UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
Campus de São José do Rio Preto

# Modelo dinâmico e estatístico aplicado a transição de fase

**Hernán Oscar Cortez Gutiérrez**

Tese apresentada ao programa de pós-graduação em Biofísica Molecular do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista, como parte das exigências para a obtenção do título de Doutor em Biofísica Molecular.

**Orientador: Prof. Dr. Elso Drigo Filho**
**Co-orientador: Prof. Dr. José Roberto Ruggiero**

São José do Rio Preto
São Paulo - Brasil
2009

Cortez Gutiérrez, Hernán Oscar.

Modelo dinâmico e estatístico aplicado a transição de fase / Hernán Oscar Cortez Gutiérrez. - São José do Rio Preto :[s.n.], 2009. 114 f. ; il. ; 30 cm.

Orientador: Elso Drigo Filho Co-orientador: José Roberto Ruggiero

Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas

1. Biofísica. 2. Limite anticontínuo - Banach. 3. Estabilidade de Breathers. 4. Interação de Breathers - Impurezas. 5. Transição de fases (Física estatística) 6. Barreira entrópica. I. Drigo Filho, Elso. II. Ruggiero, José Roberto. III. Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas. IV. Título.

CDU - 577.3

# Modelo dinâmico e estatístico aplicado a transição de fase

Tese apresentada ao programa de pós-graduação em Biofísica Molecular do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista, como parte das exigências para a obtenção do título de Doutor em Biofísica Molecular.

BANCA EXAMINADORA

**Dr. Elso Drigo Filho**-Depto. de Física-UNESP-IBILCE Orientador

Prof. Dr. Gerald Weber-Depto. de Física-Univ. Federal Ouro Preto

Prof. Dra. Regina Maria Ricotta-Depto. de Ensino Geral-FATEC

Prof. Dr. Jayme Vicente de Luca Filho-Depto. de Física-UFSCAR

Prof. Dr. Masayoshi Tsuchida -Depto. de Cienc. Comp. e Estat.- UNESP

São José do Rio Preto, 18 de fevereiro de 2009.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a meu orientador Prof. Dr. Elso Drigo Filho e ao co-orientador Dr. Jose Roberto Ruggiero pelo enorme apoio, incentivo e dedicação ao meu trabalho desde o início do programa. Assim como nas discussões cientificas. Aos meus queridos pais, Milciades e Carolina, que estiveram sempre ao meu lado me apoiando nesta fase. E um especial obrigado para minha esposa, Deolinda Fuentes Rivera e as minhas filhas Girady Iara e Liv Jois. Também pelo apoio familiar a todos meus irmãos Milton, M. Wilfredo e Lionel . Aos meus colegas, Gabriel S., Natalia F., Gisele B. , Ricardo Silva e aos professores Augusto Agostinho, Walter Azevedo, Jorge Chahine, João Ruggiero, Marcio Colombo, Marinonio , Marcelo Andrés Fossey e a todo o pessoal do Departamento de Física-UNESP.

Agradeço pelo apoio externo também aos professores Jesus Cuevas, W. Cortez, D.G. Figueiredo, G.S.S. Avila ,D. Costa, Regina Riccota, J. de Luca Filho, G. Weber, T. Masayoshi, Albert Lou, Jerry Bona, P.S. Milojevic, Javier Navarro, Arcelia Rojas Salazar e também aos colegas da Universidad Nacional del Callao -Callao-Perú . Agradecimentos à Sra. Rosemar Rosa de Carvalho e em geral a toda a administração da UNESP, CNPq pelo apoio nos eventos com suporte financiero.

"Pauca sed, pauca matura "  Karl Gauss

# Resumo

O objetivo deste trabalho é investigar a localização de energia e o aprisionamento do breather no modelo de Peyrard Bishop com o potencial original de Morse, potencial simétrico de Morse e potenciais quárticos em cadeias homogêneas e não homogêneas usando o Teorema do limite anticontinuum. No caso não homogêneo, a impureza é introduzida pela profundidade do potencial. Foi observado que o modelo SPB apresenta pequenas amplitudes e menor densidade de energia comparada com o modelo PB. Para potenciais quárticos simétricos e assimétricos foi verificado numericamente que não temos transição de fase usando o conceito de amplitude média das vibrações.

Entretanto, um potencial híbrido formado por um quártico e Morse pode fornecer uma grande amplitude de vibração das fitas de DNA .

Finalmente, no sistema não homogêneo, se verificou a hipótese de aprisionamento por meio de uma simulação de interação do breather móvel com a região de TATA box para uma cadeia longa de DNA, correspondente à seqüencia de nucleotídeos que codifica a insulina. Este resultado deve ajudar a estender a aplicação dos breathers discretos a sistemas biológicos que levam em conta reações bioquímicas localizadas (como, por exemplo, reações enzimáticas) em macromoléculas biológicas. O modelo PB pode ser modificado para explicar a existência de movimentos localizados de grande amplitude. O decaimento da função poten-

cial para valores grandes mostraram uma vibração localizada no equilíbrio de grande amplitude. Isso é feito alterando o potencial on site.

# Abstract

The objective of this work is to investigate the energy localization and the breather trapping in the Peyrard-Bishop model with the original Morse potential, symmetric Morse potential and quartics potentials in homogeneous and inhomogeneous chains. In the inhomogeneous case, the impurity is introduced by the depth of the potential. It was observed that the SPB model shows small amplitude and lower density of energy compared with the PB model. Quartics potentials, for symmetric and asymmetric cases, do not show phase transition. It is verified by numerical calculation using the concept of mean amplitude of the vibrations. Meanwhile, a potential hybrid formed by a quartic and Morse is ideal for DNA applications. Finally, it was verified the trapping hypotheses through the simulation of interaction of mobile breather with the region of TATA box for a long chain of DNA corresponding to the nucleotide sequence that encodes the insulin. This result should help to extend the application of discrete breathers the biological systems that take into account located biochemical reactions (such as enzymatic reactions) in biological macromolecules. In addition, the PB model can be modified to explain the existence of highly localized large amplitudes motions of the base pairs in DNA. We do this change the on site potential.

# Sumário

**Introdução** **1**

**1 Redes Não Harmônicas** **4**

1.1 O Modelo Peyrard-Bishop com cadeias Homogêneas . . . . . 5

1.1.1 Potenciais de Morse e Morse simétrico . . . . . 8

1.1.2 Potenciais quárticos e potencial híbrido . . . . . 10

1.2 Transições de fase unidimensionais . . . . . 11

**2 Estudo dinâmico do Modelo Peyrard-Bishop** **14**

2.1 Teoria de Mackay-Aubry . . . . . 15

2.1.1 Oscilador isolado . . . . . 17

2.1.2 N osciladores . . . . . 18

2.1.3 Método de Newton generalizado no espaço de Fourier . . 18

2.1.4 Breather estacionário . . . . . 20

2.2 Teoria de Bandas de Aubry para estudo da estabilidade . . . . . 21

2.2.1 Equação de Hill . . . . . 21

2.2.2 Representação de Floquet da solução . . . . . 22
2.2.3 Tipos de Bandas de Aubry . . . . . 24
2.3 Breather móvel . . . . . 25
2.4 Breather Novos . . . . . 28
2.4.1 Solução no equilíbrio para o caso da rede com Potencial Morse corcunda . . . . . 28
2.4.2 Teorema de existência de breather novos . . . . . 28
2.5 Excitações localizadas (Breather com número de osciladores efetivos) 29
2.5.1 Condição inicial no oscilador central . . . . . 30
2.5.2 Condição inicial em três osciladores . . . . . 30
2.6 Considerações finais . . . . . 31

**3 Estudo estatístico do Modelo Peyrard-Bishop 33**

3.1 Termodinâmica: A função de partição . . . . . 33
3.2 Método Espectral . . . . . 35
3.2.1 Equação de tipo *Schrödinger* ou *PseudoSchrödinger* . . 36
3.2.2 Estimativa da amplitude media em função da Temperatura 39
3.3 Probabilidade de um par de base estar aberto . . . . . 40
3.4 Método dinâmico-estatístico para determinar a amplitude média . 40
3.5 Método numérico para calcular autovalores e autofunções do operador de transferência . . . . . 41
3.6 Energia livre de pequenas oscilações . . . . . 41

3.7 Considerações finais . . . . . 42

**4 O Modelo de Peyrard-Bishop com cadeias não homogêneas 44**

4.1 Potenciais não homogêneos . . . . . 45

4.2 Equação do movimento para o caso de Potenciais não homogêneos 46

4.2.1 Hipótese de aprisionamento no caso do Potencial de Morse 46

4.3 Acoplamentos não homogeneos . . . . . 48

4.4 Interação não harmônica . . . . . 49

4.5 Delocalização da função de onda do estado fundamental . . . . . 49

4.6 Considerações finais . . . . . 50

**5 Resultados para o Modelo PB com Potenciais Simétricos 52**

5.1 Modelo PB com Potencial simétrico de Morse . . . . . 52

5.1.1 Método de Marin aplicado ao Modelo PB com Potencial simétrico de Morse . . . . . 53

5.1.2 Método de Bandas de Aubry aplicado ao Modelo PB com Potencial simétrico de Morse . . . . . 55

5.1.3 Amplitude media da vibração . . . . . 58

5.1.4 Cadeias não homogêneas . . . . . 58

5.2 Modelo PB com Potencial de poço duplo . . . . . 59

5.3 Considerações finais . . . . . 59

**6 Resultados para o modelo PB com potenciais não simétricos 61**

6.1 Introdução . . . . . 61

6.2 Modelo PB com o potencial de Morse . . . . . 62

6.3 Física Estatística da desnaturação térmica do DNA . . . . . 66

6.3.1 Modelo PB com Potencial híbrido . . . . . 71

**7 Dinâmica não linear e estatística do Modelo PB com Potencial Híbrido e interação não Harmônica 76**

7.1 Modelo PB com Potencial Híbrido de partes Morse, quártico e exponencial . . . . . 77

7.2 Solução localizada no equilibrio e segunda estensão do Teorema de MacKay Aubry . . . . . 79

7.3 Amplitude media para as vibrações no modelo HPB e PB com a mesma temperatura melting: T=335 K . . . . . 81

**8 Conclusões 84**

**A Método de Marin-Newton para o cálculo do breather estacionário da equação de movimento 92**

**B Método de Runge-Kutta para o cálculo do Breather móvel e o centro de energia 93**

**C Integração-Simpson para autofunções do Operador de Transferência e Método de Diferenças Finitas 96**

C.0.1 Integração-Simpson para autofunções do Operador de Transferência . . . . . 96

C.0.2 Método de Diferenças Finitas para obter a Função de Onda no estado Fundamental e amplitude media . . . . . 97

**D Bioinformatica para obter localizações típicas da Seqüencia de nucleotídeos correspondente à Insulina 99**

D.0.3 Resultado do software SCAN . . . . . 100

**E Soluções localizadas no equilibrio para Potenciais Híbridos e Potencial de Morse 101**

E.0.4 Programa em Matlab para determinar a solução no equilibrio 102

# Introdução

Transições de fase ou mudança de fase (estado), como a água fervendo ou evaporando a certa temperatura e pressão são fenômenos da vida diária e estão presentes em quase todas as áreas da física. Uma transição de fase ocorre quando temos uma mudança abrupta em uma ou mais propriedades físicas macroscópicas do sistema correspondente a uma mudança dos seus parâmetros, em particular a capacidade térmica ou capacidade calorífica.

O modelo de Peyrard-Bishop [1] foi utilizado para estudo da desnaturação do DNA e recentemente tem sido relacionado a mudanças topológicas para modelos Unidimensionais por Angelani e colaboradores [2]. Usaremos este modelo que, dependendo da não linearidade indicado pelo Potencial sobre o par da rede, admitem soluções localizadas denominadas ¨ breathers ¨ que podem ser móveis com uma velocidade constante [2]-[3]. Para a análise da dinâmica não linear adotaremos a metodologia usada por Cuevas [2]. Para estudo de classificação desta dinâmica é útil fazer uma análise de bandas para o estudo da estabilidade do breathers em Redes de Klein-Gordon, em particular, usados no modelo de Peyrard Bishop (PB) para a macromolécula de DNA. O método está baseado na aplicação da teoria de Floquet à equação de Hill linearizada correspondente às perturbações das soluções periódicas(estacionarias) do modelo (PB). Resolvendo

estas equações numericamente, usando métodos de Runge Kutta, encontramos bifurcações dependentes do tipo de Potencial utilizado e do acoplamento na rede.

Este trabalho apresenta o estudo da existência e estabilidade da solução de redes de Klein Gordon para Potenciais Simétricos e para Potenciais assimétricos do tipo Morse e quárticos. Os resultados obtidos devem contribuir para o entendimento do problema de localização de energia para obter um bom modelo de transição de fase da molécula de DNA. Neste trabalho analisaremos no capítulo dois as equações dinâmicas do movimento do breather estacionário e a construção do breather móvel, também analisamos o modelo e Peyrard-Bishop com cadeias não homogêneas, isto é levamos em conta o tipo de base existente na seqüencia de nucleotídeos e representadas pelas profundidades dos Poços dos Potenciais. Estas equações também devem contribuir para desenvolvimento de novos métodos que possibilitem a extensão da Teoria da interação entre breathers móveis e impurezas para o estudo de modelos de "hélices alfa" em proteínas [2]. No capítulo três temos o enfoque estatístico que permite que a função partição seja relacionada com uma equação tipo *Schrödinger* . Esta equação é resolvida usando o método de diferenças finitas (Apêndice C). O uso de conceitos de bioinformatica através do software SCAN [22] para visualizar a região promotora e não promotora também é discutido. Por outro lado, o software GENSCAN [23] ajuda a visualizar regiões da seqüencia de nucleotideos que codificam proteinas. No Capitulo quatro é apresentado o Modelo PB com cadeias não homogêneas e a hipótese de aprisionamento. O Capítulo cinco apresenta resultados numéricos so-

bre aspectos dinâmicos e estatísticos para potenciais simétricos. O Capítulo seis apresenta resultados da dinâmica e estatística para os potenciais assimétricos do tipo Morse e quárticos. Além disso são apresentados os regimes de aprisionamento dos breathers móveis que podem ocorrer pela influência da não homogeneidade das bases. Simulações são realizadas usando cadeias grandes de 251 pares de bases correspondentes ao trecho do DNA que codifica a Insulina (Apêndice D) . Toda a teoria desenvolvida pode ser usada também no estudo de breathers discretos em proteínas, considerando que nas reações químicas as energias são armazenadas nos sítios específicos dos aminoácidos das proteínas. O Capítulo sete explora a Dinâmica não linear e estatística do Modelo PB com Potencial Híbrido e interação não Harmonica. As perspectivas que temos é melhorar o modelo de transição de fase usando Potenciais Híbridos (Apêndice E). Além disso dentro desta mesma perspectiva indicada no capítulo 3 sobre a influência da barreira entrópica na transição de fase e com os métodos de integração numérica introduzidos para determinar as autofunções e autovalores apresentados no capítulo 3 resolvem o problema de transição de fase para o caso do Modelo de Peyrard-Bishop com interação anharmônica de movimentos vibracionais e rotacionais .

# Capítulo 1

# Redes Não Harmônicas

Existem dois tipos de redes devido ao potencial: Harmônicas e não Harmônicas, para simular sistemas fisicos. No primeiro caso toda perturbação pode ser escrita em termos de uma soma de modos normais de vibração. Os modos de vibração são também chamados fónons. No segundo caso existem modos de vibração localizados junto com os fónons . Os modos localizados são também chamados de modos intrínsecos ou breathers. Se a forma da perturbação inicial e os valores dos parâmetros são apropriados, a energia permanece localizada na rede.

Os breathers tem um papel importante na explicação da existência de vibrações de grandes amplitudes localizadas no equilibrio no caso do DNA [26].

Também os modos localizados que se movem ao longo da rede ou breathers moveis são responsáveis pelas linhas escuras nos cristais de muscovite [20]

A estrutura da molécula de DNA é bem conhecida sendo determinada pela primeira vez a forma de hélice dupla por Watson e Crick [24]. Um esquema dessa

estrutura está indicada na Figura 1.1.

Em geral, podemos descrever as equações dinâmicas de um sistema de biomoléculas da rede usando a aproximação "Hamiltoniana" dada por:

$$H = \sum_{\vec{n}} [\left\{ \frac{1}{2}(dy_{\vec{n}}/dt)^2 + V_n(y_{\vec{n}}) \right\} + K \sum_{\vec{i}} W(y_{\vec{n}}, y_{\vec{n}+\vec{i}})] \tag{1.1}$$

onde W é o potencial de acoplamento entre os pares de partículas de posições dadas pelos vetores $y_{\vec{n}}$, $V_n$ é chamado o potencial *on site* e representa possíveis potenciais externos, e K é o parâmetro que mede o grau do acoplamento entre os pares. O caso especial $V_n = V$ é chamado de modelo com cadeias homogêneas. Também esta aproximação Hamiltoniana é usada no caso unidimensional para identificar o tipo de transição de fase usando o Operador de Transferência . O operador de transferencia pode ser aproximada por uma "gradiente" denominada Equação de *Schrödinger*. A perspectiva é aplicar também esta aproximação unidimensional para outros tipos de transição de fase em biomoléculas, por exemplo enovelamento de proteínas ("protein folding")[41] e também a modelos com mais graus de liberdade.

## 1.1 O Modelo Peyrard-Bishop com cadeias Homogêneas

O Hamiltoniano para o modelo Peyrard-Bishop (BP) é dado por:

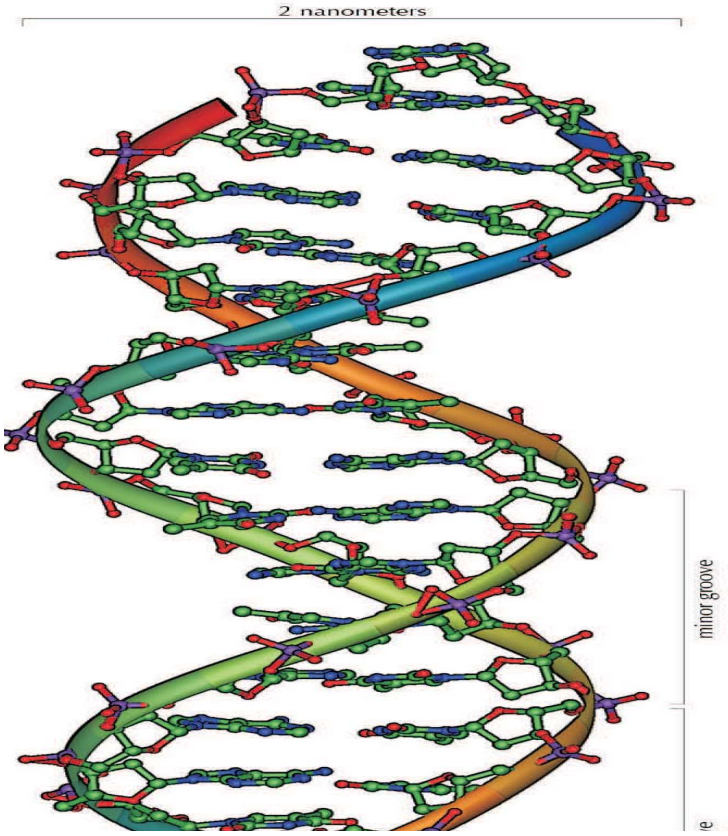



Figura 1.1: Modelo de Watson-Crick [24]

$$H = H_p + H_V, \tag{1.2}$$

onde

$$H_p = \sum_j \left\{ \frac{p_{u_j}^2}{2m} + \frac{p_{v_j}^2}{2m} \right\} \tag{1.3}$$

representa a energia cinetica do sistema, e

$$H_V = \sum_j \left\{ \frac{K}{2}[(u_j - u_{j-1})^2 + (v_j - v_{j-1})^2] \right\} + \sum_j V(u_j - v_j) \tag{1.4}$$

é a energia potencial. Na equação (1.3), $p_{u_j}$ and $p_{v_j}$ são os momentos lineares. Considerando o sistema homogêneo a massa $m$ e a constante de acoplamento K são iguais para todos os nucleotídeos. A Figura 1.2 mostra um esquema do modelo descrito pelas equações acima.

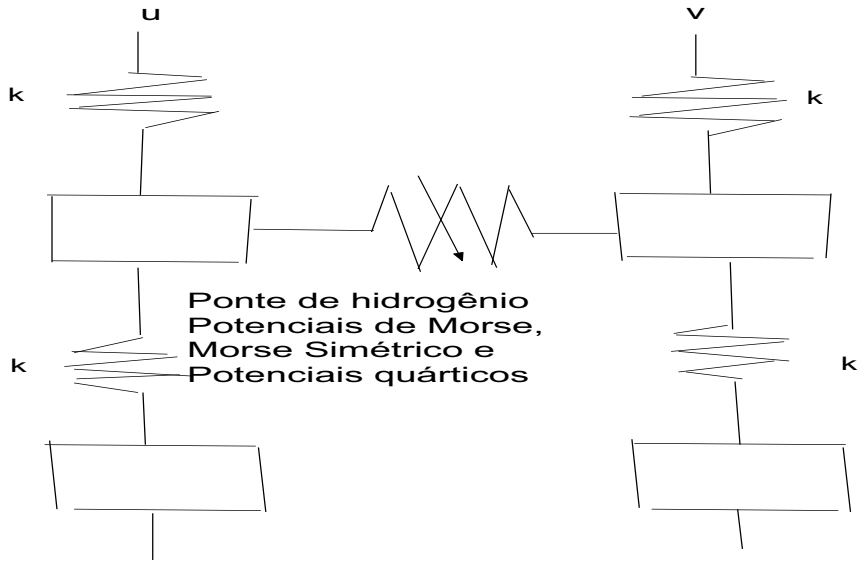



Figura 1.2: Modelo de Peyrard-Bishop.

A partir da fita de DNA o sistema biológico monta um tipo específico de RNA, o RNA mensageiro, no processo chamado transcrição. O modelo de Peyrard-Bishop permite o estudo do problema de transição de fase observando : i) a localização da energia na rede , ii) as amplitudes dos movimentos vibracionais correspondente ao deslocamento da posição de equilibrio das pontes de hidrogênio, e iii) localização do inicio da transcrição. Geralmente o trecho de DNA é uma dupla fita com uma grande quantidade de pares de bases. Por exemplo, no

caso da insulina podemos ter uma seqüencia de 4044 pares de bases que contém uma região promotora como mostrada no apêndice D. Para efeito de localizações de regiões promotoras e regiões especificas de um gene pode-se a realizar um estudo usando as ferramentas da bioinformática e relacionar com os resultados da dinâmica do DNA com o modelo de Peyrard-Bishop.

### 1.1.1 Potenciais de Morse e Morse simétrico

Inicialmente para o modelo de Peyrard-Bishop foi usado o Potencial de Morse dado por:

$$V(u_i) = D[e^{-a(u_i)} - 1]^2, \tag{1.5}$$

Podemos supor que a molécula de DNA é um aglomerado de dois polímeros lineares, os quais consistem de unidades monoméricas chamadas nucleotídeos. Cada nucleotídeo é composto de três componentes: uma molécula de açúcar (pentose), uma base heterocíclica (5-carbonos) nitrogenada e um grupo fosfato ($PO_4^-$). Existem quatro tipos de bases heterocíclicas no DNA: adenina (A) e guanina (G) que são da família das purinas, e a timina (T) e a citosina (C), que são da família das pirimidinas. O par de base A/T contém duas pontes de hidrogênio e o par G/C contém três pontes de hidrogênio. Esta informação pode ser usada para modificar a profundidade do potencial de Morse alterando o parâmetro D deste potencial como mostra a Figura 1.3.

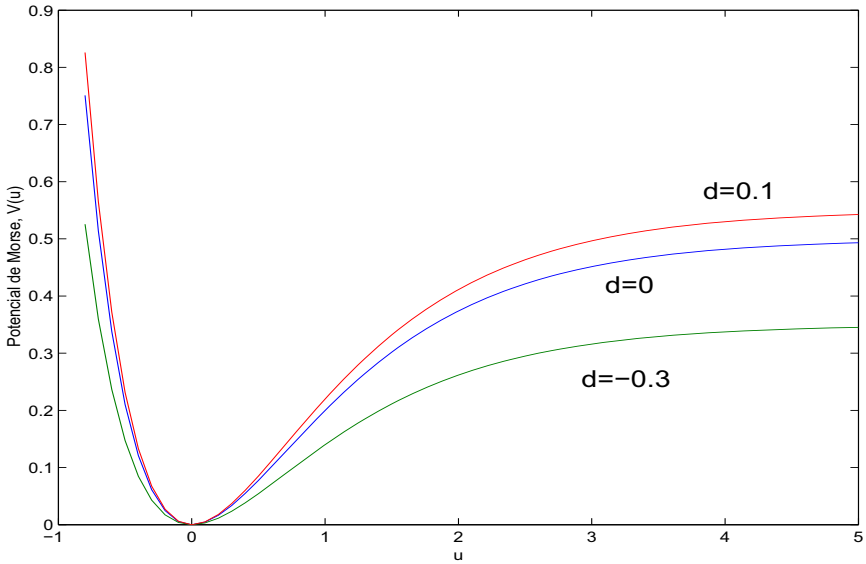



Figura 1.3: Potenciais de Morse dependentes da profundidade D=(1/2)(1+d).

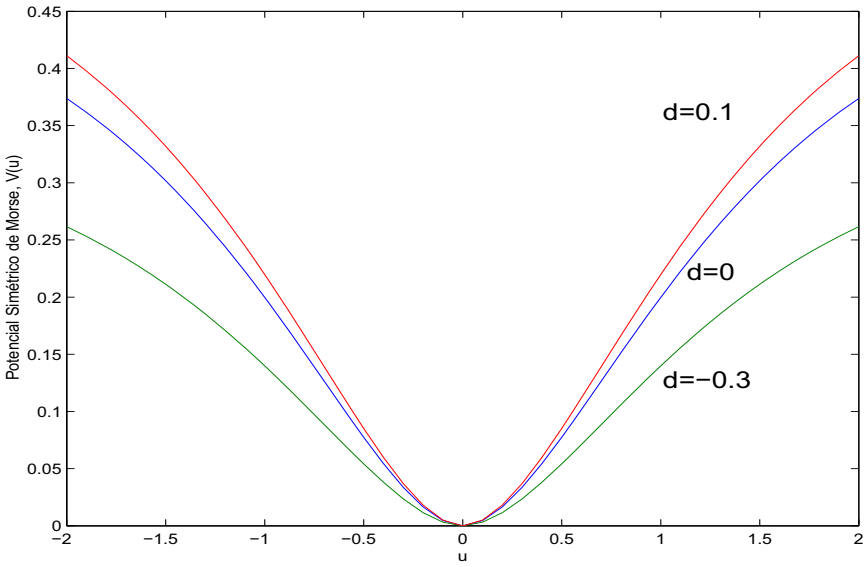



Figura 1.4: Potenciais de Morse simétricos dependentes da profundidade.

Podemos considerar no modelo o Potencial simétrico de Morse dado por:

$$V(u_i) = D[e^{-a(/u_i/)} - 1]^2, \tag{1.6}$$

A figura 1.4 mostra o comportamento da função potencial de Morse simétrica

para diferentes profundidades.

### 1.1.2 Potenciais quárticos e potencial híbrido

Outro tipo de potencial que pode ser usado nas redes estudadas é o potencial quártico. Estes potenciais podem ser simétricos como: $V(u)=(1/4)(u^2-1)^2$ e assimétrico como: $V(u)=-0.5u^2+0.04u^3+0.25u^4$.

A figura 1.5 mostra o gráficos do Potencial híbrido formado por componentes do tipo Morse, quártico e exponencial que tem relevância no estudo da desnaturação do DNA.

$$V(y) = A(exp(-sy)-1)^2(y<0) \qquad V(y) = ay^2+by^3+cy^4(0<y<1)$$

e no lado direito com um decaimento exponencial dado pelo fator s:

$$V(y) = D + Eexp(-sy)(y+1/4)(y>1)$$

dependente dos parâmetros D, E , s.

No modelo de aproximação "Hamiltoniano"podemos generalizar a interação considerando o têrmo energético de empilhamento W dado por:

$$W(y_i, y_{i-1}) = K(1+\rho e^{-\delta(y_i+y_{i-1})})(y_i-y_{i-1})^2 \tag{1.7}$$

onde os parâmetros são asignado de acordo a fatos experimentais, por exemplo K=0.01, $\rho = 3$ e $\delta = 0.8$[27].

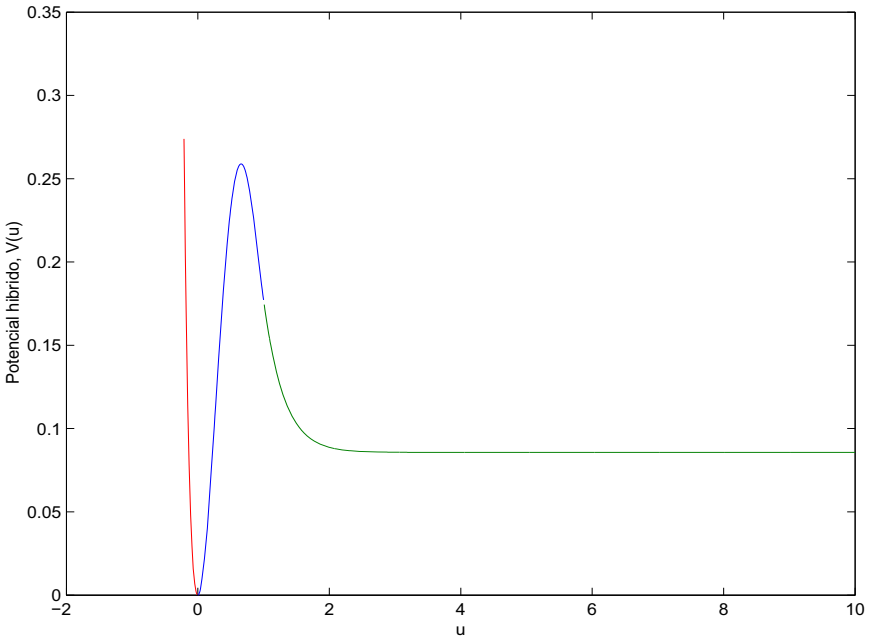



Figura 1.5: Representação do Potencial híbrido formado por três partes ( potencial de Morse, quártico e exponencial) .

## 1.2 Transições de fase unidimensionais

No modelo Hamiltoniano (Peyrard-Bishop) é possível analizar uma transição de fase unidimensional . A aproximação Hamiltoniana considera apenas oscilações na direção das pontes de hidrogênio. Neste caso ocorre ruptura das pontes de hidrogênio entre os pares de bases quando o espaçamento entre esses pares é muito grande. Esta desnaturação altera as propriedades físicas do sistema, por exemplo faz com que diminua a viscosidade da solução de DNA. No processo de desnaturação nenhuma ligação covalente é desfeita, entretanto as duas fitas de DNA são separadas quando superam a distancia aproximada de 2 Å [26].

Cadeias que tem a presença da seqüencia A...AC...A apresentam comporta-

mento diferente da seqüencia C...CAC...C . Uma justificativa para essa observação é a energia envolvida no empilhamento dos pares de base serem diferentes .

Um determinada dupla fita de DNA apresenta uma região promotora e outra não promotora que contém a informação necessária para a transcrição. Em geral a região promotora contém uma sub-região denominada de TATA box. A figura 1.6 mostra um esquema das localizações de regiões típicas de um gene.

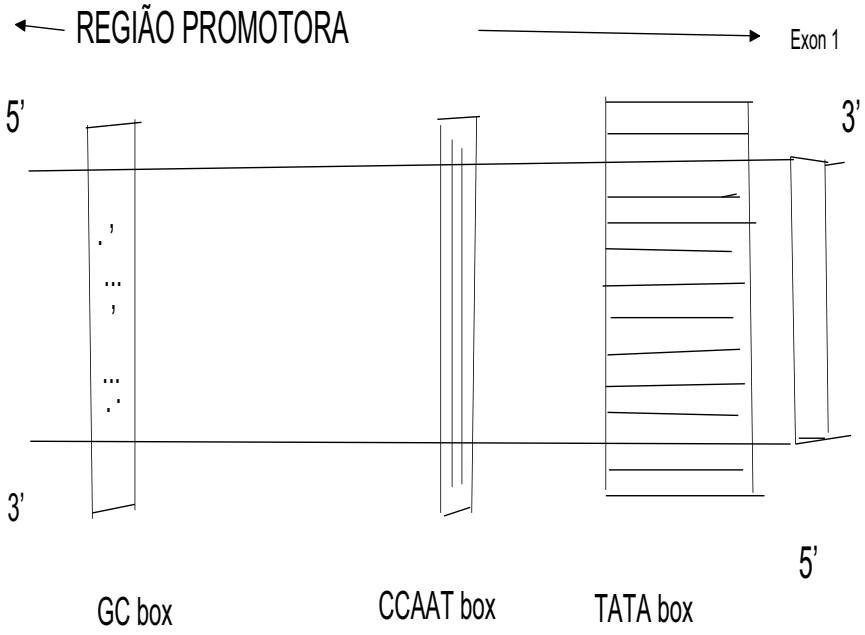



Figura 1.6: Regiões típicas apresentadas por uma seqüencia de nucleotídeos de um gen eucariotico .

A transição de fase representa no DNA o processo de transcrição em regiões localizadas da seqüência de nucleotídeos. Por isso as ferramentas de bioinformática ajudam a obter localizações valiosas de inicio e finalização do processo de transcrição. O software Promotor Scan [22] permite ver a posição do sitio de iniciação. Informação sobre a região não promotora de uma dada seqüencia

de nucleotídeos pode ser obtida usando o software Genscan [23]. O transporte eletrônico em seqüências de DNA dependem muito da sua forma ou conformação pela fato de existir correntes de tunelamento.Assim como o fato de termos transmissão nula na presencia da Timina. Medições de transporte a nível mesoscópico de seqüências de DNA conectados entre eletrodos metálicos tem sido discutidos por existir contradições na natureza condutora. Há resultados que indicam comportamento de isolante e em outros casos tem sido reportados natureza de superconductor[28]. Esta característica potencializa o seu emprego em diversas aplicações nanobiotecnologicas. Para o transporte do DNA usar Polímeros Cationicos [29,30,31,32,33].

Como fato complementar as equações dinâmicas correspondente ao modelo Hamiltoniano do DNA apresentam soluções "dominio de parede"com energia livre crescente [41] que ajuda a explicar a transição de fase no caso unidimensional e não tem conflito com o argumento de Landau que indica que : "En sistemas macroscópicos unidimensionais não existe coexistencia de fases a Temperatura finita "[41].

# Capítulo 2

# Estudo dinâmico do Modelo Peyrard-Bishop

Inicialmente simplificamos o Modelo de Peyrard-Bishop introduzindo na equação (1.3) um novo conjunto de coordenadas :

$$y_j = \frac{u_j - v_j}{\sqrt{2}}, \qquad x_j = \frac{u_j + v_j}{\sqrt{2}} \tag{2.1}$$

Obtemos uma nova forma para o hamiltoniano

$$H = \sum_j \left\{ \frac{p_{x_j}^2}{2m} + \frac{p_{y_j}^2}{2m} \right\} + \sum_j \left\{ \frac{K}{2} \left[ (x_j - x_{j-1})^2 + (y_j - y_{j-1})^2 \right] \right\} + \sum_j V(\sqrt{2} y_j) \tag{2.2}$$

Como é usual na análise do DNA [2,3] estamos interessados no estudo do Hamiltoniano óptico dado por :

$$H = \sum_j \left\{ \frac{p_{y_j}^2}{2m} \right\} + \sum_j \left\{ \frac{K}{2} \left[ (y_j - y_{j-1})^2 \right] \right\} + \sum_j V(\sqrt{2}(y_j). \tag{2.3}$$

Fazendo uso das equações de Hamilton ${y_n}'' = -\frac{\partial H}{\partial y_n}$ e considerando m=1 na equação (2.3) obtemos o sistema não linear de Klein-Gordon (KG)( n=1,2,...,N)

$${y_n}'' + K(2y_n - y_{n-1} - y_{n+1}) + V'(\sqrt{2}(y_n) = 0 \tag{2.4}$$

onde V' é a derivada da função potencial.

## 2.1 Teoria de Mackay-Aubry

Modos intrínsecos, denominados breathers discretos, são soluções periódicas e localizadas com uma dada freqüência . MacKay e Aubry provaram analiticamente sua existência [6]. Nessa prova é usado o conceito do limite anticontínuo ou limite desacoplado , isto significa analisar primeiro o sistema para $K = 0$ e depois analisar os casos para $K \neq 0$ .

A solução é obtida no intervalo [0,T] onde T é dependente do parâmetro $w_b$ pela relação : $T = 2\pi/w_b$.

Métodos numéricos de Marin e Aubry [7] têm sido usados para obter breathers usando uma série de Fourier truncada da forma:

$$y_n = {z_n}^0 + \sum_{k=1}^{k_m} 2{z_n}^k \cos(k w_b t)$$

(2.5)

Substituindo esta expressão $y_n(t)$ em (2.4) e usando a expressão:

$$V'(y_{n(t)}) = V_n'^0 + \sum_{k=1}^{k_m} 2V_n'^k \cos(kw_b t) \tag{2.6}$$

obtemos um conjunto de equações algébricas nas variaveis "z"da forma ( n=1,...,N ; $k = 0, 1..., k_m$ ):

$$k^2 {w_b}^2 {z_n}^k + K(2{z_n}^k - {z_{n-1}}^k - {z_{n+1}}^k) + {V_n}'^k = 0 \tag{2.7}$$

dependentes do parâmetro de controle K e onde ${V_n}'^k$ é o k-ésimo coeficiente de Fourier da função periódica $V'(y_n(t))$ dada por :

$$V_n'^k = \frac{1}{2k_m + 1}[V'(y_n(0)) + \sum_{i=1}^{k_m} 2V'(y_n(t_i)) \cos(kw_b t_i)], \tag{2.8}$$

onde:

$$t_i = \frac{2\pi i}{w_b(2k_m + 1)}, \tag{2.9}$$

$para\ i = 0, ..., k_m$.

O método do limite anticontínuo indica duas etapas para determinar a solução. A primeira etapa deste método é resolver numericamente para o caso em que o sistema de equações diferenciais (2.4) se encontra desacoplado $K = 0$. Para a resolução numérica do sistema (2.7) é utilizado o método de Newton.

### 2.1.1 Oscilador isolado

Usando a série de Fourier com $k_m$ denotando o número de coeficientes a ser usado podemos obter uma solução numérica de (2.7) inicialmente para o caso não acoplado e considerando somente o sítio central vibrando sob efeito do Potencial.

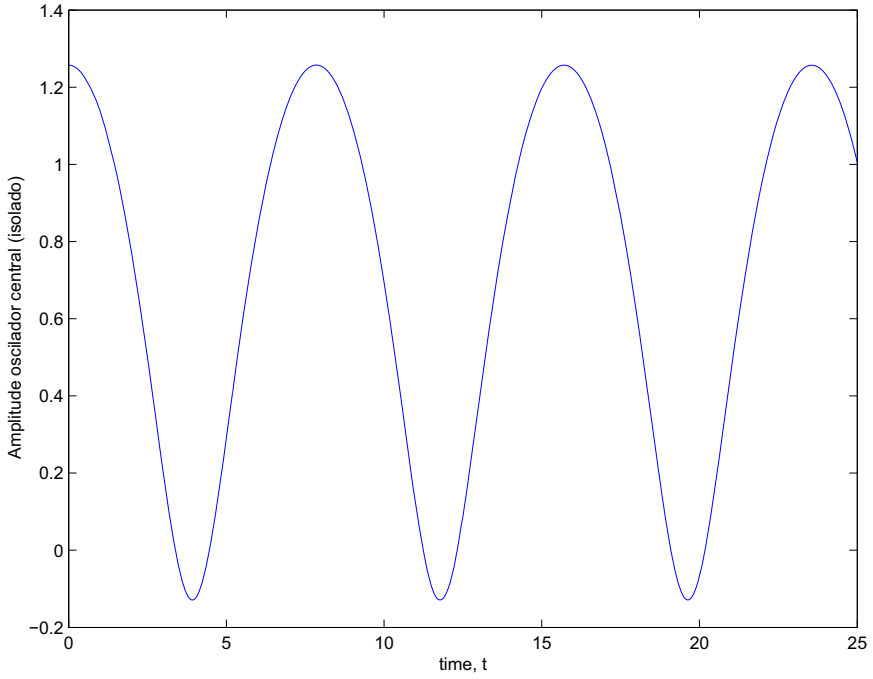



Figura 2.1: Amplitudes $y_{central}$ com o potencial de Morse e parâmetros $w_b = 0.8$ e K=0 .

Para $k_m = 17$, tem-se dezoito coeficientes de Fourier para $y_{central}(t)$ dada em (2.5) e solução de :

$$k^2 {w_b}^2 z^k + V'^k = 0 \tag{2.10}$$

onde $z^k$ representa os coeficientes de Fourier dessa vibração central. A Figura 2.1 mostra o comportamento periódico do oscilador isolado.

### 2.1.2 N osciladores

A figura 2.2 mostra 4 destas amplitudes $y_n(t)$ correspondente à (2.4) com Potencial de Morse com N=21 osciladores. Os cálculos numéricos usam o Método de Newton do pacote computacional de Matlab .

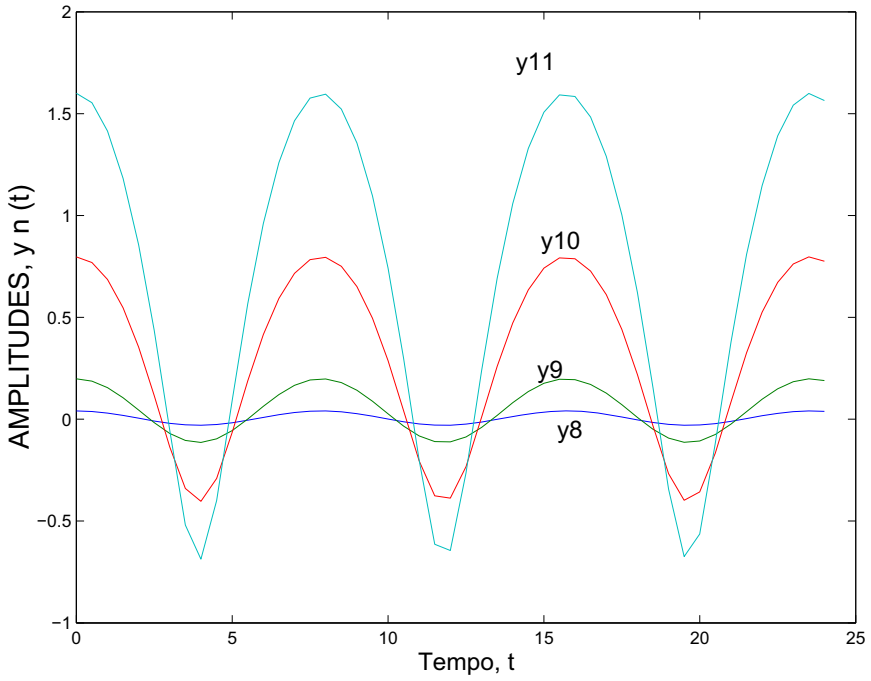



Figura 2.2: Amplitudes $y_n$ com o potencial de Morse e parâmetros $w_b = 0.8$ e K=0.13 .

### 2.1.3 Método de Newton generalizado no espaço de Fourier

Basicamente a equação (2.7) indica que temos $N.(k_m + 1)$ equações não lineares com o vetor incognita Z dado pelo total de coeficientes de Fourier das N oscilações da forma:

$$Z = \left[ \begin{array}{cccccccccccc} {z_1}^0 & . & . & . & {z_1}^{k_m} & . & . & . & {z_n}^0 & . & . & . \end{array} \right. \left. \begin{array}{cccc} {z_n}^{k_m} & . & . & . \end{array} \right. \left. \begin{array}{cccc} {z_N}^0 & . & . & . \end{array} \right. \left. \begin{array}{cc} {z_N}^{k_m} & \end{array} \right]^T$$

Seja ${F_n}^k$ ( n=1,...,N ; $k = 0, 1..., k_m$ ) uma função de $N.(k_m + 1)$ variáveis dada por:

$$ {F_n}^k = k^2 {w_b}^2 {z_n}^k + K(2{z_n}^k - {z_{n-1}}^k - {z_{n+1}}^k) + {V_n}'^k = 0 \tag{2.11} $$

Podemos escrever uma aproximação linear:

$$ {F_n}^k(Z) = {F_n}^k(X) + \frac{\partial {F_n}^k(X)}{\partial {z_1}^0}({z_1}^0 - {x_1}^0) + ... + \frac{\partial {F_n}^k(X)}{\partial {z_1}^{k_m}}({z_1}^{k_m} - {x_1}^{k_m}) + $$

$$ \frac{\partial {F_n}^k(X)}{\partial {z_2}^0}({z_2}^0 - {x_2}^0) + ... + \frac{\partial {F_n}^k(X)}{\partial {z_2}^{k_m}}({z_2}^{k_m} - {x_2}^{k_m}) + ... + $$

$$ \frac{\partial {F_n}^k(X)}{\partial {z_N}^0}({z_N}^0 - {x_N}^0) + ... + \frac{\partial {F_n}^k(X)}{\partial {z_N}^{k_m}}({z_N}^{k_m} - {x_N}^{k_m}) \tag{2.12} $$

para um ponto X da vizinhança de Z da forma:

$$ X = \left[ \begin{array}{cccccccccccccccc} {x_1}^0 & . & . & . & {x_1}^{k_m} & . & . & . & {x_n}^0 & . & . & . & {x_n}^{k_m} & . & . & . & {x_N}^0 & . & . & . & {x_N}^{k_m} \end{array} \right]^T $$

Consideremos agora F da forma :

$$ F = \left[ \begin{array}{cccccccccccccccc} {F_1}^0 & . & . & . & {F_1}^{k_m} & . & . & . & {F_n}^0 & . & . & . & {F_n}^{k_m} & . & . & . & {F_N}^0 & . & . & . & {F_N}^{k_m} \end{array} \right]^T $$

O sistema de equações dada por (2.11) pode ser escrita como:

$$ 0 = F(Z) = F(X) + [JF](X).(Z - X) \tag{2.13} $$

onde [JF](X) é o Jacobiano da função F determinado no vetor X . Também podemos dar a fórmula aproximada da solução X do sistema (2.11):

$$ Z = X - ([JF](X))^{-1}.F(X) \tag{2.14} $$

A fórmula (2.14)é o Método de Newton utilizado em forma iterativa no pacote Matlab para determinar os coeficientes de Fourier e implementado no Apêndice A.

### 2.1.4 Breather estacionário

A coleção de amplitudes $y_n(t)$ denominado breather estacionário é melhor observado no gráfico tridimensional mostrado na figura 2.3.

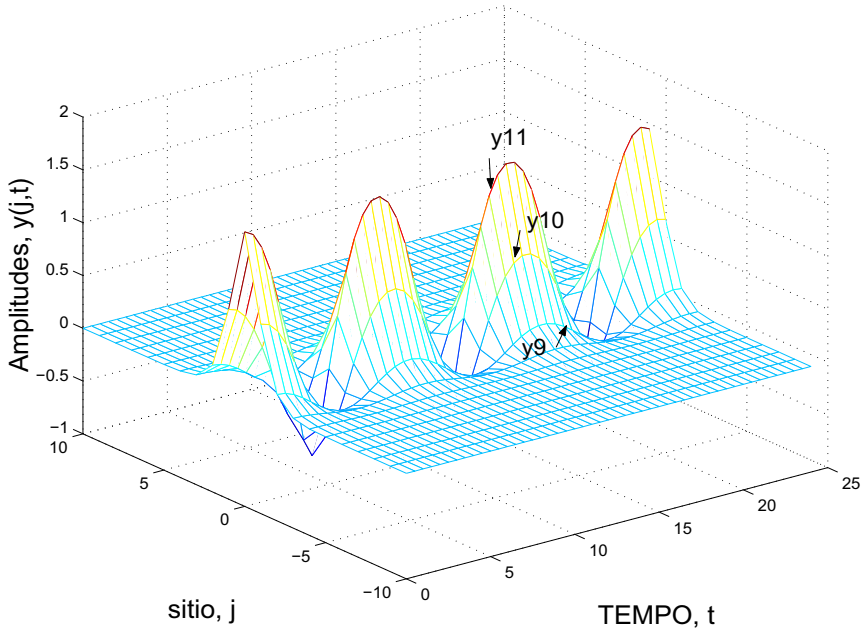



Figura 2.3: Amplitudes $y_n$ com o potencial de Morse e parâmetros $w_b = 0.8$ e K=0.13 .

## 2.2 Teoria de Bandas de Aubry para estudo da estabilidade

### 2.2.1 Equação de Hill

Para o estudo da estabilidade da solução $y(t) = [y_n(t)]$ de (2.4) consideramos uma perturbação $\epsilon_n(t)$. A solução $U_n(t)$ perturbada tem a forma:

$$U_n(t) = y_n(t) + \epsilon_n(t) \tag{2.15}$$

Impondo a condição de que $U_n(t)$ satisfaz o sistema (2.4) e fazendo a expansão em torno da solução $y_n(t)$ até a primeira ordem , obtemos o seguinte sistema de equações para $\epsilon_n(t)$ ( Equação de Hill) correspondente ao Potencial V(u):

$$\epsilon_j{}'' + K(2\epsilon_j - \epsilon_{j-1} - \epsilon_{j+1}) + V''(y_j(t))\epsilon_j = 0 \tag{2.16}$$

A teoria de Floquet [16] para equações diferenciais com coeficientes periódicos pode ser aplicada à equação (2.16). As soluções estacionarias $y_n(t)$ são funções periódicas de período T e o sistema (2.16) pode ser transformado em Equações de Hill com coeficientes periódicos porque $V''(y_j(t))$ também é uma função continua periódica. A estabilidade destas soluções pode ser obtida da evolução dos

autovalores da matriz de Floquet F0. Os autovalores são chamados de multiplicadores de Floquet . A matriz de Floquet F0 é dada pela matriz fundamental $\Phi(t)$ associado ao sistema (2.16). O sistema de equações diferenciais (2.16) pode ser transformadas em um sistema de primeira ordem fazendo:

$$\xi' = \pi, \qquad \pi' = -V''(y(t))\xi - K[J]\xi \tag{2.17}$$

onde $\xi$ e $\pi$ são vetores representados por uma matriz coluna. [V"($y_n$(t))] e [J] são matrizes NxN com elementos dados por $[V''(y_n(t))]_{i,j}$ = V"($y_n(t)$)$\delta_{i,j}$ and $[J]_{i,j}$ = 2$\delta_{i,j}$-$\delta_{i,j-1}$-$\delta_{i,j+1}$ e $\delta_{i,j}$ é o símbolo de Kronecker. Consideramos as condições de fronteira: $y_0$=$y_N$ e $y_1$=$y_{N+1}$.

Podemos colocar $\Omega$=($\xi$,$\pi$) e sendo [A] uma matriz 2N x 2N composta por quatro blocos de matrizes de dimensões N x N satisfazendo as condições do sistema de primeira ordem indicado anteriormente devemos ter que $\Omega(t)$ satisfaz a equação:

$$\Omega' = A(t)\Omega, \tag{2.18}$$

### 2.2.2 Representação de Floquet da solução

A solução obtida é periodica portanto a teoria de Floquet para equações diferenciais lineares com coeficientes periódicos e dependentes do tempo pode ser aplicada à equação diferencial (2.18).

A matriz fundamental [$\Phi$ ] pode ser construído a partir das 2N soluções lin-

earmente independentes de (2.18) correspondente às diferentes condições iniciais, definidas como vetor coluna com 2N-1 zeros e 1 na i-ésima posição (i =1, ... , 2N) tais que, para qualquer instante t, [Φ ] satisfaz :

$$\Phi' = A(t)\Phi, \tag{2.19}$$

Pela forma definida a matriz [A] é periódica, isto é, [A(t + T)] = [A(t)], então $\Phi(t+T)$ é também solução de (2.19) e conseqüentemente cada coluna de $\Phi(t+T)$ é uma combinação linear de todas as colunas de $\Phi(t)$ . Podemos escrever esta relação como:

$$\Phi(t+T) = \Phi(t)M, \tag{2.20}$$

onde M é a matriz constante . Obviamente, pela forma em que foi construída $\Phi(0)$ é a matriz identidade e $\Phi(T)$= M é a matriz conhecida como a matriz de monodromia ou matriz de Floquet F0. Os autovalores da matriz de monodromia são os multiplicadores de Floquet. Pelo Teorema de Floquet podemos representar $\Phi(t)$ como:$\Phi(t)$=$P(t)$ $e^{Rt}$,onde P(t) é periódica de periodo T e R uma matriz constante. A solução é limitada (estável) se todos os multiplicadores de Floquet (autovalores) tem valor absoluto igual a 1 [2]. Para multiplicadores com módulo diferente de 1 a solução (breather ) $y(t) = y_n(t)$ de (2.8) não será estável. Isto significa que a solução perturbada aumenta exponencialmente com o período T. Isto é uma conseqüência do fato que:

$$\Phi(t + pT) = \Phi(t)M^p, \tag{2.21}$$

A equação (2.16) fornece pertubações que representam bifurcações. Esta bifurcação representa uma mudança repentina no breather e que pode ser de três maneiras: (a) um par de autovalores conjugados atinge o valor 1+0i ( ($\theta$=0) e deixa o circulo unitário ao longo do eixo real (bifurcação harmônica); (b) um par de autovalores conjugados atinge o valor -1 ($\theta = \pm\ \pi$) e deixa o circulo unitário ao longo do eixo real (bifurcação subharmônica); (c) dois pares de autovalores conjugados colidem em dois pontos conjugados e deixam o circulo unitário (bifurcação oscilatória). Quando introduzimos o parâmetro de acoplamento temos a existência da bifurcação [2]-[14].

### 2.2.3 Tipos de Bandas de Aubry

A análise da estabilidade do breather $y(t) = y_n(t)$ pode ser complementado pela Teoria de bandas de Aubry [8]. Esta teoria consiste em estudar a equação linearizada (2.17) acrescentando um termo proporcional a $\xi$ , isto é, reescrevemos estas equações como:

$$\xi' = \pi, \pi' = -V''(y(t))\xi - KJ\xi + E\xi \tag{2.22}$$

Como no caso E=0, para cada parâmetro E existem 2xN multiplicadores de Floquet. Cada multiplicador de Floquet pode ser escrito como $\lambda$=exp(i$\theta$ ) , $\theta$ representa o argumento de Floquet. É obvio que se $\theta$ é real então /$\lambda$/=1 e a

solução localizada será estável. A teoria de bandas consiste em estudar o conjunto de pontos ($\theta$ , E) .

Da mesma forma obtida através da análise de Floquet, podemos ter três tipos de bifurcações : - Bifurcação Harmonica : Quando a estabilidade se perde no circulo unitário de autovalores por $\theta$=0. Isto ocorre em nosso caso quando o acoplamento se incrementa os autovalores se aproximam e colidem para $\theta$=0. - Bifurcação Sub-Harmonica : Quando a estabilidade se perde no circulo unitário de autovalores por $\theta$=$\pi$. Isto ocorre em nosso caso quando o acoplamento se incrementa os autovalores se aproximam e colidem para $\theta$=$\pi$. - Bifurcação Oscilatória : Quando a estabilidade se perde no circulo unitário de autovalores por $\theta \neq 0$ e $\theta \neq \pi$ . Para observar esta situação devemos incrementar o acoplamento para que os autovalores se aproximem e colidam para $\theta \neq 0$ e $\theta \neq \pi$ .

## 2.3 Breather móvel

A solução localizada, $y(t) = y_n(t)$, dada por (2.5) permanece estacionário na rede. Esta solução localizada pode mover-se ao longo da rede constituindo um mecanismo para transferência de energia, e é denominada breather móvel [2]. Como foi visto em 2.3.3, podemos ter bifurcações harmônicas e sub-harmônicas, sendo favorável a existência de bifurcações harmônicas para poder gerar breathers moveis [2]. (ver apêndice B).

De acordo com a referência [2] para obter a localização do breather móvel usaremos o conceito de centro de energia, que é definido por:

$$X_E = \frac{\sum_n nH_n}{H} \tag{2.23}$$

$H_n$ é a densidade de energia no site n dado por:

$$H_n = \left\{ \frac{p_{y_n}^2}{2m} \right\} + \left\{ \frac{k}{4} \left[ (y_n - y_{n-1})^2 + (y_{n+1} - y_n)^2 \right] \right\} + V(\sqrt{2}(y_n). \tag{2.24}$$

Para mover um breather é necessário acrescentar uma energia cinética inicial. Para isso começamos definindo a velocidade gradiente inicial:

$$v_n(0) = (y_{n+1}(0) - y_{n-1}(0))/2 \tag{2.25}$$

Uma vez que o centro inicia o movimento, o breather ganha uma velocidade de translação V que será , em principio constante [2] . Assim a energia cinética de translação do breather móvel será proporcional ao quadrado da velocidade de translação. Usamos uma perturbação da velocidade normalizada para pesquisar o movimento do centro móvel ou do breather na rede. Podemos definir a perturbação em termos do parâmetro $\lambda$. As componentes deste vetor perturbação V são dados por:

$$V_n(0) = \lambda(v_n(0)/v) \tag{2.26}$$

onde $v$ é a norma do vetor de componentes $v_n(0)$.

A Figura 2.4 mostra a Evolução do centro de energía considerando dois tipos de potencias : o Morse original e o Morse "corcunda". Foi considerado uma rede

de 251 osciladores com a parte não homogenea na posição 35. No caso refere-se a uma não homogeneidade do tipo A-T.

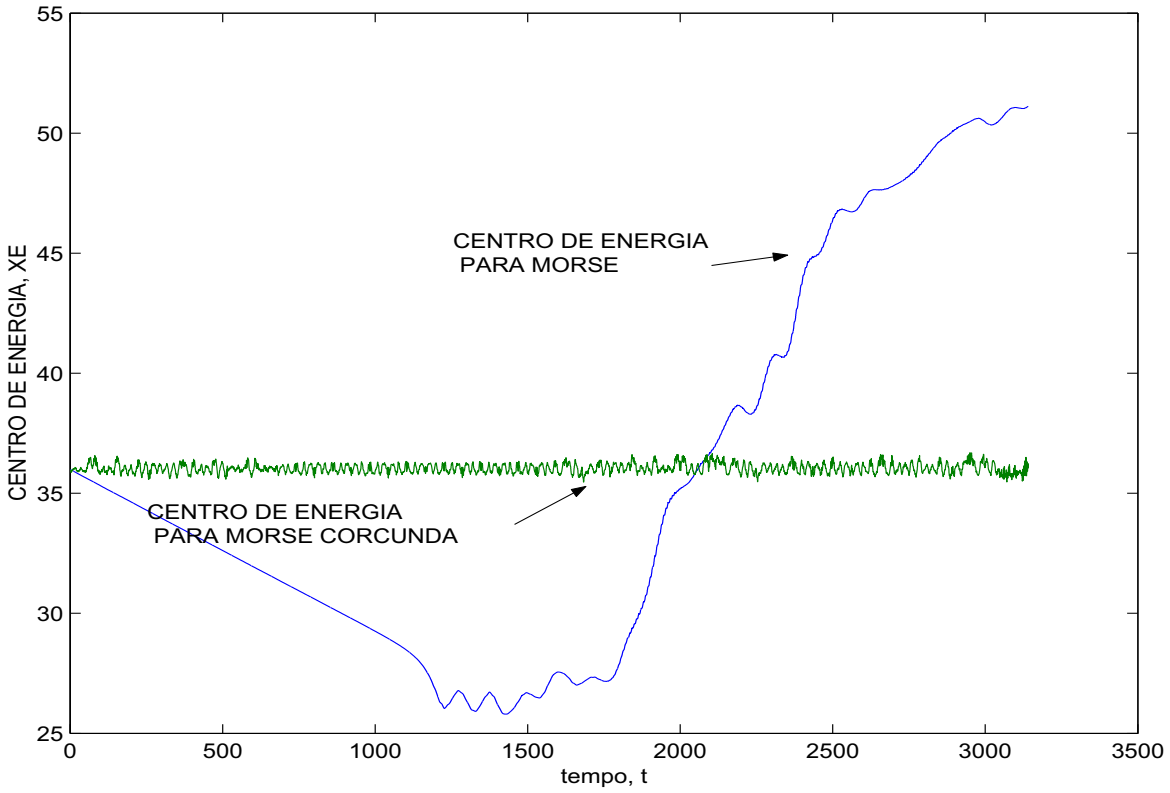



Figura 2.4: Evolução dos Centros de Energia considerando dois tipos de Potencias com a presença de um par de base do tipo A o T na posição 26. No caso do Potencial de Morse o Centro de energia é sensivel a este par de base. Os parâmetros do modelo são K=0.13 eV $^{o}$A $^{-2}$, $\rho = 0$ , $\delta = 0.8$ $^{o}$A $^{-1}$

.

## 2.4 Breather Novos

O Teorema de MacKay-Aubry forneçe a existencia de soluções no limite anticontinuum. Este teorema usa o Teorema da Função Implicita. Outro método da Análise Funcional é demostrar a existencia de "novos"breathers usando o Teorema da Contração e soluções no equilibrio.

### 2.4.1 Solução no equilíbrio para o caso da rede com Potencial Morse corcunda

Por exemplo, para o caso do Potencial Morse corcunda a solução localizado no equlibrio corresponde à solução de :

$$K(2y_n - y_{n-1} - y_{n+1}) + V'(y_n) = 0 \tag{2.27}$$

A solução é obtida fazendo $y_n = 0$ para todos os osciladores a exceção do oscilador central.

Fazendo desta maneira obtemos o valor de $y_0 = 1.67$ é obtido considerando os parâmetros do Potencial corcunda. A figura 2.5 mostra o breather de equilibrio . Tambem pode ser usado como entrada para determinar densidade de energia .

### 2.4.2 Teorema de existência de breather novos

Teorema 1 Existe uma constante $K_0$ ( dependente dos parâmetros do Potencial) tais que para $0 < K < K_0$, a equação 2.27 admite uma solução espacialmente

localizada $y_n$ satisfazendo:

$$Sup/y_n - \tilde{y}_n/ = O(/Kln(K)/), n \in Z \tag{2.28}$$

onde $\tilde{y}_n$ é uma solução aproximada.

Em particular para o Potencial de Morse corcunda dependente dos parâmetros D, E , s ,$\beta$ :

$$V(u) = A(exp(-su) - 1)^2,\ u < 0, \tag{2.29}$$

$$V(u) = au^2 + bu^3 + cu^4,\ 0 < u < 1, \tag{2.30}$$

$$V(u) = D + Eexp(-\beta u)(u + 1/\beta),\ u > 1, \tag{2.31}$$

temos as relações:

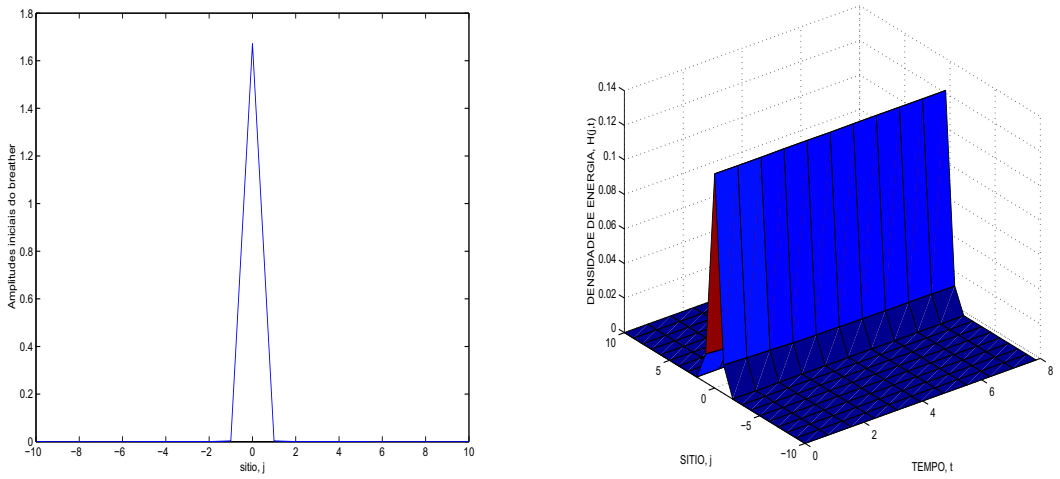
$$\tilde{y}_0 = -(1/\beta)ln(2K/\beta)E \tag{2.32}$$

$$\Omega = \sqrt{[-2(K/m)ln(2K/\beta E)]} \tag{2.33}$$

onde $\Omega$ representa a frequência do modo da excitação localizada.

## 2.5 Excitações localizadas (Breather com número de osciladores efetivos)

Como na referencia [37] podemos determinar a informação entrópica e outras quantidades macroscópicas usando dois tipos de condições iniciais.




(a) (b)

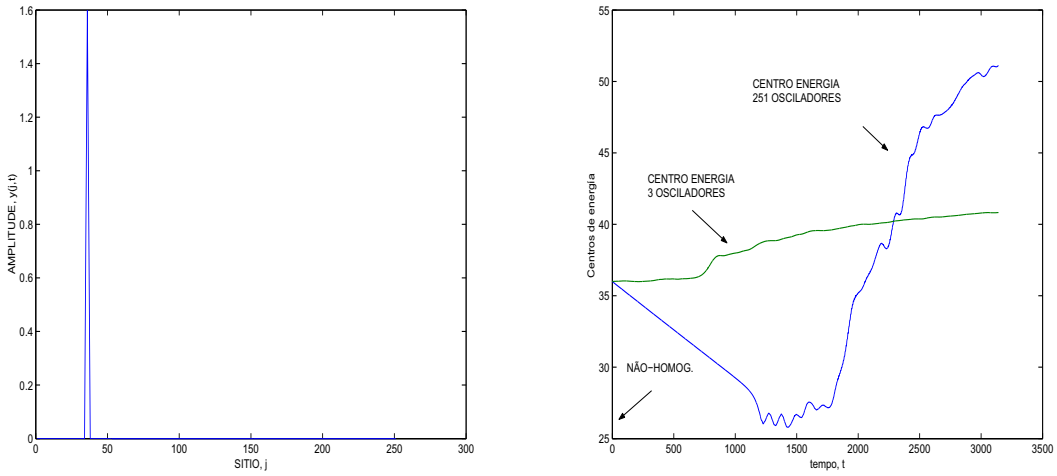
Figura 2.5: Amplitude inicial do breather obtido com o Potencial de Morse "corcunda"para K=0.01 and $w_b$=0.8 (a) e a densidade de energia correspondente ao breather inicial com velocidade dada pelo fator $\lambda$=0.5 (b).

### 2.5.1 Condição inicial no oscilador central

Caso mostrado na Figura 2.5 .

### 2.5.2 Condição inicial em três osciladores

Na Figura 2.6 temos duas situações em relação às condições iniciais. A parte (a) mostra uma configuração inicial para m=251 mas com ampitudes não nulas em tres osciladores. Na parte (b) o resultado da evolução do centro de energia do caso (a) comparado com o caso de condições não nulas em todos os osciladores. Para a construção da entrada inicial do caso (a) foi usado uma configuração inicial que apresenta aprisionamento na cadeia não homogênea e foi considerado um suconjunto de tres osciladores da parte central.




(a) (b)

Figura 2.6: Amplitude inicial do breather de entrada com três osciladores ( sub-breather obtido com o Potencial de Morse para K=0.13 and $w_b$=0.8 )(a) e os centros de energia correspondente a três e 251 osciladores do Modelo PB con não homogeneidade na posição 26 (b).

## 2.6 Considerações finais

Há uma dependência da amplitude do breather estacionário em relação à amplitude do oscilador isolado.Por exemplo,no caso do modelo dinâmico PB com Potencial de Morse temos inicialmente uma amplitude de magnitude 1.2 para o oscilador isolado que na evolução do sistema atinge uma amplitude de magnitude 1.5 . No caso da desnaturação a tendência das amplitudes é o crescimento. Foi visto de que no caso do Potencial de Morse corcunda existe na rede uma solução localizada no equlibrio de magnitude 1.67. Em consequência podemos esperar também desnaturação no caso do DNA. Finalmente observamos que a localização

de energía em redes não homogeneas com potencial de Morse considerando tres osciladores não é favoravel. Podemos ainda afirmar que o problema da interação com não homogeneidades é melhor observado considerando todo o sistema se encontra inicialmente oscilando .

# Capítulo 3

# Estudo estatístico do Modelo Peyrard-Bishop

## 3.1 Termodinâmica: A função de partição

No capitulo anterior foi visto que a descrição do movimento no modelo PB depende de duas classes de variáveis: o deslocamento do centro de massa de cada par de bases e a separação das bases do mesmo par, denotado por $y_n$.

$$H = \sum_n [\Big\{ \frac{m}{2}(dy_n/dt)^2 + V(y_n) \Big\} + \sum_i W(y_n, y_{n-1})] \tag{3.1}$$

onde W representa a energia de empilhamento de vizinhos próximos. A forma de

W é crucial para o modelo e tem a expressão definida pela equação (1.7),isto é:

$$W(y_i, y_{i-1}) = K(1 + \rho e^{-\delta(y_i + y_{i-1})})(y_i - y_{i-1})^2 \tag{3.2}$$

onde os parâmetros são tomados de acordo com fatos experimentais, por exemplo K=0.01, $\rho = 3$ e $\delta = 0.8$[27].Quando $\rho$ é tomado igual a zero o potencial W se torna puramente harmônico.

A termodinâmica do Modelo de Peyrard-Bishop é conhecida há muitos anos [1], ela é obtida usando a matriz de transferência. A função de partição Z para uma cadeia contendo N pares de bases, dada em termos do Hamiltoniano H da equação (2.3), pode ser escrita como:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^{N} (e^{-\beta H}) dy_j dp_j \tag{3.3}$$

O operador de integral de transferência é usado para evaluar esta integral.

A função de partição correspondente à variável y é dado por:

$$Z_y = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^{N} (e^{-\beta f}) dy_j \tag{3.4}$$

onde f é a parte do potencial em termos de $y_j$ e $y_{j-1}$.

As propriedades termodinâmicas (2.3) são descritas pela função $Z_y(T)$. A integração numérica da função de partição $Z_y(T)$ dependente da temperatura e dos tipos de potenciais W ( harmônico e não harmônico) e V de interações entre as bases é crucial para determinar a temperatura de desnaturação do DNA.

O problema pode em geral ser resolvido usando Matrices para caso de cadeias Homogêneas ou não homogêneas [33-38].

## 3.2 Método Espectral

Para o núcleo definido por :

$$K(x,y) = e^{-\beta(W(x,y)+(1/2)(V(x)+V(y)))} \tag{3.5}$$

onde $\beta = 1/k_BT$ e $k_B$ é a constante de Boltzmann.

Definimos o operador integral HC como :

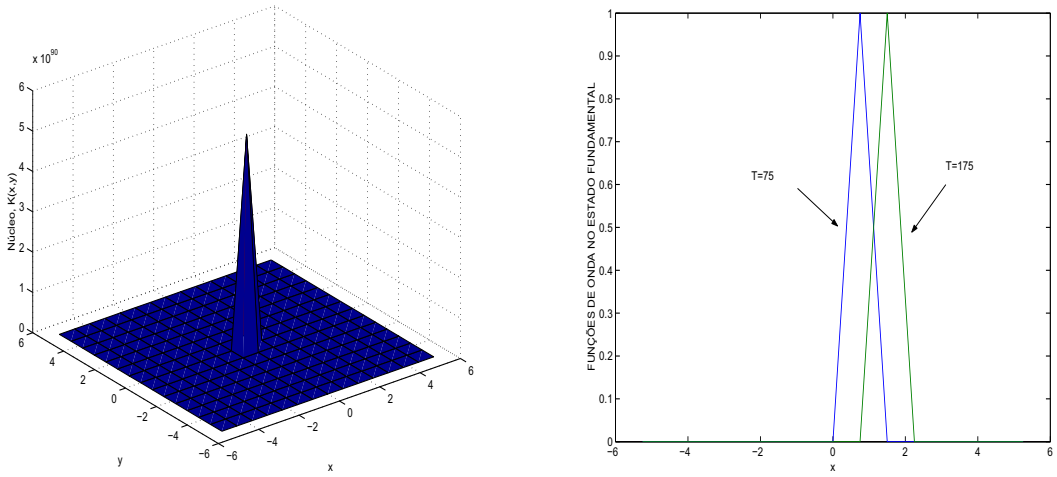
$$HC = \int_{-\infty}^{\infty} K(y,y')\Phi(y')dy' \tag{3.6}$$

Este operador fornece autofunções $\Phi(y)$ que podem ser usadas para obter estimativas estatísticas dos parâmetros do sistema termodinâmico, por exemplo o valor médio $< y >$ . Para obter autofunções devemos resolver a equação [33-38] :

$\int_{-\infty}^{\infty} K(y,y')\Phi_\nu(y')dy' = \lambda\Phi_\nu(y)$.

Podemos representar gráficamente o núcleo para o caso do Potencial de Morse dado por (1.5) com parâmetros D= 0.05254 e a=4. Também consideramos a interação não harmônica dado por (1.7).

No Apêndice C se encontra o programa de aproximação para as autofunções do Operador integral de transferência HC de núcleo K definido na equação (3.6).




(a) (b)

Figura 3.1: Gráfico do núcleo do Operador integral HC obtido usando o Potencial de Morse V com parâmetros D= 0.05254, a=4 e interação não harmônica W com parâmetros k=0.01, $\rho = 3$ , $\delta = 0.8$ (a) e as autofunções (função de onda no estado fundamental) para duas Temperaturas T=75 e T=175 (b).

Também aplicamos estas autofunções para determinar a amplitude media [38] das vibrações usando a fórmula (3.10). Por exemplo, temos para o caso do Potencial de Morse com interação não harmônica indicado anteriormente o seguintes valores: $< y > (75) = 0.56$ e $< y > (175) = 1.12$. A figura 3.1 (b) apresentam funções de onda deslocada, podendo se espalhar por muitos sites da rede. Isto significa que a amplitude continuará crescendo.

### 3.2.1 Equação de tipo *Schrödinger* ou *PseudoSchrödinger*

Podemos formular o seguinte Teorema:

Teorema 2

A equação de autovalores e autofunções :

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x,y)\Phi_\nu(y)dy = \lambda\Phi_\nu(x). \tag{3.7}$$

ou

$$HC(\Phi(x)) = \lambda\Phi(x) \tag{3.8}$$

Conduz a uma Equação do tipo Schrodinger [16]:

$$-\frac{1}{2\beta^2 Kg(x)}(d^2\Phi_\nu(x)/dx^2) + U(x)\Phi_\nu(x) = \lambda\Phi_\nu(x) \tag{3.9}$$

onde

$$U(x) = V(\sqrt{2}x) + \frac{1}{2\beta}\ln\frac{Kg(x)\beta}{2\pi} \tag{3.10}$$

e a expressão de g(x) é dado por:

$$g(x) = 1 + \rho e^{-2\delta x} \tag{3.11}$$

Inicialmente temos as identidades:

$$W(x,y) = \frac{K}{2}(1 + \rho e^{-\delta(y-x)}e^{-2\delta x})(x-y)^2 \tag{3.12}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\frac{K}{2}(1+\rho e^{-\delta(y-x)}e^{-2\delta x})(x-y)^2}\Phi_\nu(y)dy = \lambda\Phi_\nu(x)e^{-\beta V(x)}. \tag{3.13}$$

Fazemos a mudança de variavel y=x+z e uma expansão na vizinhança de z para a autofunção $\Phi_\nu(y)$ e o têrmo $e^{-\delta(y-x)}$.

Obtemos a equação de autovalores e autofunções :

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\frac{K}{2}(1+\rho e^{-\delta z}e^{-2\delta x})(z)^2}\Phi_\nu(y)dz = \lambda\Phi_\nu(x)e^{-\beta V(x)}. \tag{3.14}$$

onde $\Phi_\nu(y)$ é agora dado por:

$$\Phi_\nu(y) = \Phi_\nu(x) + \Phi_\nu(x)'z + 0.5\Phi_\nu(x)''z^2. \tag{3.15}$$

Usamos uma aproximação com o primeiro termo:

$$e^{-\delta z} = 1 - \delta z + 0.5\delta^2 z^2 \approx 1. \tag{3.16}$$

Obtemos a equação simplificada:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\frac{K}{2}(1+\rho e^{-2\delta x})(z)^2}(\Phi_\nu(x) + 0.5\Phi''_\nu(x)z^2)dz = \lambda\Phi_\nu(x)e^{-\beta V(x)}. \tag{3.17}$$

Desta maneira podemos realizar as integrais Gaussianas como na referência [38] e obter a equação de Schrodinger na variavel x.

O termo adicional na equação (3.10) representa a barreira entrópica responsável pela existencia da transição de fase de primeira ordem [39].

Por isso é importante destacar aqui que o modelo de Peyrard-Bishop com movimentos vibracionais-rotacionais com interação anharmônica é adequado para acompanhar uma transição de fase de primeira ordem. O modelo vibracional-rotacional com interação harmônico foi analisado na referência [43]. Para demostrar isso basta reduzir ao caso unidimensional para determinar a amplitude media

das vibrações-rotacionais dependentes dos parâmetros angulares usando as autofunções do operador de integral de transferência da equação (3.7). Devemos observar que este operador de transferência contém o potencial de interação anharmônica indicada na equação (3.12). Como foi sugerido por De los Santos et al [39] os modelos espaciais ajudam a acompanhar a termodinâmica entrópica real do problema de transição de fase de primeira ordem.

### 3.2.2 Estimativa da amplitude media em função da Temperatura

O valor medio do deslocamento $< y >$ é determinado usando a função de onda no estado fundamental $\Phi_0(y)$ [16]:

$$< y >= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0^2(y) y dy \tag{3.18}$$

A desvio do valor médio da amplitude das vibrações ("stretching") <y> é dada por :

desvio$= < y >= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0^2(y)(y- < y >)^2 dy$

O estado fundamental da Equação de *Schrödinger* (3.1) pode ser calculado usando o Método de Diferenças finitas.

## 3.3 Probabilidade de um par de base estar aberto

A Probabilidade de um par de base estar aberto pode ser calculada como função da temperatura considerando que para uma distancia maior do que 2.0 °A a ponte de hidrogênio esta quebrada [15]. A fórmula que fornece a Probabilidade de um par de base estar aberto é dado pela integral

$$P(y(2^{o}A, T)) = \int_{-\infty}^{2} \Phi_0^2(y)dy \tag{3.19}$$

## 3.4 Método dinâmico-estatístico para determinar a amplitude média

Podemos combinar os métodos dinâmicos e estatísticos para determinar o valor médio <y>.

Dependendo da temperatura pode-se aplicar aproximações para a resolução da equação de Pseudo Schrodinger. Para g(x) usamos a expressão:

$$g(x) = 1 + \rho e^{-2\delta\tilde{x}}, \tag{3.20}$$

onde $\tilde{x}$ é a amplitude do equilibrio.

Por exemplo, no caso do Potencial corcunda com os parâmetros do Apendice E e usando a fórmula (2.32) obtemos: $\tilde{x}$=1.67 e sua amplitude média dada por:

$$< y > (335) = 2.69 \tag{3.21}$$

## 3.5 Método numérico para calcular autovalores e autofunções do operador de transferência

Weber et al [33] indicam métodos numéricos para determinar autofunções. A equação 3.7 pode escrita na forma discreta para M pontos no intervalo $[y_i, y_f]$ como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x,y)\phi(y)dy = \sum_{k=1}^{M} r_k K(x,y_k)\phi(y_k) = \lambda\phi(x). \tag{3.22}$$

onde $r_k$ são os pesos da integração. A equação (3.22) pode ser discretizada na variável "x" sobre o mesmo intervalo $[y_i, y_f]$ para obter uma equação matricial da forma $DR\Phi = \lambda\Phi$ onde $\Phi$ é a coleção dos pontos $\phi(x_i)$, D é a matriz $K(x_i, y_j)$ e R é a matriz diagonal formada pela coleção dos pesos.

## 3.6 Energia livre de pequenas oscilações

De (3.3) temos a relação:

$$Z = Z_p Z_y \tag{3.23}$$

A expressão da energia livre F:

$$F = lnZ_pZ_y = -(\frac{1}{\beta})\ln(\frac{2\pi}{\beta\sqrt{K}}) + \tilde{F} \tag{3.24}$$

onde

$$\tilde{F} = \tilde{\epsilon} \tag{3.25}$$

onde $\tilde{\epsilon}$ é o autovalor da Equação de Schrodinger correspondente à função de onda no estado fundamental.

O calor especifico $C_V$ é dado por:

$$C_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \tag{3.26}$$

O primeiro termo da Equação (3.24) é considerado energia livre das pequenas oscilações. O calor especifico é constante correspondente às pequenas oscilações: $C_V = K_b$.

## 3.7 Considerações finais

O operador integral de Transferência é dependente da temperatura e fornece autofunções que ajudam a observar sua delocalização na rede com tendência ao aumento da amplitude das vibrações. Os Métodos alternativos dinâmico e estatístico ajudam a determinar a amplitude media para casos de interação harmônica e não harmônica e desta maneira aproveitar a equação de Schrodinger. O calor especifico relevante para as transições de fase corresponde ao autovalor da equação de Schrodinger. Dado que o calor especifico das pequenas oscilações é uma função constante e sua energia livre é diferenciavel , isto é suave "smooth" na variável

temperatura.

Como assunto complementar a energia de empilhamento "stacking" é importante na análise das transições de fase de cadeias heterogêneas [41].

# Capítulo 4

# O Modelo de Peyrard-Bishop com cadeias não homogêneas

Atualmente a nanotecnologia utiliza a estrutura molecular do DNA para uma possível realização da tecnologia de computadores com DNA. Recentemente, Porath et al tem realizado medições do transporte eletrônico de uma sequência de DNA ligado a eletrodos metálicos com diferentes resultados [28]. Para uma demonstração equivalente do transporte eletrônico foi desenvolvido a hipótese do aprisionamento. Fatos relativos ao coeficiente de transmissão ajudam a realizar comparações no problema de transporte eletrônico. Por exemplo, é observado que o nucleótideo Timina oferece um coeficiente de transmissão não nulo [28]. Em nosso caso temos que a interação mostra um aprisionamento do breather móvel na presença da Timina.

## 4.1 Potenciais não homogêneos

Como é usual na análise do DNA [2,3] com cadeias homogêneas estamos interessados no estudo do Hamiltoniano óptico equação (2.3) o caso mais geral para escrever esse hamiltoniano, usando o potencial de Morse, é dado por :

$$H = \sum_j \left\{ \frac{p_{y_j}^2}{2m_n} \right\} +$$

$$+ \sum_j \left\{ \frac{K_n}{2} \left[ (y_j - y_{j-1})^2 \right] \right\}$$

$$+ \sum_j V_n(\sqrt{2} y_j). \tag{4.1}$$

onde:

$$V_n = D_n[e^{(-y)} - 1]^2 \tag{4.2}$$

$$D_n = D(1 + \alpha \delta_{n,n_0}) \tag{4.3}$$

$$K_n = K(1 + \beta \delta_{n,n_0}) \tag{4.4}$$

$$m_n = m(1 + \gamma \delta_{n,n_0}) \tag{4.5}$$

## 4.2 Equação do movimento para o caso de Potenciais não homogêneos

Fazendo uso das equações de Hamilton e considerando $m$=1 na equação (4.1) obtemos o sistema não linear discreto de Klein-Gordon (KG)( n=1,2,...,N)

$$y_n'' + K(2y_n - y_{n-1} - y_{n+1}) + V_n'(\sqrt{2}y_n) = 0 \tag{4.6}$$

onde $V_n'$ é a derivada da função potencial.

### 4.2.1 Hipótese de aprisionamento no caso do Potencial de Morse

Para pequenas amplitudes é possível obter uma equação linearizada para (4.6):

$$y_n'' + K(2y_n - y_{n-1} - y_{n+1}) + {w_n}^2 y_n = 0 \tag{4.7}$$

onde a freqüência $w_n$ é dado por:

$${w_n}^2 = 2D_n \tag{4.8}$$

Consideremos $D = 1/2$ então a freqüência $w_n$ é dado por:

$${w_n}^2 = (1 + \alpha\delta_{n,n_0}) \tag{4.9}$$

Logo para $n_0 = 0$

$$w_0{}^2 = (1 + \alpha) \tag{4.10}$$

A equação (4.7) tem N-1 soluções ( N é o número de pares de base do DNA) correspondente a modos lineares estendidos (MLE) e uma solução localizada que corresponde ao modo linear local (MLL) originado pela introdução da não homogeneidade.

As freqüências $w_L$ das MLL podem ser calculadas considerando soluções da forma:

$$y_n(t) = e^{iw_L t} r^n \tag{4.11}$$

Para n>0 ou n<0 estas soluções tem o fator r satisfazendo a equação:

$$r^2 - (2K + w_0{}^2 - w_L{}^2)r + 1 = 0 \tag{4.12}$$

A freqüência do MLL é dado por:

$$w_L{}^2 = w_0{}^2 + 2K + sgn(\alpha)\sqrt{\alpha^2 + 4K^2} = 0 \tag{4.13}$$

A interação do breather com o modo linear local MLL dada pelas freqüências nos leva a considerar a condição da ressonância $w_b = w_L$ ou em termos do parâmetro $\alpha$ denominado parâmetro de ressonância $\alpha_{res}$ :

$$\alpha_{res} = sgn(w_b - w_0)\sqrt{({w_b}^2 - {w_0}^2)({w_b}^2 - {w_0}^2 - 4K)}/{w_0}^2 \tag{4.14}$$

A hipótese de aprisionamento[2] pode ser enunciado como: "Para que exista um breather aprisionado em Redes Klein-Gordon descritos por hamiltonianas não homogeneas é necessario que o parâmetro $\alpha$ se encontre no intervalo ( $\alpha_{res}$,0)". Quando a impureza do potencial do site central se encontra no intervalo de aprisionamento o breather móvel experimenta um comportamento caótico na proximidade do site da impureza.

## 4.3 Acoplamentos não homogeneos

Neste caso se consideramos os acoplamentos $K_n$=$K(1 + \beta\delta_{n,0})$ obtemos as equações de movimento:

$${y_0}'' + (1/2)K[(\beta + 2)(2y_0 - y_{-1} - y_1)] + V'(\sqrt{2}(y_0) = 0 \tag{4.15}$$

$${y_{\pm 1}}'' + (1/2)K[(\beta + 4)y_{\pm 1} - (\beta + 2)y_0 - 2y_{\pm 2}] + V'(\sqrt{2}(y_{\pm 1}) = 0 \tag{4.16}$$

Para soluções com $/n/\geq 2$

$${y_n}'' + K(2y_n - y_{n-1} - y_{n+1}) + {V_n}'(\sqrt{2}(y_n) = 0 \tag{4.17}$$

De forma análoga ao caso de potenciais não homogêneas a hipótese de aprisionamento indica que temos aprisionamento para quase todo $\beta<0$. Mas para $\beta>0$ a não homogeneidade comporta-se como uma barreira de potencial[2].

## 4.4 Interação não harmônica

Como foi considerado anteriormente uma simplificação pôde ser realizado no potencial W usando soluções localizadas no equilíbrio para a análise das interações de breather móvel em cadeias não homogêneas. O tipo de potencial considerado na cadeia define o tipo de não homogeneidade.

## 4.5 Delocalização da função de onda do estado fundamental

Em termos da termodinânica do problema, a profundidade (D) do potencial de Morse afeta "funções de onda"obtida obtida da equação tipo Schrodinger ( equação (3.9)) mesmo para redes homogêneas. Na Figura 4.1 observamos o comportamento da função de onda no estado fundamental para duas redes homogêneas com dois conjuntos de parâmetros do potencialde Morse usado para descrever o DNA. Os parâmetros são dados na referência [39].

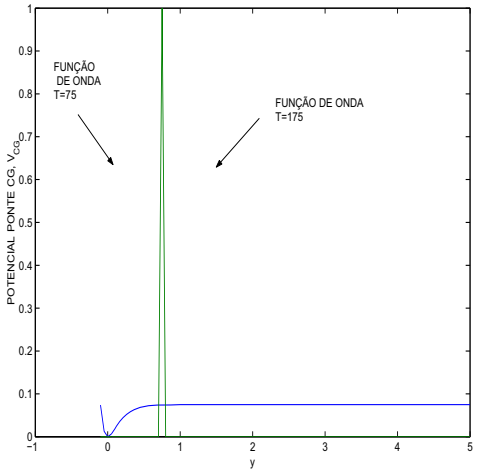
Observa-se na Figura 4.1 um deslocamento das funções obtidas para difer-

entes temperaturas são aqueles refrerentes ao par AT quando os parâmetros uados

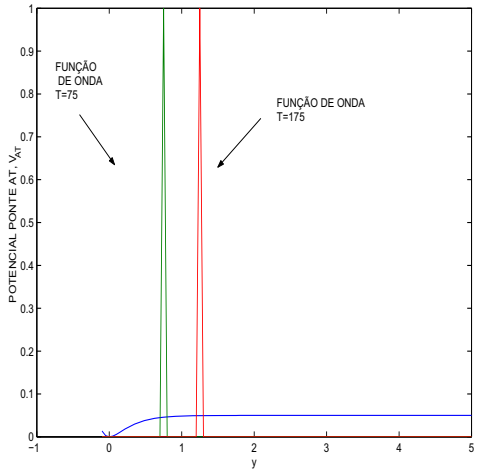
## 4.6 Considerações finais

A impureza na rede pode ser descrita formalmente nos parâmetros do potencial usado. A análise da impureza feita neste trabalho restringe-se a variar os parâmetros D e K. Observa-se que o uso de diferentes parâmetros D e a modifica as propiedades das funções de onda da equação tipo Schrodinger que descreve a termodinâmica do sistema (figura 4.1)

(figura 4.1(b)). Por outro lado, quando os parâmetros referentes ao par CG são usados, aa função de onda permanece inalterada para as temperaturas indicadas (figura 4.1(a))




(a)




(b)

Figura 4.1: O potencial de Morse correspondente a ponte CG de parâmetros $D_{CG} = 0.075$ e $a_{CG} = 6.9$ [39]. As funções de onda são mostradas para diferentes temperaturas (a) e O potencial de Morse correspondente a ponte AT de parâmetros $D_{AT} = 0.05$ e $a_{AT} = 4.2$ [39]. As funções de onda deslocadas são mostradas para diferentes temperaturas (b).

# Capítulo 5

# Resultados para o Modelo PB com Potenciais Simétricos

Os potenciais simétricos considerados serão: (i) Potencial de Morse simétrico e (ii) Potenciais quárticos simétricos. A metodologia usada foi dada no Capítulo dois sendo que se constrói a solução usando Método de Newton no Espaço de Fourier [7] e sua estabilidade é analisada através dos autovalores (multiplicadores) da matriz de Floquet [8].

## 5.1 Modelo PB com Potencial simétrico de Morse

Para determinar a solução (breather) y(t) = $\{y_n(t)\}$ de (2.4) e sua estabilidade quando o Potencial simétrico de Morse é dado por :

$$V(y_i) = D[e^{-a(/y_i/)} - 1]^2, \tag{5.1}$$

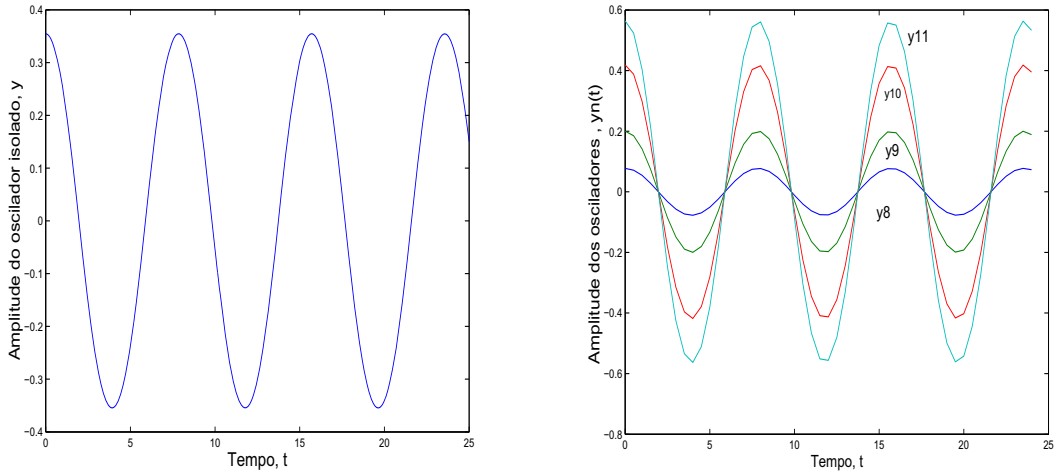
foram inicialmente obtidas suas derivadas para verificar a existência da segunda derivada contínua. Desta maneira pode-se aplicar os resultados da Teoria de MacKay-Aubry. As equações dinâmicas considerando a=1 são:

$$y_j'' + k(2y_j - y_{j-1} - y_{j+1}) - sign(y_j)[e^{-2(/y_j/)} - e^{-(/y_j/)}] = 0 \tag{5.2}$$

### 5.1.1 Método de Marin aplicado ao Modelo PB com Potencial simétrico de Morse

Inicialmente, resolvemos, usando o Método de Newton, a equação algébrica associada a (3.4) para o caso não acoplado (k = 0). A solução para o caso não acoplado com $w_b$ =0.8 e $k_m$ =17 é mostrado na figura 5.1.

Usando o Teorema de MacKay e a série de Fourier truncada com $w_b$ =0.8, k=0.28, m=21 e $k_m$ =17, obtemos os coeficientes de Fourier com o pacote Matlab [12]. A solução numérica é mostrada na figura 5.2. A figura 5.2 é outra forma de representação da Figura 5.1(b) do breather na configuração espacial. Esta solução é periódica de período T=7.85 .




(a) (b)

Figura 5.1: Evolução da amplitude do oscilador isolado e dos osciladores acoplados no intervalo de tempo (unidades de processamento) [0,25] . (a)Amplitude do oscilador isolado para wb=0.8 (b)Evolução das amplitude dos osciladores para k=0.1297.

.

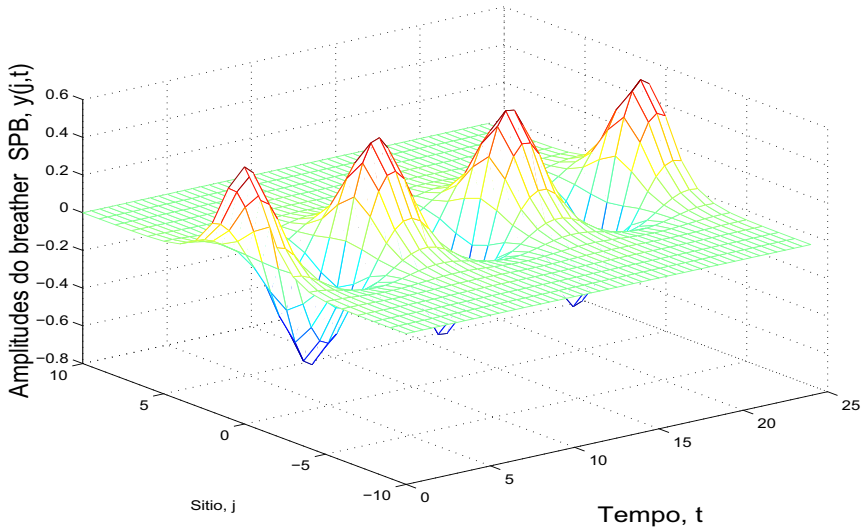



Figura 5.2: Configuração espacial do breather com :$w_b$ =0.8, k=0.1297 e $k_m$ =17 .

### 5.1.2 Método de Bandas de Aubry aplicado ao Modelo PB com Potencial simétrico de Morse

No caso do Morse simétrico temos a seguinte Equação Hill

$$\epsilon_j'' + k(2\epsilon_j - \epsilon_{j-1} - \epsilon_{j+1}) + [2e^{-2(/y_j/)} - e^{-(/y_j/)}]\epsilon_j = 0 \tag{5.3}$$

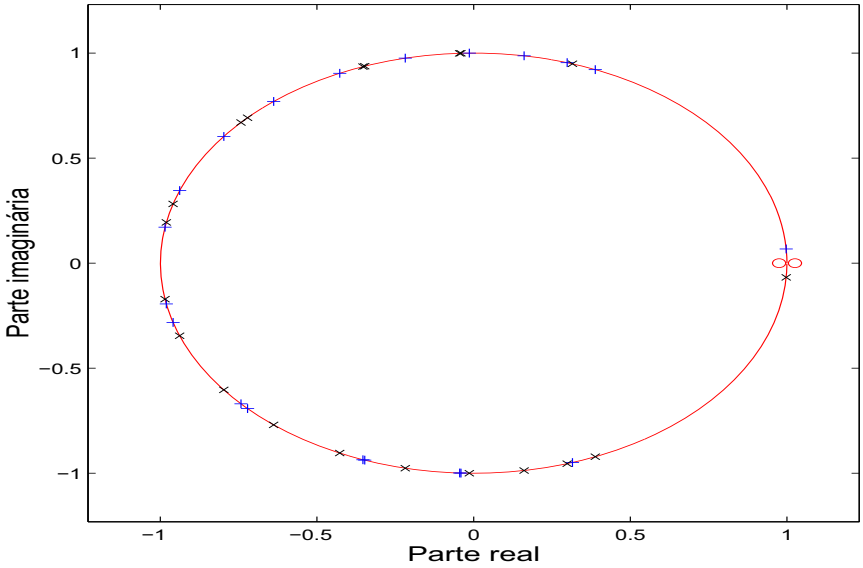



Figura 5.3: Evolução dos multiplicadores de Floquet $w_b$ =0.8, k=0.28 .

Obtemos a partir da equação (5.3) a figura 5.3 que mostra uma bifurcação harmônica. A figura 5.4 mostra o comportamento das bandas correspondente a esta bifurcação conforme discutido no capítulo 2 e a figura 5.5 mostra também o deslocamento da banda com a perda da intersecção com o eixo $\theta = 0$ quando se usa o acoplamento K=0.305.

O centro de energia somente é móvel para uma determinada velocidade inicial. Assim é necessário escolher bem essa velocidade , foi escolhido a velocidade inicial de v=0.1 para que possa se deslocar o centro de energia na rede como

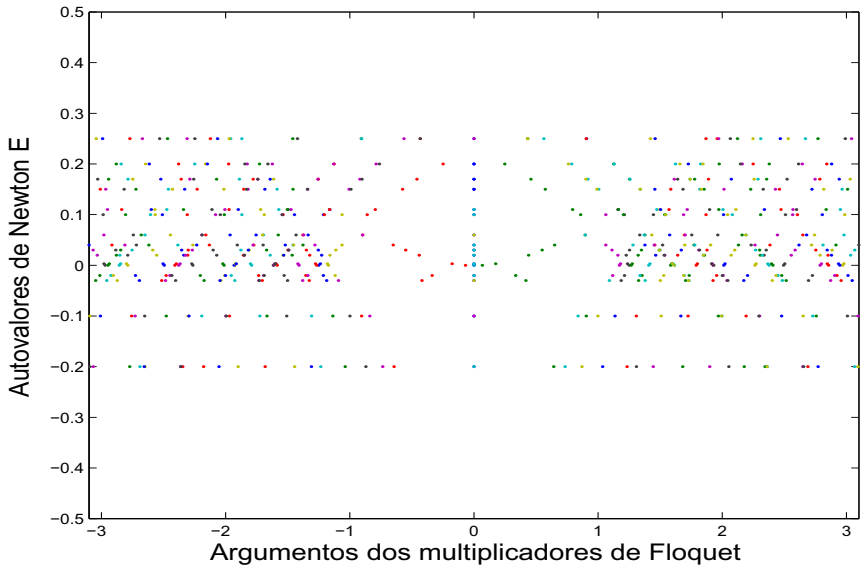



Figura 5.4: Bandas de Aubry calculados para o breather $w_b$ =0.8, k=0.28 .

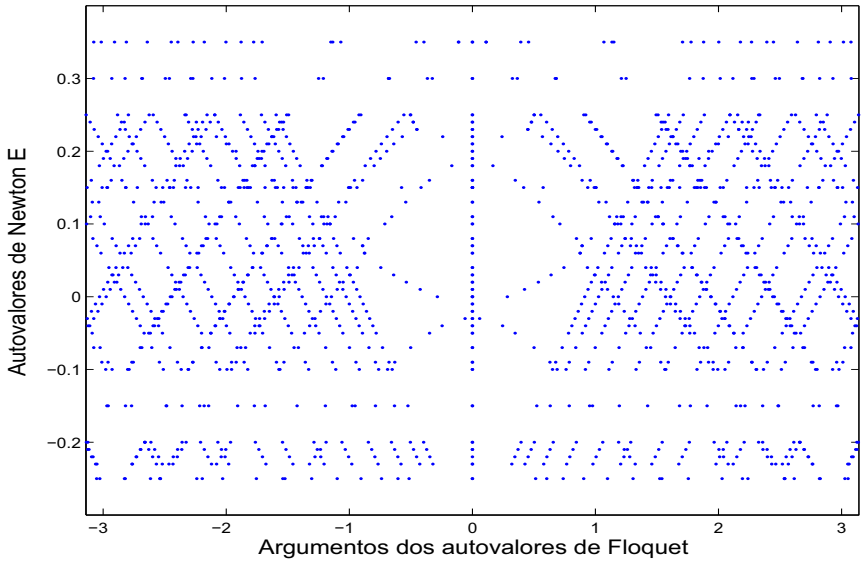



Figura 5.5: Bandas de Aubry calculados para o breather $w_b$ =0.8, k=0.305 .

mostra a figura 5.6. Essa escolha corresponde a um breather com velocidade constante. Para o caso estudado aquiFoi determinado inicialmente a bifurcação harmônica [25]. Realmente delocalização foi observado também nas autofunções do operador integral de transferência.

O breather estacionário e o breather móvel são representados na Figura 5.7.

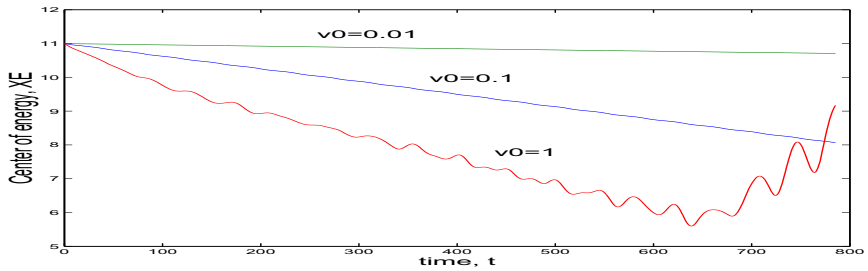



Figura 5.6: Evolução do Centro de energia($X_E$) com K=0.28 and $w_b$=0.8, o parâmetro $\lambda$ foi analisado para três valores $\lambda = 0.01$ (linha superior), $\lambda = 0.1$ (linha intermédia) e $\lambda = 1$ (linha inferior) .

O breather estacionário representa o estado do breather antes da bifurcação.

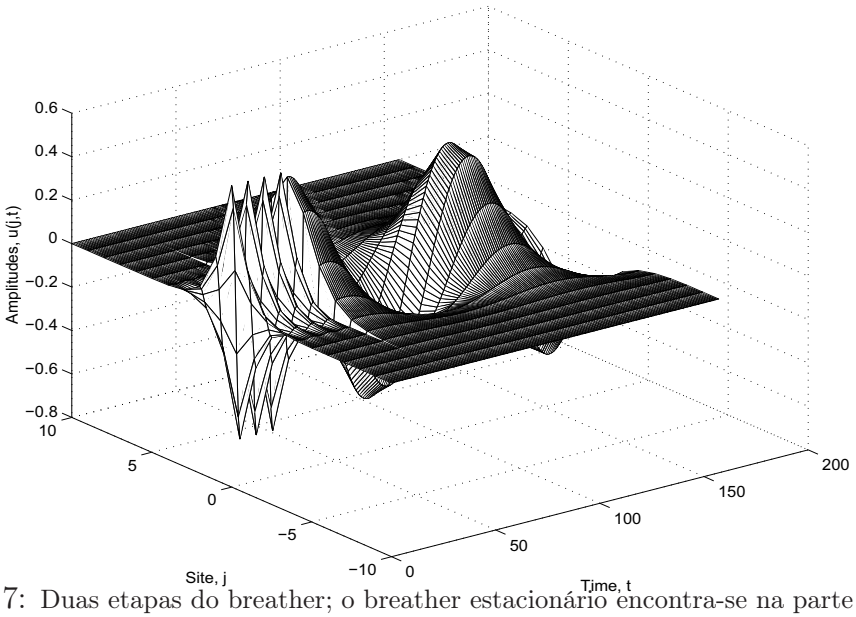



Figura 5.7: Duas etapas do breather; o breather estacionário encontra-se na parte inicial e o estado móvel depois da perturbação da velocidade .

### 5.1.3 Amplitude media da vibração

O estado fundamental é obtido da equação de Schrodinger (3.9) para o Potencial simétrico dada pela equação (5.1) e é mostrado na Figura 5.8 para este modelo. A função de onda é uma função par, logo o valor médio da amplitude será nula. Conseqüentemente, não existe transição de fase para este tipo de potencial, conforme esperado pelo argumento de Angelani [1].

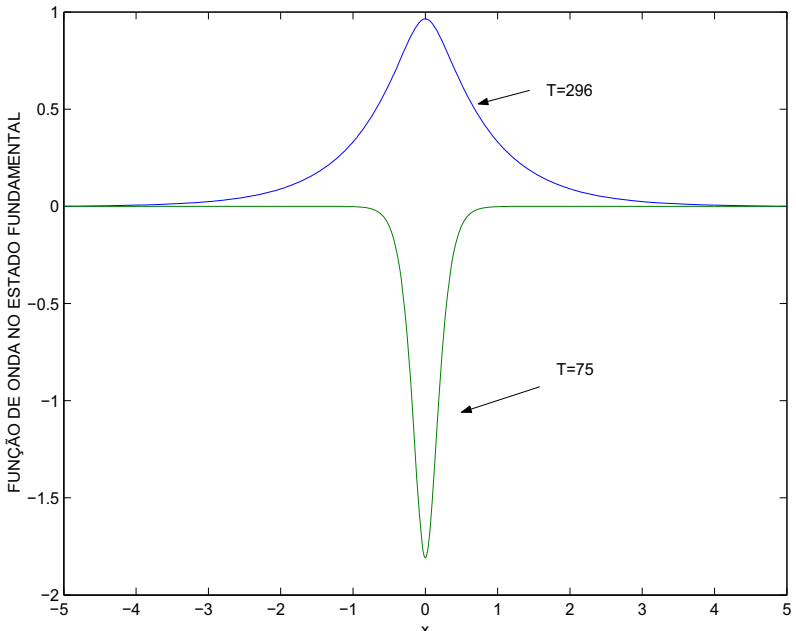



Figura 5.8: As Funções de onda do estado fundamental para diferentes valores de temperatura obtida com o método de diferença finita demostram a não delocalização paro caso do Potencial de Morse simétrico .

### 5.1.4 Cadeias não homogêneas

Verificamos a hipótese de aprisionamento para o parâmetro $\alpha$ usando a equação (4.14). Foi determinado o intervalo da forma :$\alpha\epsilon(-0.7541, 0)$.

## 5.2 Modelo PB com Potencial de poço duplo

Foi resolvido a Equação de Schrodinger para o Potencia poço duplo indicado na seção (1.12).Usando o método de diferenças finitas mostrado no Apêndice C obtemos a Figura 5.9. Como conseqüência da sua simetria o valor médio das amplitudes <y> sera zero e não temos transição de fase para este caso.

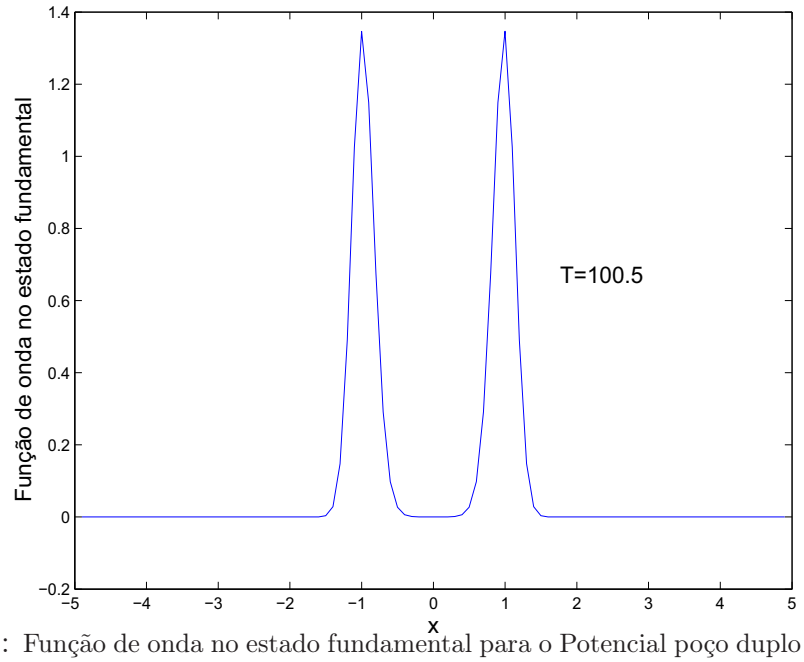



Figura 5.9: Função de onda no estado fundamental para o Potencial poço duplo considerando a equação de Schrodinger .

## 5.3 Considerações finais

No Capítulo 3 foi observado usando o operador de transferência que existe uma delocalização das funções de onda para o Potencial assimétrico de Morse . Neste Capítulo usando a equação de Schrodinger observamos que as funções

do estado fundamental não mostram o fenômeno de delocalização em relação à variável temperatura. No caso de Potenciais assimétricos a delocalização gera um incremento na amplitude média. No aspecto dinâmico observou-se a existência de breather móveis para a rede homogênea e a possibilidade de aprisionamento no caso do parâmtro de impureza

# Capítulo 6

# Resultados para o modelo PB com potenciais não simétricos

## 6.1 Introdução

Constatou-se no capítulo anterior que existia um intervalo de aprisionamento para Modelos PB com Potenciais Simétricos com cadeias não homogeneas. Hisakado, M. [34] resolve também o problema do aprisionamento (em inglés "trapping") no DNA usando solitón. O problema do aprisionamento está muito ligado ao problema do transporte eletrónico no DNA. Roche,S. [28] tem demostrou a importância da não homogeneidade nas sequencias do DNA. Especificamente a sustituição de uma guanina por uma timina conduz a uma transmissão nula. Também foram usadas equações de Langevin [39] para provar o efeito da ponte de hidrogênio AT. Atualmente a nanobiotecnologia explora as propiedades elétri-

cas de polímeros conjugados para o transporte do DNA.

Morales, M. [30], Vauthier, C.[29] consideram nanocompostos para o transporte do DNA e aplicações biotecnologicas. Em particular, pode-se fazer a sintese de partículas magnéticas mesoporosas para aplicações biomédicas [30].

Os potenciais assimétricos considerados serão: (i) potencial de Morse (não simétrico), (ii) potenciais quárticos assimétricos e iii) potencial híbrido formado por três partes: Morse, quártico e exponencial. A metodologia usada foi dada no Capítulo dois sendo que se constrói a solução usando Método de Newton no Espaço de Fourier [7] e sua estabilidade é estudada analisando-se os autovalores (multiplicadores) da matriz de Floquet [8]. Para a análise termodinâmica os conceitos foram dados no capítulo três.

## 6.2 Modelo PB com o potencial de Morse

Para determinar a solução (breather) $y(t) = \{y_n(t)\}$ de (2.4) e sua estabilidade para o Potencial de Morse dado por :

$$V(y_i) = D(e^{-ay_i} - 1)^2, \tag{6.1}$$

inicialmente obtemos suas derivadas para verificar a existência da segunda derivada continua, para de esta maneira poder aplicar os resultados da Teoria de MacKay-Aubry. As equações dinâmicas considerando $D = 1/2$ e $a = 1$ são:

$$y_j'' + k(2y_j - y_{j-1} - y_{j+1}) - [e^{-2(y_j)} - e^{-(y_j)}] = 0 \tag{6.2}$$

Usando o Teorema de MacKay e a série de Fourier truncada com $w_b$ =0.8, k=0.13,$k_m$ =17 e m=251, obtemos os coeficientes de Fourier com o pacote Matlab [12]. A solução numérica do perfil do breather é mostrada na figura 6.1. A velocidade inicial está mostrada na Figura 6.2

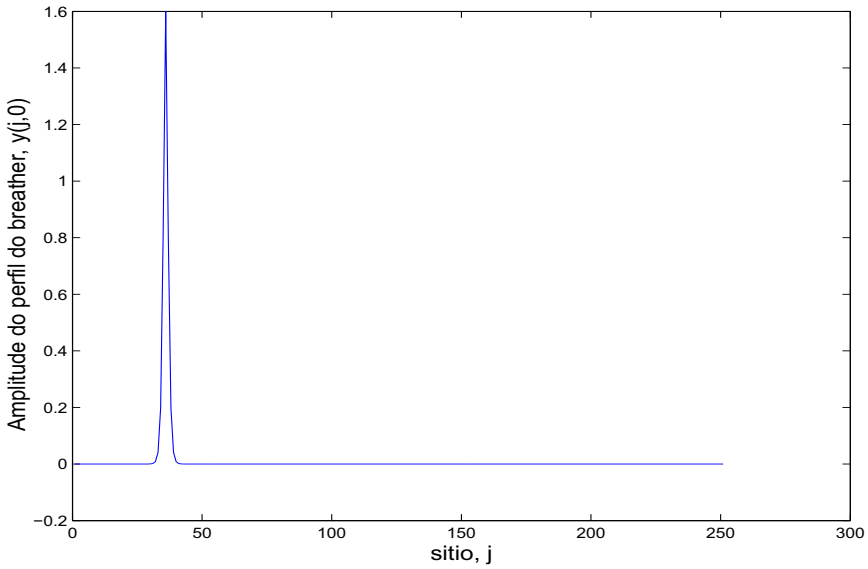



Figura 6.1: Perfil do breather com :$w_b$ =0.8, k=0.13,$k_m$ =17 e m=251 .

Inicialmente tem-se obtido o breather breather móvel a uma distancia digamos de 36 nucleotideos do extremo direito da seqüencia considerada. A figura 6.3 mostra o centro de energia do breather móvel que se desloca na rede a partir da posição 36.As Figuras 6.4 e 6.5 mostram a interação com a região do TATA box para dois tipos de simulações.A Figura 6.6 considera-se um bloco grande de impurezas do oscilador 1 ao 35. Observa-se que a reflexão do breather é imediata.

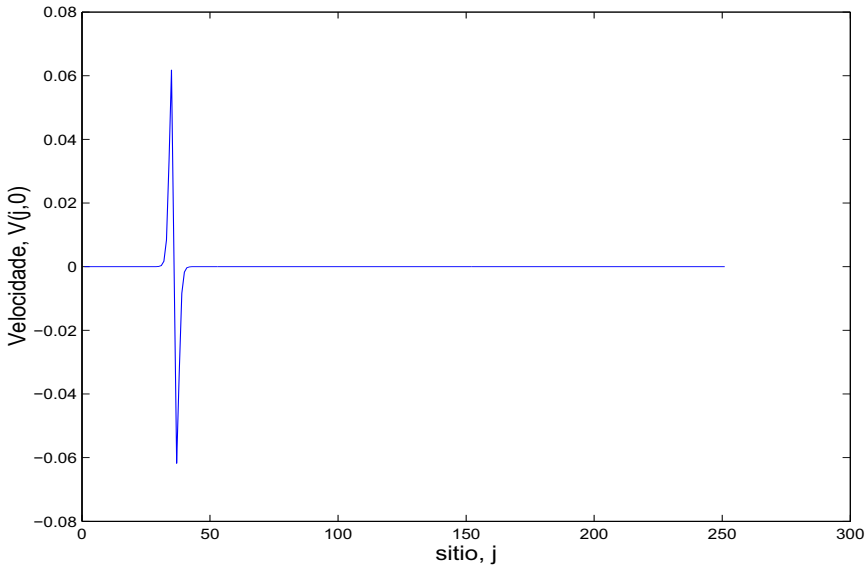



Figura 6.2: Velocidade inicial do breather com :$w_b$ =0.8, k=0.13,$k_m$ =17 e m=251 .

Foi usado um valor para la impureza de -0.40, o que elimina a profundidade do poço do potencial de Morse nessa região em relação ao resto da cadeia.

Vamos considerar a região promotora ( Ver tabela 6.1) de uma seqüencia que codifica Insulina (Ver Apêndice D). Para o estudo da interação inicialmente foi considerado o centro de energia saindo da posição 36 do nucleotídeo em direção oposta ao caso anterior mostrado na Figura 6.4. A figura 6.8 mostra a evolução linear do centro de energia XE como função do tempo. No instante inicial o centro de enrgia do breather está localizado na posição 36 conforme fiscutido no Apêndice D. A figura 6.9 apresenta a evolução do centro de energia na região promotora. Usaremos dois tipos de profundiadde do poço pela presença de pontes AT O CG. Para adenina ou timina equivale a um fator de 0.6 na parte não homogênea e para o caso de citosina e guanina se ha considerado o valor de 1.0.

O deslocamento na região promotora é muito lenta. Foi colocado na posição

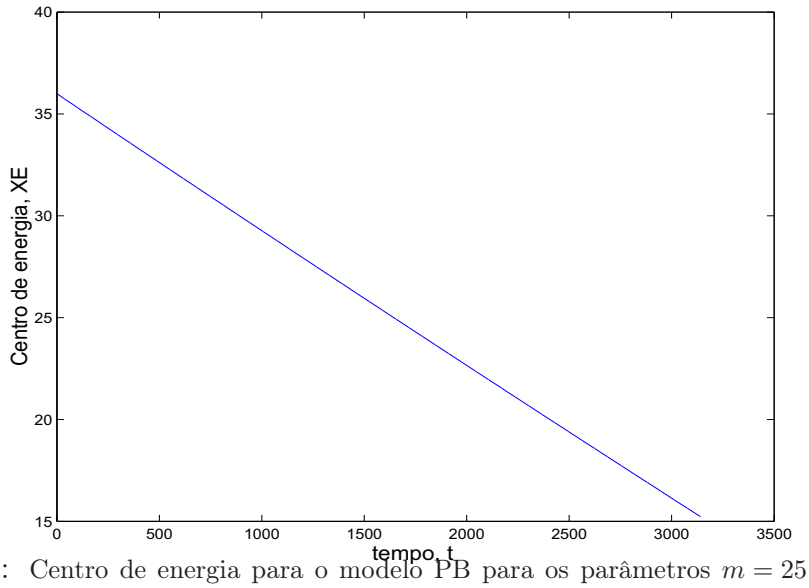



Figura 6.3: Centro de energia para o modelo PB para os parâmetros $m = 251$, $K = 0.13$, $w_b = 0.8$ e $v_0 = 0.1$.Foi considerado o parâmetro $\alpha = 0$ para obter o regime inicial de cadeia homogenea .

36 o breather em concordância com os dados obtidos da Bioinformática. Para nosso caso foi realizado um SCAN da região promotora usando o Programa on line do Internet que permite usar o software correspondente. 0 apêndice D mostra a resultado do programa PROMOTOR SCAN com as localizações especificas mais prováveis de ocorrência. A análise do gene da insulina utilizando o programa SCAN evidencia o inicio da transcrição ( transcription start site-TSS) na posição 2185. Nosso breather foi colocado na posição corresponente ao sinal EBP de posição 1966.

Tabela 6.1: Localizações tipicas no gen que codifica a insulina de 4044 p.b.

| Localização | 1931-2181 | 2155 | 2185 | 1966 | |
|---|---|---|---|---|---|
| IDENTIFICAÇÃO | REGIÃO PROMOTORA | TATABOX | TSS | C/EBP-SINAL | |

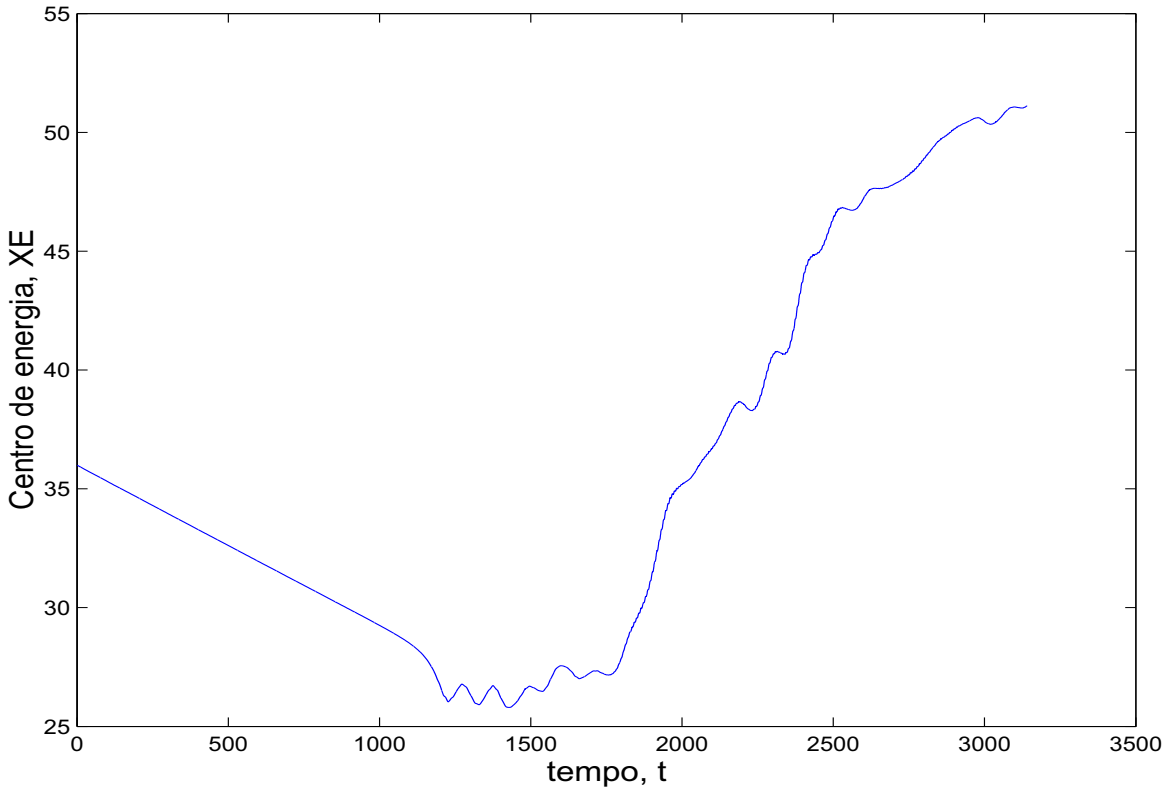



Figura 6.4: Interação do breather móvel com uma não homogeneidade na posição 26 no modelo PB Foi considerado o parâmetro $\alpha = -0.30$ para obter o regime de aprisionamento no TATA box .

## 6.3 Física Estatística da desnaturação térmica do DNA

Verificamos o crescimento da amplitude media <y>(T) com a Temperatura usando o método de diferenças finitas.Os resultados são dados na Tabela 6.2 usa os parâmetros dados por K=0.06, a=4.45 e D=0.04 que indicam a Temperatura de desnaturação de 350 K correspondente a uma amplitude media superior a 2 $^{o}$A.

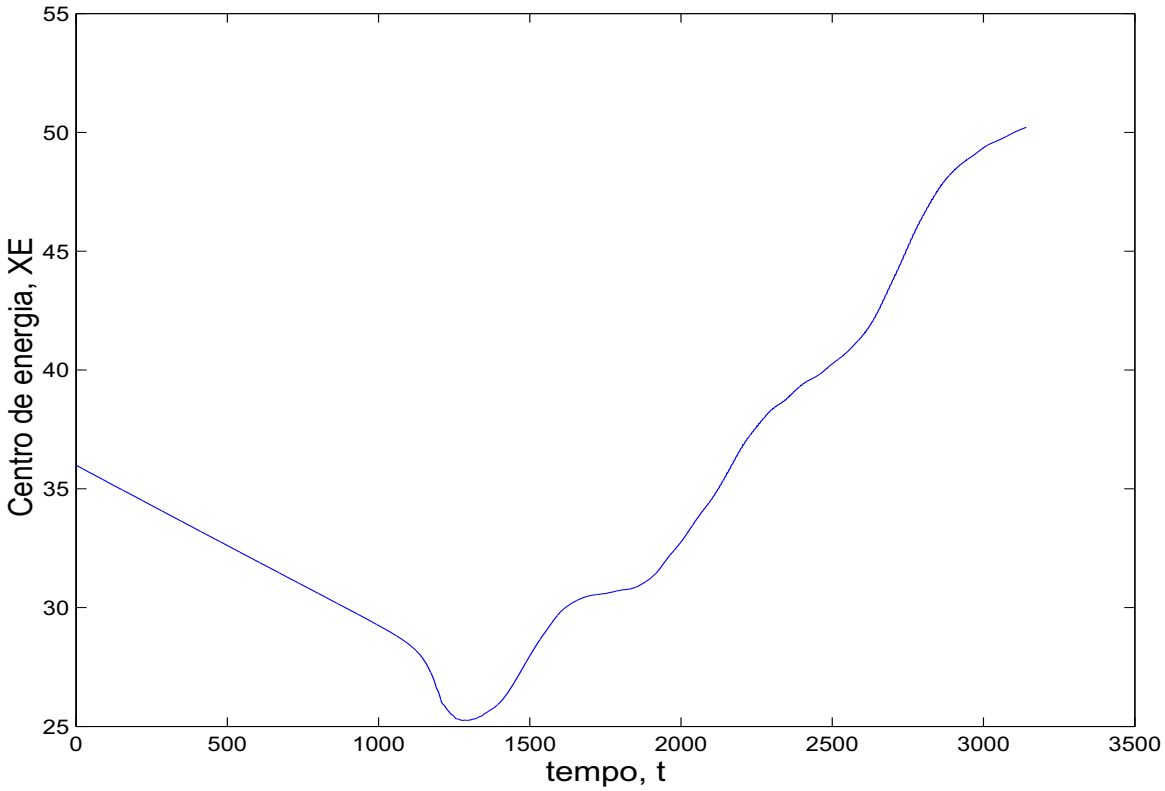



Figura 6.5: Interação do breather móvel com a região da não homogeneidade de posição 21-26 no modelo PB Foi considerado o parâmetro $\alpha = -0.30$ para obter o regime de aprisionamento no TATA box .

A Figura 6.11 mostra o função de onda no estado fundamental para T=360 considerando os parâmetros K=0.06, a=4.45 e D=0.04. .

A energia de empilhamento conduz a dois tipos de modelos de desnaturação do DNA . Para $\rho = 0$ a desnaturação é obtida da solução da equação de Schrodinger (3.7) com g(x)=1 [41]. Para este caso conhecido a função de onda no estado fundamental[4]. Podemos escrever a energia livre como [4,41]:

$$\tilde{F}(T) = D(T < Tcrit) \qquad \tilde{F}(T) = D(1 - (1 - T/Tcrit)^2)(T > Tcrit)$$

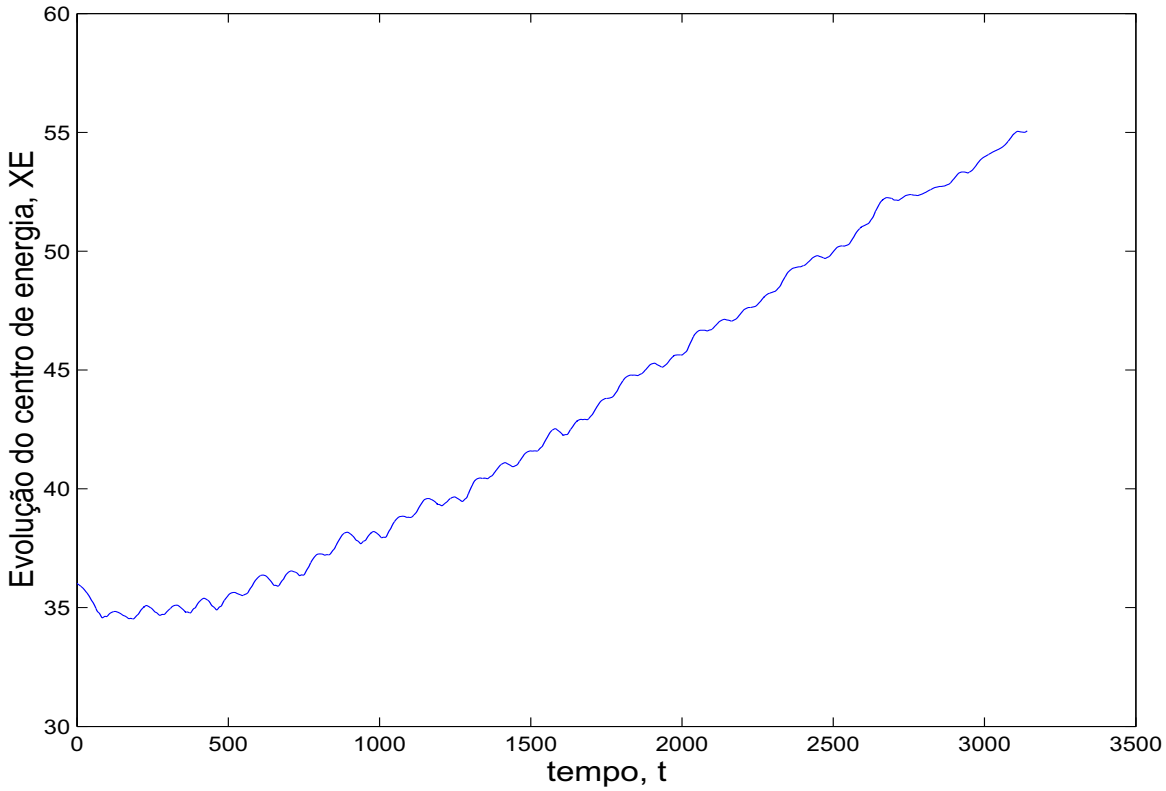



Figura 6.6: Interação do breather móvel com a região da não homogeneidade de posição 1-35 no modelo PB Foi considerado o parâmetro $\alpha = -0.40$ no bloco de não homogeneidade .

$$Tcrit = 2\sqrt{2KD}/a$$

Neste caso a Função de energia livre não é continua e temos transição de fase de segunda ordem ( calor especifico tem um salto ou discontinuidade para T=Tcrit ) segundo o esquema de clasificação de Ehrenfest[41].

Para $\rho \neq 0$ a desnaturação é obtida da solução da equação de Schrodinger (3.7) [41]. O potencial adicional $\tilde{U}$ da equação (3.8) é da forma:

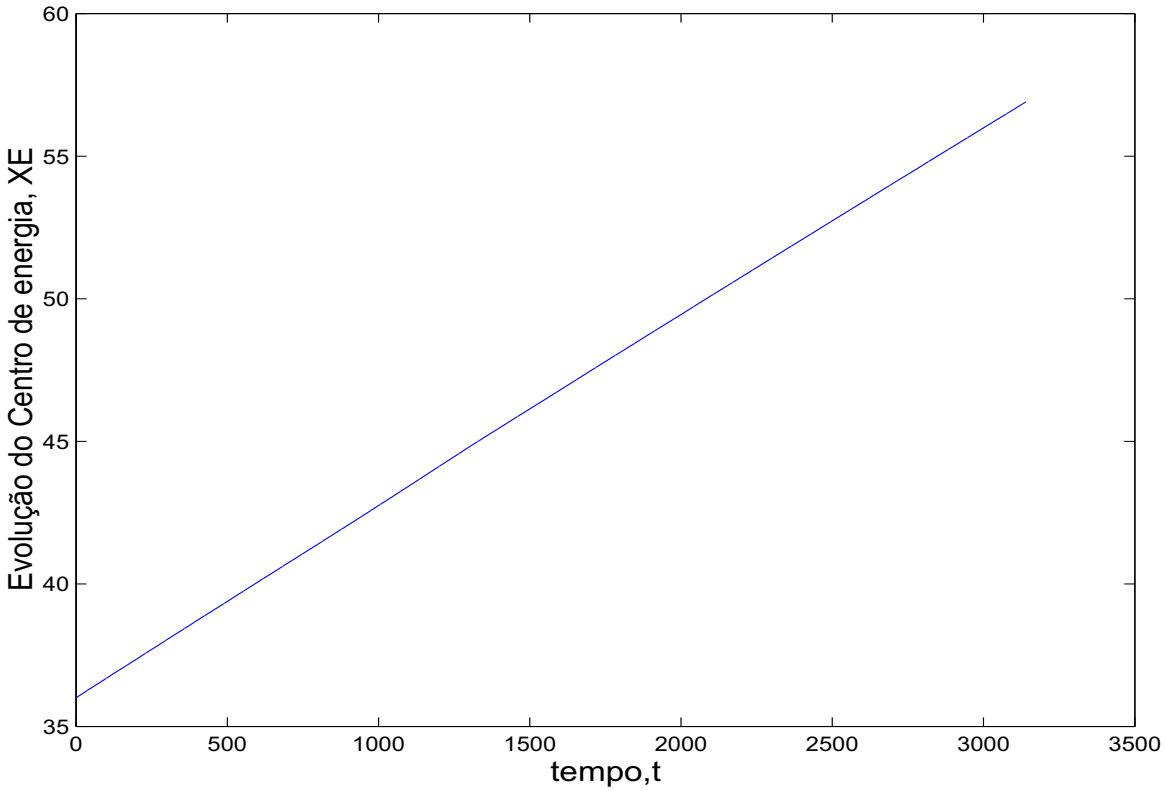



Figura 6.7: Centro de energia saido da posição nucleotideo localizado na posição 36 segundo o apresentado no Apêndice D .

$$\tilde{U}(x) = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{Kg(x)\beta}{2\pi} \tag{6.3}$$

A ordem da transição de fase é dada pelo parametro de "stacking"relativo [41]:

$$"staking" relativo(a, \delta) = \frac{\delta}{a} \tag{6.4}$$

Podemos ter transição de fase de primeira orden de natureza entrópica devido ao

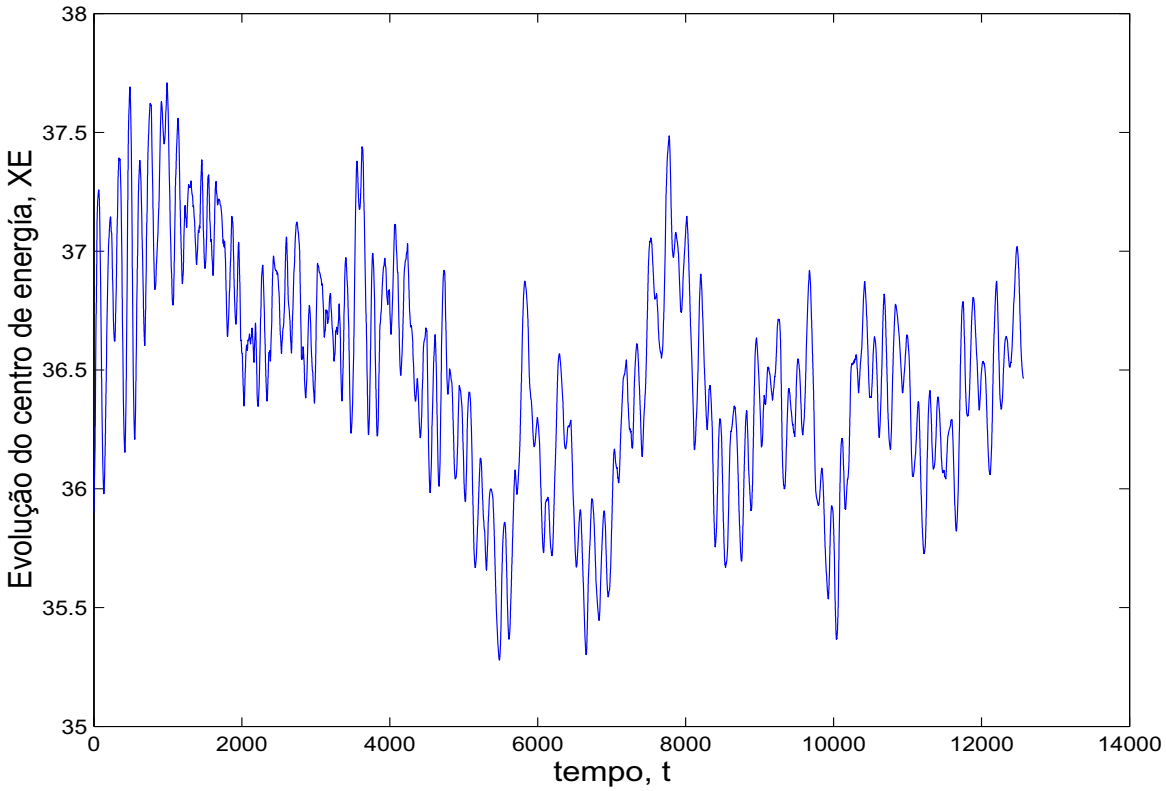



Figura 6.8: Evolução do Centro na região promotora correspondente á seqüencia que codifica a insulina .

efeito stacking e concordante com os datos experimentais da existencia de muitas etapas de melting de sequências reais heterogêneas de DNA [41].

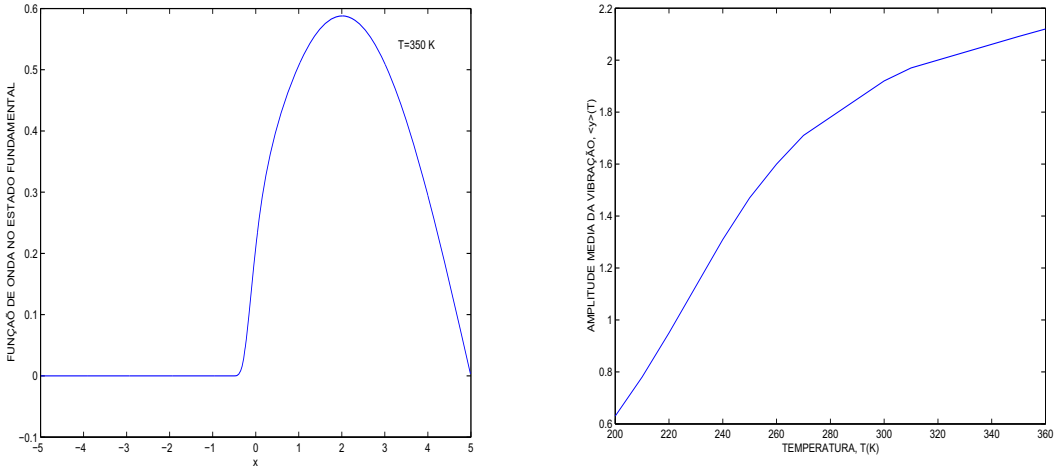
A figura 6.10 mostra a função de onda no estado fundamental que foi usado para calcular o valor medio das amplitudes usando o método de diferenças finitas . O valor determinado é aproximadamente zero, isto é $< y > \approx 0.5$.

Tabela 6.2: Amplitude media das vibrações para o caso do Potencial de Morse.

| Temperatura T | 200 | 210 | 220 | 230 | 240 | 250 | 260 | 270 | 300 | 310 | 350 | 360 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $< y > (T)$ | 0.63 | 0.78 | 0.95 | 1.13 | 1.31 | 1.47 | 1.6 | 1.71 | 1.92 | 1.97 | 2.0910 | 2.12 |

### 6.3.1 Modelo PB com Potencial híbrido

Para a analise da Temperatura de desnaturação do DNA foi calculado o valor médio das amplitudes medias de vibração correspondente a uma Temperatura de 428 K. Por exemplo, no caso do Potencial Morse foi obtido uma amplitude media de 2.2404 $^{o}$A e no caso do Potencial Híbrido a amplitude media foi de 2.3966 $^{o}$A, este fato significa que temos um crescimento maior da amplitude media das vibrações no modelo com o Potencial de Híbrido. A figura 6.11 mostra a função de onda no estado fundamental utilizado. A figura 6.12 mostra a evolução da amplitude media para outras Temperaturas.




(a) (b)

Figura 6.9: Função de onda no estado fundamental correspondente a uma Temperatura de T=350 com o potencial de Morse(a) e a evolução da amplitude media de vibração que mostra ser maior a 2 $^{o}$A para uma T=350 K. Esta temperatura pode ser considerado como a Temperatura para a transição de fase ou desnaturação.

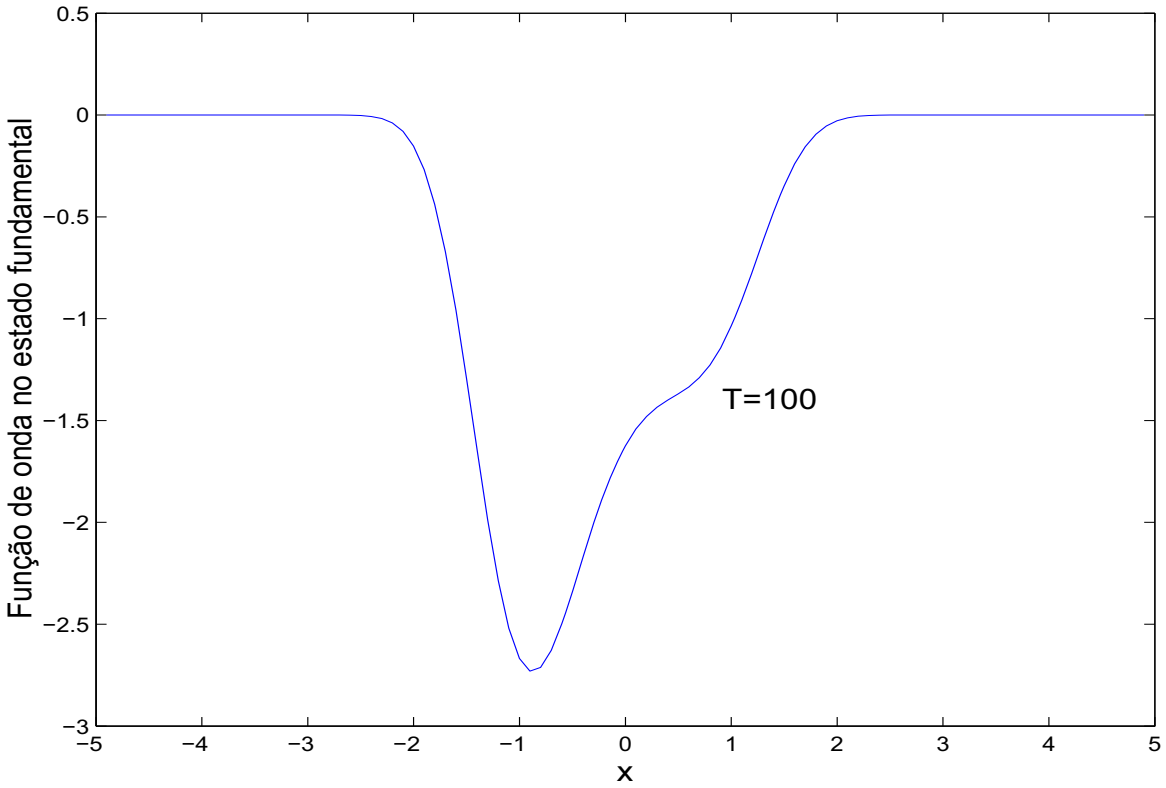
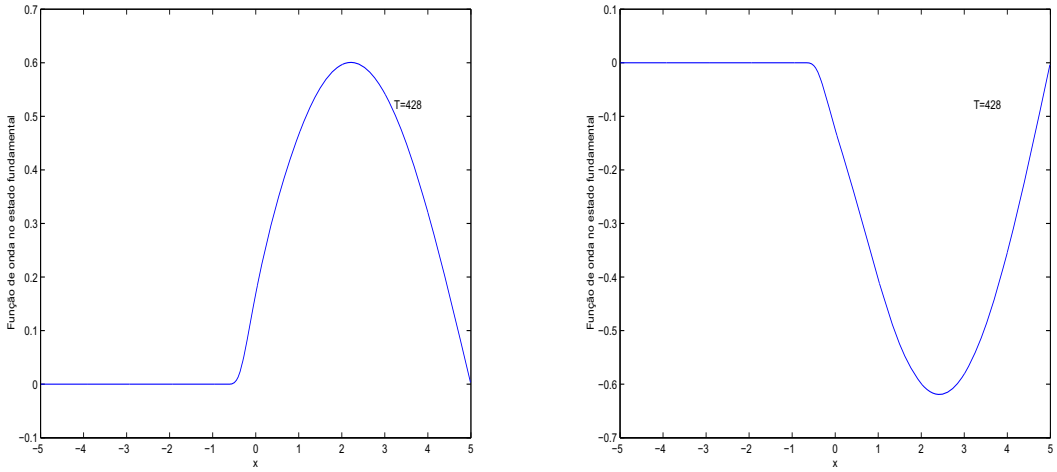
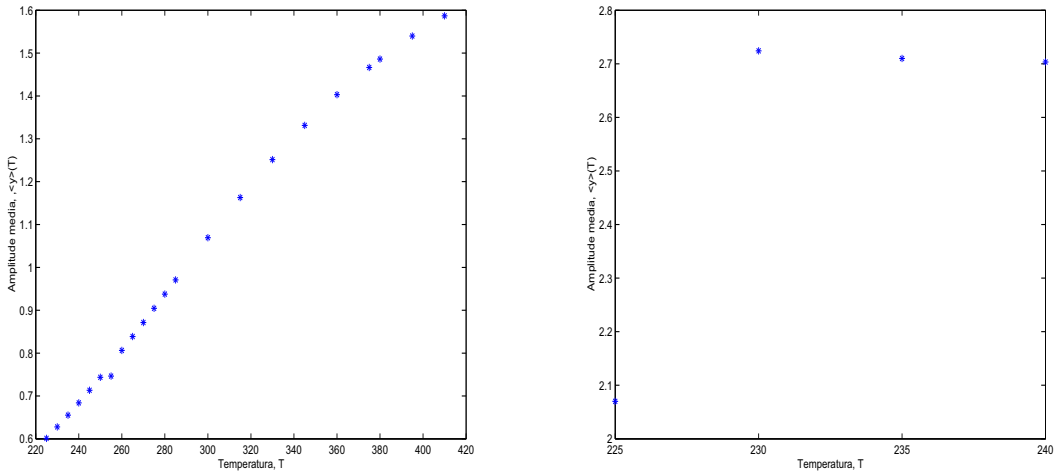



Figura 6.10: Função de onda no estado fundamental com o potencial quártico assimétrico.




(a) (b)

Figura 6.11: Função de onda no estado fundamental correspondente a uma Temperatura de T=428 com o potencial de Morse(a) e com o potencial híbrido(b)Os parâmetros do modelo são K=0.003 , D=0.0857 e a=4.




(a) (b)

Figura 6.12: Evolução da amplitude media com a Temperatura(a)Amplitude media das vibrações com parâmetro D=0.33 no Potencial de Morse and k=0.003. (b)Evolução das amplitude media dos osciladores no caso do Potencial híbrido (Apêndice E)

.

# Capítulo 7

# Dinâmica não linear e estatística do Modelo PB com Potencial Híbrido e interação não Harmônica

Recentemente Cuesta-Lopez e col. [26] propuseram um novo potencial para o estudo da dinâmica da desnaturação térmica do DNA, no contexto do modelo PB. Esse potencial é uma modificação do potencial de Morse e foi denominada potencial de Morse "corcunda". O modelo com o potencial de Morse "corcunda"(HPB) satisfaz as condições do Teorema de MacKay-Aubry para a existencia de Breathers. No equilibrio apresenta maiores amplitudes de acordo aos fatos experimentais observados no DNA [26].

## 7.1 Modelo PB com Potencial Híbrido de partes Morse, quártico e exponencial

Modificações do Potencial Morse podem levar a transição de fase. O Potencial de Morse simétrico não conduz a transição de fase [25] . Entretanto o Potencial de Morse modificado considerando uma interação não Harmonica conduz a uma transição de fase [26,27].

A equação 1.1 considerando V o Potencial Híbrido e W dado pela forma não linear :

$$W(y_i, y_{i-1}) = 0.5(1 + \rho e^{-\delta(y_i + y_{i-1})})(y_i - y_{i-1})^2 \tag{7.1}$$

descreve o Modelo do DNA de uma maneira mais real com os parâmetros K=0.01, $\rho = 3$ e $\delta = 0.8$ [27].

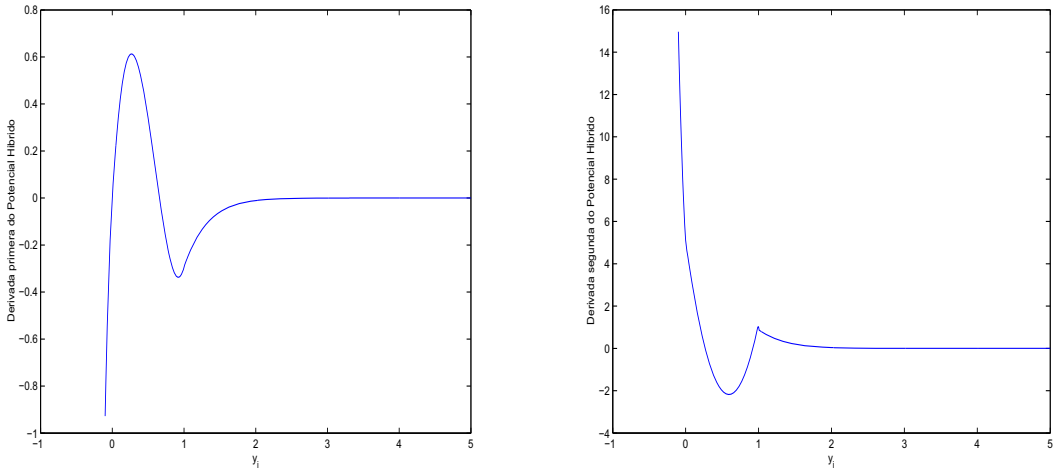
O Potencial de Morse "corcunda" é dado por :

$$V(y_i) = 0.15806(e^{-4y_i} - 1)^2, y_i < 0, \tag{7.2}$$

$$V(y_i) = 2.5289{y_i}^2 - 4.0557{y_i}^3 + 1.7040{y_i}^4, 0 < y_i < 1, \tag{7.3}$$

$$V(y_i) = 0.857 + 4(e^{-4y_i})(y_i + 1/4), y_i < 0 \tag{7.4}$$

Para obter as soluções das equações de movimento (2.4) com esse potencial e estudar sua estabilidade , determina-se primeiramente as suas duas primeiras

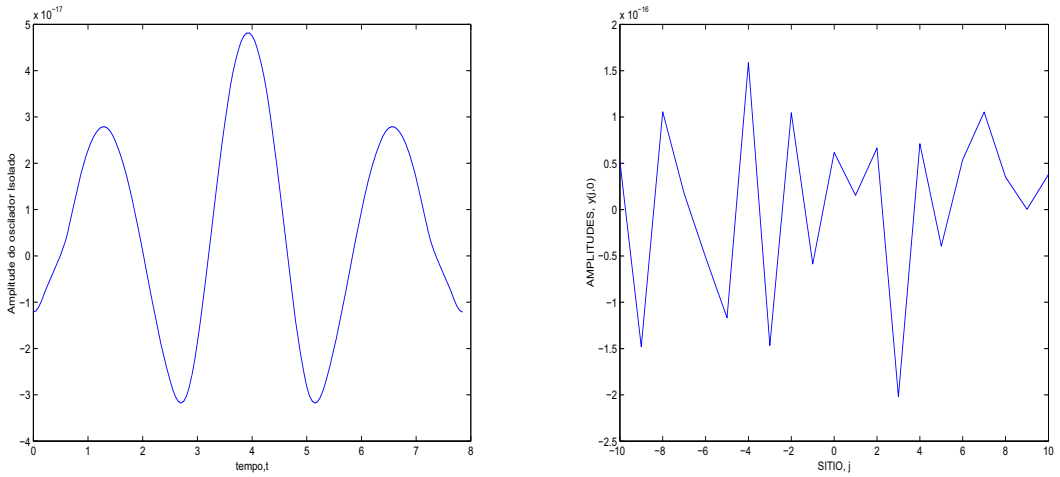



(a) (b)

Figura 7.1: Derivada primeira para o potencial de Morse Híbrido (a) e a derivada segunda do potencial Morse híbrido(b).

derivadas. O resultado obtido das derivadas do potencial são mostradas nas figuras 7.1 a e b, respectivamente. Elas evidenciam a continuidade de ambas, o que garante a aplicabilidade da metodologia descrita no capítulo 2. O primeiro passo para obter a solução é a resolução da equação do movimento para um oscilador isolado (caso do limite anticontinuum: K=0). Na figura 7.2a apresentamos a evolução para um período, do oscilador isolado com frequencia $w_b$=0.8 , isto é de período $T = 7.85$. Diferentemente da solução encontrada no modelo SPB, figura 5.1, a amplitude apresenta dois máximos relativos entre o máximo absoluto que define o período, evidenciando a existência de dois períodos no movimento do oscilador isolado. A partir do oscilador isolado na posição central, os demais osciladores em repouso e usando condições de fronteira períodicas via método de MacKay-Aubry não foram obtidas excitações localizadas no sitio central, como

mostrada na Figura 7.2b. Esta coleção de oscilações pode ser considerada como um multibreather.

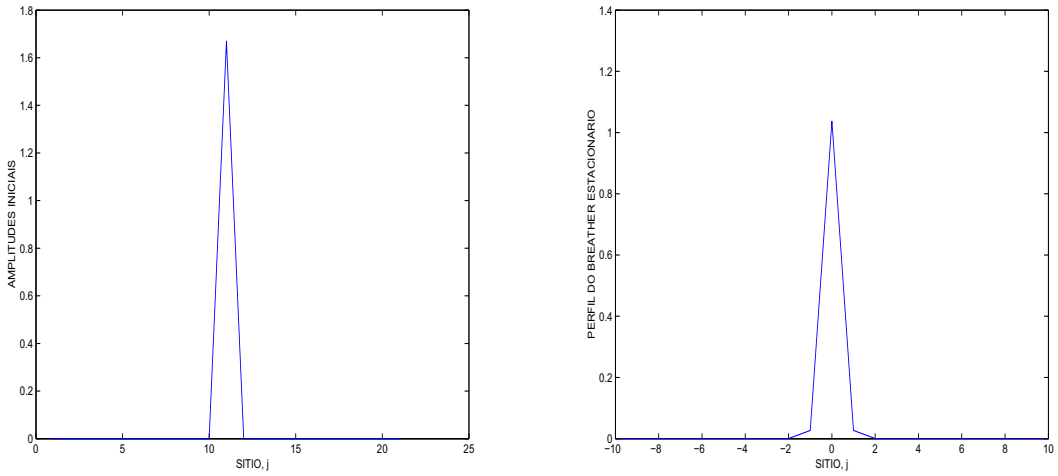



(a) (b)

Figura 7.2: Evolução do oscilador isolado do modelo HPB (a) e as amplitudes do Breather estacionário do modelo HPB com parâmetros K=0.1297 e $w_b$=0.8 (b).

## 7.2 Solução localizada no equilibrio e segunda estensão do Teorema de MacKay Aubry

Nesta seção usaremos a solução mostrada na figura 7.3a ( obtida usando a equação (2.27) para K=0.01 e os parâmetros do potencial "corcunda" segundo a formula $\tilde{y}_0 = -(1/\beta)ln(2K/\beta)E)$. Podemos usar uma variante do Teorema do limite anticontinuo ( "segunda extensão do limite anticontinuo"), isto é o método de Newton para continuar iterando a partir desta "solução no equilibrio" e obter

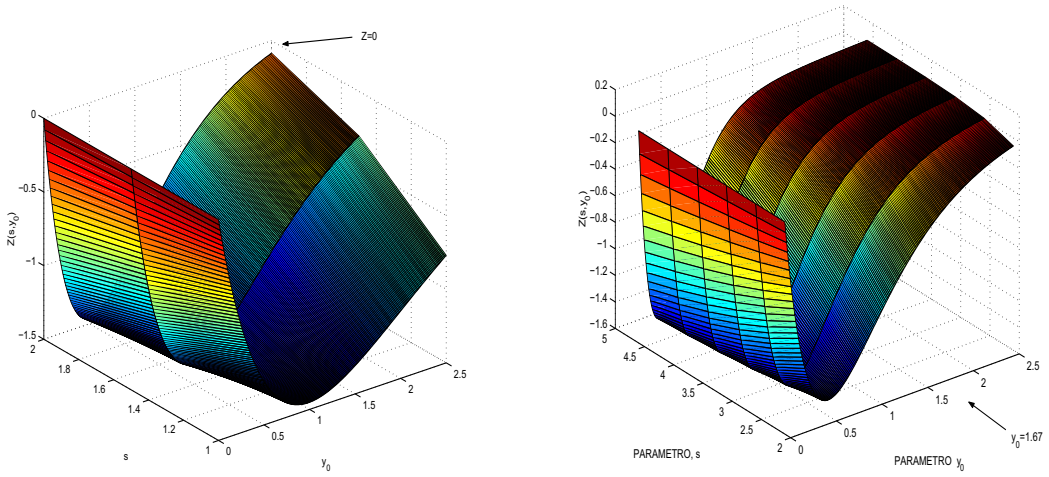



(a) (b)

Figura 7.3: Condições iniciais para obter o "new breather"(a) e as amplitudes do Breather estacionário do modelo HPB com parâmetros K=0.1297 e $w_b$=0.8 e condições de fronteira fixas(b).

a figura 7.3b para o caso de condições de fronteira com extremos fixos.

É interesante, por fim, considerar o potencial Morse "corcunda" em cada sitio como função de um parâmetro "s", para $y > 1$ ou seja : $V(y,s) = D + Eexp(-sy)(y+1/4)$. Na figura 7.4 mostramos o comportamento da função$Z(s,y_0)$ representando o lado esquerdo da equação (2.27) para $n = 0$ e $V = V(y,s)$ como indicado. Para o modelo a solução no equilibrio é dado somente para valores $s\epsilon(2,5)$




(a) (b)

Figura 7.4: Comportamento da equação do ponto de equilibrio para $s < 2$ (a) e no caso (b) para $2 < s < 5$.

## 7.3 Amplitude media para as vibrações no modelo HPB e PB com a mesma temperatura melting: T=335 K

Usando o Método de Diferenças Finitas foi obtido a evolução da amplitude media das vibrações para o Potencial de Morse com D=0.0524, a=4.0 e para o Potencial Híbrido Morse.Os resultados são mostrados na Figura 7.5.

Mais ilustrativo nos resultados é o resultado da figura 7.6 . Para isso devemos usar as formulas (3.19) e (3.22) para construir a figura 7.6 que mostra o efeito da interação não harmônica na abertura dos pares das bases para o caso do Potencial de Morse da Figura 7.5. A temperatura "melting" obtida

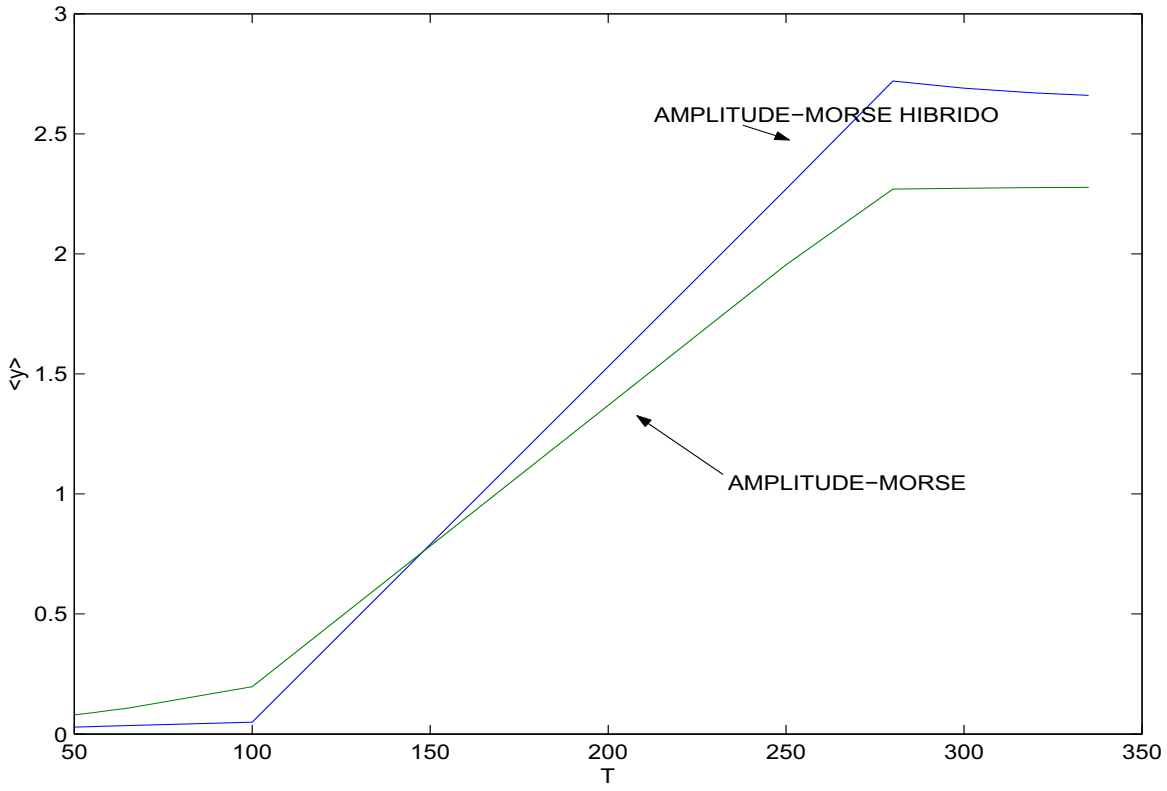



Figura 7.5: Evolução da amplitude media das vibrações considerando os dois Potenciais de Morse e de Morse Híbrido com interação não harmonica . Os parâmetros do modelo são K=0.01 eV $^{o}$A $^{-2}$, $\rho = 3$ , $\delta = 0.8$ $^{o}$A $^{-1}$

.

é de $T_c = 335K$. Também a Figura 7.6 apresenta a probabilidade em função da temperatura relativa $(T/T_c)$ de obter $< y >< 2$ Å. O valor $< y >> 2$ é considerado a condição para a quebra das pontes de hdrogênio no DNA para o potencial de Morse. O gráfico 7.6 evidencia uma variação subita.

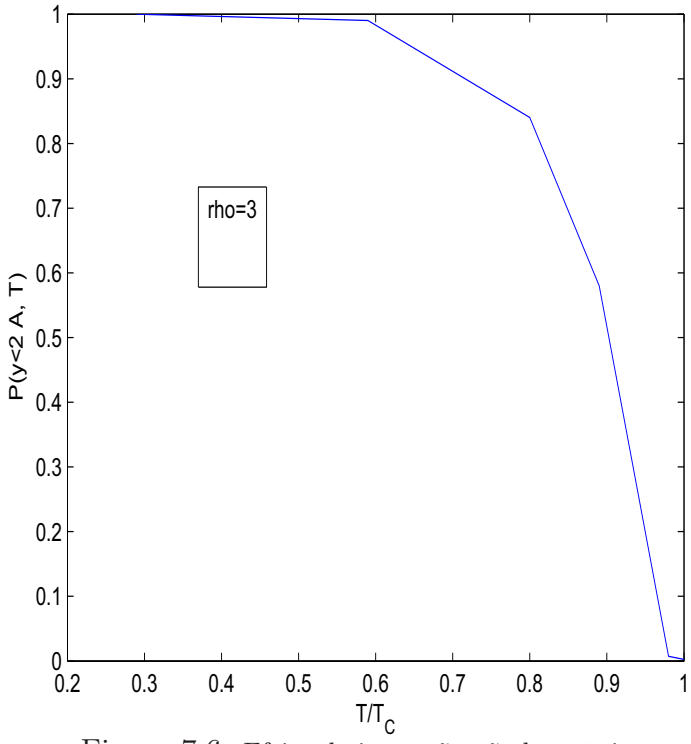



Figura 7.6: Efeito da interação não harmônica.

# Capítulo 8

# Conclusões

Neste trabalho foi analisado a existência e estabilidade de breathers em redes e o problema da transição de fase em Modelos unidimensionais do tipo Klein-Gordon com potenciais simétricos e assimétricos con interações harmônicas e não harmônicas.

Para o modelo SPB, foi encontrado um intervalo maior de estabilidade em termos do parâmetro K se comparado com o modelo PB original. Também foi determinado uma bifurcação harmônica nesse modelo. Essa bifurcação é ideal para a construção de breather móvel. Para cadeias homogêneas verificamos também a necessidade de superar a barreira de Peierls-Navarro dada por uma energia crítica para obter breather móvel. Além disso para valores debaixo desta energia o centro de energia permanece estático, isto é o breather permanece estacionário. Foi verificado a hipótese de aprisionamento para os modelos PB e SPB

não homogêneas, ou seja redes com impureza, onde o potencial foi modificado em um sitio.

Foi verificado a hipótese do aprisionamento em cadeias longas. Também nessas cadeias foi observado o fenômeno da reflexão(rebote)para a rede com impureza. Usando o teorema da contração como uma estensão o teorema de MacKay Aubry foi verificado a existência de breather novos com uma amplitude maior do que no caso do limite anticontinuo, usando o potencial corcunda e interação não harmônica .

Para os modelos discutidos com potenciais simétricos e quartico assimétrico não temos transição de fase a exeção do Potencial de Morse e do Morse corcunda. Uma possível explicação é que as amplitudes dos breathers estacionários são muito pequenas para serem aprisionados na rede. Foi determinada a amplitude media no caso de Interações não harmônicas usando equação de *Schrödinger* e resolvendo o problema de autovalores e autofunções para o operador de transferência. Foi verificada que a interação não harmônica é favoravel para obter uma "barreira entrópica" e uma transição de fase de primeira ordem dependente do parâmetro de stacking "delta".

Foi discutido que o modelo de Peyrard-Bishop com movimentos vibracionais-rotacionais para o DNA com interação anharmônica é adequado para explicar a transição de fase de primeira ordem pela existência da barreira entrópica e representar um modelo com tres graus de liberdade.

# Referências Bibliográficas


[1] Angelani, L., Ruocco, G. and Zamponi, F. Relationship between phase transition and topological changes in one-dimensional models.*Phys. Rev. E.* **v.72**,016122(1-9), (2005).

[2] Cuevas, J. Moving breathers in a DNA model with competing short-and long-range dispersive interactions .*Physica D*,**163**, 106-126, (2002).

[3] Loos, G. and James, G. Localized waves in nonlinear oscillator chains. *Chaos.* **15**, 015113(1-15), (2005).

[4] Peyrard, M. and Bishop, A.R. Statistical Mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation . *Phys. Rev. Letters.* **62**, 2755-2758,(1989)

[5] Forinash, K. et al. Local modes and localization in a multicomponent nonlinear lattice. *Phys. Rev. E.* **55**, 4740-4750, (1997).

[6] Mackay, R.S. and Aubry, S. , "Proof of existence of breathers for time-reversible for Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators ", *Nonlinearity* **7**, 1623-1643, (1994).

[7] ] Marin, J.L. and Aubry, S. , "Breathers in nonlinear lattices :numerical calculation from the anticontinuos limit ", Nonlinearity **9**, 1501-1528,(1996).

[8] Aubry, S. , "Breathers in nonlinear lattices:existence , linear stability and quantization ",*Physica* D ,**103** 201-250, (1997).

[9] Tsironis, G.P. and Aubry, S., "Slow Relaxation Induced by Breathers in nonlinear lattices", *Physical Review Letters* **77,** 5225-5228, (1996).

[10] Cheng, D.et al, Breather mobility in discrete $\phi 4$ lattices", Physical Review Letters ,Vol. 77, pp. 4776-4779, 1996

[11] Ahn,T. "Multisite oscillations in networks of weakly coupled oscillators ", Nonlinearity Vol. 11, pp. 965, 1998.

[12] Riste, T. "Phase Transitions and Relaxations in Systems with competing Energy Scales ", D. Sherrington-Kluwer Academic, Dordrecht, 2004.

[13] Bikaki, A. et al . "Energy relaxation in discrete nonlinear lattices ",Physical Review E , Vol.59, pp. 1234-1237, 1999.

[14] Theodorakopoulos,N. Phase transitions in one dimension: Are they all driven by domain walls? .*Physica D* ,Vol. 216, p. 185-190, 2006.

[15] Peyrard, M. Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA. *Nonlinearity*,Vol. 17, p. 1-33, 2004.

[16] Hoppensteadt, F.C. Analysis and Simulation of Chaotic Systems, Spring-Verlag, New York, 2000.

[17] Alvarez , A et al. , Dark Breathers in Klein Gordon lattices :existence. Band analysis of their stability properties, *New J. Phys.* ,Vol. 4, pp. 72.1-72.19, 2002.

[18] Aubry, S. and Cretegny, T. , Mobility and Reactivity of Discrete Breathers ,*Physica D* ,Vol. 119, pp. 34-46, 1998

[19] Gao, Y.; Prohofsky, E. W. A modified self-consistent phonon theory of hydrogen bond melting. *J. Chem. Phys.*, v.80, pp.2242, 1984.

[20] Russel, F.; Eilbeck, J. C. Evidence for moving breathers in a layered crystal insulator at 300K . *E. P. L.*., v.78, p.10004, 2006.

[21] Flach, S.; Gorbach, A. Discrete Breathers-Advances in theory and applications . *Physics Reports.*, v.467, pp. 1-116, 2008.

[22] Promotor Scan, http://www.bimas.cit.nih.gov/molbio/proscan/

[23] Genscan, http://www.genes.mit.edu/GENSCAN.html .

[24] Watson, J.; Crick, F. A structure for deoxyribose nucleic acid. *Nature.*, v.171, pp. 737-38, 1953.

[25] Cortez, H.; Drigo Filho and Ruggiero, J.R., Breather Stability in one Dimensional Lattices with a Symmetric Morse Potential ,*TEMA Tend. Mat.Apl.Comp.* ,Vol. 9, pp. 205-212, 2008

[26] Cuesta-Lopez, S. and Erramy, J., Falo, F. and Peyrard, M., Can we Model DNA at mesoscale? .*Journal of Biological Physics* ,Vol. 31, pp. 273-301, 2005.

[27] Peyrard, M., Modeling DNA at mesoscale: a challenge for nonlinear science?.*Nonlinearity 6* ,Vol. 21, pp. 91-100, 2008.

[28] Roche, S., Electronic transport and termopower in aperiodic DNA sequences.*Modern Physics Letter B* ,Vol. 18, pp. 847-871, 2004.

[29] Couvreur, P.and Vauthier,C., Nanotechnology: Intelligent Design to treat Complex Disease.*Pharmaceutical Research*,Vol. 23, pp. 1417-1450, 2006.

[30] Jain, T.,Morales, M., Iron Oxide nanoparticles for Sustained Delivery of Anticancer Agents.*Molecular Pharmaceutics* ,Vol. 12, pp. 194-205, 2005.

[31] Bae A.H., S., Supramolecular design of a pophyrin-[60]fullerene photocurrent generation system on a DNA scaffold fabricated by a conjugated polmer film .*Macromolecules* ,Vol. 38, pp. 1609-1615, 2005.

[32] Marky, L., Calorimetric unfolding of Intramolecular Triplexes.*J. Physics Chem. B* ,Vol. 109, pp. 1877-18183, 2005.

[33] Weber, G., Thermal equivalence of DNA duplexes without calculation of melting temperature.*Nature Physics* ,Vol. 2, pp. 55-59, 2006.

[34] Hisakado, M. Breather trapping mechanism in piecewise homogeneous DNA, *Physics Letters A*, Vol. 227, pp 87-93, 1997.

[35] Heeger, A.J. Polymers,*Rev. Modern. Phys.*, Vol. 60,781,1998.

[36] Roth, S. One dimensional Metals,VCH, New York, 1995.

[37] Ponno, A., Ruggiero, J., E. Drigo, J. De Luca, Energy localization in the $\phi$ 4 oscillator chain", Physical Review E ,Vol. 73, pp. 056609, 2006

[38] Zhang, Y., Zheng, W.,Liu, J., Chen, Y. , Theory of DNA melting based on the Peyrard-Bishop model, Physical Review E ,Vol. 56, pp. 7100-7114, 1997

[39] De los Santos, F., Hammal, A., Muñoz, M., Simplified Langevin approach to the Peyrard -Bishop-Dauxois model of DNA , Physical Review E ,Vol. 77, pp. 032901, 2008

[40] Theodorakopoulos, N., Dauxois, T., Peyard, M. , Physical Rev. Letters 85,Vol. 6, 2000

[41] Dauxois, T., Thermodynamic Instabilities, Journal of Statistical Physical ,Vol. 107, pp. 870-891, 2002

[42] , Theodorakopoulos, N., Dauxois, T., Peyard, Order of phase transition in models of DNA thermal denaturation, Physical Review letters ,Vol. 85, pp. 6-9, 2000

[43] Silva, R., Drigo Filho,E.,and Ruggiero, J.R. A model coupling Vibrational and Rotational Motion for the DNA molecule *J. Biol.Phys.*. **v.34**, (511-519), (2008).

# Apêndice A

# Método de Marin-Newton para o cálculo do breather estacionário da equação de movimento

A fórmula obtida em (2.14)

$$Z = X - ([JF](X))^{-1}.F(X) \tag{A.1}$$

representa o método de Newton existente no Pacote MATLAB. A semente ou vetor de partida é dado por X=zeros(km+1,1); X(1)=0.3, X(2)=0.4. o valor de Z é obtido usando o pacote MATLAB usando o valor da função F e do seu Jacobiano no vetor X:

$$Z = newton(F(X), [JF](X), X) \tag{A.2}$$

# Apêndice B

# Método de Runge-Kutta para o cálculo do Breather móvel e o centro de energia

O programa seguinte requer que seja armazenado num arquivo *.tex os parâmetros, a configuração e velocidade inicial do breather.

module param implicit none save real(8)::wb,ee,D,b,L,a,pi,s,gamma,xs integer::m end module param

program vacante Cálculo de breathers móviles

use param implicit none

real(8)::T,h,t1,t2,xe integer::i,j,p,q,nt,pasper,interv real(8),dimension(:),allocatable::x,v,E

pi=dacos(-1.d0)

```
open(1,file="girita.txt",status="old")

read(1,*) wb,ee,L,a,D,b,sm,nt,interv,allocate(x(m),v(m),E(m),read(1,*)(x(i),i=1,m)
read(1,*)(v(i),i=1,m)

T=2.0d0*pi/wb h=T/interv

open(2,file="joisita.txt",status="unknown")

call centro(x,v,xe,Ewrite(2,74)t1,xe,x,v,Edo p=1,nt do q=1,pasper t1=dfloat(p-
1)*Tt2=dfloat(p-1)*T+dfloat(q)*T/pasper call rk4(x,v,h) call centro(x,v,xe,E,Ec)
write(2,74)t2,xe,x,v,E,Ec end do end do

close(2)

74 format(1x,f20.12,<4*m+2>(1x,f20.16))

end Subrutinas subroutine rk4(x,v,h) use param implicit none

real(8) h,h2,h3,h6 real(8),dimension(m)::x,v,x0,v0,k1x,k1v,k2x,k2v,k3x,k3v,k4x,k4v
condições inicias( PROBLEMA DE CAUCHY) x0=x v0=v

h2=h/2.d0 h3=h/3.d0 h6=h/6.d0

df(x0,v0,k1x,k1v) df(x0+k1x*h2,v0+k1v*h2,k2x,k2v) df(x0+k2x*h2,v0+k2v*h2,k3x,k3v)
df(x0+k3x*h,v0+h*k3v,k4x,k4v)

x=x0+k1x*h6+k2x*h3+k3x*h3+k4x*h6 v=v0+k1v*h6+k2v*h3+k3v*h3+k4v*h6

return

end

use param real(8),dimension(m)::q,p,dq,dp integer::i

dq=p dp=-dexp(-q)+ dexp(-2*q)

! Potencial de Interacción do i=2,m-1 dp(i)=dp(i)-ee*(2.d0*q(i)-q(i-1)-q(i+1))
```

```
end do

    i=1 dp(i)=dp(i)-ee*(2.d0*q(i)-q(m)-q(i+1))

    i=m dp(i)=dp(i)-ee*(2.d0*q(i)-q(i-1)-q(1))

    return end

    !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! subroutine centro(x,v,xe,E,Ec)

    use param integer::i real(8)::xe,a1,a2 real(8),dimension(m)::x,v,E,Ec,mm

    do i=1,m mm(i)=dfloat(i) end do

    call energia(x,v,E,Ec) a1=0.d0 a2=0.d0 do i=1,m a1=a1+E(i)*i a2=a2+E(i)
end do

    xe=a1/a2

    return end

    !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! subroutine energia(x,v,E,Ec)

    use param

    integer::i real(8),dimension(m)::x,v,E,Ec

    ! Velocidad y potencial on-site Ec=.5d0*v**2 E=Ec+.5d0*(dexp(-x)-1)**2

    ! Interacción NN do i=2,m-1 E(i)=E(i)+.25d0*ee*((x(i)-x(i-1))**2+ (x(i+1)-
x(i))**2) end do

    i=1 E(i)=E(i)+ .25d0*ee*((x(i)-x(m))**2+ (x(i+1)-x(i))**2)

    i=m E(i)=E(i)+ .25d0*ee*((x(i)-x(i-1))**2+ (x(1)-x(i))**2)

    return end
```

# Apêndice C

# Integração-Simpson para autofunções do Operador de Transferência e Método de Diferenças Finitas

### C.0.1 Integração-Simpson para autofunções do Operador de Transferência

Programa para obter autofunções do operador de Transferência:

$x = -5.25 : 0.75 : 5.25$; $y = x$; $[X, Y] = meshgrid(x, y)$;

$D = 0.05254$; $a = 4$; $k = 0.01$; $rho = 3$;

T=75; beta=1/(Kb*T); $Z = h * (exp(-beta. * ((k/2) * (1 + rho * exp(-alfa *$

$(X+Y))).*(X-Y)^2+0.5*D*(exp(-a.*X)-1).^2+0.5*D*(exp(-a.*Y)-1).^2)))$

$ZZ = exp(-beta.*((k/2)*(1+rho*exp(-alfa*(X+Y))).*(X-Y)^2+0.5*$

$D*(exp(-a.*X)-1).^2+0.5*D*(exp(-a.*Y)-1).^2));\ KH = zeros(15);$

$KH = (2/3)*Z;\ KH(:,1) = 0.5*KH(:,1);\ KH(:,15) = 0.5*KH(:,15);$

$surf(X,Y,KH);\ surf(X,Y,ZZ)$

eig(KH); $[V,D] = eig(KH);\ EIGENSTATES = V$

### C.0.2 Método de Diferenças Finitas para obter a Função de Onda no estado Fundamental e amplitude media

t=-5:0.1:5;

DEFINIÇÃO DAS CONSTANTES k=0.06; Kb=0.00008617; T=100;

beta=1/(Kb*T); $CS = k*(beta)^2$;

DEFINIÇÃO da Função Potencial $y = CS*(-0.5*t.^2+0.25*t.^4+0.04*t.^3)$;

DEFINIÇÃO DO PASSO NO INTERVALO $(-5,5)$ h=0.01;

m=1;

s=-4.9:0.1:4.9; DEFININDO MATRIZ $CCP$ CCP=zeros(99,99); for i=2:98;

$CCP(i,i) = y(i+1)+1/(m*h.^2);\ CCP(i,i+1) = -1/(2*m*h.^2);\ CCP(i-1,i) =$

$-1/(2*m*h.^2);\ CCP(i,i-1) = -1/(2*m*h.^2);\ CCP(i+1,i) = -1/(2*m*h.^2);$

end $CCP(1,1) = y(2)+1/(m*h.^2);\ CCP(99,99) = y(100)+1/(m*h.^2);$

[V,D]=eig($CCP$);

$AREA1 = sum((V(:,1).^2))*h;$

V1 REPRESENTA O ESTADO FUNDAMENTAL $V1$=V(:,1)/($AREA1.^{0.5}$);

$MEDIA$=$sum(s * (V1.^2)) * h$

No caso do potencial assimétrico o valor médio da amplitude é 0.5110 Para obter o gráfico da função de onda no estado fundamental usamos o comando: plot(s,V1)

# Apêndice D

# Bioinformatica para obter localizações típicas da Seqüencia de nucleotídeos correspondente à Insulina

Seqüencia de 251 nucleotídeos da região promotora da insulina:

T G A G C A G G G A C A G G T C T G G C C A C C G G G C C C C
T G G T T A A G A C T C T A A T G A C C C G C T G G T C C T G A G
G A A G A G G T G C T G A C G A C C A A G G A G A T C T T C C C A
C A G A C C C A G C A C C A G G G A A A T G G T C C G G A A A T T
G C A G C C T C A G C C C C C C A G C C A T C T G C C G A C C C C C

C C A C C C C G C C C T A A T G G G C C A G G C G G C A G G G G T

T G A C A G G T A G G G G A G A T G G G C T C T G A G A C T A T A

A A G C C A G C G G G G G C C C A G C A G C

### D.0.3 Resultado do software SCAN

Observamos a localização do sinal C/EBP 1966 que corresponde á posição 36 a partir da posição 1931.

---

– Proscan: Version 1.7

Processed Sequence: 4044 Base Pairs

Promoter region predicted on forward strand in 1931 to 2181

Promoter Score: 81.22 (Promoter Cutoff = 53.000000)

TATA found at 2155, Est.TSS = 2185 Significant Signals:

Name TFD #Strand *Location* Weight

$C/EBP$ S00266+ 1966 1.229000

$CREB$ S00489− 2009 1.147000

CREB S00144− 2011 2.549000

AP-2 S01936+2072 1.108000

---

# Apêndice E

# Soluções localizadas no equilibrio para Potenciais Híbridos e Potencial de Morse

O Potencial híbrido composto de quártico e Morse é definido pela expressão:

$V(u) = A(exp(-su) - 1)^2,\ u < 0,\ V(u) = au^2 + bu^3 + cu^4,\ 0 < u < 1,$ $V(u) = D + Eexp(-su)(u + 1/s),\ u > 1$, dependente dos parâmetros D, E , s.

Em nosso caso desejamos que o Potencial Híbrido seja uma função continua e com derivada de segunda ordem continua. Os parâmetros a, b, c e A são determinados de acordo esta condição. Em particular se consideramos D=0.0857, E=4 e s=4 e então os valores das outras constantes serão: a=2.5289, b=-4.0557, c=1.7040 e A=0.15806.

### E.0.4 Programa em Matlab para determinar a solução no equilibrio

Programa que determina a solução no equilibrio por método gráfico

t=0:0.001:10;

hk=0.01; hrho=3; hdelta=0.8; hbeta=4; halfa=4; E=4.0; D=0.0857; YC=(-1/hbeta)*log((2*hk)/(E*hbeta)) Dmorse=0.0524;

$yh = 2 * hk. * t - E. * (exp(-hbeta. * t)) * (hbeta). * t + 2 * hk * exp(-hdelta. * t). * t + (hk) * (1 - (hdelta) * (hrho) * exp(-hdelta. * t)). * (t.^2)$;

EQUAÇÃO PARA SOLUÇÃO NO EQUILIBRIO NO CASO DO POTENCIAL DE MORSE $yhmorse = 2 * hk. * t + 2 * Dmorse * halfa. * (-exp(-2 * halfa. * t) + exp(-halfa. * t)) + 2 * hk * exp(-hdelta. * t). * t + (hk) * (1 - (hdelta) * (hrho) * exp(-hdelta. * t)). * (t.^2)$;

plot(t,yh,t,yha, t,yhmorse);

plot(t,yh);