b = c_1/\sqrt{c}, \qquad p = 4\left(J_1 s^2(1-\rho)^2/c + sJ_o/2\right),$$

en donde términos de orden superior fueron descartados. La última Ec. (11.26) se conoce como ecuación no lineal de Schrödinger con no linealidad de saturación. Si tenemos en cuenta la no linealidad menor que $0(b|\varphi|^2)$ se obtiene la ecuación convencional no relativista de teoría de campos φ^6.

$$i\varphi_t + \varphi_{\chi\chi} - \mu\varphi + (|\varphi|^2 - \beta|\varphi|^4)\varphi = 0, \tag{11.27}$$

conocida como la ecuación de Schrödinger no lineal cúbica quinta (c-qNLSE).

11.1.2. Dinámica de los estados comprimidos de Kennard

A continuación se despliega otro ejemplo de aplicación de estados coherentes (Belyaeva, Ramirez-Medina, Serkin, 2012). Se emplea una generalización del teorema de Ehrenfest, que consiste en el cálculo de la tasa de cambio de los valores promedio de coordenada y momento de los paquetes de onda. Así, la onda gaussiana fue tomada como un prototipo de un estado coherente. También podría estudiarse la dinámica lineal y no lineal de los paquetes de ondas gaussianas con variación de parámetros (amplitud, ancho y fase) y el potencial externo del tipo de oscilador armónico. Comenzamos con la ecuación no lineal de Schrödinger pero ahora también influida por un potencial externo $V(x)$

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - R|\Psi|^2\Psi + V(x)\Psi, \tag{11.28}$$

donde para el caso general consideramos que la norma

$$N_0 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = const, \tag{11.29}$$

no necesariamente sea igual a la unidad. Las expresiones para cantidades conservadas se obtienen siguiendo el método de Ehrenfest. Como el Hamiltoniano del sistema, asociado con su valor promedio de la energía $< E >= H_{01}$:

$$H_{01} = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2}\left|\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right|^2 - \frac{1}{2}R|\Psi|^4 + V|\Psi|^2\right] dx. \tag{11.30}$$

La evolución espacio-temporal del primer momento, asociada con la ruta de un centro de masas de paquetes de ondas no lineales, se describe mediante la ecuación:

$$iN_0\frac{d<x>}{dt}=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx. \tag{11.31}$$

Asimismo, utilizando el mismo método obtenemos para el segundo momento del impulso

$$iN_0\frac{d^2<x>}{dt^2}=4H_{01}-2\int_{-\infty}^{\infty}\left[2V+x\frac{\partial V}{\partial x}\right]|\Psi|^2dx. \tag{11.32}$$

Se toma ahora en cuenta el paquete de onda de la forma de estado coherente

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{a(t)\sqrt{pi}}}exp\left\{-\frac{1}{2a^2(t)}x^2-i\frac{da/dt}{2a(t)}x^2\right\}, \tag{11.33}$$

con $N_0=1$ y el parámetro $a(t)$ dependiente del tiempo. Como potencial externo se usa al potencial del oscilador armónico $V(x)=\frac{1}{2}\omega^2x^2$. de forma estándar uno puede obtener la ecuación de movimiento

$$\frac{d^2a}{dt^2}-\frac{1}{a^3}+\omega^2a=0. \tag{11.34}$$

La ecuación diferencial no lineal (11.34) se conoce como ecuación de Ermakov. Una solución para esta ecuación fue encontrada por Pinney en 1950 y describe el estado de Kennard, es decir, un estado comprimido o una onda localizada, la posición y el impulso, ancho y amplitud a partir de los cuales oscila periódicamente.

Kennard descubrió los estados coherentes de un oscilador armónico en 1927, a su vez, este trabajo produce como resultado una clase más de paquetes de onda oscilantes para anchuras iniciales arbitrarias y localizaciones de funciones de onda no limitadas simplemente por el estado base desplazado.

Estas soluciones se conocen como estados comprimidos. Este fue un punto de inflexión para derivar la relación de incertidumbre dependiente del tiempo de Heisenberg para los estados de paquetes de onda de oscilación. Una de las múltiples razones que hacen de este trabajo algo notable es que los estados de Kennard de los paquetes de onda siguen siendo gaussianos en cualquier momento, siempre y cuando su ancho y amplitud oscilen. Esto significa que, si el estado inicial tiene un ancho mayor que el ancho del valor propio del potencial, la densidad de probabilidad representa la compresión periódica y la función de onda gaussiana puede estar fuertemente localizada en el espacio. Por esta razón se le des denominó como estados comprimidos.

El caso especial para un estado comprimido, cuando $\omega = 1/a^2$ corresponde a paquetes de onda que representan los estados propios del Hamiltoniano desplazado del oscilador armónico, para lo cual se minimiza la relación de incertidumbre de Heisenberg. Estos estados por definición son estados coherentes.

11.2. Estados coherentes generalizados

El esquema presentado arriba se puede generalizar para construir los *estados coherentes generalizados* (ECG) con propiedades similares a las de los estados coherentes del oscilador armónico. Los estados coherentes generalizados para sistemas cuánticos arbitrarios han sido desarrollados en diferentes consideraciones físicas y matemáticas (Glauber 1963, Klauder y Sudarshan 1968, Klauder 1993, Perelomov 2010, Klauder y Skagerstam 1985). La base de este desarrollo para los grupos de Lie, especialmente realizado por

Perelomov (2010), fue conectar estrechamente los estados coherentes con la dinámica grupal de cada problema físico.

Los ECG son particularmente útiles debido a sus propiedades algebraicas y topológicas bien definidas. Comúnmente es útil usar funciones de prueba (es decir, algunas bases) para promediar el Hamiltoniano cuántico. La elección de estados coherentes como funciones de prueba será la más idónea por su similitud con los estados clásicos. En algunas ocasiones las excitaciones colectivas no son más que estructuras de algún tipo de solitón. Entonces se debe formular un procedimiento consistente para reducir los modelos cuánticos estadísticos a sus contrapartes de campos clásicos. Por lo tanto, un problema formulado en el lenguaje de la mecánica cuántica con algunas dinámicas de grupo se analizará con la ayuda de estados coherentes relacionados con ese grupo y lo convertirá en un sistema cuasi-clásico. Por otro lado, en diversos problemas de muchos ingredientes cuánticos es natural utilizar los estados coherentes generalizados con operadores de spin, para lo cual se han construido los estados coherentes generalizados con los operadores de spin de grupo $SU(2)$. Dichos estados, para los valores arbitrarios de spin j, corresponden a puntos del espacio $SU(2j+1)/SU(2j) \otimes U(1)$. Para definir y analizar algunas propiedades de los estados coherentes generalizados haremos uso de la siguiente estrategia. Sea que G es un grupo de Lie, g es un elemento de este grupo y T su representación unitaria no reducida que actúa en el espacio de Hilbert H. Denotemos por $|\Psi>$ a un vector en ese espacio, por $<\Phi|\Psi>$ a la multiplicación escalar y al operador de proyección sobre Ψ como $|\Psi><\Psi|$. Fijamos un vector Ψ_0. Consideramos una serie de vectores $\{|\Psi(g)>\}$, como $|\Psi(g)>= T(g)|\Psi_0>$ y g recorren todo el grupo

G. Los vectores que definieron el mismo estado (los que se diferencian en la fase) se agruparan en clases de equivalencia ($|\Psi(g_1) > \sim|\Psi(g_2) >$) . Esto es posible si $|\Psi(g_1) >= exp(i\alpha)|\Psi(g_2) >$, por lo tanto $T(g_2^{-1} \times g_1)|\Psi(g_0) >= exp(i\alpha)|\Psi(g_1) >$.

Sea $K = \{k\}$ una serie de elementos del grupo G que satisface $T(k)|\Psi(g_0) >= exp(i\alpha(k))|\Psi(g_0) >$. Este es el conjunto del subgrupo estacionario del vector $|\Psi_0 >$. De lo que proponemos anteriormente, es fácil ver que los vectores $|\Psi >$ se agrupan en la clase adjunta izquierda $g_{1k} \in g_1 K$ se diferenciarán uno del otro sólo en la fase. Esto significa que pertenecen a la misma clase. A partir de esto, concluimos que los diferentes vectores (estados) corresponden a los elementos g que pertenecen al espacio cociente $M = G/K$. En este caso, para describir el conjunto de diferentes estados es suficiente tomar un elemento de cada clase. Desde el punto de vista geométrico, el grupo g_m se trata como un espacio de paquete de fibra con la base $M = G/K$ y la capa K. Luego, a los elementos g_m les corresponderá alguna sección del espacio fibrado (Gazeau, J.-P. 2009). Por lo tanto, los estados coherentes generalizados se definirán como sigue: el sistema de estados coherentes, que denotamos como ($T|\psi_0 >$), (T es la representación del grupo G que actúa en el espacio H, y $|\psi_0 >$ es el vector fijo de este espacio), es el conjunto de estados $\{|\psi_g >\}$ que satisfacen $|\psi_g >= T(g_m)|\psi_0 >$ donde $g_m \in G/K$ y K es un subgrupo estacionario del grupo de referencia $|\psi_g >$ determinado por el punto $x = x(g)$ del espacio G/K correspondiente al elemento

$$g : |\psi_g >= e^{\alpha}|x >, \quad \psi_0 = |0 > . \tag{11.35}$$

Con base en los grupos de Lie, veamos algunos ejemplos importantes.

11.2.1. Grupo SU(2)

El grupo $G = SU(2)$ es uno de los grupos fundamentales en física, por lo tanto, es importante analizar los estados coherentes generalizados construidos con base en este grupo. El álgebra de este grupo está definida por los generadores $S^{\pm} = S^x \pm S^y$, $S^0 = S^z$ con los conmutadores $[S^z, S^{\pm}] = \pm S^{\pm}$, $[S^-, S^+] = -2S^z$ y el operador de Casimir $\hat{C}_1 = S^{z^2} + \frac{1}{2}(S^+S^- + S^-S^+) = S^{z^2} + S^{x^2} + S^{y^2}$ que conmuta con S^z. Del lema de Schur, este operador es proporcional al operador unitario $\hat{C}_1 = j(j+1)\hat{I}$. Esto implica que la representación del grupo $SU(2)$ se caracteriza por el número j, (Makhankov 1990). Para el operador de la representación no reducida $T(g)$ de este grupo se pueden parametrizar como:

$$T(g) = e^{\alpha S_+ - \overline{\alpha} S_- + i\lambda S_z}, \qquad |\alpha| \geq \pi/2, \qquad \lambda \quad \epsilon \quad \Re. \tag{11.36}$$

Si ahora elegimos un vector propio del operador S^z como un vector de referencia $|\psi_0 >= |0>$, la acción del operador $e^{i\lambda S^z}$ sobre el vector $|\psi_0>$ lleva sólo el desplazamiento de fase para $|\psi_0>$. Esto significa que los elementos como $e^{i\lambda S^z}$ producen un subgrupo estacionario del vector $|\, psi_0>$ que coincide con el grupo $U(1)$. Entonces, los estados coherentes generalizados en nuestro caso se definirán en el espacio homogéneo $SU(2)/U(1)$, sobre la esfera S^2, es decir, sobre el espacio complejo proyectivo $\mathbf{CP} = S^2$. Ahora el sistema de estados coherentes generalizados se puede escribir como:

$$|\Psi >= T(g)|\psi_0 >= e^{\alpha S^+ - \overline{\alpha} S^-}|0 >= (1 + |\psi|^2)^{-j} e^{\alpha S^+}|0>, \tag{11.37}$$

con

$$\hat{S^{\pm}} = \hat{S^x} + i\hat{S^y}, \quad \psi = \frac{\alpha}{|\alpha|} Tan|\alpha|, \quad |0 >= |j, -j>, \tag{11.38}$$

donde α y ψ son números complejos y j definen la representación unitaria del grupo $SU(2)$. Como se puede ver, la serie de estados coherentes o funciones de prueba tienen la simetría de la esfera.

El vector estado con menos peso es el vector $|0>=|j,-j>$ para el grupo $SU(2)$. El resultado está vinculado intuitivamente con la situación en la que el vector con menos peso es el "vacío" para el operador descendente $S^-|\psi_0>=0$. Un caso particular de este grupo es el de Heisenberg-Weyl. Para otros casos cuánticos cuando el Hamiltoniano se da en términos de operadores Bose, entonces la base más natural de las funciones de prueba es la que se forma con estos estados coherentes. En este caso, el operador de aniquilación satisface $a^-|0>=0$. Cuando el estudio involucra grados infinitos de libertad, la construcción de los estados coherentes generalizados es muy similar a la situación descrita anteriormente.

Para $j=1$, los estados coherentes generalizados serán aquellos que vivan en el espacio $SU(2)/U(1)$ y puedan ser parametrizados por la función compleja ψ

$$|\Psi>=\frac{1}{1+|\psi|^2}\left\{|0>+\sqrt{2}\psi|1>+\psi^2|2>\right\}, \tag{11.39}$$

siendo $|i>$ $(i=0,1,2)$ estados cuánticos de spin puro (*down*, *middle y up states*, como de costumbre). Los componentes del vector de spin clásico serán:

$$\vec{S}=(S^x,S^y,S^z)=<\Psi|\hat{S}|\Psi> \tag{11.40}$$

y además

$$S^+=\bar{S}^-=2j\frac{\bar{\psi}}{1+|\psi|^2}, \tag{11.41}$$

$$S^z = -j\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2}, \tag{11.42}$$

$$Q^{zz} = \frac{j^2(1-|\psi|^2)+2j|\psi|^2}{(1+|\psi|^2)^2}. \tag{11.43}$$

Pero a medida que los operadores de giro conmutan en diferentes lugares de la celda, entonces la correlación de S^iS^j tendrá la forma

$$< \Psi|\hat{S^i_m}\hat{S^j_{m+1}}|\Psi >=< \varphi|\hat{S^i_m}|\varphi >< \varphi|\hat{S^j_{m+1}}|\varphi >, \tag{11.44}$$

donde $|\varphi >= |\psi >_m |\psi >_{m+1}$

11.2.2. Grupo SU(1,1)

El álgebra de este grupo se define para las relaciones de conmutación $[K^z, K^\pm] = \pm K^\pm$, $[K^-, K^+] = 2K^z$ y, además, el operador de Casimir

$$\hat{C_2} = (K^z)^2 - \frac{1}{2}(K^+K^- + K^-K^+) = (K^z)^2 - (K^x)^2 - (K^y)^2, \tag{11.45}$$

conmuta con todos los operadores K. Nuevamente, de acuerdo con el lema de Schur para las representaciones irreducibles, este operador de Casimir es un múltiplo de la unidad $\hat{C_2} = k(k-1)\hat{I}$.

Veamos la siguiente parametrización del grupo $SU(1,1)$,

$$T_2(g) = exp(\alpha K^+ - \overline{\alpha}K^- + i\lambda K^z). \tag{11.46}$$

Si elegimos $|\psi_0 >$ como un vector propio del operador K^2, entonces la acción del operador $e^{i\lambda K^z}$ sobre el vector $|\psi_0 >$ simplemente implica un cambio de fase, es decir, los elementos $b = e^{i\lambda K^z}$ forman el grupo estacionario del vector $|\psi_0 >$. Como se puede ver, el grupo estacionario $b = e^{i\lambda K^z}$ coincide con el

grupo $U(1)$; por lo tanto, los estados coherentes generalizados se definirán en el espacio homogéneo $SU(1,1)/U(1)$, es decir, sobre la pseudoesfera $S^{1,1}$. El sistema de estados coherentes generalizados se constituirá fácilmente como

$$|\alpha >_2 = D_2(\alpha)|\psi_0 >_2 = e^{\alpha K^+ - \overline{\alpha} K^-}|\psi_0 >_2 . \tag{11.47}$$

La representación unitaria irreducible del grupo $SU(1,1)$ tiene la serie fundamental, dos series discretas $T^{(+)}$, $T^{(-)}$ y una adicional unitaria de representación irreducible.

Por lo tanto, se puede construir una serie de sistemas de estados coherentes relacionados con esta serie. El más importante podría ser el sistema relacionado con las series discretas que se puede generalizar mediante los operadores de creación y aniquilación. Basta con considerar sólo una de las dos series, por ejemplo $T^{(-)}$, porque todos los resultados se pueden traducir fácilmente a $T^{(+)}$. Por lo tanto, $K_0|k,\mu >= \mu|k,\mu >$. Podemos elegir el vector base $|\psi_0 >_2$ de la siguiente manera

$$|\psi_0 >_2 = |k,k >, \tag{11.48}$$

y tenemos $K|\psi_0 >_2 = 0$. Finalmente, los estados coherentes construidos con los últimos vectores tienen la forma

$$|\xi >_2 = (1-|\xi|^2)^2 e^{\xi K^+}. \tag{11.49}$$

Estos estados constituirán ahora los estados coherentes de pseudo spin del grupo $SU(1,1)$.

11.2.3. Propiedades de los estados coherentes generalizados

Los estados coherentes generalizados tienen propiedades en ciertos casos análogas a las propiedades de los estados coherentes de Heisenberg-Weyl, mencionemos las más importantes

1. Los operadores $T(g)$ transfieren un estado coherente a otro.

2. Los estados coherentes generalizados son sobre-completos (más precisamente) son demasiado completos.

3. Los estados coherentes generalizados no son ortogonales entre sí:

$$< \xi' | \xi >_1 \quad = \quad [(1 + |\xi'|^2)(1 + |\xi|^2)]^{-j}((1 + \xi\bar{\xi'})^{2j}, \qquad (11.50)$$

$$< \xi' | \xi >_2 \quad = \quad [(1 - |\xi'|^2)(1 - |\xi|^2)]^{k}((1 - \xi\bar{\xi'})^{-2k}, \qquad (11.51)$$

   donde el primero corresponde a la esfera S^2, y el segundo a la pseudoesfera $S^{1,1}$.

4. Los estados coherentes minimizan la dispersión:

$$\Delta C_2 =< \psi_g | C_2 | \psi_g > - g^{ik} < \psi_g | x_j | \psi_g >< \psi_g | x_k | \psi_g >, \qquad (11.52)$$

   con $C_2 = g^{ik} x_i x_j$ que es el operador cuadrático de Casimir, x_i son los generadores del álgebra de Lie y g^{ik} es el tensor métrico Cartan-Killing.

   La evaluación de la incertidumbre (11.52) nos permite obtener los siguientes valores

$$\Delta \hat{C}^2 = j, \text{para el grupo,} \quad SU(2) \qquad (11.53)$$

$$|\Delta C_2| = k, \text{ para el grupo. } SU(1,1) \qquad (11.54)$$

La relación análoga a esta última para el caso especial de los estados coherentes comunes basados en el álgebra de Weyl, es la relación de la incertidumbre de Heisenberg, obteniendo $\Delta p \Delta x = \frac{1}{2}$

5. En el límite de grandes valores de j (o k) los estados coherentes generalizados tienden a los estados bosónicos. Por lo tanto, como $j, (k) \to \infty$, los estados coherentes de estos grupos de Lie se pueden escribir como

$$\begin{aligned} |\xi>_1 &= \lim_{j\to\infty}\left[1+\frac{|\alpha|^2}{2j}\right]^{-j} exp(\alpha a^\dagger)|\psi>_1 \\ &= exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) exp(\alpha a^\dagger)|\psi_0>, \end{aligned} \tag{11.55}$$

$$\begin{aligned} |\xi>_2 &= \lim_{k\to\infty}\left[1-\frac{|\alpha|^2}{2k}\right]^{k} exp(\alpha a^\dagger)|\psi>_2 \\ &= exp\left[-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right] exp(\alpha a^\dagger)|\psi_0> . \end{aligned} \tag{11.56}$$

Para otros grupos, los estados coherentes generalizados se construyen usando la representación fundamental

$$\begin{aligned} |\psi> &= \left\{\sum_i^{2j}(\xi\hat{T_i^\dagger} - \overline{\xi}_i\hat{T_i^-})\right\}|0> \\ &= \left[1+\sum_i^{2j}|\psi_i|^2\right]\left\{|0>+\sum_i^{2j}\psi_i|i>\right\}, \end{aligned} \tag{11.57}$$

donde $\hat{T_i^\dagger}$ y $\hat{T_i^-}$ son los generadores del grupo $SU(2j+1)$ en la representación fundamental y

$$\psi_i = \frac{\xi_i}{|\xi|}tan|\xi| \qquad |\xi| = \sqrt{\sum_i^{2j}|\xi_i|^2}, \tag{11.58}$$

con los siguientes vectores y valores

$$|0>=(0,...,0,1)^{2j} \qquad |j>=(0,...,0,1,0,...,0)^{2j}. \tag{11.59}$$

En el caso de $\mathbf{CP}^2$, el grupo de Lie a estudiar es $G = SU(3)$, el espacio será $G/H = SU(3)/SU(2)\otimes U(1)$ y para el estado coherente obtenemos

$$|\psi>=(1+|\psi_1|^2+|\psi_2|^2)^{\frac{1}{2}}\{|0>+\psi_1|1>+\psi_2|2>\}. \tag{11.60}$$

11.3. Aplicaciones de los estados coherentes generalizados

Seguidamente veremos algunas aplicaciones de los estados coherentes generalizados en varios modelos de la física matemática.

11.3.1. El ferromagnetismo en la teoría de Heisenberg

El modelo de Heisenberg proporciona la base para el estudio teórico de una amplia clase de fenómenos ferromagnéticos (y antiferromagnéticos) en el nivel cuántico. En los últimos años, el estudio de las excitaciones no lineales de spin en términos de ondas solitarias en el modelo de Heisenberg de ferromagnetismo se ha llevado acabo con mucho interés. Se consideran diferentes interacciones magnéticas en los límites clásicos y semi-clásicos.

Como el ferromagnetismo tiene un carácter microscópico, debido a las bajas temperaturas, entonces es posible dar una descripción clásica o semi-clásica de su comportamiento. Un ejemplo conocido es el modelo unidimensional de Hubbard correspondiente a 2 componentes de la cadena de

spin de Heisenberg con interacción entre ellas (Hubbard 1963). Al generalizar el modelo de Hubbard, obtenemos la cadena de hilado multicomponente, que se puede usar para describir excitaciones colectivas (Makhankov y Pashaev 1992).

Veamos el caso del modelo del ferromagnetismo de Heisenberg con anisotropía uniaxial para el cual se propone el Hamiltoniano cuántico

$$H = -J\sum_n (S_n S_{n+1} + \delta S_n^z S_{n+1}^z), \tag{11.61}$$

siendo S_n^x, S_n^y, S_n^z , los operadores de spin que actúan sobre el n-sitio, y δ es el coeficiente de anisotropía.

Para el modelo (11.61) consideramos usar los estados coherentes de spin. Como los operadores de spin conmutan en los sitios adyacentes, entonces el estado coherente para toda la línea donde están los spines tiene la forma

$$|\Psi> = \prod_n |\psi>_n \, . \tag{11.62}$$

Entonces evaluamos el promedio del Hamiltoniano cuántico (11.61) por los estados coherentes (11.62)

$$H_o = <\Psi|H|\Psi>, \tag{11.63}$$

obteniéndose la versión cuasi clásica del Hamiltoniano (11.61)

$$\begin{aligned} H_c &= -J\sum \left(\vec{S}_n \vec{S}_{n+1} + \delta \vec{S}_n^z \vec{S}_{n+1}^z\right) = \\ &- j^2 J \sum_n \frac{2(\psi_n \psi_{n+1}^*) + (1+\delta)(1-|\psi_n|^2)(1-|\psi_{n+1}|^2)}{(1-|\psi_n|^2)(1-|\psi_{n-1}|^2)}. \end{aligned} \tag{11.64}$$

En el límite continuo unidimensional cuando $D = 1$, el Hamiltoniano cuasi clásico tendrá la forma

$$H_c = -const. + 2j^2 a_o J \int dx \frac{|\psi_x|^2 + \rho|\psi|^2}{(1+|\psi|^2)^2}. \tag{11.65}$$

De aquí se ve que la energía clásica es positiva y su valor sobrepasa el valor negativo constante y las perturbaciones clásicas poseerán energías positivas.

Aplicando directamente los estados coherentes generalizados de spin al Hamiltoniano del anti-ferromagneto,

$$H = +J \sum_n (\hat{S}_n \hat{S}_{n+1} + \delta \hat{S}_n^z \hat{S}_{n+1}^z), \tag{11.66}$$

obtenemos excitaciones con energías negativas, que producirán inestabilidad en el sistema. Aparentemente, esta es la razón de la complejidad de definir el estado vacío en ferromagnetismo. Para evitar dificultades con las excitaciones y obtener energías positivas (Perelomov 2010) se reescribe el Hamiltoniano en términos de operadores de spin para el grupo

$$K^{\pm} = iS^{\pm}, \qquad K^z = S^z, \tag{11.67}$$

obtenemos una representación pseudo-spin para el anti-ferromagnetismo:

$$H = -J \sum_n \left[\frac{1}{2}(K_n^+ K_{n+1}^- + h.c.) - K_n^z K_{n+1}^z (1+\delta) \right]. \tag{11.68}$$

Aplicamos el método de estados coherentes y promediamos el Hamiltoniano cuántico (11.66) mediante el uso de estados coherentes generalizados definidos en la variedad $SU(1,1)/U(1)$

$$|\xi> = (1-|\xi|^2)^2 e^{\xi K^+} |0> \tag{11.69}$$

De la misma manera que para el caso del ferromagnetismo (11.63), obteniendo la versión clásica del Hamiltoniano del enrejado.

$$H = -J\sum_{n}\frac{2(\xi_n^*\xi_{n+1}) - (1+\delta)(1+|\xi_n|^2)(1+|\xi_{n+1}|^2)}{(1-|\xi_n|^2)(1-|\xi_{n-1}|^2)}. \tag{11.70}$$

En el límite continuo esta ecuación representa al σ - modelo del Hamiltoniano

$$H = JK^2N + \frac{a_0}{2}J\int dx(K_xK_x + \rho K^zK^z), \tag{11.71}$$

Para el caso de proyección estereográfica tenemos:

$$H = const. + 2k^2a_oJ\int dx\frac{|\xi_x|^2 + \rho|\xi|^2}{(1-|\xi|^2)^2}, \tag{11.72}$$

De esta manera, evitamos el problema de excitaciones con energía negativa y en su lugar nos ocupamos con problemas de grupos no compactos y variedades de representación (σ-modelo) o expresión singular (proyección e stereográfica).

En el límite continuo suponemos que $\lambda a_0 << 1$ con $\alpha = a_0 n$, la ecuación de movimiento que se obtiene del Hamiltoniano semi clásico para el caso SU(2) del ferromagnetismo será:

$$i\dot{\psi} + \Delta\psi + 2\frac{(\nabla\psi)^2\psi^*}{1+|\psi|^2} + \rho\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2}\psi = 0. \tag{11.73}$$

Para el otro caso $\mathbf{S}^{1,1}$ del anti ferromagnetismo, en el límite continuo la ecuación de movimiento clásico será (Makhankov, Agüero Granados y Makhankov 1996).

$$i\dot{\xi} + \Delta\xi + 2\frac{(\nabla\xi)^2\xi^*}{1-|\xi|^2} + \rho\frac{1+|\xi|^2}{1-|\xi|^2}\xi = 0. \tag{11.74}$$

Esta es la forma de ecuación de movimiento de anisotropía de Landau-Lifshitz. Entonces la simetría de los Hamiltonianos cuánticos con

respecto a los ECG es esférica S^2 para el ferromagnetismo y pseudo esférica $S^{1,1}$ para el antiferromagnetismo. El σ - modelo de esta ecuación produce la descripción cuasi-clásica correcta de la condensación de Bogolyubov, que predice el acoplamiento entre el anti-ferromagnetismo y los superfluidos (Pashaev y Sergeenkov 1986, Makhankov 1990).

11.3.2. Dinámica de interacción ADN-proteína

Ahora aplicamos el método de estados coherentes generalizados para comprender la dinámica interna del ADN que interactúa con una proteína. En este caso, los pares de bases de ADN que representan como spines clásicos en un sistema de doble hebra del ADN . Teniendo en cuenta el modelo de ADN de Watson y Crick con el eje helicoidal en la dirección z, Takeno y Homma consideraron la forma B del ADN (Takeno y Homma 1983, 1984). Se utilizaron tres consideraciones fundamentales para estudiar la estructura y la dinámica del ADN :

1. Las características esenciales se pueden obtener únicamente prestando atención a las bases de las dos hebras.

2. La dinámica de posiciones de las bases están determinados por los movimientos rotacionales sobre los puntos en los cuales ellos están anclados a las hebras.

3. Las fluctuaciones dan lugar, en ciertas circunstancias, a la ruptura de los puentes de hidrógeno de las bases, lo que induce el desenrollamiento de las dobles hebras a las que estaban unidas.

El Hamiltoniano completo se construirá considerando las siguientes partes. Lo primero es la contribución cuasi pura spínica H_1

$$H_1 = \sum_n [J(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \mathbf{S}'_n \cdot \mathbf{S}'_{n+1}) + \mu(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}'_n)], \tag{11.75}$$

que esta escrito en términos del operador rotacional $\mathbf{S}_n = (S_n^x, S_n^x, S_n^x)$ con las componentes

$$S_n^x = sen\theta_n cos\varphi_n, \quad S_n^y = sen\theta_n sin\varphi_n, \quad S_n^z = cos\theta_n. \tag{11.76}$$

La doble hélice de ADN se modela con dos cadenas de quasi spin acopladas. Los términos proporcionales a J corresponden a la interacción de apilamiento entre la n-ésima base y su entorno más cercano, el último término corresponde a la interacción inter hebra o lo que es lo mismo la energía de acoplamiento de los puentes de hidrógeno entre las hebras, por lo que μ será el parámetro de acoplamiento respectivo. En equilibrio, se espera que el parámetro μ sea menor que 1.

Además, como las funciones del ADN cambian bajo temperaturas biológicas, es necesario incluir en el Hamiltoniano la contribución de fonones y el acoplamiento de los desplazamientos de las bases y las rotaciones de las bases representados por los vectores quasi-spin,

$$H_2 = \left[\frac{p_n^2}{2m_1} + k_1(X_n - X_{n+1})^2 + \alpha_1(X_{n+1} - X_{n-1})(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}'_n) \right]. \tag{11.77}$$

Aquí X_n denota el desplazamiento de las bases a lo largo del enlace de hidrógeno en el sitio n y p_n representa el impulso del desplazamiento.

Del mismo modo, cuando el ADN está interactuando con otra molécula como proteína, por ejemplo, podría agregarse una nueva contribución al

Hamiltoniano.

$$H_3 = \left[\frac{q_n^2}{2m_2} + k_2(Y_n - Y_{n+1})^2 + \alpha_2(Y_{n+1} - Y_{n-1})(S_n^z S_n^z)\right], \tag{11.78}$$

donde y_n indica el desplazamiento del enésimo grupo de péptidos en esta molécula de proteína. El Hamiltoniano total viene dado entonces por la suma de todas las contribuciones

$$H = H_1 + H_2 + H_3. \tag{11.79}$$

Utilizaremos los estados coherentes del grupo $SU(2)/U(1)$ para pasar del caso cuasi-cuántico a su contraparte clásica. Se debe tener en cuenta que para estudiar el comportamiento del ADN bajo las temperaturas fisiológicas promedio para los seres vivos (300 K, o un poco más para humanos), las restricciones sobre las energías de excitación. Muchos enlaces entre los átomos pueden considerarse rígidos; por otro lado, existen grados de libertad para los cuales la energía de excitación es mucho menor en la escala térmica, lo cual permite considerarlo en el comportamiento clásico. Recordemos que los estados coherentes para el grupo $SU(2)$ se pueden representar como:

$$|\Psi_j >= (1 + |\psi_j|^2)^{-S} e^{\psi_j \hat{S}_j^\dagger} |S, -S >_j \, . \tag{11.80}$$

Ahora, teniendo en cuenta que los operadores de spin $\hat{S}_j^\dagger$ conmutan en los sitios vecinos de las hebras de ADN , el estado coherente para toda la red es el producto directo de los estados coherentes generalizados tomada en diferentes sitios

$$|\Psi >= \prod_j |\psi_j >; \quad j = 1, 2, 3, ..., N. \tag{11.81}$$

Por lo que, para valores promedios de la interaccioón spin-spin tenemos

$$< \Psi|\hat{S}_j^\dagger \hat{S}_{j+1}^\dagger|\Psi >=< \psi_j|\hat{S}_j^\dagger|\Psi_j >< \psi_{j+1}|\hat{S}_{j+1}^\dagger|\psi_{j+1} > . \tag{11.82}$$

Los valores promedios de los operadores spin $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$ que se obtienen empleando los estados coherentes del grupo $SU(2)$ pueden ser escritos con ayuda de sus proyecciones estereográficas (11.41)-(11.43), con $S^+ = S^x + iS^y$ y $S^- = S^x - iS^y$. Las cantidades $\psi_n, \theta_n, y\phi_n$ de la Ec. (11.76) están relacionadas por la fórmula $\psi_n = tan(\theta_n/2)e^{i\phi_n}$. Expresiones similares pueden ser construidas para la segunda hebra del ADN . En este caso, los estados coherentes generalizados estarán parametrizados por la variable ξ con sus ángulos correspondientes $\theta^{'}$ y $\phi^{'}$.

Usando las formulas anteriores y los estados coherentes definidos en la Ec. (11.80) se obtiene

$$
\begin{aligned}
H \;=\; & \sum_n \Bigg\{ -\frac{J}{2}\left(\frac{(\overline{\psi_n}\psi_{n+1} + \overline{\psi_n}\psi_{n+1}) + (1-|\psi_n|^2)(1-|\psi_{n+1}|^2)}{(1+|\psi_n|^2)(1+|\psi_{n+1}|^2)} \right. \\
& \left. + \frac{(\overline{\xi_n}\xi_{n+1} + \overline{\xi_n}\xi_{n+1}) + (1-|\xi_n|^2)(1-|\xi_{n+1}|^2)}{(1+|\xi_n|^2)(1+|\xi_{n+1}|^2)} \right) \\
& -\frac{1}{4}(\mu - \alpha_1(X_{n+1} - X_{n-1}))\frac{2\overline{\psi_n}\xi_n + 2\overline{\xi_n}\psi_n + (1-|\xi_n|^2)(1-|\psi_n|^2)}{(1+|\xi_n|^2)(1+|\psi_n|^2)} \\
& + \frac{p_n^2}{2m_1} + + k_1(X_n - X_{n+1})^2 \Bigg\}. \qquad (11.83)
\end{aligned}
$$

Debido a que la extensión de las excitaciones en el ADN es mucho mayor que la distancia interna "a" entre los nucleótidos vecinos, podemos hacer una aproximación de límite continuo. Introduciendo los campos $X_n \to X(z,t)$, $Y_n \to Y(z,t)$ con $z = na$ y hacemos aproximaciones estándar y aplicamos las fórmulas de las proyecciones estereográficas para construir el Hamiltoniano

de la siguiente forma

$$\begin{aligned} H &= \int \left\{ \frac{aJ}{2}\left(\frac{|\psi_z|^2}{1+|\psi|^2} + \frac{|\xi_z|^2}{1+|\xi|^2} \right) \right. \\ &- \frac{1}{4a}(\mu - 2\alpha_1 \alpha X_z)\left(\frac{2(\psi\bar{\xi} + \bar{\psi}\xi) + (1-|\xi|^2)(1-|\psi|^2)}{(1+|\xi|^2)(1+|\psi|^2)} \right) \\ &+ \frac{\alpha_2}{2}\frac{(1-|\xi|^2)(1-|\psi|^2)}{(1+|\xi|^2)(1+|\psi|^2)} y_z + \frac{p^2}{2am_1} + \frac{q^2}{2am_2} + \\ &+ \left. k_1 a (X_z)^2 + k_2 a (y_z)^2 \right\} dz + const. \end{aligned} \tag{11.84}$$

Usando la ecuación de movimiento de Hamilton $\dot{X} = \frac{\partial H}{\partial p}$; $\dot{y} = \frac{\partial H}{\partial q}$ y sus equivalentes canónicos conjugados, podemos encontrar las ecuaciones de movimiento para $X(z,t), \quad y(z,t)$.

La ecuación de movimiento para $\psi(z,t)$ y para $\xi(x,t)$ tendrá la forma clásica común, por ejemplo para ξ:

$$i\xi_t = -(1+|\xi|^2)^2 \frac{\delta H}{\delta \bar{\xi}}. \tag{11.85}$$

El mismo tipo de ecuaciones se construyen para la segunda variable ψ de campo .

Al analizar el sistema de ecuaciones, se obtiene una variante de la ecuación diferencial nolineal de Schrödinger con no linealidad del tipo saturable. Existe una inmensa gamma de posibles ecuaciones que pertenecen a esta familia de ecuaciones generalizadas de Schrödinger.

$$\begin{aligned} i\psi_t &= -\frac{Ja}{2}\psi_{zz} + aJ\frac{\psi_z^2 \bar{\psi}}{1+|\psi|^2} + \\ &+ \left[\frac{2\mu}{a} - \beta \frac{1+|\psi|^4 - 6|\psi|^2}{(1+|\psi|^2)^2} - \gamma \left(\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2} \right)^2 \right] \left[\frac{1-|\psi|^2}{1+|\psi|^2} \right] \psi, \end{aligned} \tag{11.86}$$

con los siguientes valores paramétricos:

$$\beta = \frac{2\alpha_1^2}{m_1 v_1^2 - 2ak_1}, \qquad \gamma = \frac{\alpha_2^2}{2(m_2 v_2^2 - 2ak_2)}.$$

La solución de la Ec. (11.86) analíticamente es posible haciendo ciertas aproximaciones que conducen a la obtención por ejemplo de la ecuación no lineal cúbica-quinta de Schrödinger, para la cual se encuentran, entre otras, estructuras compactas sin colas infinitas denominados compactones (Agüero, Belyaeva y Serkin 2011).

12. TEORÍA DE PERTURBACIONES

En este capítulo se estudia a grandes rasgos la ecuación no lineal de Schcrödinger (NLSE) no-integrable que se diferencia de la NLSE integrable por un término perturbativo que puede describir efectos de disipación energética, de interacción con otras ondas no lineales y/o de la acción de potenciales externos.

12.1. Ecuación no lineal de Schrödinger perturbada

Si la naturaleza de estos efectos perturbativos se limita a magnitudes pequeñas en comparación con la evolución ideal de la envolvente, existe una razón por la cual estos términos adicionales a la NLSE pueden ser agrupados en un término general $\varepsilon(u)$ que se asume de carácter levemente perturbativo al caso ideal. Se supone que la acción de los términos perturbativos transforma la onda solitaria de tal manera que puede adaptarse

continuamente a los cambios de un medio. El formalismo matemático que se llama "aproximación adiabática" para solitones fue desarrollada inicialmente en los años 1970 en trabajos de Karpman y Maslov (1977), y de Karpman y Soloviov (1981).

En su forma normalizada y en el régimen de dispersión anómala, la NLSE perturbada gobierna la evolución de $u(x,t)$ en la fibra de Kerr no ideal y queda escrita como (Karpman y Maslov, 1977):

$$iu_t + \frac{1}{2}u_{xx} + |u|^2 u = i\varepsilon(u), \tag{12.1}$$

donde ε es el término de la perturbación.

La solución de la Ec. (12.1) se busca en la siguiente forma:

$$u(x,t) = \eta(t)\text{sech}\left\{\eta(t)\left[x - q(t)\right]\right\}\exp\left[i\varphi(t) - i\delta(t)x\right]. \tag{12.2}$$

Así, la evolución del solitón en el tiempo será gobernada por el comportamiento del conjunto de sus coordenadas: la amplitud $\eta(t)$, la posición del centro de masa $q(t)$, la fase $\varphi(t)$, y su velocidad $\delta(t)$.

En presencia de la perturbación $i\varepsilon(u)$ en la NLSE (12.1), los parámetros del solitón varían lentamente con el tiempo, causando modificaciones en la forma del solitón y emisión de energía de carácter adiabático, dada la pequeña magnitud de las perturbaciones en comparación con la dinámica ideal. Esta evolución lenta y adiabática del solitón, permite al sistema no lineal adaptarse a lo largo de la propagación para preservar su perfil $u(x,t)$ (Karpman y Maslov 1977, Karpman y Soloviov 1981, Hasegawa y Kodama 1995, Agrawal 2001, Akhmediev y Ankiewicz 1997).

12.2. Dinámica adiabática de las coordenadas del solitón

Basado en la teoría de dispersión inversa, Karpman y Maslov encontraron la dependencia temporal de los parámetros del anzats (12.2) (Karpman y Maslov 1977, Karpman y Soloviov 1981, Hernández, Villagrán, Serkin, Agüero, Belyaeva, Peña, Morales 2006):

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{1}{\eta} Re \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(u)\ u^*(z) dz, \tag{12.3}$$

$$\frac{d\delta}{dt} = -\frac{1}{\eta} Im \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(u) \text{tanh z}\ u^*(z) dz, \tag{12.4}$$

$$\frac{dq}{dt} = -\delta + \frac{1}{\eta^3} Re \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(u)\ z\ u^*(z) dz, \tag{12.5}$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\eta^2} Im \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(u) \left[1 - z\text{tanh z}\right] u^*(z) dz + \frac{1}{2}\left(\eta^2 - \delta^2\right) + q\frac{d\delta}{dt}, \tag{12.6}$$

considerando $z = \eta(t)\left[x - q(t)\right]$. Es evidente que las Ecs. (12.3)-(12.6) admiten la reproducción del solitón fundamental no perturbado

$$u(x,t) = \eta_0 \text{sech}\left\{\eta_0\left[x + \delta_0 t\right]\right\} \exp\left[i\frac{1}{2}\left(\eta_0^2 - \delta_0^2\right) t - i\delta_0 x\right], \tag{12.7}$$

que resulta de imponer la condición $\varepsilon(u) = 0$ a la Ec. (12.1)

$$\begin{aligned}
\frac{d\eta}{dt} &= 0, && \Longrightarrow \eta(t) = \eta_0, \\
\frac{d\delta}{dt} &= 0, && \Longrightarrow \delta(t) = \delta_0, \\
\frac{dq}{dt} &= -\delta, && \Longrightarrow q(t) = -\delta_0 t, \\
\frac{d\varphi}{dt} &= \frac{1}{2}\left(\eta_0^2 - \delta_0^2\right), && \Longrightarrow \varphi(t) = \frac{1}{2}\left(\eta_0^2 - \delta_0^2\right) t.
\end{aligned} \tag{12.8}$$

La teoría de perturbación adiabática para solitones permite estudiar tales efectos como la disipación energética debido a la absorción electromagnética del medio, la distorsión del perfil temporal del solitón por efecto de auto-escarpado, la alteración de su espectro de frecuencias debido al efecto de dispersión intra-pulso de Raman, la dinámica del solitón en el potencial parabólico, etc. (Hasegawa y Kodama 1995, Agrawal 2001, Akhmediev y Ankiewicz 1997).

A continuación se procede a estudiar las principales perturbaciones a la propagación ideal del solitón fundamental en el medio de Kerr e investigar las diversas consecuencias que estas perturbaciones tienen sobre la evolución del solitón fundamental.

12.3. Perturbación disipativa

El primer efecto que puede alterar considerablemente la estabilidad del solitón es la pérdida de energía al propagarse en el medio de Kerr (Karpman y Maslov 1997, Agrawal 2001). La disipación se debe principalmente a la absorción de energía electromagnética por parte del material que compone al medio. El término perturbativo definido en la NLSE perturbada (12.1) adopta la forma:

$$i\varepsilon(u) = i\gamma(t)u, \tag{12.9}$$

resultando en

$$iu_t + \frac{1}{2}u_{xx} + |u|^2 u = i\gamma(t)u. \tag{12.10}$$

Al insertar esta perturbación en el conjunto de ecuaciones (12.3)-(12.6), la dinámica adiabática de las coordenadas del solitón resulta en:

$$\frac{d\eta}{dt} = \gamma\eta \int_{-\infty}^{\infty} \text{sech}^2(z)dz = 2\gamma\eta, \tag{12.11}$$

$$\frac{d\delta}{dt} = 0, \tag{12.12}$$

$$\frac{dq}{dt} = -\delta + \frac{1}{\eta^3} Re \int_{-\infty}^{\infty} z\text{sech}^2(z)dz, \tag{12.13}$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{2}\left(\eta^2 - \delta^2\right), \tag{12.14}$$

donde

$$\eta(t) = \eta_0 \exp\{\int_0^t 2\gamma(t')dt'\},$$

$$\delta(t) = \nu_0,$$

$$q(t) = -\nu_0 t + q_0,$$

$$\varphi(t) = \frac{\eta_0^2}{2}\left\{\int_0^t \exp\left[\int_0^{t'} 4\gamma(\tau)d\tau\right]dt'\right\} - \frac{1}{2}\nu_0^2 t + q_0\nu_0.$$

Para el caso de la disipación constante $\gamma(t) = \gamma_0$, los parametros del solitón serán definidos por las siguientes relaciones

$$\eta(t) = \eta_0 \exp\left(2\gamma_0 t\right), \quad \varphi(t) = \frac{\eta_0^2}{8\gamma}\left[\exp(4\gamma t) - 1\right] - \frac{1}{2}\nu_0^2 t + q_0\nu_0, \tag{12.15}$$

y la evolución del solitón brillante disipado queda descrita por:

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \eta_0 \exp\left(2\gamma_0 t\right) \text{sech}\left[\eta_0 \exp\left(2\gamma_0 t\right)\left(x - x_0 + \nu_0 t\right)\right] \\ &\quad \times \exp\left(i\left\{\frac{\eta_0^2}{8\gamma}\left[\exp(4\gamma t) - 1\right] - \frac{1}{2}\nu_0^2 t - \nu_0 x\right\}\right). \end{aligned} \tag{12.16}$$

Se observa claramente que el principal efecto que sufrirá el solitón en un medio de Kerr disipativo es la pérdida de amplitud a medida que se propaga, con

un factor exponencial de atenuación que multiplica a la amplitud inicial. Es fácil concluir que esta evolución eventualmente conllevaría la disipación del solitón, debido al esparcimiento temporal progresivo resultante de la relación inversa entre su amplitud y ancho, ver figura (12.1).

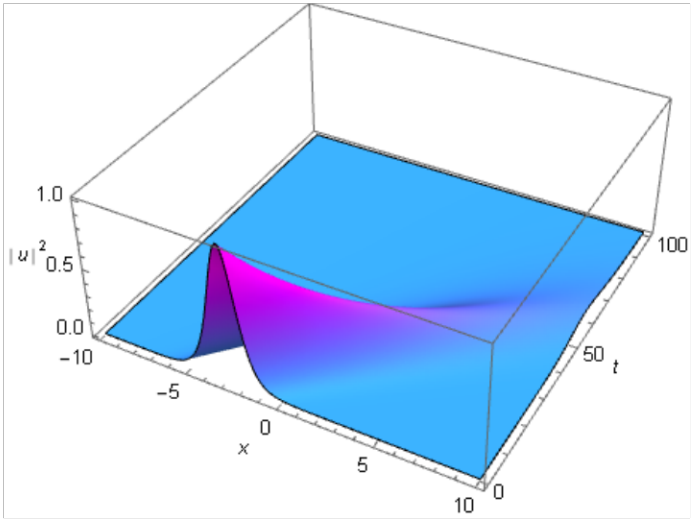


Figura 12.1. *Un solitón disipativo con los parámetros iniciales:* $\eta_0 = 1,\ \gamma_0 = -0{,}01,\ q_0 = 3\ y\ \nu_0 = 0{,}2.$

La integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u|^2\, dx = 2\eta(t) = 2\eta_0 e^{2\gamma_0 t}, \tag{12.17}$$

que en el caso de solitón fundamental, $\gamma = 0$, es una invariante; para el solitón disipativo tenemos: $\gamma(t) = \gamma_0$; es decir sufre la variación exponencial. Por esta razón, solamente se puede esperar que el solitón mantenga su estabilidad en la medida que $2\gamma_0 t \ll 1$, lo cual es consistente con la condición $\varepsilon \ll 1$ de la NLSE perturbada, que conduce a la dinámica adiabática.

12.4. Solitón en el potencial de un oscilador armónico

El segundo ejemplo que tiene aplicación importante para estudios en el condensado de Bose Einstein, es la dinámica de un solitón en el potencial del oscilador armónico (Karpman y Masolv 1977, Tenorio, Vargas, Serkin, Granados, Belyaeva, Moreno, Lara 2005).

Vamos a considerar la NLSE (12.1) con el potencial de oscilador armónico

$$iu_t + \frac{1}{2}u_{xx} + |u|^2 u - \frac{1}{2}\Omega^2 x^2 u = 0, \tag{12.18}$$

y estudiamos el movimiento de un solitón dentro de este potencial. Se puede suponer que en la Ec. (12.18) la perturbación tiene la forma: $i\varepsilon(u) = \frac{1}{2}\Omega^2 x^2 u$. La integración del sistema de ecuaciones (12.3)-(12.6) resulta en los siguientes ecuaciones:

$$\frac{d\eta}{dt} = 0, \qquad \frac{dq}{dt} = -\delta, \tag{12.19}$$

$$\frac{d\delta}{dt} = \Omega^2 q, \qquad \frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{2}\eta^2 - \delta^2, \tag{12.20}$$

de las cuales obtenemos las ecuaciones para la posición del centro de masas $q(t)$ y de la fase $\delta(t)$

$$\frac{d^2q}{dt^2} = -\Omega^2 q, \qquad \frac{d^2\delta}{dt^2} = -\Omega^2\delta. \tag{12.21}$$

de las dos ecuaciones (12.21) se obtiene el centro de masas $q(t)$ y la fase $\delta(t)$

$$q(t) = q_0 \cos(\Omega t) - \frac{\delta_0}{\Omega}\sin(\Omega t), \tag{12.22}$$

$$\delta(t) = q_0\Omega \sin(\Omega t) + \delta_0 \cos(\Omega t). \tag{12.23}$$

Se observa claramente que la posición del centro de masas $q(t)$ del solitón se mueve de acuerdo con la ley armónica con la frecuencia básica del oscilador. Lo mismo es correcto y para su fase $\delta(t)$. La amplitud η y el ancho $1/\eta$ del solitón conservan sus valores iniciales durante su movimiento: $\eta(t) = \eta_0$. La figura (12.2) muestra la dinámica del solitón de la NLSE en una trampa parabólica. Asimismo la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u|^2 \, dx = 2\eta_0, \tag{12.24}$$

es una invariante de movimiento.

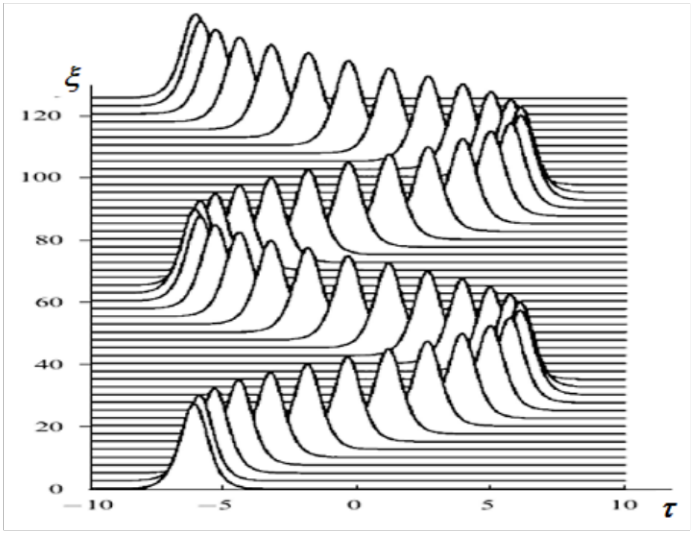


Figura 12.2. *Dinámica de un solitón en la* NLSE *en un potencial armónico con* $\Omega = 0.1$.

12.5. Interacciones y fuerzas entre solitones de la NLSE

La interacción de solitones, dependiendo de sus fases relativas, es un ejemplo muy ilustrativo de aplicación de métodos perturbativos para investigación de la dinámica no lineal. Los cálculos numéricos comprueban las predicciones de la teoría de perturbación adiabática para solitones.

Para investigar la interacción de dos solitones de la NLSE escribimos la superposición lineal de dos solitones individuales

$$u(x,t) = u_1(x,t) + u_2(x,t), \tag{12.25}$$

donde las soluciones solitónicas se representan por las siguientes fórmulas:

$$u_{1,2}(x,t) = \eta_{1,2}(t)\mathrm{sech}\left[\eta_{1,2}(t)(x - q_{1,2}(t))\right]\exp\left[i\varphi_{1,2}(t) - i\delta_{1,2}(t)x\right]. \tag{12.26}$$

Al sustituir Ec. (12.25) en la Ec. (12.1), obtenemos el modelo NLSE perturbado para dos solitones:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + |u_1|^2 u_1 &= i\xi(u_1) - 2|u_1|^2 u_2 - u_1^2 u_2^*, \\ i\frac{\partial u_2}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + |u_2|^2 u_2 &= i\xi(u_2) - 2|u_2|^2 u_1 - u_2^2 u_1^*, \end{aligned} \tag{12.27}$$

donde la interacción se puede interpretar como una perturbación

$$\varepsilon(u_m) = i\left(2|u_m|^2 u_n + u_m^2 u_n^*\right), \quad m,n = 1,2, \ m \neq n. \tag{12.28}$$

Para nuestro análisis, hacemos una suposición sobre la distancia entre solitones, es decir, consideramos que la separación entre ellos es bastante

grande ($q_2 > q_1$) pero tienen aproximadamente las mismas velocidades y amplitudes. Estas suposiciones se expresan como:

$$\begin{aligned} &|\Delta\eta q| << 1 << \eta q,\ |\varphi q| << 1, \qquad q = \frac{1}{2}\left(q_2 - q_1\right), \\ &\delta = \frac{1}{2}(\delta_2 + \delta_1),\ \Delta\delta = \delta_2 - \delta_1, \qquad \eta = \frac{1}{2}(\eta_2 + \eta_1), \\ &\Delta\eta = \eta_2 - \eta_1, \qquad \varphi = \varphi_2 - \varphi_1. \end{aligned} \tag{12.29}$$

Para $\varepsilon(u_m)u_m^*$ se obtiene

$$\begin{aligned} Im\left[\varepsilon(u_m)u_m^*\right] &= (-1)^m 3\eta^4 \sec \mathrm{h}^3(z) \sec \mathrm{h}(z - 2\eta q)\cos\varphi, \\ Re\left[\varepsilon(u_m)u_m^*\right] &= (-1)^m \eta^4 \sec \mathrm{h}^3(z) \sec \mathrm{h}(z - 2\eta q)\sin\varphi. \end{aligned} \tag{12.30}$$

Al sustituir Ecs. (12.30) en la Ec. (12.27), obtenemos el sistema de ecuaciones para los parámetros de dos solitones:

$$\begin{aligned} \frac{d\eta_k}{dt} &= (-1)^k\ 4\eta^3 \exp(-\eta q)\sin\varphi, \\ \frac{d\delta_k}{dt} &= (-1)^k\ 4\eta^3 \exp(-\eta q)\cos\varphi, \\ \frac{dq_k}{dt} &= -\delta_k - (-1)^k\ 2\eta \exp(-\eta q)\sin\varphi, \\ \frac{d\varphi_k}{dt} &= 6\eta^2 \exp(-\eta q)\cos\varphi + 2\eta\delta \exp(-\eta q)\sin\varphi + \frac{1}{2}(\eta_k^2 + \delta_k^2), \end{aligned} \tag{12.31}$$

donde $k = 1, 2$. De las Ecs. (12.31) se puede derivar las ecuaciones para los parámetros definidos en la Ec. (12.19,12.20):

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta\eta}{dt} &= 8\eta^3 \exp(-\eta q)\sin\varphi, \quad \frac{dq}{dt} = -\Delta\delta, \\ \frac{d\Delta\delta}{dt} &= 8\eta^3 \exp(-\eta q)\cos\varphi, \quad \frac{d\varphi}{dt} = \eta\Delta\eta. \end{aligned} \tag{12.32}$$

Para resolver el sistema de ecuaciones (12.32) definimos la función compleja $Y = \Delta\delta + i\Delta\eta$ y obtenemos la ecuación de su movimiento

$$\frac{d^2}{dt^2}Y = \frac{\eta}{2}\frac{d}{dt}Y^2. \tag{12.33}$$

Integrando la Ec. (12.33) nos da

$$Y^2 - 16\eta^2 \exp(-\eta q + i\varphi) = A^2, \tag{12.34}$$

donde A es una constante compleja. Las Ecs. (12.34) y (12.33) se pueden reducir a una sola ecuación

$$\frac{dY}{dt} = \frac{\eta}{2}(Y^2 - A^2), \tag{12.35}$$

que se resuelve explícitamente:

$$Y \equiv \Delta\delta + i\Delta\eta = -\psi \tanh(A\eta t + \theta), \tag{12.36}$$

donde θ es la constante de integración (compleja). Insertando (12.36) en (12.34), tenemos

$$4i\eta \cosh(\eta A t + \theta) = A \exp\left(\frac{1}{2}\eta q - i\frac{1}{2}\varphi\right). \tag{12.37}$$

Las Ecs. (12.36) y (12.37) dan la solución del sistema de Ecs. (12.32). En particular, la distancia de separación entre los solitones $q(t)$ es:

$$q(t) = \frac{1}{\eta} \ln\left[\cosh^2(\eta\Delta\kappa t + \alpha) + \cos^2(\eta\Delta\upsilon t + \phi) - 1\right] + q_0, \tag{12.38}$$

$$q_0 = \frac{2}{\eta} \ln\left(\frac{4\eta}{|A|}\right) \tag{12.39}$$

Los cuatro parámetros reales $A = \Delta\kappa + i\Delta\upsilon$ y $\theta = \alpha + i\phi$ se determinan a partir de los valores iniciales de $\Delta\eta$, $\Delta\delta$, q, y φ a través de las relaciones (12.39) y (12.38) en $t = 0$, es decir,

$$\Delta\delta_0 + i\Delta\eta_0 = -A \tanh\theta, \tag{12.40}$$

$$4i\eta \cosh\theta = A \exp\left(\frac{1}{2}\eta q_0 - i\frac{1}{2}\varphi_0\right), \tag{12.41}$$

donde el subíndice cero indica el valor inicial, por ejemplo para el parametro $\Delta\eta_0 = \Delta(0)$.

Finalmente vemos que la Ec. (12.38) para la separación relativa $q(t)$ desolitones cambia con el tiempo t dependiendo de las fases de los solitones. Entonces tenemos dos posibilidades:

(1). Sea que dos solitones inicialmente tenían las mismas amplitudes, velocidades y fases. En este caso, $\varphi(t) = 0$ para todos los intervalos de tiempo, es decir, los dos solitones siempre están "in phase". La separación relativa $q(t)$ de solitones es una función periódica cuyo periodo es:

$$T = \frac{\pi}{4}\exp(q_0/2). \tag{12.42}$$

En el inicio, los dos solitones se atraen mutuamente y se mueven juntos hasta colisionar y después de la colisión, $q(t)$ crece otra vez, lo que significa que los solitones se repelen. En $t = T$ los solitones regresan a sus estados iniciales. Este proceso se repite infinitamente.

(2). Sea que dos solitones inicialmente tengan fases opuestas: $\varphi_0 = \pi$,pero mismas amplitudes y velocidades. La diferencia de fases se conserva todo el tiempo. En este caso, la separación inicial de solitones aumenta constantamente, tal que los solitones se repelen cada uno y se dispersan al infinito. Finalmente, el resultado de la teoría de perturbación comprobada por cálculos numéricos muestra que dos solitones "in fase" siempre se atraen; en contraparte, dos solitones "out of fase" siempre se repelen.

BIBLIOGRAFÍA

Ablowitz, M. J. and H. Segur (1981). *Solitons and the inverse scattering transform*, USA: SIAM.

Ablowitz, M. J. and P. A Clarkson (1991). *Solitons, nonlinear evolution equations and inverse scattering*. U.K.: Cambridge University Press.

Ablowitz, M. J., D. J. Kaup, A. C. Newell and H. Segur (1973). Nonlinear evolution equations of physical significance, *Phys. Rev. Lett.*, 31, 125–127.

Agrawal, G. P. (2001). *Nonlinear Fiber Optics*, San Diego, USA: Academic Press.

Agüero Granados, M. A. (1991). "Coherent State Theory and the Field Lattice Model". In *Procceding of Nonlinear Evolution Equation and Dynamical Systems, Dubna* (pp. 207-210) Springer-Verlag.

Agüero Granados, M. A. and A. A. Espinoza Garrido (1993). "Bubble and kink solitons in the phi-six model of nonlinear field theory", in *Phys. Lett. A*, 182, 294-299.

Agüero Granados, M. A., A. Espinoza J. Martínez (1997). "Creación y aniquilación de solitones en la ecuación no lineal de la cuerda", en *Revista Mexicana de Física* 43, 3, 361-373.

Agüero, M. and R. Alvarado (1999). "On certain symmetries of the nonlinear Schrödinger equation" in *Journal of Physics A: Math. and Gen.*, 3, 493-516.

Agüero, M. A., T. L. Belyaeva and V. N. Serkin (2011). "Compacton anti-compacton pair for hydrogen bonds and rotational waves in DNA dynamics", in *Commun. Nonl. Sci. Numer. Simulat.*,16, 3071-3080.

Agüero, M. and R. Alvarado (2000). " Bright and singular solitons in the Boussinesq like equation", in *Physica Scripta*, 62, 232-237.

Agüero, M., Najera, Ma. L, Carrillo, M. (2008). "Nonclassical solitonic structures in DNA's vibrational dynamics", in *Inter. Jour. of Modern. Phys. B*, 22, 16, 2571.

Agüero, M. and M. Paulin (2001). "Solitonic structures in a nonlinear model with interparticle anharmonic interaction", in *Physical Review E. Vol.* 63, 046606

Akhmediev, N. N. and A. Ankiewicz (1997). *Solitons, Nonlinear pulses and beams*, London: Charpman and Hall.

Ali, S. T., J. P. Antoine, J. P. Gazeau and U. A. Mueller (1995). "Coherent states and their generalizations: A mathematical overview" in *Rev. Math. Phys.*, 7, 1013-1104.

Ankiewicz, A., D. J. Kedziora, A. Chowdury, U. Bandelow and N. Akhmediev (2016). "Infinite hierarchy of nonlinear Schrödinger equations and their solutions" in *Phys. Rev. E* 93, 012206.

Appali, R., S. Petersen and U. Rienen (2010). "A comparision of Hodgkin-Huxley and soliton neural theories", in *Advances in Radio Science*, 8, 75-79.

Bass, M. (1995). *Handbook of Optics*. USA: McGraw-Hill.

Belinski, V. and E. Verdaguer (2005). *Gravitational Solitons*. Cambridge University Pess, Cambridge.

Belyaeva T. L., C. A. Ramirez-Medina y V. N. Serkin (2012). "Dinámica de estados comprimidos de Kennard y squeezions en el potencial armónico: A

la memoria de Ehrenfest y Kennard por los 85 años de la publicación de sus artículos", en *Internet Electron, Journ. Nanoc. Mol.*, 10, 2, 1859-1876.

Biswas, A. and D. Milovic (2010). *Mathematical theory of dispersion-managed optical solitons*, Berlin: Springer-Verlag.

Borzov V.V. and E.V, Damaskinsky (2005). Generalized coherent states: a novel approach" in *Journal of mathematical sciences*, 128, 2711.

Braun, O. M. and Y. S. Kivshar (2004). *The Frenkel Kontorova Model.* Germany: Springer-Verlag.

Bullough, R., Caudrey, P.J. (1980). *Solitons.* Berlin: Springer-Verlag.

Camassa, R. and Holm, D. D. (1993), "An integrable shallow water equation with peaked solitons" in *Phys. Rev. Lett.*, 71 (11), pp. 1661–1664.

Calogero, F. and A. Degasperis (1982). *Spectral transform and solitons: tools to solve and investigate nonlinear evolution equations.* Amsterdam: Elsevier Science Ltd.

Chiao, R. Y., E. Garmire and C. H. Townes (1964). "Self-trapping of optical beam", in *Phys. Rev. Lett.*, 13, 479-482.

Combescure M. and D. Robert (2012). *Coherent States and Applications in Mathematical Physics.* Germany: Springer.

Contreras, F., H. Cervantes, M. Agüero and Ma. Najera (2013). "Classic and Non Classic Soliton Like Structures for Traveling Nerve Pulses". in *International Journal of Modern Nonlinear Theory and Application*, 2, 7-13.

Contreras, F., F. Ongay, O. Pavon and M. Agüero (2013). "Nontopological solitons as traveling pulses along the nerve". in *International Journal of Modern Nonlinear Theory and Application*, 2, 195-200.

Dauxois T. and M. Peyrard (2004). *Physics of solitons*. Cambridge Academic Press, UK.

Davydov A. S. and N. l Kislukha (1973). "Solitary excitons in one dimensional molecular chains", in *Phys. Stat. Sol. (b)*, 59, 465.

Davydov A.S. (1973). "The theory of contraction of proteins under their excitation". in *Jour. Theor. Biol.*, 38(3), 559-569.

Davydov, A.C. (1985). *Solitons in Molecular Systems*. Dordrecht-Boston-London: Kluwer Academic.

Dirac, P.A.M. (1927). "The quantum theory of the emission and absortion of radiation", en *Proccedings of the Royal Sciety A*, 114, 243-268.

Dodd, R. K., J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon and H. C. Morris (1982). *Solitons and Nonlinear Wave Equations*. London-Orlando-New York: Academic Press, Inc.

Dubrovin, B. A., I. M. Krichever, T. G. Malanyuk and V. G. Makhankov (1988). "Exact olutions of a nonstationary Schrödinger equation with selfconsistent potential", in *Sov.J. Particles & Nuclei*, 1(9), 252.

Dusuel, S., P. Michaux and M. Remoissenet (1998). "From kinks to compactonlike kinks", in *Phys. Rev. E* , 57(2), 2320.

Englander S.W., N.R. Kallenbach, A.J. Heeger, J. A. Krumhans, and S. Litwin (1980). "Nature of the open state in long polynucleotide double helices: Possibility of soliton excitations" in *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 77, 7222-7226.

Faddeev, L. D. and L. A. Takhtadjan (1987). *Hamiltonian Methods in th Theory of Solitons,* Heidelberg-Berlin-New York: Springer-Verlag.

Fermi E., J. R. Pasta and S. M. Ulam (1955). *Studies of nonlinear problems* V.1, LA-1410 , Collected works of E. Fermi, Vol. 2, University of Chicago Press 1965, 978-988.

Filippov, A.T. (2010). *The versatile soliton.* Berlin: Modern Birkhauser classic.

FitzHugh, P. G. (1961). "Mathematical models of excitation and propagation in nerve", in *Biophys. Jour.*, 1, 445466.

Frenkel, J. and T. Kontorova (1938). "Plastic deformation and twinning", in *Phys. Z. Sowietunion*, 13, 1.

Frenkel, Ya. I., (1971). *Introduction into the Theory of Metals.* Leningrad: Nauka. (en ruso).

Friedberg R. (1987). *Ideal magnetohydrodynamics.* Cambridge Academic Press.

Friedberg R., T.D. Lee and A. Sirlin (1976). "Class of scalar-field soliton in three space dimensions", in *Phys. Rev. D*,13, 2739.

Friedberg, R., T.D. Lee, Y. Pang (1987). "Mini - soliton stars", in *Phys. Rev. D*, 35, 3640.

Gardner, C. S., J. M. Greene, M. D. Kruskal and R. M. Miura (1974). "Korteweg-de Vries equation and generalizations. VI. methods for exact solution", in *Comm. Pure Appl. Math.*, 2(7), 97-107.

Gardner. C.S., J. M. Greene, M. D. Kuskal and R. M. Miura (1967). "Method of solving the Korteweg-de Vries equation", in *Phys Rev. Lett.*, 1(9), 1095-1097.

Gazeau, J. P. (2009). *Coherent states in quantum physics.* Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH and Co.

Gelfand, I. M. and B. M. Levitan (1951). "On the determination of a differential equation from its spectral function", in *Izves. Akadem. Nayk* CCCR *Ser. Mat.*, 1(5), 309-366.

Gilmore, R. (2006). *Lie group, Lie algebras and some of their applications* New York: Dover publications.

Glauber, R. (1963). "The quantum theory of optical coherence", in *Phys. Rev.*, 130, 2529-2539.

Gonzalez-Pereza, A., L. D. Mosgaard, R. Budvytyte, E. Villagran-Vargas, A.D. Jackson, T.Heimburg (2016). "Solitary electromechanical pulses in lobster neurons", in *Biophys. Chem.*, 216, 51-59.

Hasegawa, A. and Y. Kodama (1995). *Solitons in optical communication.* New York: Oxford University Press.

Hasegawa, A. and M. Matsumoto (2003). *Optical Solitons in Fibers.* Berlin: Springer-Verlag.

Hasegawa, A. and F. D. Tappert (1973). "Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. I. Anomalous dispersion", in *Applied Physics Letters*, 23, 142-144.

Hasegawa, A. and F. D. Tappert (1973). "Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers II. Normal dispersion", in *Appl. Phys. Lett.*, 23, 171-173.

Heimburg, T. and A. Jackson (2005). "On soliton propagation in biomembranes and nerves", in PNAS, 102(28), 9790-9795.

Hernández, T. C., V. E. Villagrán, V. N Serkin, G. M. Agüero, T. L. Belyaeva, M. R. Peña and L. L. Morales (2006). "Dynamics of solitons in the model of nonlinear Schrödinger equation with an external harmonic potential: 1. Bright solitons", in *Quantum Electronics*, 35, 778-786.

Herrera, J., M. A. Maza, M. A. Minzoni, N. Smyth and A. Worthy (2004). "Davydov soliton evolution in temperature gradients driven by hyperbolic waves", in *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 191(1-2), 156-177.

Hirota, R. (1973). "Exact envelope-soliton solutions of a nonlinear wave equation", in *J. Math. Phys.*, 14, 805.

Hirota, R. (2004). *The direct method in soliton theory*, Cambridge Academic Press.

Hodgkin, A. L. and A. F. Huxley (1952). "A Quantitative Description of Membrane Current and its Application to Conduction and Excitationin Nerve", in *Jour. Physic.*, 117, 500-544.

Hooft, G. (1974). "Magnetic monopoles in unified gauge theories", in *Nuclear Physics B,* 79, 276-284.

Holstein, T. and H. Primakoff (1940). "Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet", in *Physical Review Journals Archive*, 58, 1098-1113.

Hubbard, J. (1963). "Electron correlations in narrow energy bands", in *Proc. Roy. Soc. A*, 276, 238.

Jang, J. (2010). *Nonlinear waves in integrable and no integrables systems*. USA: SIAM.

Karpman, V. I. and E. M. Mazlov (1977). "Perturbation theory for solitons", in *Sov. Phys.* JETP, 46, 291-296.

Karpman, V. I., & Soloviev, (1981). "A perturbation approach to the two soliton system", in *Physica D 3* (1981) 487-497.

Kartavenko, V. G. (1984). "Soliton-like solutions in nuclear hydrodynamics", in *Yad. Fiz. 40,* 377-388.

Kaup, J. (1987). "Nonlinear Schrödinger solitons in the forced Toda lattice", in *Physica D*, 25, 361-368.

Kelley, P.L. (1964). "Self-focusing of optical beams", in *Phys. Rev. Lett.*, 15, 1005-1007.

Kivshar, Y. S., A. M. Kosevich and O. A. Chubykalo (1987). "Resonant and non-resonant soliton scattering by impurities", in *Phys. Lett. A.* , 26, 35-40.

Klauder J. R. and B. S. Skagerstam (1985). *Coherent states: Applications in Physics and Mathematical Physics.* Singapore: World Scientific.

Klauder, J. R. and E. C. G Sudarshan (1968). *Fundamentals of Quantum Optics* New York: Benjamin.

Klauder, J.R. (1993). "Coherent states without groups: quantization on non-homogeneous manifolds", en *Mod. Phys. Lett. A*, 8, 1735-1738.

Konstant, B. (1970). *Group representation in mathematics and physics.* Barragman V. (Ed.). Springer Verlag.

Kruskal, J. M. and M. Zabusky (1965). "Interactions of soliton in collisionless plasma and the recurrence of initial states", in *Phys. Rev. Lett.* 15, 240-243.

Kundu. A., V. G Makhankov and O. Pashaev (1984). "On nonlinear effects in magnetic chains" en*Physica D*, 11, 375.

Lautrup, B., R. Appali, A. D. Jackson and T. Heimburg (2011). "The stability of solitons in biomembranes and nerves", in *Eur. Phys. J. E* 34, 201, 34-57.

Lax, P.D. (1968). "Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary Waves", in *Comm. Pure Appl. Math.*, 2(1), 467.

Lee, T.D. and Y. Pang (1992). "Nontopological solitons" in *Physics Reports*, 221, (5,6), 251-350.

Linde, A. and D.Linde (1994). "Topological defects as seeds for eternal inflation", in *Phys. Rev. D*, 50(4), 2456-2468.

Lokenath, D. (1997). *Nonlinear partial differential equations for scientists and engineers.* Boston: Birkhauser.

M. Braun, O. and Y. S. Kivshar (1998). "Nonlinear dynamics of the Frenkel-Kontorova model", in *Phys. Rep.*, 30(1-2), 1-108.

Makhankov, V. (1990). *Soliton Phenomenology.* London: Kluwer Academic Publishers.

Makhankov, V. G., M. A. Agüero Granados and A. V. Makhankov (1996). "Generalized coherent states and spin S>1 systems", in *J. phys. A. Math. Gen.*, 29, 3005-3019.

Makhankov, V.G. (1978). "Dynamics of classical solitons (in non-integrable systems)", in *Phys. Rep.* , 35(1), 1-128

Makhankov, V. and O. Pashev (1992). "Continual classical Heisenberg models defined on graded su(2,1) and su(3) algebras", in *Journal of Mathematical Physics, 33(8),* 2923-2936.

Makhankov, V. G., Y. P. Rybakov and V. I. Sanyuk (1994). *Localized Nontopological structures: construction of solutions and stability problems.* Moscow: Nauka.

Makhankov, V.G., Rybakov, Yu.P., Sanyuk, V.I. (1993). *The Skyrme Model: Fundamentals, Methods, Applications.* Heidelberg-Berlin-New York: Springer-Verlag.

Malkin I. A. and V. I. Manko (1979). *Dynamical symmetries and coherent states of quantum systems.* Moscow: Nauka.

Marchenko, V.A. (1955). "On the reconstruction of the potential energy from phases of the scattered waves", in *Doklady Akademy Nauk, SSSR.* 104, 695-698.

Miura, R. M. (1968). "Kortewg y de Vries equation and generalizations. A remarkable explicit nonlinear transformation" in *Journal of Mathematical Physics*, 9, 1202.

Mollenauer, L. F. and J. P. Gordon (2006). *Solitons in Optical Fibers.* Boston: Academic Press.

Mollenauer, L. F., R. H. Stolen and J. P. Gordon (1980). "Experimental observation of picosecond pulse narrowing and solitons in optical fibers", in *Phys. Rev. Lett.*, 45, 1095.

Muñoz Martínez, E. J. y X. García (1990). *Fisiología: células, órganos y sistemas. Tomo 1. Fisiología celular y comunicación intracelular*, México: Ediciones Científicas Literarias/FCE.

Muratov, C.B. (2000). "A quantitative approximation scheme for the traveling wave solutions in the Hodgkin-Huxley model", in *Biophysical Journal*, 79, 2893-2901.

Nagumo, J., S. Arimoto and S. Yoshizawa (1964). "An active pulse transmission line simulating nerve axon", in *Proc.* IEEE*, 50*:20612070.

Newell, A.C. (1985). *Solitons in Mathematics and Physics.* Philadelphia: SIAM.

Novikov, S.P. (1995). *Solitons and Geometry.* U.K.: Cambridge University Press.

Pashaev, O. and S. Sergeenkov (1986). "Nonlinear sigma models with concompact symmetry group in the theory of a nearly ideal gas", in *Physica A. Statistical Mechanics and Applications, A*, 137, 282-294.

Perelomov, A.M. (2010). *Generalized coherent states and their applications* Springer, Verlag.

Peyrard, M. and A. R. Bishop (1989). "Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation" en *Phys. Rev. Lett.* , 62, 2755.

Peyrard, M. and M. D. Kruskal (1984). "Kinks dynamics in the highly discrete sine-Gordon system", in *Physics D*, 14, 88-102.

Pinney E. (1950). The nonlinear differential equation $y'' + p(x)y + cy^{-3}$. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 1, 681.

Rajaraman, R. (1982). *Solitons and Instantons*, Netherlands: North-Holland Publishing Company.

Rogers, C. and W. F. Shadwick (1982), *Backlund transformations and their applications*, Academic Press, New York.

Rosenau, P. and J. M. Hyman (1993). "Compactons solitons with finite wavew length", in *Phys. Rev. Lett.*, 70(5), 564-567.

Rubinstein, A. J. (1970). "Sine-Gordon Equation", in *Math. Phys.*, 1(1), 258.

Russell, J. S. (1844). *R*eport on waves. U.K.: British Association Reports.

Rybakov, Y. P.,Makhankov, V.G, Sanyuk, B. (1989). *Model Skyrma y Solitoni v fizike adronov* (en ruso). Publicación del Instituto Unificado de Investigaciones Nucleares, Dubna P4-89-568.

Rybakov, Y.P. (1985) *Particles Structure in Nonlinear Field Theory,* Moscow: People's Friendship Univ. Press (in Russian).

Shnir, Y. M. (2018). *Topological and non-topological solitons in scalar field theories.* UK: Cambrigde Monographs.

Schrödinger, E.S. (1926). "Der Stetige Ubergang von der micro zurmakro mechanic", in *Naturwissenschaften Bd.*, 14, 664-666.

Scott, A.C. (1983). "Solitons in the Alpha-Helix Protein, Structure and Dynamics of Nucleic Acids and Proteins" in *Structure and dynamics: Nucleic acids and proteins, E. Clementi and R. Sarna (eds.)* 389-404. New York: Adenine Press.

Scott, A. (2003). *Nonlinear Science. Emergence and Dynamics of Coherent Structures.* Oxford university press.

Shin, H. S. and K. S. Soh (1995). "Black hole formation by sine gordon solitons in two dimensional dilaton gravity", in *Phys. Rev.D*, 52, 981-984.

Sudarshan, E. C. G. (1963). "Equivalence of semiclassical and quantum mechanical description of statistical light beams", in *Phys. rev. Lett. 1.* 277-279,

Sulem, C. and P. L. Sulem (1999). *The nonlinear Schrödinger equation.* Applied Mathematical Sciences 139, Springer-Verlag 1999.

Shrivastava, S. and M. Schneider (2014). "Evidence for two-dimensional solitary sound waves in a lipid controlled interface and its implications for biological signaling" in *Jour. of Royal Society Innterface*, 11, 20140098.

Takhtajian, L.A. and L. D. Fadeev (1986). *Hamiltonian approach in theory of solitons* (in russian). Moscow: Nauka.

Takeno, S. and S. Homma (1984). "A Coupled Base-Rotator Model for Structure and Dynamics of DNA: Local Fluctuations in Helical Twist Angles and Topological Solitons", in *Progress of theoretical physics*, 72(4), 679-693.

Takeno, S., Homma, S. (1983). "Topological Solitons and Modulated Structure of Bases in DNA Double Helices: A Dynamic Plane Base-Rotator Model", in *Progress of theoretical physics*, 70(1), 308-311.

Talanov, V. I. (1964), "Self-focusing of electromagnetic waves in nonlinear media", in *Izv. Vysshikh. Uchebn. Zavedenii, Radiofiz.*, 7, 564.

Taylor, J. R. (1992). *Optical solitons-theory and experiment*, United Kingdom: Cambridge University Press.

Tenorio, C. H., E .V. Vargas, V. N. Serkin, M. A. Granados, T. L. Belyaeva,

R. P. Moreno y L. M. Lara (2005). "Dynamics of solitons in the model of nonlinear Schrödinger equation with an external harmonic potential: II. Dark solitons", in *Quantum Electronics 35*, 929-937.

Ulam, S. M. (1991). *A*dventures of mathematician, USA: University of California Press.

Villagrán, E., L. Morales, R. Peña y V. N. Serkin (2006). "Dinámica nolineal del ADN y su relación con los solitones. Parte 1", en *Electron. J. Nanoc. Moletron*, 4, 753.

Villagrán, E., A. Ludu, R. Hustert, P. Gumrich, A. D. Jackson and T. Heimburg (2011). "Periodic solutions and refrac-tory periods in the soliton theory for nerves he locust femoral nerve", in *Bioph. Chem.* 153, 159-167.

Villagrán, E., J. R. Collantes and M.A. Agüero (2018). "Boussinesq solitons as propagators of neural signals", in 6th Engineering, Science and Technology Conference (2017), KnE Engineering, (pp. 120-128).

Watson, J. D. and F. H. Crick (1953). "Molecular Structure of Nucleic Acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid", in *Nature*, 171, 737-738.

Wazwaz, A.M. (2009). *Partial Differential Equations and Solitary Waves Theory*, Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.

Wattis, J. A. D. (1998). "Stationary breather modes of generalised nonlinear Klein-Gordon lattices" in *J. Phys. A: Math. Gen.*, 31, 3301–3323.

Whitham, G.B. (1999). *Linear and Nonlinear Waves.* USA: John Wiley & sons.

Yadjima N. and M. Oikawa (1976). "Formation and interaction of sonic Langmuir solitons", in *Prog. Theor. Phys.*, 56, 1719-1739.

Yakusevich (1958), *Nonlinear models of DNA.* USA: John Wiley & sons.

Yang, J. (2010). *Nonlinear Waves in Integrable and Nonintegrable.* USA: Systems,

Society for Industrial and Applied Mathematics.

Yomosa, S. (1983). "Soliton excitations in deoxyribonucleic acid (DNA) double hélices", in *Phys Rev. A* 27, 2120.

Zakharov, V. E. and L. D. Fadeev (1971). *Functional Analysis and Its Applications, 5*, 280-287.

Zakharov, V.E., S. V. Manakov, S. P. Novikov and L. P. Pitaevsk (1984) *Theory of Solitons.* New York: Plenum.

Zakharov, V.E. and A. B. Shabat (1972). "Exact theory of two-dimensional selffocusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media", in JETP,34, 62.

Zaslavsky, G. M. and R. Z. Sagdeev (1988). *Introduction to Nonlinear Physics.* Moscow: Nauka.

Zhang, F. (1988). "Kink internal modes in discrete nonlinear chains", in *Phys. Rev. E 54, 4*, 4325.

Zhang, F. and R. Gilmore (1990). "Coherent states: Theory and some applications", in *Rev. Mod. Phys*, 62(24), 867-927.

Introducción a la Teoría de Solitones, se terminó de editar el 16 de octubre de 2020, en los talleres de Ediciones Verbolibre, S.A. de C.V., Sur 23 núm. 242, Col. Leyes de Reforma 1a sección, Deleg. Izta-palapa, Ciudad de México, 09310. Tel.: 5640-9185. edicionesverbolibre@gmail.com.



Vladimir N. Serkin

Profesor Investigador Titular "C" en el Instituto de Ciencias de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla y miembro del Sistema Nacional de Investigadores nivel 3. Sus contribuciones más notables y significativas han sido en óptica no lineal y solitones ópticos con tiempos de duración del orden de femtosegundos. Ha propuesto radicalmente nuevos métodos de generación de pulsos ultracortos y solitones ópticos. Ha publicado más de 200 artículos en revistas internacionales con arbitraje. Los objetivos principales de sus estudios científicos son el descubrimiento de nuevas vías para el estímulo de nuevos experimentos e investigaciones. El alto nivel internacional de sus trabajos ha sido confirmado por más de 3000 citas a sus investigaciones en bases de datos como Research Gate, Google Scholar, Scopus, ISI Web of Knowledge, y por los expertos en este campo.



Máximo A. Agüero Granados

Doctor en Ciencias (PH.D) con mención en Física-matemáticas por la Universidad Rusa Amistad de los Pueblos. Hizo su post-doctorado en el área de solitones en altas energías y medios condensados en el Instituto Unificado de Investigaciones Nucleares, Dubna-Rusia. Es Profesor Investigador en la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma del Estado de México y miembro del Sistema Nacional de Investigadores nivel 1. Su línea de investigación abarca la dinámica de ondas no lineales en procesos físicos descritos por modelos no-integrables en el ADN, pulsos nerviosos, óptica no lineal y teorías de campo. Lo anterior especialmente dentro del marco de soluciones no-clásicas de ecuaciones diferenciales no lineales, lo cual conllevó a la obtención de contribuciones científicas de alto nivel con prestigio internacional.

El libro expone los fundamentos físico-matemáticos de estructuras solitónicas y excitaciones colectivas en varios sistemas y fenómenos no lineales. Su dinámica, surgimiento e interacción se consideran las propiedades de estos objetos no lineales. El énfasis principal se concentra en los métodos exactos y aproximados de solución de las ecuaciones diferenciales no lineales y la obtención de sus soluciones tipo ondas localizadas no lineales. Se analizan ejemplos concretos a medida que se avanza en su grado de complejidad: movimiento oscilatorio, ondas no lineales, sistemas integrables de las ecuaciones no lineales y sistemas simples discretos de muchos cuerpos, aproximaciones continuas tendientes a presentar ecuaciones de Korteweg-de Vries, familia de ecuaciones de tipo Klein-Gordon y Schrödinger no lineales. El texto ofrece al lector la posibilidad de adquirir una noción moderna del estado de esta rama de la ciencia. Está dirigido a físicos teóricos y experimentales, a diversos especialistas involucrados en la investigación científica de fenómenos no lineales, así como a estudiantes de las universidades interesados en el tema de física no lineal y solitones en ciencias modernas.

EDICIONES EÓN

ISBN: 978-607-8732-25-8

9 786078 732258