



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

CONFINAMIENTO CILÍNDRICO DE POLÍMEROS SEMIFLEXIBLES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
YAIR AUGUSTO GUTIÉRREZ FOSADO

DIRECTOR DE TESIS: DR. JEMAL GUVEN
MIEMBRO DEL COMITÉ TUTORAL: DR. MARCELO SALGADO
MIEMBRO DEL COMITÉ TUTORAL: DR. JOSÉ ANTONIO SAN-
TIAGO

pcf

posgrado en ciencias físicas
u n a m

CIUDAD UNIVERSITARIA, MÉXICO D.F.

NOVIEMBRE, 2012



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

*Dedicado al apoyo inquebrantable,
al afecto incondicional,
a la confianza depositada,
la atención constante,
a la complejidad que implica
y el sentimiento que produce
... A mi familia, por supuesto.*

Agradecimientos

La tesis que tiene en sus manos no habría sido posible sin las aportaciones de numerosas personas, entre ellas mi tutor, el Dr. Jemal Janer Guven Seery, quien me inició en la investigación de un tema tan interesante como lo es, el análisis de sistemas biológicos desde el punto de vista geométrico. Doy las gracias a Alan Miranda Menchaca y a Pablo Agustín Vázquez Montejo, por su colaboración y la paciencia que demostraron al orientarme en problemas relacionados con mi tesis.

No puedo pasar por alto a mis sinodales, los doctores: José Antonio Santiago García, Hernando Quevedo Cubillos, Rolando C. Castillo Caballero y Patricia Guadarrama Acosta, cada uno de los cuales dedicó generosamente tiempo y atención para mejorar esta tesis. Con sus lecturas críticas de las primeras versiones, y sus sugerencias constructivas, influyeron de manera positiva en el contenido de este trabajo.

Quiero mencionar que esta investigación fue realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN114510, Geometría de las Membranas Biológicas. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.

Finalmente, mi mayor deuda es con la gente que hasta la culminación de este trabajo ha estado conmigo, mis padres: Benjamín Gutiérrez Escamilla y Flor de María Fosado Quiroz. De igual manera, estoy particularmente agradecido con mi familia y amigos; por la comprensión, paciencia y el ánimo recibidos.

Yair Augusto Gutiérrez Fosado.
México, DF; noviembre de 2012.

Resumen

La forma adoptada, la capacidad para resistir o transmitir fuerzas, entre otras propiedades de los biopolímeros, tales como el ADN, los filamentos de actina y los microtúbulos; dependen en gran medida de la competencia entre la energía de doblamiento del material y su entropía. Las fluctuaciones térmicas de los polímeros, pueden ser caracterizadas usando el concepto de longitud de persistencia, L_p . En el régimen semiflexible, para el cual la longitud del sistema, L , es aproximadamente igual que L_p , los únicos grados de libertad relevantes, son asociados con la geometría del polímero: es posible describir su comportamiento, mediante un Hamiltoniano construido con elementos de carácter puramente geométrico. Ejemplo de esto son los polímeros semiflexibles, modelados como una elástica de Euler, caracterizada por su energía de doblamiento, que es descrita completamente, por un Hamiltoniano invariante bajo reparametrizaciones, dependiente de la curvatura de Frenet-Serret.

En este trabajo de tesis, la geometría diferencial es utilizada como herramienta fundamental, para desarrollar un marco teórico, que resulta útil en la caracterización de los estados de equilibrio, de polímeros semiflexibles confinados por superficies. Esto se logra empleando el principio variacional, donde multiplicadores de Lagrange adecuados, que involucran la restricción del confinamiento y las definiciones de la base adaptada a la curva, son introducidos. Se establecen las ecuaciones de Euler-Lagrange correspondientes y una expresión para la fuerza confinante, en términos de la geometría local de la superficie y de la curva.

Los estados base asociados a cada superficie confinante son identificados, la estabilidad de las configuraciones encontradas es determinada, y sus propiedades físicas, tales como la energía y fuerza transmitida a la superficie, son descritas para los casos de confinamiento esférico y confinamiento cilíndrico. Estos resultados dependen sensiblemente de la longitud total de la elástica. Finalmente, se analizan las diferencias principales, encontradas entre ambos casos.

Summary

The adopted form, the ability to resist or transmit forces, among other properties of biopolymers such as DNA, actin filaments and microtubules; depend largely on the competition between the bending energy of the material and its entropy. Thermal fluctuations of the polymers may be characterized using the concept of persistence length, L_p . In the semiflexible regime, for which the length of the system, L , is approximately equal to L_p , the only relevant degrees of freedom are associated with the geometry of the polymer: it is possible to describe its behavior through a Hamiltonian, constructed with purely geometric elements. Semiflexible polymers are modeled as an Euler elastic, characterized by its bending energy, which is fully described by a Hamiltonian invariant under reparameterization, which depends on Frenet-Serret curvature.

In this thesis, differential geometry is used as a fundamental tool to develop a theoretical framework that is useful in characterizing the equilibrium states of semiflexible polymers confined by surfaces. This is accomplished using the variational principle, where appropriate Lagrange multipliers, which involve the constriction of confinement, and the definitions of the framework adapted to the curve, are introduced. Both, the Euler-Lagrange equations and an expression for the confining force, are established in terms of the local geometry of the surface and the curve.

The ground states associated with each confining surface are identified, the stability of the configurations is determined, and its physical properties such as energy and force transmitted to the surface are described for two cases, spherical confinement and cylindrical confinement. These results depend largely on the total length of the elastic. Finally, we analyze the main differences found between this two cases.

Índice

Agradecimientos	v
Resumen	vii
1. Introducción	1
1.1. Antecedentes	2
1.2. Justificación	5
1.3. Objetivos	5
1.4. Métodos	5
2. Geometría de polímeros confinados a superficies, usando variables auxiliares	7
2.1. Introducción	7
2.2. Elástica de Euler en una superficie	9
2.3. Ecuaciones de Euler-Lagrange en términos de las curvaturas sobre la superficie	13
2.4. Confinamiento y la pérdida de invariancia translacional y rotacional	14
2.5. Conclusiones del capítulo	16
3. Confinamiento esférico	19
3.1. Introducción	19
3.2. Elástica de Euler confinada por una esfera	21
3.3. Confinamiento débil por esferas	26
3.3.1. Energía	28
3.3.2. Fuerza transmitida	29
3.4. Confinamiento esférico fuerte	30
3.5. Estado base $n = 2, p = 1$	31
3.6. Conclusiones del capítulo	32
4. Confinamiento cilíndrico	33
4.1. Introducción	33

4.2. Confinamiento vertical	34
4.2.1. Condiciones de frontera	35
4.2.2. Reconstrucción de la curva a partir de la curvatura	36
4.2.3. Solución de la cuadratura	38
4.2.4. Análisis de las elásticas	41
4.2.5. Trayectoria en el espacio de parámetros	42
4.2.6. Energía	43
4.3. Elástica de Euler confinada por un cilindro	44
4.3.1. Confinamiento cilíndrico débil	47
4.3.2. Confinamiento cilíndrico fuerte	54
4.4. Energía del lazo	57
4.5. Fuerzas transmitidas	59
4.6. Conclusiones del capítulo	61
5. Conclusiones	63
A. Geometría diferencial de superficies bidimensionales	65
A.1. Introducción	65
A.2. Parametrización de una superficie	65
A.3. Primera forma fundamental	66
A.4. Derivada Covariante	67
A.5. Segunda forma fundamental	69
A.5.1. Curvatura	69
A.5.2. Tensor de curvatura extrínseca	70
A.6. Curvaturas principales	72
A.7. Ecuaciones de Gauss y Weingarten	74
A.8. Condiciones de integrabilidad	75
A.9. Teorema Egregio de Gauss	78
B. Dos marcos de referencia importantes	79
B.1. Marco de Frenet-Serret	79
B.2. Marco de Darboux	80
C. Superficies con simetría axial	83
D. Solución de la cuadratura para confinamiento cilíndrico	85

Índice de figuras

3.1.	Estado con una simetría binaria, para valores de R , en el intervalo $[1, 3]$, dentro de una esfera unitaria: (a) y (b) muestran oscilaciones crecientes alrededor del ecuador; (c) muestra oscilaciones que desarrollan traslapes; (d) indica la primera autointersección realizada en los dos polos; (e) muestra la autointersección de la triple órbita de la esfera; (f) presenta la órbita que colapsa cubriendo tres veces el ecuador. La fuerza local confinante normalizada, λ , es codificada por colores en estas figuras. Gracias a Jemal Guven y Pablo Vazquez, por proporcionar estas figuras.	20
3.2.	Potencial cuártico en el confinamiento esférico.	23
4.1.	Potencial cuártico en el confinamiento cilíndrico.	35
4.2.	Elástica planar de Euler, confinada a yacer de manera vertical, en un cilindro de menor radio.	36
4.3.	Elásticas de Euler de diferentes longitudes, confinadas verticalmente dentro de un cilindro.	41
4.4.	Trayectoria en el espacio de parámetros, de los estados de equilibrio.	42
4.5.	Energía total de la elástica confinada verticalmente dentro del cilindro, como función de su longitud.	44
4.6.	Eigenvalores Λ_m para el confinamiento cilíndrico débil, como función del número de modo m , para $n = 1$ (círculos), $n = 2$ (cuadrados), y $n = 3$ (diamantes). Las líneas de unión, no tienen significado físico para valores de m no enteros; son usados para facilitar la visualización de la gráfica.	53
4.7.	Trayectoria en el espacio de parámetros $(c(L), m(L))$, para los estados con simetrías $n = 1$ y $n = 2$	55
4.8.	Estado con simetría $n = 1$, para valores de L , en el intervalo $[2\pi, 5.5\pi]$, dentro de un cilindro unitario: (a) muestra la configuración próxima al círculo geodésico; (b) la separación de la elástica con respecto al plano transversal al eje del cilindro; (c) la primera elástica con $\alpha = \pi/2$	56

4.9. Estado con simetría $n = 2$, para valores de L , en el intervalo $[2\pi, 4.5\pi]$, dentro de un cilindro unitario: (a) muestra la configuración próxima al círculo geodésico; (b) los cuatro puntos con $\alpha = 0$ se muestran claramente; (c) la primera elástica para la cual α adquiere un valor de $\pi/2$	57
4.10. Energía total de los estados con simetría $n = 2$, $n = 1$ y confinamiento vertical.	58
4.11. Fuerza como función de la longitud de arco, para diferentes estados: a) y b), representan el estado con simetría $n = 1$, para $L = 2.5\pi$ y $L = 5.43$ respectivamente; mientras que c) y d) muestran el estado con $n = 2$, para $L = 2.5\pi$ y $L = 4.51\pi$. Nótese que la amplitud de la fuerza, aumenta con la longitud de la elástica, en ambos casos.	60
4.12. Fuerza total de los estados con simetría $n = 2$, $n = 1$ y confinamiento vertical.	61
A.1. Círculo osculante	70
A.2. Curva C , sobre la superficie Σ	71
A.3. Curvaturas principales	73

Capítulo 1

Introducción

RESUMEN: Esta sección, pretende establecer una relación entre algunos problemas biológicos de interés, y su descripción mediante el uso de herramientas proporcionadas por la geometría diferencial; así como dar un panorama general, del contenido de este trabajo de tesis.

La física siempre ha servido como telón de fondo para otras ciencias. De hecho, muchos de los grandes temas en física, tales como el flujo de energía e información, son relevantes en contextos tan diversos como lo son: la electrónica, la medicina, la biología, entre otros. Esta última (la biología), por su riqueza, ha proporcionado una fuente constante de problemas sumamente interesantes, en los cuales pensar. Es en los fenómenos que ocurren en los organismos vivos, donde se pueden apreciar elaboraciones tan complejas y ricas, que son dignas de estudio. Ejemplo de esto son las membranas biológicas, que constituyen una de las componentes más importantes de la vida, ya que separan el contenido celular del ambiente externo, y por lo tanto, establecen la frontera espacial de la vida, separando la materia animada de la inanimada [1]. Otro tema fascinante y concerniente a la biología, que resulta desafiante para físicos, bioquímicos e incluso matemáticos, es la presencia de motivos muy regulares, tales como las hélices alfa o las hojas beta, como estados de equilibrio de biopolímeros y proteínas.

Debido al gran número de grados de libertad, presentes en los sistemas mencionados, su descripción microscópica resulta ser bastante complicada. Por ejemplo, una molécula de ADN posee una arquitectura muy elaborada, se encuentra constituida por un gran número de compuestos químicos, llamados nucleótidos. Cada nucleótido, está formado por tres unidades: un compuesto nitrogenado conocido como base (Adenina, Guanina, Timina y Citocina), un monosacárido (ribosa o desoxirribosa) y un grupo fosfato. Debido a la afinidad química entre las bases, los nucleótidos se unen entre sí, mediante enlaces químicos débiles, llamados puentes de hidrógeno, formando lo que

se conoce como pares de bases, donde los nucleótidos que contienen adenina se acoplan siempre con los que contienen timina, y los que contienen citosina con los que contienen guanina. Además, el ADN es una macromolécula dinámica, ya que cada uno de sus enlaces químicos se flexiona constantemente y participa en interacciones con otras moléculas. Por todo esto, una descripción detallada del comportamiento de este sistema, resultaría demasiado compleja, ya que involucraría considerar tres aspectos relevantes desde el punto de vista físico: elasticidad, entropía y electrostática. En este trabajo, nos enfocaremos en particular, en modelos de las propiedades elásticas de estos sistemas.

1.1. Antecedentes

Modelo del polímero

Para realizar una descripción sencilla de la mecánica del ADN, resulta útil establecer, cuales son las escalas de longitud de interés en el modelo. El ADN, es un polímero aproximadamente cilíndrico, de 2 nm de diámetro, constituido por un grupo de placas, aproximadamente planas (los pares de bases), cada una de 0.34 nm de grosor. Por otra parte, la longitud total de una molécula de ADN, por ejemplo, en uno de nuestros cromosomas, puede llegar a ser de 2 cm , es decir, diez millones de veces la longitud de su diámetro [1]. Por lo tanto, podemos esperar que a escalas mesoscópicas¹, el comportamiento de este sistema, no dependa en gran medida de los detalles de su estructura. Esta idea, refleja una línea de pensamiento presente en toda la física: la naturaleza, se encuentra estructurada de manera jerárquica por escalas de longitud y cada nivel sucesivo en estas escalas, olvida la mayor parte de los detalles presentes en los niveles inferiores. Históricamente, las ideas que hemos tenido acerca de la estructura de la materia, han partido de la concepción de moléculas, átomos, protones, neutrones y electrones, hasta llegar más allá de estos, a los quarks y leptones, y aún en la actualidad, continuamos con la búsqueda de niveles de estructura más pequeños. Si fuera necesario comprender cada nivel de estructura antes de avanzar, la odisea de la ciencia nunca hubiera comenzado [1].

¹En física y química, la escala mesoscópica se refiere a la escala de longitud, en la que se puede discutir razonablemente las propiedades de un material o fenómeno, sin tener que discutir el comportamiento de los átomos individuales, esto es, alrededor de 200 nm .

Otra manera de expresar el planteamiento del párrafo anterior, es decir que:

Al estudiar un sistema con un gran número de componentes idénticos, que actúan localmente, es posible realizar una simplificación, cuando se considera una escala mucho mayor que el tamaño de sus constituyentes. En este caso, el comportamiento del sistema, es descrito por unos pocos grados efectivos de libertad.

Esto nos permite, una vez establecida la escala de interés del modelo, pensar en el ADN como una varilla elástica, caracterizada por tres magnitudes físicas: el alargamiento (u), que mide el aumento de longitud que tiene un material cuando se le somete a un esfuerzo; la curvatura (κ), que mide el cambio del vector tangente a lo largo de la varilla; y la torsión (τ), relativa a la cantidad de fuerza necesaria para cambiar el estado de rotación, con respecto al eje de la varilla, de los elementos que la componen. En el contexto del ADN, podemos interpretar el alargamiento, como una medida de la diferencia de longitud, entre el estado natural y el estado que surge tras aplicar un esfuerzo, a un fragmento corto formado por N pares de bases. La curvatura se puede pensar, como una medida del inclinamiento del plano en el que se halla un par de bases, con respecto al plano del par de bases anterior. Finalmente, para interpretar la torsión, imaginemos que el estado natural de la doble hélice de ADN en disolución, completa una espiral cada 10 pares de bases, entonces, la medida de la rotación de un par de bases con respecto a su predecesor, menos el valor de este ángulo en la situación relajada, es a lo que denominaremos torsión.

Así, la energía elástica necesaria para producir una deformación, en una sección infinitesimal de longitud ds , de la varilla, está dada por:

$$dH = \frac{1}{2} K_B T [L_p \kappa^2 + B u^2 + C \tau^2 + 2D u \tau] ds, \quad (1.1)$$

donde K_B y T son la constante de Boltzmann y la temperatura del sistema respectivamente; mientras que L_p , B , C y D , representan los parámetros conocidos como: longitud de persistencia, rigidez de alargamiento, longitud de persistencia de torsión y acoplamiento torsión-alargamiento, respectivamente. Podemos observar, que aún despreciando las contribuciones de los aspectos de entropía y electrostática, el modelo elástico del ADN por si solo, es bastante complicado. Sin embargo, es posible realizar una simplificación al modelo, considerando el límite en el que la longitud total del polímero, L , es mucho menor que su longitud de persistencia ², L_p , [2]. En este caso, el comportamiento del sistema es dominado por la energía de doblamiento, por

²El parámetro de los materiales que determina la energía de doblamiento, es llamado

lo que es posible despreciar la variable de torsión ($C = D = 0$) y considerar al ADN como un material inextensible ($B = 0$). Sorprendentemente, estas simplificaciones han coincidido con los resultados encontrados experimentalmente [3; 4]. De hecho, se encontró (por comparación con simulaciones y experimentos), que esta simplificación sigue siendo precisa en el régimen de polímero semiflexible, es decir, cuando se satisface $L \simeq L_p$, [2].

Hemos logrado acotar el modelo del ADN y simplificarlo al de una varilla elástica inextensible, cuya energía de doblamiento está dada por el primer término al lado derecho de la igualdad, en la Ec.(1.1). Resulta interesante que esta expresión, es la que caracteriza a la curva clásica conocida como elástica de Euler, y es la solución a un problema variacional propuesto por Daniel Bernoulli a Leonhard Euler en 1744, [8]. La idealización matemática de este problema, es la de minimizar la integral del cuadrado de la curvatura de Frenet-Serret (κ), para curvas de longitud fija (L), que satisfacen condiciones de frontera específicas. Debido a que la energía de estos sistemas puede ser representada como un funcional de entidades geométricas, como la curvatura, es posible aplicar la geometría diferencial como herramienta fundamental en el análisis y entendimiento de los estados de equilibrio y formas adoptadas por algunos sistemas biológicos, desde el punto de vista geométrico.

Confinamiento

Diversos problemas de interés en biofísica involucran el confinamiento o la adhesión de polímeros semiflexibles a membranas biológicas, por lo que en la actualidad, estos sistemas han recibido bastante atención. Existen trabajos que abarcan, desde simulaciones Monte Carlo del confinamiento esférico de un polímero [9], hasta modelos estadísticos de polímeros [10]; sin embargo, pocos estudios han empleado un punto de vista propiamente geométrico del problema.

Debido a esta aparente naturalidad geométrica del sistema, es que en este trabajo se utiliza el formalismo desarrollado en la Ref.[11], en el cual se encuentran las ecuaciones de Euler-Lagrange que describen la evolución de los estados de equilibrio del sistema, para el caso en que un polímero semiflexible se encuentra confinado a yacer sobre una superficie esférica. Estas mismas ecuaciones fueron halladas con anterioridad en [12]. También se encuentra una expresión de la fuerza confinante, en términos de la geometría local, tanto de la superficie, como de la curva.

rigidez de doblamiento y se denota por k . La competencia entre la energía de doblamiento y las fluctuaciones térmicas, determina una longitud característica, conocida como longitud de persistencia, $L_p = \frac{k}{k_B T}$. Valores experimentales de la longitud de persistencia, de filamentos biológicos unidimensionales, varían entre: 50 nm para la doble cadena de ADN [5], $10 \text{ }\mu\text{m}$ para filamentos de actina [6; 7] y en el rango de mm para microtúbulos [6].

1.2. Justificación

Debido a limitaciones técnicas, tanto experimentales como numéricas, el estudio detallado de las configuraciones de equilibrio, adoptadas en el caso de confinamiento de una elástica de Euler, por una superficie axialmente simétrica, ha sido complicado. La dificultad reside en el hecho de que, al explorar distintas geometrías confinantes, se encuentra que la pérdida de invariancia rotacional y translacional, está relacionada con soluciones no analíticas de las ecuaciones que describen al sistema. Es por esto que en el presente trabajo se consideran únicamente los casos de confinamiento esférico y confinamiento cilíndrico. Cada uno de los cuales exhibe un sin fin de configuraciones posibles. El estudio de cada una de estas configuraciones, es considerado relevante, para el entendimiento de algunos procesos celulares, como lo son: el empacamiento del ADN dentro de los cápsides virales [13] o las deformaciones elásticas de los microtúbulos.

1.3. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo de tesis consiste en identificar, tanto la fuerza producida sobre la superficie, debida al confinamiento del polímero, como la energía de cada una de las configuraciones de equilibrio mecánico, asociadas a las geometrías tratadas: esferas y cilindros. De igual manera, se pretende determinar la estabilidad y los estados base, de cada sistema.

1.4. Métodos

Con este propósito, el segundo capítulo se enfoca en desarrollar un marco teórico para la descripción geométrica de biopolímeros confinados a superficies, enfatizando el uso del método de variables auxiliares. En el tercer capítulo se presenta la aplicación al caso esférico, del marco variacional desarrollado. Este caso fue tratado con detalle en la Ref.[11]. Cabe mencionar, que a diferencia del confinamiento por esferas, en el cual se encuentran soluciones analíticas a las Ecuaciones de Euler-Lagrange, en el caso de confinamiento cilíndrico, presentado en el cuarto capítulo, sólo existen soluciones numéricas del problema. Es por esto que antes de resolver las ecuaciones que describen al sistema completo, un enfoque perturbativo para anillos pequeños es empleado. Finalmente, se expone una discusión de los resultados obtenidos.

Capítulo 2

Geometría de polímeros confinados a superficies, usando variables auxiliares

RESUMEN: Consideremos una curva elástica, descrita por un Hamiltoniano dependiente de la curvatura κ y posiblemente de la torsión τ de Frenet-Serret. Estamos interesados en determinar la respuesta del Hamiltoniano, a una deformación de las funciones de encajamiento de la curva: $\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{Y} + \delta\mathbf{Y}$. Estas deformaciones afectan de manera directa a κ , τ y a los vectores de la base del marco de Frenet-Serret $\{\mathbf{T}, \mathbf{N}, \mathbf{B}\}$ adaptado a la curva. La aproximación adoptada, consiste en tratar a todas estas variables, como variables auxiliares independientes. Para hacer esto, las relaciones entre las curvaturas cuando se aplica el principio variacional, deben ser preservadas.

2.1. Introducción

Un polímero es un compuesto molecular que se distingue por tener una masa molar grande, puede alcanzar millones de UMAs¹, y por lo tanto es una macromolécula. Además, esta formado por unidades repetidas de monómeros, agrupados en cadenas largas mediante enlaces covalentes,². Una clase especial de macromoléculas son los biopolímeros, ya que sus

¹La Unidad de Masa Atómica, UMA, es una unidad de masa empleada en física y química, especialmente en la medida de masas atómicas y moleculares. Equivale a la doceava parte de la masa de un átomo de carbono-12.

²Un enlace covalente entre dos o más átomos, se produce cuando estos comparten electrones. El número de enlaces covalentes que puede formar un átomo está determinado por su número de electrones de valencia.

propiedades definen la estructura, función y procesos de los sistemas biológicos a nivel molecular. En particular, estamos interesados en procesos a escala mesoscópica, en los que las superficies pueden constreñir la configuración del biopolímero. Esto es relevante, por ejemplo, en el empacamiento del ADN dentro de los cápsides virales [10; 14], sin embargo, este tipo de sistemas resultan muy complejos, pues se deben considerar aspectos como la elasticidad del polímero, la entropía y en algunos casos, el comportamiento eléctrico del sistema [15].

Un modelo biológico es una representación simplificada de uno más complejo, con la finalidad de incluir en el modelo, sólo los componentes necesarios para explicar una o varias variables que se desean estudiar, la desventaja es que no representa completamente la realidad. El aspecto del problema que nos interesa es ¿Cómo se pueden caracterizar los estados de equilibrio mecánico, es decir, las configuraciones que minimizan la energía elástica tridimensional, de un polímero confinado a yacer en una superficie fija?, esta pregunta exhibe un nivel notable de complejidad, que consideramos, arroja información útil en la escala de interés.

Debido a sus propiedades, el polímero semiflexible libre (sin constricción de confinamiento), puede ser modelado como una elástica de Euler, esto es, como una curva Γ en el espacio tridimensional, cuya energía de doblamiento se encuentra determinada por la geometría del sistema:

$$H = \frac{1}{2} \int ds \kappa^2, \quad (2.1)$$

donde s representa la longitud de arco y κ la curvatura de Frenet-Serret. Supondremos que Γ es una curva cerrada, ya que estas minimizan la energía de doblamiento y su comportamiento resulta interesante. Este tipo de curvas fueron estudiadas en profundidad por Euler. Una revisión histórica puede ser encontrada en la referencia [16]; una aproximación más reciente del problema es presentada en [17; 18] y revisada en la referencia [19]. Un marco alternativo, que trata el mismo problema de confinamiento, fue desarrollado en la referencia [20].

Si es que no existen fuerzas externas actuando sobre el polímero, la configuración de equilibrio que este adoptará, será circular, pero en general, las fuerzas producidas por el confinamiento, obligarán a la curva a adoptar diferentes formas. La membrana que confina al polímero, es modelada como una superficie bidimensional Σ , suficientemente diferenciable y rígida como para no ser deformada por el polímero confinado. Con estos elementos, se puede desarrollar un marco para estudiar las configuraciones de equilibrio del sistema, implementando la constricción de confinamiento del polímero mediante

multiplicadores de Lagrange y derivando las ecuaciones de Euler-Lagrange correspondientes, como se hace en [21]. Finalmente, se explotan las simetrías del sistema, para así encontrar las primeras integrales de movimiento.

2.2. Elástica de Euler en una superficie

Consideremos una curva $\Gamma : s \rightarrow \mathbf{Y}(s)$ parametrizada por longitud de arco, sujeta a la restricción de yacer sobre una superficie Σ . Esta superficie es descrita de forma paramétrica, por el mapeo $\Sigma : (u^1, u^2) \rightarrow \mathbf{X}(u^1, u^2)$. Por lo tanto, la curva confinada puede ser descrita como una curva sobre la superficie $\Gamma_\Sigma : s \rightarrow (U^1(s), U^2(s))$.

Supongamos que el marco de referencia de Frenet-Serret (ver Apéndice B.1) adaptado a la curva se encuentra matemáticamente bien definido. El Hamiltoniano invariante bajo reparametrizaciones, asociado a este sistema y, dado por la Ec.(1.1), contiene términos de curvatura y torsión, por lo que puede ser representado por un funcional dependiente de las curvaturas de Frenet-Serret, a lo largo de la curva:

$$H[\mathbf{Y}] = \int H(\kappa, \tau, \kappa', \tau', \dots) ds, \quad (2.2)$$

donde ' representa derivada con respecto a longitud de arco y, κ y τ , son la curvatura y la torsión respectivamente. Este tipo de Hamiltonianos son importantes en la descripción estática y cinemática de curvas, y la manera en la que los estudiamos, es explotando el teorema de Noether, para así identificar las condiciones de equilibrio como leyes de conservación, asociadas con la invariancia Euclidiana de la energía.

La aproximación adoptada involucra tratar al vector tangente a la curva, $\mathbf{T} = \mathbf{Y}'$, como variable independiente. Una manera de asegurar esto, es imponer un conjunto de restricciones en el principio variacional, tal y como se hace en la Ref.[21]. La sutileza en este procedimiento, yace en preservar las relaciones entre las curvaturas cuando se aplica el principio variacional, ya que las ecuaciones de Frenet-Serret (B.1), deben ser preservadas bajo deformaciones de las variables auxiliares involucradas.

Consideremos el funcional:

$$\begin{aligned} H_c[\mathbf{Y}, \mathbf{T}, \Lambda, \mathbf{F}, u^a] &= \frac{1}{2} \int \mathbf{T}'^2 ds + \int [\mathbf{F} \cdot (\mathbf{T} - \mathbf{Y}') - \frac{1}{2} \Lambda (\mathbf{T}^2 - 1)] ds \\ &+ \int \boldsymbol{\lambda}(s) \cdot [\mathbf{Y}(s) - \mathbf{X}(u^a(s))] ds, \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde en la primera integral, hemos reescrito la Ec.(2.1), utilizando la relación de Frenet-Serret, $\kappa^2 = \mathbf{T}'^2$. La segunda integral incluye las constricciones que ayudarán a tratar a \mathbf{T} , como variable independiente: Tres multiplicadores de Lagrange, (las tres componentes del vector \mathbf{F}), son necesarios para fijar las componentes del vector tangente \mathbf{T} , dado por la primer derivada respecto a s , de las funciones de encajamiento \mathbf{Y} , las cuales representan el vector de posición de un punto sobre la curva, para cada valor del parámetro s , y el multiplicador Λ asegura que la curva está parametrizada por longitud de arco, ya que en este caso, \mathbf{T} es un vector unitario. Finalmente, la tercera integral impone la condición de que Γ yace sobre Σ .

Tal y como se aplica el principio variacional en mecánica clásica, para encontrar las ecuaciones de Euler-Lagrange, es posible obtener la variación en H_c , debido a una deformación en \mathbf{Y} , esto es:

$$\delta_{\mathbf{Y}}H_c = \int ds (\mathbf{F}' + \boldsymbol{\lambda}) \cdot \delta\mathbf{Y} - \int ds (\mathbf{F} \cdot \delta\mathbf{Y})', \quad (2.4)$$

donde el segundo término del lado derecho de la igualdad, es un término de frontera. De esta manera, podemos observar que en equilibrio, es decir, cuando se satisface $\delta H_c = 0$, se cumple que:

$$\mathbf{F}' = -\boldsymbol{\lambda}. \quad (2.5)$$

Cabe mencionar que para una curva sin la restricción de yacer sobre una superficie fija, el último término de la Ec.(2.3) es cero, y por lo tanto, $\mathbf{F}' = 0$, es decir, \mathbf{F} se conserva. Así, cuando incluimos la restricción, sabemos que la tensión en el lazo no debe ser conservada y por lo tanto, el multiplicador de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}$, es identificado como la fuerza externa, asociada con la restricción.

Encontremos las ecuaciones que satisface H_c , para deformaciones de \mathbf{T} :

$$\delta_{\mathbf{T}}H_c = \int ds (\mathbf{F} - \mathbf{T}'' - \Lambda\mathbf{T}) \cdot \delta\mathbf{T} + \int ds (\mathbf{T}' \cdot \delta\mathbf{T})', \quad (2.6)$$

donde la segunda integral es un término de frontera. Así, en equilibrio mecánico se satisface $\mathbf{F} = \mathbf{T}'' + \Lambda\mathbf{T}$, que al utilizar las relaciones de Frenet-Serret (B.1), puede ser reescrito como:

$$\mathbf{F} = (\Lambda - \kappa^2)\mathbf{T} + \kappa'\mathbf{N} + \kappa\tau\mathbf{B}. \quad (2.7)$$

Es importante notar, que debido a que los términos en la variación del Hamiltoniano respecto a \mathbf{T} , no involucran al multiplicador $\boldsymbol{\lambda}$ asociado con la restricción, entonces, el vector \mathbf{F} , está dado tanto para la elástica libre como para la confinada, por la Ec.(2.7).

La variación con respecto a $u^a(s)$ de H_c , es:

$$\begin{aligned}\delta_u H_c &= \int ds \boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial u^a} \delta u^a \\ &= \int ds \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{e}_a \delta u^a,\end{aligned}\quad (2.8)$$

donde $\mathbf{e}_a = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial u^a}$, para $a = 1, 2$, representa los dos vectores tangentes adaptados a la superficie, (ver Apéndice A.2). En equilibrio se cumple $\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{e}_a = 0$, por lo que se concluye que la fuerza sobre la curva asociada con la constricción, siempre actúa de manera ortogonal a la superficie. De esta manera, el multiplicador puede ser representado de la forma $\boldsymbol{\lambda} = \lambda \mathbf{n}$, donde \mathbf{n} es el vector normal a la superficie. Utilizando este resultado en la Ec.(2.5), obtenemos:

$$\mathbf{F}' = -\lambda \mathbf{n}. \quad (2.9)$$

De la ecuación anterior, es posible establecer una condición de integrabilidad para curvas cerradas:

$$\oint ds \lambda \mathbf{n} = 0, \quad (2.10)$$

esta identidad se mantiene, aunque el contacto con la superficie, sea o no completo.

Derivando la Ec.(2.7) respecto a s y utilizando las relaciones (B.1), un cálculo directo da como resultado:

$$\mathbf{F}' = (\Lambda' - 3\kappa\kappa')\mathbf{T} + [\kappa'' + \kappa(\Lambda - \tau^2 - \kappa^2)]\mathbf{N} + (2\kappa'\tau + \kappa\tau')\mathbf{B}. \quad (2.11)$$

De la Ec.(2.9), se sigue que la proyección tangencial de \mathbf{F}' debe ser cero, ($\mathbf{F}' \cdot \mathbf{T} = 0$). Este hecho es utilizado en la ecuación anterior, para determinar el multiplicador de Lagrange, Λ , asociado con la parametrización por longitud de arco:

$$\Lambda = \frac{3}{2}\kappa^2 - c, \quad (2.12)$$

donde c es una constante de integración, asociada a la constricción de longitud fija de la elástica³. Este resultado permite expresar a \mathbf{F} , en el marco de

³Se pudo usar el funcional $\mathcal{H}_c = H_c + c \left(\int ds - L \right)$, en vez de usar únicamente H_c , donde c actúa como el multiplicador de Lagrange que fija la longitud y se habría llegado al mismo resultado.

Frenet-Serret, como:

$$\mathbf{F} = \left(\frac{\kappa^2}{2} - c \right) \mathbf{T} + \kappa' \mathbf{N} + \kappa \tau \mathbf{B}. \quad (2.13)$$

De igual manera, \mathbf{F}' dado en la Ec.(2.11), es separado en sus componentes normales:

$$\mathbf{F}' = \varepsilon_N \mathbf{N} + \varepsilon_B \mathbf{B}, \quad (2.14)$$

donde las ecuaciones de Euler-Lagrange, correspondientes a los modos de oscilación de la curva, están dadas por:

$$\varepsilon_N = \mathbf{F}' \cdot \mathbf{N} = \kappa'' + \kappa \left(\frac{\kappa^2}{2} - \tau^2 - c \right), \quad (2.15a)$$

$$\varepsilon_B = \mathbf{F}' \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{\kappa} (\kappa^2 \tau)'. \quad (2.15b)$$

La ecuación de Euler-Lagrange tangencial $\varepsilon_T = \mathbf{F}' \cdot \mathbf{T}$ es cero, sin importar si la curva se encuentra constreñida o no, a yacer sobre la superficie. Esto es consecuencia de que los únicos grados de libertad son geométricos.

Debido a que la fuerza confinante actúa en dirección normal a la superficie, resulta conveniente escribir las ecuaciones de Euler-Lagrange en un marco de referencia que considere al vector normal a la superficie \mathbf{n} , en vez de los vectores normal \mathbf{N} y binormal \mathbf{B} de la curva. Este marco es conocido como *Marco de Darboux*, y está formado por el trihedro $\{\mathbf{T}, \mathbf{n}, \mathbf{l} = \mathbf{T} \times \mathbf{n}\}$. Propiedades relevantes de este marco, se encuentran resumidas en el (Apéndice B.2).

El marco de Frenet-Serret se encuentra relacionado con el marco de Darboux, a través de una rotación alrededor del vector tangente \mathbf{T} , un ángulo ω , y de acuerdo a la Ec.(B.6), los vectores normales se relacionan de la siguiente manera:

$$\mathbf{N} = \text{Cos } \omega \mathbf{n} + \text{Sen } \omega \mathbf{l}; \quad \mathbf{B} = -\text{Sen } \omega \mathbf{n} + \text{Cos } \omega \mathbf{l}. \quad (2.16)$$

Usando estas expresiones, es posible reescribir \mathbf{F}' de la Ec.(2.14), en una forma adaptada a la superficie:

$$\mathbf{F}' = (\text{Cos } \omega \varepsilon_N - \text{Sen } \omega \varepsilon_B) \mathbf{n} + (\text{Sen } \omega \varepsilon_N + \text{Cos } \omega \varepsilon_B) \mathbf{l}. \quad (2.17)$$

La proyección de la Ec.(2.9) sobre el vector \mathbf{l} , provee la ecuación de Euler-Lagrange:

$$\varepsilon_l = \text{Sen } \omega \varepsilon_N + \text{Cos } \omega \varepsilon_B = 0, \quad (2.18)$$

y la proyección correspondiente sobre \mathbf{n} , determina a λ :

$$\lambda = -\text{Cos } \omega \varepsilon_{\mathbf{N}} + \text{Sen } \omega \varepsilon_{\mathbf{B}}. \quad (2.19)$$

Podemos concluir, que tanto la ecuación de Euler-Lagrange (2.18), como la fuerza confinante (2.19), se encuentran determinadas por la geometría local del sistema.

Notemos que las ecuaciones de Euler-Lagrange, para el problema de la elástica de Euler sin restricción, para el cual $\mathbf{F}' = 0$, están dadas por $\varepsilon_{\mathbf{N}} = 0$ y $\varepsilon_{\mathbf{B}} = 0$. Estas ecuaciones son reemplazadas para el caso con restricción, por una sola ecuación, $\varepsilon_{\mathbf{I}} = 0$. Esta discrepancia aparente en el número de ecuaciones, refleja el hecho que una curva espacial posee dos modos independientes de deformación, mientras que una curva superficial, sólo posee uno. En general, la integrabilidad del par original de ecuaciones, se pierde cuando la restricción está presente.

2.3. Ecuaciones de Euler-Lagrange en términos de las curvaturas sobre la superficie

La ecuación de Euler-Lagrange (2.18), puede ser expresada en términos de las curvaturas sobre la superficie, utilizando las identidades (B.7) a (B.11):

$$\varepsilon_{\mathbf{I}} = \kappa_g'' + \kappa_g \left(\frac{\kappa_g^2 + \kappa_n^2}{2} - \tau_g^2 - c \right) - \frac{(\kappa_n^2 \tau_g)'}{\kappa_n} = 0. \quad (2.20)$$

Esta ecuación, coincide con la encontrada en la referencia [12] y fue reproducida en [11]. Es importante notar que en esta, se involucran ambas curvaturas al igual que la torsión geodésica, por lo que en general, la curva no será una geodésica; incluso si $\kappa_g = 0$, la curva no minimizará la energía de doblamiento, a menos que también cumpla algunos de los tres siguientes casos:

- $\kappa_n^2 \tau_g$ es constante.
- Se trate de una curva asintótica, es decir, una curva con curvatura normal nula en todas partes.
- Se trate de una curva principal de la superficie, es decir, que satisfaga $\tau_g = 0$ en todas partes.

Es poco probable que una geodésica satisfaga estas condiciones.

La magnitud de la fuerza confinante, es expresada en términos de las curvaturas sobre la superficie como:

$$-\lambda = \kappa_n'' + \kappa_n \left(\frac{\kappa_g^2 + \kappa_n^2}{2} - \tau_g^2 - c \right) + \frac{(\kappa_g^2 \tau_g)'}{\kappa_g}, \quad (2.21)$$

esta expresión fue derivada en [11]. Se puede apreciar que, $-\lambda$, tiene una expresión idéntica a la Ecuación de Euler-Lagrange ε_1 , al intercambiar κ_g con κ_n , (salvo un signo en el último término). Esto es consecuencia de la descomposición simétrica de la curvatura de Frenet-Serret, en sus partes geodésica y normal, ($\kappa \mathbf{N} = \kappa_n \mathbf{n} + \kappa_g \mathbf{l}$).

Además, es posible expresar al vector \mathbf{F} de la Ec.(2.13), con respecto al marco de Darboux, como:

$$\mathbf{F} = \left(\frac{\kappa_g^2 + \kappa_n^2}{2} - c \right) \mathbf{T} + (\kappa_n' + \kappa_g \tau_g) \mathbf{n} + (\kappa_g' - \kappa_n \tau_g) \mathbf{l}, \quad (2.22)$$

2.4. Confinamiento y la pérdida de invariancia translacional y rotacional

Como es bien sabido, el teorema de Noether establece un método para aprovechar las simetrías del sistema físico, (representado por el Hamiltoniano), y de esta manera encontrar cantidades conservadas asociadas a estas simetrías. En particular, estamos interesados en saber cuáles son estas cantidades, cuando el Hamiltoniano es invariante bajo translaciones y cuando es invariante bajo rotaciones.

Los términos de la carga de Noether, Q , para el Hamiltoniano deformado δH_c , satisfacen la ecuación $\delta H_c = \int Q' ds$. Es decir, salvo las ecuaciones de Euler-Lagrange, las cuales se anulan en equilibrio, Q contiene los términos de frontera de las variaciones del Hamiltoniano, dadas en las ecuaciones (2.4) y (2.6):

$$Q = -\mathbf{F} \cdot \delta \mathbf{Y} + \mathbf{T}' \cdot \delta \mathbf{T}. \quad (2.23)$$

Para el caso de una translación infinitesimal de la curva, se cumple:

$$\mathbf{Y} \longrightarrow \mathbf{Y} + \delta \mathbf{Y} = \mathbf{Y} + \epsilon \mathbf{a}, \quad (2.24)$$

con $\epsilon \mathbf{a}$, correspondiente a un desplazamiento infinitesimal en la dirección del vector arbitrario y constante, \mathbf{a} . Por lo tanto, \mathbf{T} no cambia bajo translaciones:

2.4. Confinamiento y la pérdida de invariancia translacional y rotacional 15

$$\mathbf{T} \longrightarrow (\mathbf{Y} + \delta\mathbf{Y})' = \mathbf{Y}' = \mathbf{T} \implies \delta\mathbf{T} = 0. \quad (2.25)$$

De manera análoga, puede ser demostrado que, $\delta\mathbf{N} = \delta\mathbf{B} = 0$. Es decir, que bajo translaciones, la base de Frenet-Serret no cambia. Así, en el equilibrio se cumple:

$$\delta H_c = - \int (\mathbf{F} \cdot \epsilon \mathbf{a})' ds = -\epsilon \mathbf{a} \cdot \int \mathbf{F}' ds = 0 \implies \mathbf{F}' = 0. \quad (2.26)$$

Por lo que se concluye, que la conservación de \mathbf{F} , es consecuencia de la invariancia translacional del Hamiltoniano. Esto se cumple, para el caso de la curva sin restricción. Sin embargo, para el caso que estudiamos, el vector \mathbf{F} satisface la Ec.(2.9), y por ende, se pierde esta invariancia.

Cuando la curva sufre una rotación infinitesimal, se observa que:

$$\mathbf{Y} \longrightarrow \mathbf{Y} + \delta\mathbf{Y} = \mathbf{Y} + \epsilon\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{Y}. \quad (2.27)$$

Es directo demostrar, que para este caso, los vectores base del marco de Frenet-Serret, transforman como:

$$\delta\mathbf{T} = \epsilon\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{T}, \quad \delta\mathbf{N} = \epsilon\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{N}, \quad \delta\mathbf{B} = \epsilon\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{B}. \quad (2.28)$$

Mientras que la carga de Noether, está dada por:

$$\begin{aligned} Q &= -\mathbf{F} \cdot (\epsilon\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{Y}) + \mathbf{T}' \cdot (\epsilon\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{T}) \\ &= \epsilon\boldsymbol{\omega} \cdot (-\mathbf{Y} \times \mathbf{F} + \kappa\mathbf{T} \times \mathbf{N}) \\ &= \epsilon\boldsymbol{\omega} \cdot (-\mathbf{Y} \times \mathbf{F} + \kappa\mathbf{B}). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Por lo tanto, la variación del Hamiltoniano es:

$$\delta H_c = -\epsilon\boldsymbol{\omega} \cdot \int \mathbf{M}' ds, \quad (2.30)$$

con \mathbf{M} , la torca por unidad de longitud, con respecto al origen, actuando sobre un segmento de curva y que consiste de dos partes:

$$\mathbf{M} = (\mathbf{Y} \times \mathbf{F}) + \mathbf{S}, \quad (2.31)$$

el primer término, es la torca debido a la fuerza \mathbf{F} , y el segundo, es identificado con el momento de doblamiento, originado por segundas derivadas en la energía de doblamiento:

$$\begin{aligned}\mathbf{S} &= -\kappa\mathbf{B} \\ &= \kappa_g\mathbf{n} - \kappa_n\mathbf{l}.\end{aligned}\tag{2.32}$$

Es posible demostrar, que para una curva libre de constricción, \mathbf{M} es conservado, esto se logra, al expresar \mathbf{M}' , en la forma explícitamente invariante bajo translaciones, $\mathbf{T} \times \mathbf{F} + \mathbf{S}'$ [22], como se hace a continuación:

$$\begin{aligned}\mathbf{M}' &= \mathbf{T} \times \mathbf{F} + \mathbf{Y} \times \mathbf{F}' + \mathbf{S}' \\ &= \mathbf{T} \times \left[\left(\frac{\kappa^2}{2} - c \right) \mathbf{T} + \kappa' \mathbf{N} + \kappa \tau \mathbf{B} \right] - (\kappa \mathbf{B})' \\ &= (\kappa' \mathbf{B} - \kappa \tau \mathbf{N}) - \kappa' \mathbf{B} - \kappa \mathbf{B}' \\ &= 0,\end{aligned}\tag{2.33}$$

donde se aplica, el hecho que para una curva libre, \mathbf{F} también es conservado, y la expresión (2.13) es usada.

Sin embargo, en general no se cumple $\mathbf{M}' = 0$, por lo que, para el caso con constricción, se tiene:

$$\begin{aligned}\mathbf{M}' &= \mathbf{Y} \times \mathbf{F}' \\ &= \varepsilon_1(\mathbf{Y} \times \mathbf{l}) - \lambda(\mathbf{Y} \times \mathbf{n}),\end{aligned}\tag{2.34}$$

donde la expresión (2.17), de \mathbf{F}' , fue utilizada. Así, para un equilibrio confinado con $\varepsilon_1 = 0$, el vector \mathbf{M} no está conservado, teniendo como fuente, el momento de la fuerza asociado con la constricción. Un caso especial de geometría confinante, es una esfera centrada en el origen, de manera que, \mathbf{Y} siempre se encuentra dirigido a lo largo del vector normal \mathbf{n} , y por lo tanto, \mathbf{M} sería conservado. Por otra parte, si la geometría confinante posee simetría con respecto a un eje, (digamos el eje $\hat{\mathbf{z}}$), entonces, el Hamiltoniano será invariante, con respecto a rotaciones alrededor del eje de simetría. En este caso, la cantidad conservada, será la proyección correspondiente de \mathbf{M} , es decir, $M_3 = \mathbf{M} \cdot \hat{\mathbf{z}}$.

2.5. Conclusiones del capítulo

Para curvas sin constricción, la invariancia Euclidiana de la energía, permite integrar las ecuaciones de Euler-Lagrange. Mientras que, las ecuaciones correspondientes para el caso con constricción de confinamiento, debido a la

pérdida de la invariancia rotacional y translacional de la energía, en general no serán integrables.

No obstante, en varios casos de interés, la geometría confinante respeta algún subgrupo del grupo Euclidiano. En particular, se analizarán en las secciones subsecuentes, dos casos importantes: la esfera, para la cual \mathbf{M} si es conservado y por ende respeta el grupo de rotaciones, y el cilindro, que respeta los subgrupos de rotación alrededor, y translación a lo largo, de su eje de simetría. En ambos casos, se apreciará como estas invariancias residuales, permiten expresar las ecuaciones de Euler-Lagrange, como una cuadratura.

Capítulo 3

Confinamiento esférico

RESUMEN: El marco variacional desarrollado en el capítulo anterior, es utilizado para examinar los estados de equilibrio, de un polímero semiflexible, que tiene la restricción de yacer sobre una superficie fija. Como una aplicación, se presenta el confinamiento de un polímero cerrado, de longitud $2\pi R$, dentro de una cavidad esférica de radio menor, R_0 . Esta sección presenta un resumen de la Ref.[11].

3.1. Introducción

La conservación de la torca, asociada con la invariancia rotacional residual de una esfera, permite que la ecuación de Euler-Lagrange sea expresada como una cuadratura, en términos de la curvatura geodésica, κ_g , que puede ser integrada de manera directa. Por lo tanto, resulta posible reconstruir la curva, a partir de la curvatura encontrada. En particular, este marco es utilizado, para examinar el confinamiento de un polímero semiflexible, cerrado, de longitud fija $2\pi R$, dentro de una esfera de radio $R_0 \leq R$.

En contraste con un polímero abierto, el cual adoptará una forma circular alrededor de una geodésica sobre la esfera, cuando su longitud excede $2\pi R_0$; la cerradura del lazo, será incompatible con una geodésica, a no ser que, R sea un múltiplo entero de R_0 . Así mismo, se mostrará, que existe un número infinito de estados ligados, completamente diferentes, etiquetados por un par de enteros, $n = 2, 3, 4, \dots$ y $p = 1, 2, 3, \dots$, que representan: el número de periodos del ángulo polar y el ángulo azimutal, en un circuito del lazo respectivamente. Es decir, n caracteriza la simetría dihedral, con respecto al eje de simetría, y p , el número de revoluciones alrededor de este mismo eje.

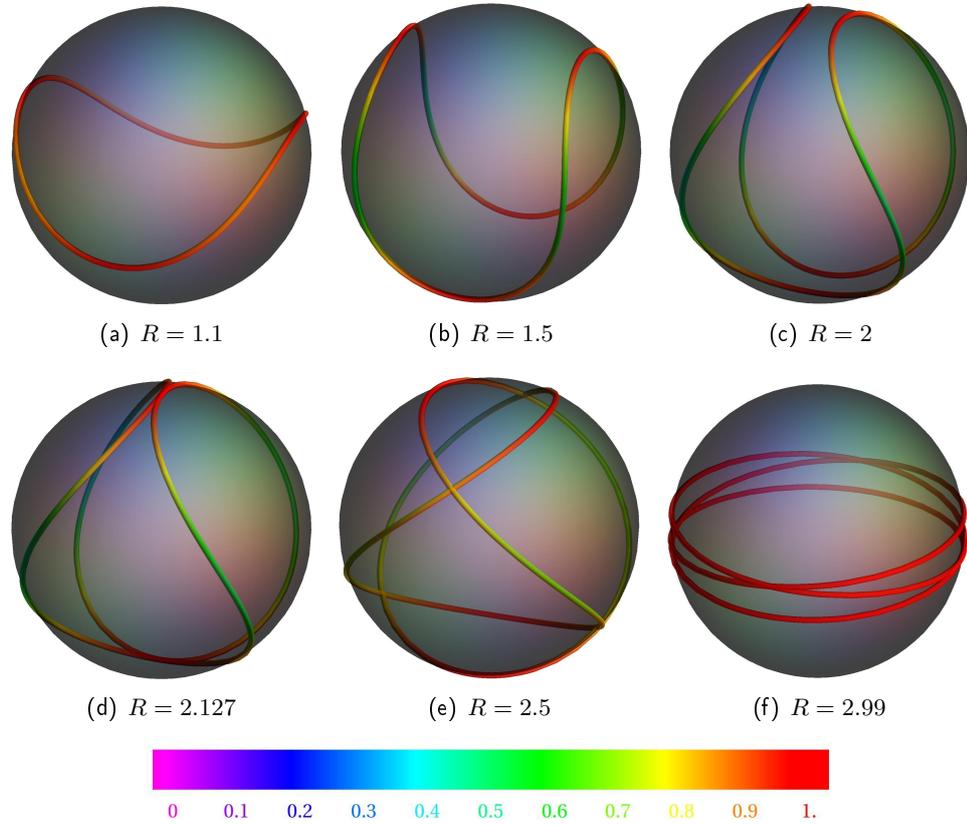


Figura 3.1: Estado con una simetría binaria, para valores de R , en el intervalo $[1, 3]$, dentro de una esfera unitaria: (a) y (b) muestran oscilaciones crecientes alrededor del ecuador; (c) muestra oscilaciones que desarrollan traslapes; (d) indica la primera autointersección realizada en los dos polos; (e) muestra la autointersección de la triple órbita de la esfera; (f) presenta la órbita que colapsa cubriendo tres veces el ecuador. La fuerza local confinante normalizada, λ , es codificada por colores en estas figuras. Gracias a Jemal Guven y Pablo Vazquez, por proporcionar estas figuras.

Lazos con longitud infinitesimalmente mayor a $2\pi R_0$, oscilan simétricamente alrededor de un círculo geodésico, con $p = 1$ y una simetría de orden n , para $n = 2, 3, \dots$. La simetría de orden dos, resulta ser el estado base, que además es estable. Para valores finitos de R , las simetrías de orden mayor son inestables, ya que decaen hacia simetrías de orden dos. En la Fig.3.1(a) a 3.1(c), se muestran los estados con $n = 2$, para varios valores normalizados de R .

Para un valor crítico de la longitud, el lazo presentará autointersecciones sobre la esfera. Para el caso de una simetría binaria, $n = 2$, esto ocurre cuando $R = 2.127 R_0$, que es cuando el lazo cruza los polos, como se muestra en la Fig.3.1(d). Consideramos que las autointersecciones son consistentes con

la física del problema y no tienen costo de energía.

Conforme R incrementa hasta alcanzar el valor de $R = 3R_0$, el lazo colapsa en un círculo geodésico que cubre la esfera tres veces, ver Fig.3.1(e) y Fig.3.1(f).

3.2. Elástica de Euler confinada por una esfera

Consideremos una curva cerrada, de longitud $S = 2\pi R$, confinada dentro de una esfera de radio R_0 . Normalizaremos las longitudes en términos de R_0 . Sobre una esfera, el tensor de curvatura extrínseca es proporcional al tensor métrico, y ya que hemos normalizado, tenemos la relación $K_{ab} = \gamma_{ab}$, así que la curvatura normal es constante, $\kappa_n = -1$, y la torsión geodésica es nula, $\tau_g = 0$. Empleando estos resultados en la Ec.(2.22), resulta:

$$\mathbf{F} = \left(\frac{\kappa_g^2}{2} + \sigma \right) \mathbf{T} + \kappa_g' \mathbf{l}, \quad \text{donde} \quad \sigma = \frac{1}{2} - c. \quad (3.1)$$

El vector \mathbf{F} , es tangente a la superficie en todo punto, y se encuentra totalmente determinado por la geometría del sistema. Sin embargo, debido a la constricción de la superficie, \mathbf{F} no es conservado.

El vector de torca, definido en la Ec.(2.31) es:

$$\mathbf{M} = \kappa_g' \mathbf{T} - \left(\frac{\kappa_g^2}{2} + \sigma - 1 \right) \mathbf{l} + \kappa_g \mathbf{n}, \quad (3.2)$$

donde se emplea la Ec.(2.32) y el hecho que \mathbf{Y} se encuentra dirigido a lo largo del vector normal \mathbf{n} .

Como se estableció en el capítulo anterior, la invariancia rotacional, de la energía de doblamiento confinada a la esfera, implica que \mathbf{M} es un vector constante. Su magnitud es una constante. Esto provee una cuadratura, en términos de la curvatura geodésica, ($M^2 = \mathbf{M} \cdot \mathbf{M}$):

$$M^2 = (\kappa_g')^2 + \left(\frac{\kappa_g^2}{2} + \sigma - 1 \right)^2 + \kappa_g^2. \quad (3.3)$$

Es simple comprobar que la condición $(M^2)' = 0$, en la ecuación anterior, reproduce la ecuación de Euler-Lagrange (2.20) para una esfera:

$$\varepsilon_1 = \kappa_g'' + \kappa_g \left(\frac{\kappa_g^2}{2} + \sigma \right) = 0. \quad (3.4)$$

Esta ecuación, es idéntica a la descrita por un lazo elástico, con densidad de energía $\frac{\kappa_g^2}{2}$. Este resultado, es consecuencia directa de la descomposición de la curvatura de Frenet-Serret, en sus partes normal y geodésica, $\kappa^2 = \kappa_g^2 + \kappa_n^2$, así como el hecho que κ_n es constante. Podemos decir entonces, que las esferas son especiales en estos aspectos.

Diferentes propiedades matemáticas de curvas elásticas sobre esferas, fueron descritas por Langer y Singer en los ochenta [17]. En la referencia [23], se presenta el problema utilizando métodos numéricos. Recientemente, estos trabajos han sido reexaminados en la referencia [24]. La conexión con la descripción de defectos cónicos en hojas planas inextensibles, fue desarrollada en [25; 26].

Sabemos que para una geodésica, $\kappa_g = 0$ en todo punto, por lo tanto, la Ec.(3.3) implica que, $M^2 = (\sigma - 1)^2$. A menos que la longitud del lazo sea un múltiplo entero de 2π , las curvas geodésicas serán inconsistentes con la condición de frontera asociada a la cerradura. Si $\kappa_g = 0$ es accesible para cualquier punto a lo largo del lazo, existirá una cota inferior para el valor de M , que resulta no trivial:

$$(\sigma - 1)^2 \leq M^2. \quad (3.5)$$

En equilibrio, todos los lazos confinados satisfacen esta ecuación.

Resulta útil reescribir la Ec.(3.3) en la forma:

$$(\kappa_g')^2 + V(\kappa_g) = E^2, \quad (3.6)$$

donde:

$$V(\kappa_g) = \left(\frac{\kappa_g^2}{2} + \sigma \right)^2, \quad (3.7)$$

y $E^2 = M^2 + 2\sigma - 1$ es manifiestamente positivo.¹

Si κ_g es identificado como la posición de una partícula ficticia y s como el tiempo, la Ec.(3.6) describe, el movimiento de una partícula de masa $m = 2$, con energía total E^2 , dentro del potencial cuártico simétrico $V(\kappa_g)$. Este potencial, que se muestra en la Fig.(3.2), depende del signo de σ ; si $\sigma \geq 0$, entonces, V tendrá un mínimo en $\kappa_g = 0$; si $\sigma < 0$, entonces, posee dos pozos simétricos centrados en $\kappa_g = \pm\sqrt{-2\sigma}$, separados por un máximo local, situado en $\kappa_g = 0$.

¹Esta es una condición menos fuerte para M que la de la Ec.(3.5).

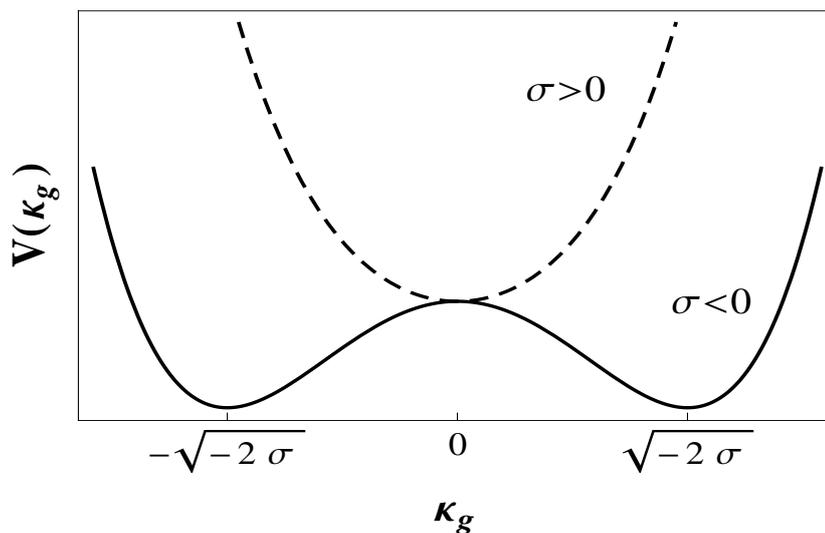


Figura 3.2: Se muestra el potencial de la Ec.(3.7) y su dependencia en el signo de σ .

Aunque la analogía de la partícula resulta muy útil, tiene sus limitantes. E^2 no representa la energía de la elástica y el potencial depende de la constante de integración σ , cuyo valor es determinado por las condiciones de frontera, al igual que el de E^2 .

El comportamiento cualitativo del lazo, dependerá de los puntos de retorno del potencial, y por lo tanto, en los valores relativos de σ^2 y E^2 :

- $E^2 > \sigma^2$:

En este régimen, existen únicamente dos puntos de retorno, que ocurren cuando $E^2 = V(\kappa_1)$, lo que implica:

$$\kappa_1^2 = 2(E - \sigma) \geq 0. \quad (3.8)$$

Entonces, $\kappa'_g = 0$ sucede cuando $\kappa_g = \pm\kappa_1$. Por lo tanto, la curvatura geodésica sólo puede adquirir valores en el intervalo simétrico $[-\kappa_1, \kappa_1]$. Esto será independiente del signo de σ . Se espera que un lazo con longitud mayor a 2π , oscile simétricamente alrededor del ecuador, donde $\kappa_g = 0$, de manera que $\oint ds \kappa_g = 0$.

- $E^2 < \sigma^2$:

Este régimen es inalcanzable físicamente si el lazo es cerrado.²

La reconstrucción del lazo a partir de su curvatura, involucra examinar el vector de torca conservado, \mathbf{M} . Sin pérdida de generalidad, resulta posible alinear \mathbf{M} a lo largo del eje $\hat{\mathbf{z}}$, $\mathbf{M} = M\hat{\mathbf{z}}$, como en la referencia [26]. El vector normal \mathbf{n} , está parametrizado, en términos de coordenadas esféricas como:

$$\mathbf{n}(s) = (\text{Sen } \vartheta(s) \text{ Cos } \varphi(s), \text{ Sen } \vartheta(s) \text{ Sen } \varphi(s), \text{ Cos } \vartheta(s)). \quad (3.9)$$

La idea es encontrar las funciones de encajamiento, \mathbf{Y} , (que se encuentran dirigidas a lo largo del vector \mathbf{n}), en términos de la curvatura geodésica, para esto, debemos encontrar los ángulos polar y azimutal, en función de κ_g .

Tomando las proyecciones de \mathbf{M} en el marco de Darboux, es posible determinar las funciones de encajamiento de la curva sobre la esfera, en términos de κ_g y dos constantes, σ y M , como se realiza a continuación:

La proyección de \mathbf{M} dado por la Ec.(3.2), en \mathbf{n} , determina el ángulo polar en términos de κ_g .³

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{n} = M \text{Cos } \vartheta = \kappa_g; \quad (3.10)$$

la proyección sobre \mathbf{l} , determina el ángulo azimutal φ :

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{l} = -M\varphi' \text{Sen}^2 \vartheta = -\left(\frac{\kappa_g^2}{2} + \sigma - 1\right), \quad (3.11)$$

donde ocupamos la relación $\mathbf{l} = \mathbf{T} \times \mathbf{n} = \mathbf{n}' \times \mathbf{n}$.

Notemos que φ , no incrementa monotónicamente a lo largo del lazo. De hecho, presentará traslapes, cuando se cumpla $\varphi' = 0$ y $\sigma < 1$, (ver Ec.(3.12)). Combinando las Ecs. (3.10) y (3.11), se obtiene:

$$\varphi' = \frac{M}{2} \left(\frac{M^2 + 2(\sigma - 1)}{M^2 - \kappa_g^2} - 1 \right). \quad (3.12)$$

²Sólo puede ser alcanzado si $\sigma < 0$, de tal manera que el potencial tenga dos pozos y la trayectoria en κ_g se encuentre confinada a oscilar en uno ellos. Podemos escribir:

$$E^2 - V(\kappa_g) = \frac{1}{4}(\kappa_+^2 - \kappa_g^2)(\kappa_g^2 - \kappa_-^2),$$

donde $\kappa_+^2 = -2(E + \sigma) \geq 0$ y $\kappa_-^2 = 2(E - \sigma) \geq 0$. Por lo tanto, κ_g estaría confinada, a yacer en uno de los dos intervalos con signo definido, es decir, que estaría confinado a un sólo hemisferio.

³La proyección de \mathbf{M} , en $\mathbf{T} = \mathbf{n}'$, reproduce la derivada de la Ec.(3.10).

La Ec.(3.10), proporciona una cota superior para κ_g , $|\kappa_g| \leq M$. Como veremos más adelante, M siempre estará acotada. Así, κ_g y por lo tanto la energía geodésica, también estarán acotadas. Por otra parte, la Ec.(3.10), implica que los valores extremos de κ_g , ocurren cuando ϑ , adquiere valores de múltiplos enteros de π . La cota es alcanzada, cuando el lazo pasa a través de los polos.

Es posible reescribir la cuadratura (3.3), en términos del ángulo polar, usando la Ec.(3.10):

$$\vartheta'^2 + \frac{1}{4M^2} \left(\frac{M^2 + 2(\sigma - 1)}{\text{Sen } \vartheta} - M^2 \text{Sen } \vartheta \right)^2 = 1. \quad (3.13)$$

Así, resulta claro que el acceso a los polos, donde ϑ adquiere valores iguales a múltiplos enteros de π , es posible únicamente cuando M y σ , se ajustan de tal manera, que el coeficiente del término divergente en el potencial de la Ec.(3.13), desaparece:

$$M^2 + 2(\sigma - 1) = 0, \quad (3.14)$$

a la vez esto implica que $\sigma < 1$.

Cuando la Ec.(3.14) se satisface, la evolución de φ se simplifica, ya que la Ec.(3.12) adquiere la forma $\varphi' = -M/2$, por lo tanto, φ incrementa linealmente con la longitud de arco a lo largo del lazo. Esta identidad implica $M = -2/R$ y como consecuencia de la Ec.(3.14), se cumple $\sigma = 1 - 2/R^2$, cuando se cruzan los polos.

Supongamos que la longitud del lazo, es suficientemente pequeña para que no ocurran ni autocontactos ni autointersecciones. El movimiento periódico, en el potencial $V(\kappa_g)$ de la Ec.(3.7), implica una simetría dihedral de orden n : si el lazo cierra, después de completar n periodos de ϑ , en un recorrido del ecuador, se tiene que, $\theta(s + 2\pi R/n) = \theta(s)$ y $\varphi(s + 2\pi R/n) = \varphi(s) + 2\pi/n$, donde $n \geq 2$, es un entero.⁴ Entonces, la cerradura impone una discretización del sistema.⁵

En equilibrio, el número de periodos del ángulo azimutal p , incrementará con la longitud del lazo, por lo que es posible, reemplazar la condición sobre φ , por $\varphi(s + 2\pi R/n) = \varphi(s) + 2\pi p/n$. La cuadratura (3.6), puede ser escrita

⁴La identidad (3.10), implica que la identidad anterior, es equivalente a $\kappa_g(s + 2\pi R/n) = \kappa_g(s)$.

⁵El caso $n=1$, se excluye, debido al teorema de los cuatro vértices y a la simetría del potencial.

en forma integral:

$$\frac{2\pi R}{4n} = \int_0^{\kappa_1} \frac{d\kappa_g}{\sqrt{E^2 - V(\kappa_g)}}, \quad (3.15)$$

y la condición para φ , (3.12), es reescrita con ayuda de la Ec.(3.6):

$$\frac{2\pi p}{4n} = \frac{M}{2} \int_0^{\kappa_1} \frac{d\kappa_g}{\sqrt{E^2 - V(\kappa_g)}} \frac{\kappa_g^2 + 2(\sigma - 1)}{M^2 - \kappa_g^2}, \quad (3.16)$$

donde κ_1 , es el punto de retorno del potencial, definido en (3.8). Las Ecs.(3.15) y (3.16), representan las condiciones de frontera de longitud fija y cerradura del lazo, respectivamente. La primera es independiente de p y la segunda es independiente de R . Juntas, determinan las dos constantes de integración σ y M , en términos del radio de la elástica R , y los dos enteros n y p .

3.3. Confinamiento débil por esferas

Aunque la cuadratura (3.3), puede ser integrada exactamente, en términos de funciones elípticas [17; 19; 24], resulta útil resolver el problema, usando un enfoque perturbativo para examinar anillos con un radio R , un poco mayor que uno. Por lo tanto, es posible escribir la longitud del lazo, $s = 2\pi R = 2\pi(1 + \Delta R)$, en términos del exceso de longitud ΔR del lazo, con respecto, al radio de la esfera unitaria.

Se define $\Delta R := R - 1 \ll 1$, de tal manera que el lazo, es suficientemente pequeño para que no ocurran autocontacto ni autointersecciones. En este caso, los estados de equilibrio, son descritos por pequeñas deformaciones, alrededor de un círculo geodésico sobre la esfera, con $\kappa_g = 0$ y es apropiado escribir la aproximación armónica de la cuadratura (3.6), como:

$$\begin{aligned} (\kappa'_g)^2 + \sigma\kappa_g^2 &= E^2 - \sigma^2 \\ &= M^2 - \sigma^2 + 2\sigma - 1. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Las funciones κ_g , así como las constantes σ y M , son expandidas en potencias de $\epsilon = \sqrt{\Delta R}$, que es, el parámetro sin dimensiones más pequeño.

$$\kappa_g = \kappa_1 + \kappa_3 + \dots; \quad M = M_0 + M_2 + \dots; \quad \sigma = \sigma_0 + \sigma_2 + \dots. \quad (3.18)$$

⁶En el orden más bajo, $\kappa_g \approx \kappa_1$. Entonces, los términos de la cuadratura (3.17) relevantes son: $(\kappa'_1)^2$ y κ_1^2 , cuyo orden es dos, y 1, cuyo orden es cero. Por lo tanto, el orden uno no contribuye en las constantes M y σ .

Por lo tanto, la aproximación armónica de la cuadratura (3.17), en el orden más bajo, adquiere la forma:

$$(\kappa'_1)^2 + \sigma_0 \kappa_1^2 = M_0^2 - (\sigma_0 - 1)^2 + 2M_0 M_2 - 2\sigma_0 \sigma_2. \quad (3.19)$$

En este orden, la longitud de arco coincide con el ángulo azimutal, φ , y la curvatura geodésica a lo largo de un anillo cerrado, está dada por:

$$\begin{aligned} \kappa_1(s) &= A_1 \text{Cos } ns \\ &\approx A_1 \text{Cos } n\varphi, \end{aligned} \quad (3.20)$$

donde n es un entero y A_1 una constante. Sustituyendo la Ec.(3.20) en la Ec.(3.19) y respetando el orden de las ecuaciones, encontramos las relaciones $\sigma_0 = n^2$ y $M_0 = n^2 - 1$. También implica la restricción:

$$A_1^2 = \frac{2}{n^2}(n^2 - 1)(M_2 - \sigma_2) \quad (3.21)$$

sobre la diferencia de las correcciones a segundo orden.

A continuación, determinamos ΔR en términos de la amplitud A_1 y el entero n . Para esto, recordamos que, el elemento de línea para una esfera unitaria, puede ser escrito como:

$$s = \int d\varphi \left[\left(\frac{d\vartheta}{d\varphi} \right)^2 + \text{Sen}^2 \vartheta \right]^{1/2}. \quad (3.22)$$

Usando la Ec.(3.10) y la aproximación armónica de κ_g dada por la Ec.(3.20), se obtiene:

$$\text{Sen}^2 \vartheta \approx 1 - \frac{A_1^2}{M_0^2} \text{Cos}^2 n\varphi, \quad \text{y} \quad \frac{d\vartheta}{d\varphi} \approx -\frac{1}{M_0} \frac{d\kappa_1}{d\varphi} = \frac{nA_1}{M_0} \text{Sen } n\varphi, \quad (3.23)$$

de lo que se sigue:

$$s \approx \varphi + \frac{1}{4} \frac{A_1^2}{(n^2 - 1)^2} \left((n^2 - 1)\varphi - \frac{(n^2 + 1)}{2n} \text{Sen } 2n\varphi \right). \quad (3.24)$$

Debido a que en este régimen $S \approx (1 + \Delta R)\varphi$, la ecuación anterior permite expresar ΔR como:⁷

$$\Delta R = \frac{1}{4(n^2 - 1)} A_1^2. \quad (3.25)$$

⁷ A_1 desaparece cuando $n = 1$, una solución, que es identificada como una rotación trivial del lazo ecuatorial, alrededor de un eje, sobre el mismo plano ecuatorial.

Esta es toda la información que puede ser extraída de la cuadratura. Para especificar σ_2 y M_2 en términos de ΔR , es necesario examinar las condiciones de frontera, (3.15) y (3.16), corregidas a segundo orden en $\epsilon = \sqrt{\Delta R}$. En este orden, el punto de retorno κ_1 del potencial $V(\kappa_g)$, definido por la Ec.(3.7), coincide con A_1 dado en la aproximación armónica de la Ec.(3.21). En general, $E^2 - V(\kappa_g) = 1/4(\kappa_g^2 + K^2)(\kappa_1^2 - \kappa_g^2)$, donde:

$$\begin{aligned} k_1^2 &= 2(E - \sigma) \approx A_1^2, \\ K^2 &= 2(E + \sigma) \approx 4n^2 - \frac{2}{n^2}(M_2 - \sigma_2) + 2(M_2 + \sigma_2). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Por lo tanto, la corrección a segundo orden es encontrada:

$$\frac{1}{\sqrt{E^2 - V(\kappa_g)}} \approx \frac{1}{n} \frac{1}{\sqrt{A_1^2 - \kappa_g^2}} \left(1 - \frac{1}{4n^4}(\sigma_2 - M_2) - \frac{1}{4n^2}(\sigma_2 + M_2) - \frac{\kappa_g^2}{8n^2} \right). \quad (3.27)$$

Con este resultado, la Ec.(3.15) queda como:

$$\Delta R = -\frac{1}{4n^4}(\sigma_2 - M_2) - \frac{1}{4n^2}(\sigma_2 + M_2) - \frac{1}{16n^2}A_1^2. \quad (3.28)$$

El término que aparece en la condición (3.16), puede ser escrito a segundo orden como:

$$M \frac{\frac{1}{2}\kappa_g^2 + \sigma - 1}{M^2 - \kappa_g^2} \approx 1 + \frac{1}{n^2 - 1}(\sigma_2 - M_2) + \frac{1}{2(n^2 - 1)} \frac{n^2 + 1}{n^2 - 1} \kappa_g^2, \quad (3.29)$$

por lo que para $n \neq 1$, resulta:

$$\Delta R = -\frac{1}{n^2 - 1}(\sigma_2 - M_2) - \frac{1}{4(n^2 - 1)} \frac{n^2 + 1}{n^2 - 1} A_1^2. \quad (3.30)$$

Usando la Ec.(3.21) en (3.30), es posible reproducir la relación (3.25) entre A_1 y ΔR , $A_1^2 = 4(n^2 - 1)\Delta R$. Sustituyendo este resultado en las ecuaciones (3.28) y (3.30), y resolviendo este sistema de ecuaciones, se encuentra:

$$\sigma_2 = \frac{1}{2}(3 - 7n^2)\Delta R, \quad M_2 = \frac{3}{2}(1 - n^2)\Delta R. \quad (3.31)$$

3.3.1. Energía

La energía de doblamiento del anillo confinado por la esfera, se descompone en la suma de las partes geodésica y normal, reflejando de esta manera,

la descomposición de la curvatura de Frenet: $\kappa^2 = \kappa_g^2 + 1$:

$$H = \frac{1}{2} \oint ds (\kappa_g^2 + 1) := H_g + H_n. \quad (3.32)$$

donde $H_n = \pi R$, es la energía asociada a una curva elástica, introducida en una espiral circular de radio $R_0 = 1$, como se aprecia, crece linealmente con la longitud. Para un anillo débilmente confinado, la Ec.(3.32) adquiere la forma:

$$H/H_{\text{anillo}} \approx 1 + 2n^2 \Delta R, \quad (3.33)$$

donde $H_{\text{anillo}} = \pi/R$, es la energía de doblamiento de un anillo circular de radio R , sin constricción. La energía (3.33) crece linealmente con la longitud del aro. Esto no ocurre para anillos de mayor longitud. Para un valor fijo de ΔR , la energía incrementa con n . El estado base, es el estado completamente pegado a la esfera, con $n = 2$. Como se mostrará, todos los estados con $n \geq 3$ son inestables.

3.3.2. Fuerza transmitida

La fuerza transmitida a la esfera en cualquier punto, está dada por la Ec.(2.21) y debido a que $\kappa_n = -1$ es constante, toma la forma particularmente simple:

$$\lambda = \frac{1}{2} \kappa_g^2 + \sigma. \quad (3.34)$$

Comparando las ecuaciones (3.32) y (3.34), se observa que en todo punto sobre el anillo, λ está relacionada con la densidad de energía local. Su dependencia espacial, se encuentra completamente determinada por la curvatura geodésica y su cota inferior es σ .

Usando las expresiones (3.20) y la primera de las ecuaciones (3.31), en (3.34), se encuentra que para valores pequeños de ΔR y $n \geq 2$, la fuerza viene dada por:

$$\lambda_n \approx n^2 + \frac{\Delta R}{2} [3 - 7n^2 + 4(n^2 - 1) \text{Cos}^2 n\varphi], \quad (3.35)$$

donde se aprecia que la fuerza confinante es manifiestamente positiva, con valores que oscilan alrededor de n^2 . λ_n no desaparece en el límite $\Delta R \rightarrow 0$, lo que se interpreta como una inestabilidad de Euler. El empacamiento del anillo circular, en un estado de simetría n , involucra una compresión crítica en el anillo, que es transmitida como fuerza normal sobre la esfera.

3.4. Confinamiento esférico fuerte

En esta sección, se examina la forma adoptada por un lazo de radio finito R , confinado por la esfera. La Ec.(3.6), puede ser integrada en términos de funciones elípticas [17; 19; 24], para esto, resulta útil presentarla en la forma:

$$s = 2 \int \frac{d\kappa_g}{(K_g^2 + K^2)(\kappa_1^2 - \kappa_g^2)} \quad (3.36)$$

donde se definen $K^2 = 2(E + \sigma)$ y $\kappa_1^2 = 2(E - \sigma)$. Integrando e invirtiendo esta ecuación, se obtiene κ_g como función de s :

$$\kappa_g(s) = 2\sqrt{mq} \operatorname{cn}[qs, m]. \quad (3.37)$$

La función $\operatorname{cn}[x, m]$, es conocida como el coseno elíptico de Jacobi [27]. El número de onda angular, está dado en términos de la constante E , (definida abajo de la Ec.(3.7)), como $q = \sqrt{E}$. Por lo tanto, la Ec.(3.37), implica que la curvatura oscila entre los valores $\pm\kappa_1$, con $\kappa_1 = 2\sqrt{mq}$ la curvatura máxima, es decir, $-\kappa_1 \leq \kappa \leq \kappa_1$. Además, el módulo de m es definido por:

$$m = \frac{\kappa_1^2}{4q^2} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sigma}{q^2}\right). \quad (3.38)$$

La curvatura κ_g , depende de los parámetros por determinar σ y M , a través de los parámetros q y m .⁸ Estos parámetros, serán determinados explícitamente, en términos de R y n , usando las condiciones de frontera, asociadas con la cerradura del anillo.

Usando el hecho de que el periodo del coseno elíptico es $4K[m]$, donde $K[m]$ es la integral elíptica completa de primer tipo [27], es posible, expresar la condición de frontera para κ_g de la Ec.(3.15), en la forma:

$$q = 4n \frac{\mathcal{K}[m]}{(2\pi R)}. \quad (3.40)$$

La integración de la Ec.(3.12) da como resultado:

$$\varphi(s) = \frac{M}{2} \left(\frac{q^2 + 1}{q(q^2 - 1)} \Pi \left[-\frac{4mq^2}{(q^2 - 1)^2}, \operatorname{am}[qs, m], m \right] - s \right), \quad (3.41)$$

⁸Las definiciones de m (3.38) y $q = \sqrt{E}$, son invertidas para dar:

$$\sigma = q^2 (1 - 2m), \quad M^2 = (q^2 - 1)^2 + 4mq^2. \quad (3.39)$$

El módulo de m toma valores en el intervalo $[0, 1]$; lo cual acota a σ en términos de q : $|\sigma| \leq q^2$, cambiando de signo cuando $m = 1/2$.

donde $\Pi[\eta, \text{am}[x, m], m]$, es la integral elíptica incompleta de tercer tipo y $\text{am}[x, m]$, es la amplitud de Jacobi [27]. Entonces, la condición de cerradura tras p circuitos del ángulo polar, $\varphi(2\pi R) = 2\pi p$, implica:

$$\frac{2\pi M R}{2} \left(\frac{q^2 + 1}{\mathcal{K}[m](q^2 - 1)} \Pi \left[-\frac{4mq^2}{(q^2 - 1)^2}, m \right] - 1 \right) = 2\pi p. \quad (3.42)$$

Con ayuda de la Ec.(3.40), la relación anterior determina m implícitamente como función de R . Con esto, se completa la construcción formal del anillo confinado.

3.5. Estado base $n = 2$, $p = 1$

El estado con simetría $n = 2$, es ilustrado en la Fig.(3.1), para valores de R en el intervalo $[1, 3]$. Cuando ΔR es pequeño, se observa una oscilación alrededor del círculo geodésico (ver Fig.3.1(a)), lo que es consistente con el análisis perturbativo previo. Conforme R incrementa, las oscilaciones alrededor de este círculo aumentan en amplitud, por lo que la elástica explora una mayor superficie de la esfera, (Figs.3.1(b) y 3.1(c)). En la Fig.(3.1(c)), los traslapes con $\varphi' = 0$ comienzan. Para el valor crítico del radio, $R_2 = 2.127$, existe autocontacto en los dos polos, Fig.(3.1(d)).⁹

Para valores de R mayores a R_2 , es necesario mirar de manera más cuidadosa las condiciones de frontera, ya que si la física admite autointersecciones sobre la superficie y estas ocurren sin costo de energía, como hemos asumido, la curva descrita matemáticamente por funciones elípticas, continua representando el lazo físico.¹⁰

Es importante notar, que existe un cambio en el comportamiento del lazo conforme R incrementa más allá de R_2 , (ver Fig.3.1(e)), al cruzar los polos, el lazo realiza dos revoluciones adicionales en φ , por lo que $p = 1$, debe ser reemplazado por $p = 3$, en la condición de frontera (3.16). Se observa que el lazo cruza los polos cuatro veces, dos en cada polo. Una discontinuidad de -2π es introducida en φ por cada cruce. Estas discontinuidades contribuyen al periodo de la elástica; por lo que el periodo de 2π para una sólo revolución, es reemplazado por $2\pi - 4(2\pi) = -6\pi$. Esto implica que la orientación cambia

⁹Para cada valor de n , existe un valor crítico R_n , para el cual esto ocurre y cuya magnitud incrementa con n . Para valores mayores a una longitud crítica del lazo, todos los estados de equilibrio presentan autointersección.

¹⁰Si se prohíben las autointersecciones, la física sería muy diferente. Esto se describe en el contexto de cónicas en la referencia [26] y de manera numérica en [28]. Conforme el lazo explora la esfera, existe un aumento súbito en la energía de la elástica, asociado con este autoconfinamiento. Después de cierto punto, se espera que las configuraciones del lazo parcialmente adheridas a la esfera, se vuelvan energéticamente favorables.

de dirección.¹¹ Cuando $R = 3$, el lazo se degenera rodeando tres veces el círculo geodésico, (Fig.3.1(e)).

3.6. Conclusiones del capítulo

Se ha examinado el confinamiento, de un lazo semiflexible y cerrado, por una superficie esférica. Nos hemos centrado en la descripción del estado base de este sistema. Si el lazo es pequeño, este realizará oscilaciones alrededor del círculo geodésico, exhibiendo una simetría dihedral de orden dos. Este es el único estado estable del sistema en este régimen. La descripción del estado base y los estados que se derivan del mismo, se vuelve más complicada, cuando la longitud del lazo incrementa. Como se puede ver en [11], la fuerza total transmitida a la esfera, así como la energía total de la elástica, exhiben discontinuidades debido al cambio de simetría.

¹¹Para el estado con simetría de grado n , el número de revoluciones está dado por $p = 2n - 1$.

Capítulo 4

Confinamiento cilíndrico

RESUMEN: Se analizan las configuraciones de equilibrio, que puede adoptar un polímero semiflexible cerrado, de longitud fija $2\pi R$, confinado dentro de una cavidad cilíndrica de menor radio, R_0 . Esta vez, la invariancia rotacional y translacional, sólo se da alrededor y a lo largo del eje de simetría del cilindro, como consecuencia, la cuadratura no tiene solución analítica.

4.1. Introducción

El problema del polímero semiflexible, que envuelve una cavidad cilíndrica y que está relacionado de manera íntima, con el envolvimiento del ADN alrededor de las histonas, fue estudiado hace algún tiempo por Nickerson y Mannig [12; 29], y revisado recientemente por Van der Heijden, Peletier y R. Planqué [30]. Finalmente, un problema relacionado, por tratar el confinamiento de una hoja de papel cilíndrica, dentro de un cilindro circular, fue tratado por Boué, Adda-Bedia y Boudaoud [9].

A diferencia de los trabajos mencionados, la estrategia que adoptaremos, se centra en explotar las simetrías del sistema. Como se ha visto en las secciones anteriores, la constricción impuesta por la superficie confinante, rompe la invariancia Euclidiana de la energía de doblamiento y la manera en la que ocurre no es arbitraria. El marco variacional desarrollado en el capítulo 2, que involucra los grados de libertad del sistema, imponiendo las constricciones al usar multiplicadores de Lagrange locales, será utilizado, para examinar el confinamiento de un polímero semiflexible cerrado, de longitud fija $L = 2\pi R$, dentro de un cilindro de radio menor R_0 .

La descripción del confinamiento cilíndrico, resulta un poco más complicada que para esferas, por lo que trataremos de disgregar el problema por

partes. Iniciamos describiendo el confinamiento de una elástica plana, que yace de manera vertical dentro del cilindro. Posteriormente, nos limitaremos a un tratamiento perturbativo del problema, en el cual el radio del lazo sin perturbaciones, es sólo un poco más grande que el de la cavidad cilíndrica. De manera análoga a la esfera, existen simetrías de orden n . El estado base correspondiente del anillo, no tiene un análogo esférico, pues resulta ser una deformación elíptica del anillo circular, misma que yace sobre el plano longitudinal del cilindro. Conforme el orden n de simetría aumenta, también lo hace la energía.

4.2. Confinamiento vertical

Consideremos un cilindro infinito de radio unitario, cuya sección transversal tiene una longitud de 2π . Examinemos el confinamiento de la elástica planar de Euler, con longitud $2L \geq 2\pi$. Por ser planar, la elástica satisface la restricción de yacer de manera vertical, dentro de dicho cilindro, como se muestra en la Fig.(4.2).

Utilizando el marco desarrollado en la sección 2.2 y considerando que para la elástica planar $\tau = 0$, encontramos que la Ec.(2.13), tras un cambio en el signo de c ,¹ se reduce a:

$$\mathbf{F} = \left(\frac{\kappa^2}{2} + c \right) \mathbf{T} + \kappa' \mathbf{N}. \quad (4.1)$$

El cuadrado de la Ec.(4.1), provee una cuadratura para la curvatura κ , en términos de la longitud de arco s :

$$F^2 = (\kappa')^2 + U(\kappa), \quad \text{donde} \quad U(\kappa) = \left(\frac{\kappa^2}{2} + c \right)^2 \quad (4.2)$$

Al igual que para el caso del confinamiento esférico, es posible realizar la analogía de la partícula en un pozo de potencial. Esto se logra, si κ es identificado con la posición de una partícula ficticia y s como el tiempo. De esta manera, la Ec.(4.2), describe el movimiento de una partícula con masa $m = 2$ y energía total F^2 , dentro del potencial cuártico simétrico $U(\kappa)$. Este potencial se muestra en la Fig.(4.1) y depende del signo de c ; si $c < 0$, entonces posee dos pozos simétricos centrados en $\kappa = \pm\sqrt{-2c}$, separados por un máximo local, situado en $\kappa = 0$; si $c > 0$, entonces $U(\kappa)$ tendrá un mínimo global en $\kappa = 0$. El punto de retorno, κ_1 , para este potencial, se encuentra con la condición $U(\kappa_1) = F^2$, por lo que $\kappa_1 = \pm\sqrt{2(F - c)}$ sin importar el signo de c .

¹El cambio de signo, es realizado para tener el mismo potencial que en el confinamiento esférico, (3.7), identificando σ con c .

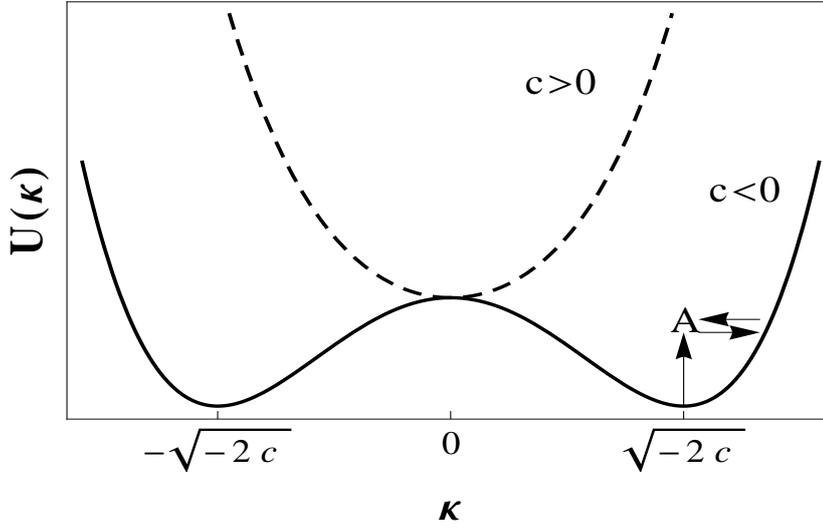


Figura 4.1: Se muestra el potencial de la Ec.(4.2) y su dependencia en el signo de c .

4.2.1. Condiciones de frontera

Cuando las ecuaciones de Euler-Lagrange se satisfacen, la variación del funcional, está dada por los términos de frontera de la Ec.(2.23):

$$\delta H = \int ds Q', \quad Q = -\mathbf{F} \cdot \delta \mathbf{Y} + \mathbf{T}' \cdot \delta \mathbf{T}. \quad (4.3)$$

Por lo tanto, en equilibrio, ($\delta H = 0$), se debe satisfacer que Q sea constante.

Observemos la Fig.(4.2), donde se representa una elástica de longitud $2L$, que yace en el plano $x - z$ y que se encuentra confinada verticalmente, dentro de un cilindro infinito de radio unitario. Sin pérdida de generalidad, nos enfocaremos únicamente, en la descripción de la mitad superior de dicha elástica. Esta comprende, los puntos en contacto con el cilindro, localizados en s_0 y $s_f = s_0 + L$ respectivamente. Si estos puntos son considerados fijos, la primera condición de frontera es impuesta, $\delta \mathbf{Y}(s_0) = \delta \mathbf{Y}(s_f) = 0$. Además, resulta conveniente expresar Q en términos del ángulo θ entre la curva y el eje coordenado $\hat{\mathbf{x}}$, es decir, el ángulo definido por $\text{Cos } \theta = \mathbf{T} \cdot \hat{\mathbf{x}}$ y $\text{Sen } \theta = \mathbf{T} \cdot \hat{\mathbf{z}}$, lo cual implica que $\delta \theta = \mathbf{N} \cdot \delta \mathbf{T}$. Por lo tanto, se satisface que $Q = \kappa(s) \delta \theta(s)$ y debido al confinamiento, sabemos que $\delta \theta$ no puede ser arbitrario en la frontera, por ende, κ tampoco lo es.² Así, la segunda condición establece el

²Lo mismo no es cierto, para el caso en que la elástica de Euler sigue siendo planar, pero sin la restricción impuesta por las paredes del cilindro. En este caso, la condición se satisface para un $\delta \theta$ arbitrario y ya que debemos tener $Q = 0$, entonces, la curvatura

valor de la curvatura κ_0 en los puntos de contacto y para determinarlo, es necesario revisar la reconstrucción de la curva, lo que se realiza en la siguiente sección.

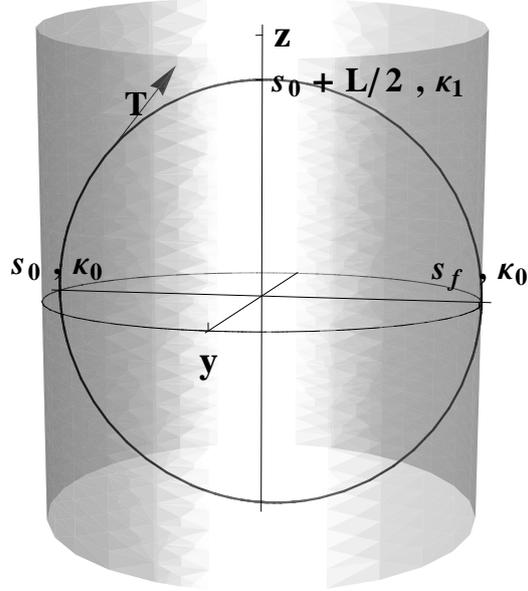


Figura 4.2: Elástica planar de Euler, confinada a yacer de manera vertical, en un cilindro de menor radio.

4.2.2. Reconstrucción de la curva a partir de la curvatura

Las funciones de encajamiento de la curva, $\mathbf{Y} = (x(s), 0, z(s))$, pueden ser obtenidas en términos de la curvatura. Para esto, se utilizan las proyecciones del vector constante \mathbf{F} de la Ec.(4.1), sobre la base cartesiana $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{z}})$:

$$F^x \equiv \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}} = \left(\frac{\kappa^2}{2} + c \right) x' - \kappa' z', \quad (4.4a)$$

$$F^z \equiv \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{z}} = \left(\frac{\kappa^2}{2} + c \right) z' + \kappa' x', \quad (4.4b)$$

Tomando las combinaciones lineales apropiadas de las ecuaciones anteriores, se obtienen las componentes del vector tangente $\mathbf{T} = (x', 0, z')$, en términos

desaparece en los puntos de contacto, esto es, $\kappa(s_0) = \kappa(s_f) = 0$.

del cuadrado de la curvatura y su derivada:

$$F^z x' - F^x z' = \kappa', \quad (4.5a)$$

$$F^x x' - F^z z' = \left(\frac{\kappa^2}{2} + c \right). \quad (4.5b)$$

Para simplificar estas ecuaciones, se considera la elástica vertical como el resultado de deformar una curva elástica de longitud L , que yace en el eje $\hat{\mathbf{x}}$, tras aplicar una fuerza F^x sobre ella. Si además, la condición de que la curva es simétrica con respecto al eje $\hat{\mathbf{z}}$, es impuesta, se tendrán las siguientes constricciones, sobre los vectores tangentes:

$$x'(s_0) = x'(s_f) = 0 \quad \text{y} \quad z'(s_0) = -z'(s_f). \quad (4.6)$$

Usando estas condiciones en las Ecs.(4.5), se encuentra que $F^z = 0$, por lo que la fuerza sobre la curva, sólo actúa en dirección del eje $\hat{\mathbf{x}}$. Además, surgen las relaciones:

$$z' = -\frac{\kappa'}{F}, \quad (4.7a)$$

$$x' = \frac{1}{F} \left(\frac{\kappa^2}{2} + c \right). \quad (4.7b)$$

donde $F = F^x$. A su vez, la segunda de estas condiciones implica:

$$x'(s_0) = 0 \quad \implies \quad \kappa_0 = \kappa(s_0) = \pm\sqrt{-2c}. \quad (4.8)$$

La Ec.(4.8), representa la segunda condición de frontera intrínseca, que determina el valor de la curvatura en los puntos de contacto, en términos de la constante c .

Antes de continuar con la solución de la cuadratura, analicemos de manera más detallada, la relación entre la longitud de la elástica, la longitud de arco y la curvatura. En la longitud de arco, partimos de un valor s mayor o igual al punto de contacto de la elástica con el cilindro, s_0 , (ver nuevamente Fig.(4.2)), en este punto, la curvatura κ debe ser mayor o igual a la curvatura κ_0 de la Ec.(4.8), así continuamos, hasta que la longitud de arco adquiere un valor de $s_0 + L/2$, bien definido en términos de la longitud de la elástica, en este punto, se alcanza el valor máximo de la curvatura κ_1 , que coincide con el punto de retorno del potencial $U(\kappa)$.

Ahora observemos detenidamente la Fig.(4.1), donde se representa este potencial. Si la elástica tiene una longitud igual a la de la sección transversal del cilindro, adquiere una forma circular y su curvatura será constante, $\kappa = 1$. Esto quiere decir, que nos encontramos atrapados en el pozo de potencial, $\kappa_0 = \sqrt{-2c}$. Para una elástica de mayor longitud, nos situaremos en algún punto A por encima de κ_0 , una vez allí, seremos capaces de movernos horizontalmente en este pozo, es decir, la curvatura podrá aumentar, hasta adquirir un valor máximo, el del punto de retorno, $\kappa_1 = \sqrt{2(F-c)}$. Después regresaremos al punto inicial, donde el valor de la curvatura es κ_0 . Esta misma situación es representada en la Fig.(4.2), en términos de la curvatura y la longitud de arco, para una elástica de longitud dada.

4.2.3. Solución de la cuadratura

En las secciones anteriores, se han determinado las condiciones de frontera que satisface el sistema. Con esta información, la cuadratura (4.2) puede ser resuelta, dependiendo de los valores relativos entre las constantes F y c .

1) Para $F^2 < c^2$, se reescribe la cuadratura en la forma integral:

$$\int_{s \geq s_0}^{s_0+L/2} ds = 2 \int_{\kappa \geq \kappa_0}^{\kappa_1} \frac{dk}{\sqrt{(\kappa_1^2 - k^2)(k^2 - \kappa_2^2)}}, \quad (4.9)$$

donde se definen, $\kappa_1^2 = 2(F-c)$ y $\kappa_2^2 = -2(F+c)$. Notemos que los límites de integración, dependen de las condiciones de frontera encontradas. Integrando e invirtiendo la Ec.(4.9), encontramos κ en términos de s :

$$\kappa(s) = 2q \operatorname{dn}[q(s_0 + L/2 - s), m], \quad (4.10)$$

donde $\operatorname{dn}[u, m]$, es la función delta elíptica de Jacobi [27], además, hemos reemplazado las constantes F y c , en términos de los parámetros q y m , definidos a través de las relaciones: $F = mq^2$ y $-c = q^2(2-m)$. En este caso, la curvatura es positiva en todos lados y oscila entre los dos valores, κ_2 y κ_1 , es decir, $0 < \kappa_2 < \kappa < \kappa_1$.

Utilizando la condición de frontera $\kappa(s_0) = q\sqrt{2(2-m)}$ en la Ec.(4.10), es posible determinar q en función de L y m :

$$q = \frac{2}{L} \mathcal{F}[\pi/4, m], \quad (4.11)$$

con $\mathcal{F}[u, m]$, la integral elíptica incompleta de primera especie.

Para encontrar las funciones de encajamiento de la curva, lo que se hace, es sustituir la función de curvatura encontrada, en las Ecs.(4.7) e integrarlas,

dando como resultado:

$$z(s) = \frac{1}{mq} \left(2\text{dn}[q(s_0 + L/2 - s), m] - \sqrt{2(2 - m)} \right), \quad (4.12a)$$

$$x(s) = \frac{(2 - m)(s_0 + L/2 - s)}{m} - \frac{2}{mq} \mathcal{E}[\text{amp}[q(s_0 + L/2 - s), m], m], \quad (4.12b)$$

donde $\mathcal{E}[u, m]$, es la integral elíptica incompleta de segunda especie y $\text{amp}[u, m]$, es la amplitud de Jacobi. Finalmente, es posible escribir m en términos de L , para esto, imponemos la simetría con respecto al eje $\hat{\mathbf{z}}$, lo que determina $x(s_0) = -1$ y $x(s_f) = 1$, ya que el cilindro tiene un radio unitario. Sustituyendo estos resultados en la segunda de las Ecs.(4.12), se llega a:

$$m = L \left(\frac{\mathcal{E}[\text{amp}[qL/2, m], m]}{\mathcal{F}[\pi/4, m]} + \frac{m}{2} - 1 \right). \quad (4.13)$$

Recordemos que estamos en el caso $F^2 < c^2$. En términos del parámetro m , esta desigualdad indica $0 < m < 1$. Por lo tanto, las soluciones encontradas, serán válidas únicamente en este régimen.

2) Para $F^2 = c^2$, sólo existen soluciones para $d^2 = -4c > 0$, por lo que podemos reescribir la cuadratura (4.2), como:

$$(U')^2 + U^2(U - d^2) = 0, \quad (4.14)$$

donde se ha realizado el cambio de variable, $U = \kappa^2$. La solución general de esta ecuación diferencial, da como resultado κ en función de s :

$$\kappa(s) = \sqrt{-4c} \text{Sech}(\sqrt{-c}s - a), \quad (4.15)$$

donde a es una constante por determinar. Utilizando el hecho que $\kappa(L/2) = \kappa_1 = \sqrt{2(F - c)} = \sqrt{-4c}$,³ es posible determinar c como función de L , esto es:

$$\sqrt{-c} = \frac{2a}{L}. \quad (4.16)$$

Sustituyendo este resultados en la Ec.(4.15), se obtiene:

$$\kappa(s) = \frac{4a}{L} \text{Sech} \left(\frac{2a}{L} s - a \right). \quad (4.17)$$

³Sabemos que $F^2 = c^2$, implica la relación $F = \pm c$. Si tomamos $F = c$, no existe solución para la ecuación diferencial, que satisfaga la condición de frontera $\kappa(L/2) = \kappa_1 = 0$, por lo que se debe satisfacer $F = -c$.

Mientras que la condición de frontera (4.8), determina el valor de la constante $a = \text{ArcSech}(1/\sqrt{2}) \simeq 0.8813$. Por lo tanto, la curvatura es positiva en todas partes, aproximándose a cero únicamente para $s \rightarrow \pm\infty$. Esto quiere decir, que esta solución es válida, cuando nos encontramos situados a la misma altura que el máximo local, en el pozo de potencial $U(\kappa)$.

Reemplazando la curvatura (4.17), en las Ecs.(4.7), es posible determinar las funciones de encajamiento de la curva:

$$z(s) = \frac{L^2}{4a^2} \left(\kappa(s) - \frac{a}{L} \sqrt{8} \right), \quad (4.18a)$$

$$x(s) = -s + L \left(\frac{1}{2} - 1.1345 \text{Tanh}\left(a - \frac{2a}{L}\right) \right). \quad (4.18b)$$

3) Finalmente, para $F^2 > c^2$, la cuadratura se reescribe como:

$$\int_{s \geq s_0}^{s_0+L/2} ds = 2 \int_{\kappa \geq \kappa_0}^{\kappa_1} \frac{dk}{\sqrt{(K^2 + k^2)(k_1^2 - k^2)}}, \quad (4.19)$$

donde se definen, como en los casos previos, $K^2 = 2(F + c)$ y $\kappa_1^2 = 2(F - c)$. De la ecuación anterior, la curvatura es determinada:

$$\kappa(s) = 2\sqrt{mq} \text{cn}[q(s_0 + L/2 - s), m], \quad (4.20)$$

donde $\text{cn}[u, m]$, es la función coseno elíptico de Jacobi. Esta vez, la relación entre los parámetros, está dada por: $F = q^2$ y $c = q^2(1 - 2m)$. Por lo tanto, la curvatura oscila entre $\pm\kappa_1$, con $\kappa_1 = 2\sqrt{mq}$.

La condición de frontera $\kappa(s_0) = q\sqrt{2(2m - 1)}$, ayuda a determinar el parámetro q , en función de L y m :

$$q = \frac{2}{L} \mathcal{F}[\text{ArcSen}(1/\sqrt{2m}), m], \quad (4.21)$$

y las funciones de encajamiento:

$$z(s) = \frac{1}{q} \left(2\sqrt{mq} \text{cn}[q(s_0 + L/2 - s), m] - \sqrt{2(2m - 1)} \right), \quad (4.22a)$$

$$x(s) = s_0 + L/2 - s - \frac{2}{q} \mathcal{E}[\text{amp}[q(s_0 + L/2 - s), m], m]. \quad (4.22b)$$

Con la condición de frontera extrínseca, al igual que en el primer caso, encontramos m como función de L , que satisface la relación:

$$L \left(\frac{\mathcal{E}[\text{amp}[q(s_0 + L/2 - s), m], m]}{\mathcal{F}[\text{ArcSen}(1/\sqrt{2m}), m]} - \frac{1}{2} \right) - 1 = 0. \quad (4.23)$$

Debemos notar que ambas soluciones, $F^2 > c^2$ y $F^2 < c^2$, tienden a la solución con, $F^2 = c^2$, conforme $m \rightarrow 1$

4.2.4. Análisis de las elásticas

Dadas las funciones de encajamiento de la sección anterior y fijando $s_0 = 0$ en cada una de las soluciones, es posible graficar la elástica de Euler, confinada verticalmente, para diferentes longitudes. Estas se encuentran representadas en la Fig.(4.3). El lazo de menor longitud, $L = 2\pi$, como se ha dicho, adquiere una forma circular. Se puede apreciar que, conforme la longitud aumenta, los lazos se encuentran en mayor contacto con las paredes del cilindro. Es decir, la curvatura en la parte superior e inferior de la elástica aumenta, mientras que en la parte media disminuye. Este proceso continua, hasta alcanzar una longitud $L = 8.7336 \simeq 2.78\pi$, dicha elástica, es la de mayor longitud representada en la Fig.(4.3), para la cual, la parte media hace contacto total con las paredes del cilindro, cabe mencionar, que estas secciones no contribuyen a la energía de doblamiento de la elástica. Si la longitud aumenta, $L > 2.78\pi$, la sección recta también lo hará y las regiones superior e inferior tendrán la misma forma.

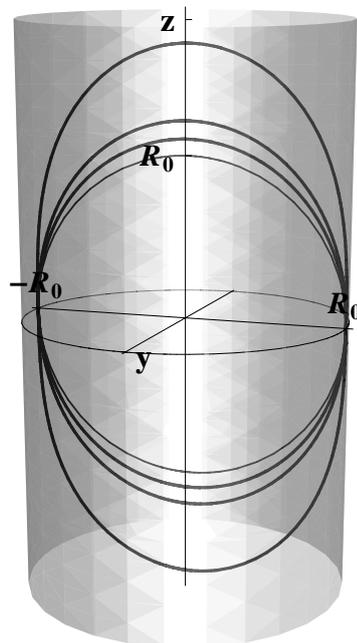


Figura 4.3: Elásticas de Euler de diferentes longitudes, confinadas verticalmente dentro de un cilindro.

4.2.5. Trayectoria en el espacio de parámetros

Cada estado de equilibrio, puede ser representado como un punto en el espacio de parámetros, (c, F) . Conforme L incrementa, el estado seguirá una trayectoria $L \rightarrow (c(L), F(L))$, representada en la Fig.(4.4).

Los valores del punto inicial en esta trayectoria, son fáciles de encontrar, ya que al inicio, consideramos una elástica de longitud 2π , por lo que adopta una forma circular, con curvatura $\kappa_0 = 1$. Sustituyendo este resultado en la Ec.(4.8), encontramos que el valor inicial del parámetro c , debe ser $-1/2$. Para encontrar el valor del parámetro F , notamos que para esta longitud inicial de la elástica, la energía potencial de la partícula ficticia es cero, por lo que la energía total, es puramente la energía cinética. Esto es, $F^2 = (\kappa')^2$, y ya que la curvatura es constante en cada punto de la circunferencia, el valor inicial del parámetro F es cero.

Para una longitud $L = 6.6164 \simeq 2.1\pi$, la magnitud de los parámetros F y c es la misma, es decir, ocurre para un lazo un poco más grande que la elástica circular. Cuando la elástica tiene una longitud $L \geq 2.78\pi$, y por lo tanto, cuando hace contacto finito con las paredes del cilindro, la curvatura en los puntos de contacto es cero, $\kappa_0 = 0$, por lo que $c = 0$.

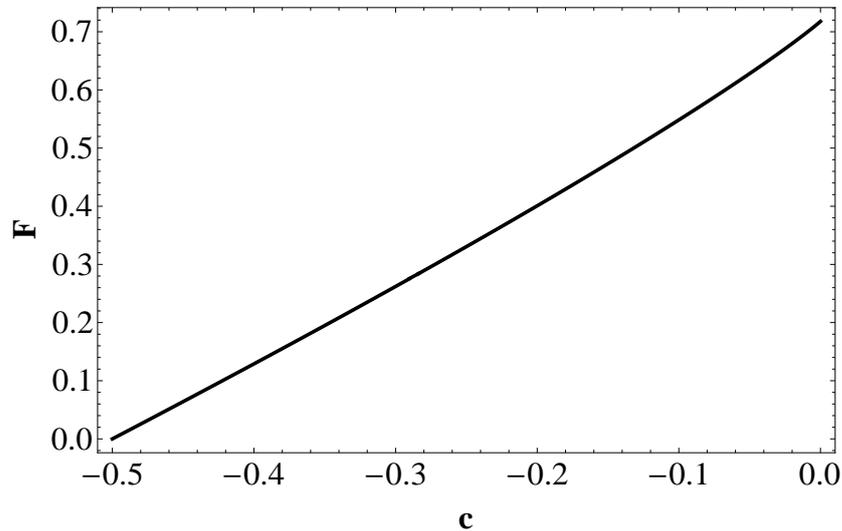


Figura 4.4: Trayectoria en el espacio de parámetros, de los estados de equilibrio.

4.2.6. Energía

La energía total de la mitad superior de la curva, está dada por, un medio de la integral, del cuadrado de la curvatura a lo largo de la elástica, Ec.(2.1), tomando como límites de integración los puntos de contacto, s_0 y $s_f = s_0 + L$. Por lo tanto, asume diferentes expresiones, dependiendo de los valores relativos entre F y c .

1) Para $F^2 < c^2$, la energía resulta de sustituir la curvatura (4.10), en la Ec.(2.1), dando como resultado:

$$H = 2q (\mathcal{E}[\text{amp}[qL/2, m], m] - \mathcal{E}[\text{amp}[-qL/2, m], m]). \quad (4.24)$$

2) En el caso $F^2 = c^2$, sustituimos (4.17), en la Ec.(2.1), obteniendo así:

$$H \simeq \frac{5}{L}. \quad (4.25)$$

Esta solución es válida, para el caso en que la longitud de la mitad de la elástica es, $L = 1.05\pi$. Valor para el cual, la magnitud de los parámetros F y c , es la misma.

3) El proceso se repite para el caso $F^2 > c^2$ y se encuentra que la energía está dada por la expresión:

$$H = 2q^2L(1-m) + 2q (\mathcal{E}[\text{amp}[-qL/2, m], m] - \mathcal{E}[\text{amp}[qL/2, m], m]). \quad (4.26)$$

Combinando estas tres soluciones, encontramos la energía de la mitad superior de la elástica, como función de la mitad de su longitud total. Multiplicando por dos ambos parámetros, H y L , es posible encontrar la energía total de la elástica completa, como función de su longitud. Esto se puede apreciar en la Fig.(4.5), donde $E_0 = \pi$, representa la energía de un lazo de longitud 2π , sin constricción. Este resultado se puede comprobar de manera directa, al sustituir el valor de la curvatura para un círculo de radio unitario, $\kappa = 1$, en la Ec.(2.1).

Al aumentar la longitud, el radio de curvatura también lo hace, y por lo tanto la curvatura disminuye, lo cual se ve reflejado en el descenso de la energía. Este proceso continua, hasta llegar al valor de $L = 2.78\pi$, a partir de este punto, la energía se satura, es decir que, aunque aumente la longitud del lazo, el valor de la energía no cambiará. Esto se debe, a que para $L \geq 2.78\pi$, la región en contacto con las paredes del cilindro aumenta y estas regiones de curvatura nula, no contribuyen a la energía total del sistema.

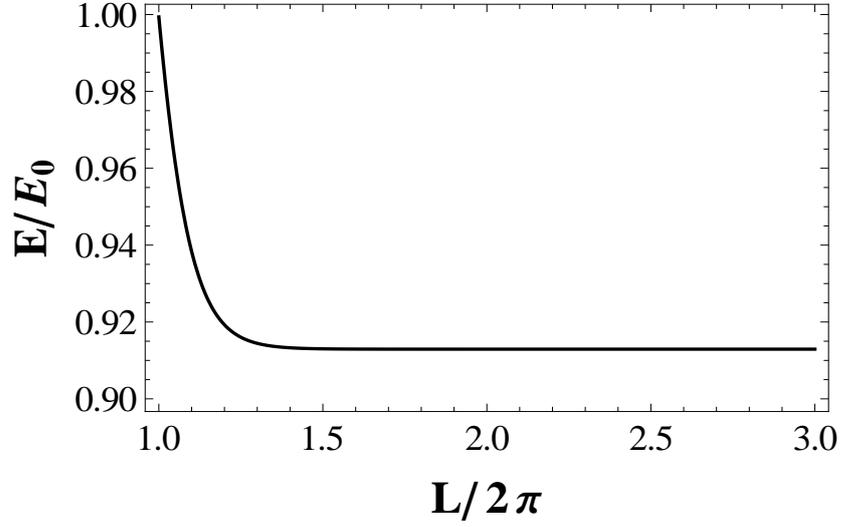


Figura 4.5: Energía total de la elástica confinada verticalmente dentro del cilindro, como función de su longitud.

Es importante notar que la energía de un lazo libre, es de la forma $E = \pi/R$. Así, para longitudes cercanas a 2π , tanto la elástica libre, como la confinada verticalmente, decrecen a una tasa similar; sin embargo, conforme la longitud de la elástica aumenta, en el caso libre se encuentra que la energía tiende a cero rápidamente, mientras que la confinada, se satura en $E = 0.912\pi$.

4.3. Elástica de Euler confinada por un cilindro

Examinamos el confinamiento de un anillo circular de radio R , dentro de un cilindro de radio R_0 , menor que el radio del anillo. A diferencia de la esfera, ya no es obvio que en el confinamiento débil, habrá contacto completo.

Utilizando los resultados derivados en el Apéndice C, para superficies que presentan simetría axial, es posible hallar la curvatura geodésica para el caso cilíndrico:

$$\kappa_g = -\alpha', \quad (4.27)$$

donde α , es el ángulo que el vector tangente al lazo, hace con la dirección de los paralelos del cilindro. Las dos curvaturas principales, resultan ser, $C_\perp = 0$ y $C_\parallel = 1$, por lo que la curvatura normal y la torsión geodésica son:

$$\kappa_n = -\text{Cos}^2\alpha; \quad \tau_g = -\frac{\text{Sen } 2\alpha}{2}. \quad (4.28)$$

Como se hizo para el confinamiento esférico, las longitudes serán medidas en unidades de R_0 . La ecuación de Euler-Lagrange (2.20), en términos del parámetro α , adquiere la forma:

$$-\varepsilon_l = \alpha''' + \alpha' \left(\frac{\alpha'^2}{2} + \frac{3}{2} \text{Cos}^4 \alpha - 6 \text{Sen}^2 \alpha \text{Cos}^2 \alpha - c \right) = 0. \quad (4.29)$$

Es posible aprovechar, las invariancias translacional y rotacional, a lo largo, y alrededor del eje de simetría del cilindro, y así obtener una cuadratura para α , como se verá a continuación.

La invariancia translacional a lo largo del eje $\hat{\mathbf{z}}$, implica que $f = \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{z}}$, es constante. Así, proyectando la expresión (2.22) de \mathbf{F} , sobre el vector $\hat{\mathbf{z}}$ y usando las definiciones para \mathbf{T} y \mathbf{l} , dadas en la Ec.(C.10), se obtiene:

$$f = -\text{Cos} \alpha (\kappa'_g - \kappa_n \tau_g) + \text{Sen} \alpha \left(\frac{\kappa_g^2 + \kappa_n^2}{2} - c \right). \quad (4.30)$$

De manera similar, la invariancia rotacional al rededor del eje $\hat{\mathbf{z}}$, establece que $m = \mathbf{M} \cdot \hat{\mathbf{z}}$, es constante. Sobre un cilindro, el vector de posición, \mathbf{Y} , puede ser expresado en la base de Darboux, como:

$$\mathbf{Y} = Z (\text{Sen} \alpha \mathbf{T} - \text{Cos} \alpha \mathbf{l}) + \mathbf{n}, \quad (4.31)$$

por lo tanto:

$$\mathbf{Y} \times \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{z}} = \text{Sen} \alpha (\kappa'_g - \kappa_n \tau_g) + \text{Cos} \alpha \left(\frac{\kappa_g^2 + \kappa_n^2}{2} - c \right). \quad (4.32)$$

Usando la expresión (2.32) para \mathbf{S} , uno obtiene:

$$S_3 = \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{z}} = \kappa_n \text{Cos} \alpha. \quad (4.33)$$

Sumando las expresiones (4.32) y (4.33), m es identificado:

$$m = \text{Sen} \alpha (\kappa'_g - \kappa_n \tau_g) + \text{Cos} \alpha \left(\frac{\kappa_g^2 + \kappa_n^2}{2} + \kappa_n - c \right). \quad (4.34)$$

Es directo demostrar que, $f' = \text{Cos} \alpha \varepsilon_1$ y $m' = \text{Sen} \alpha \varepsilon_1$, así, en equilibrio, f y m son conservados.

Las ecuaciones (4.30) y (4.34), son de segundo orden en derivadas de α , la dependencia se debe al término κ'_g . Tomando la combinación lineal apropiada, es posible eliminar esta dependencia y quedarnos a primer orden:

$$f \operatorname{Sen} \alpha + m \operatorname{Cos} \alpha = \frac{\kappa_g^2 + \kappa_n^2}{2} + \kappa_n \operatorname{Cos}^2 \alpha - c. \quad (4.35)$$

Sustituyendo κ_g y κ_n , de las ecuaciones (4.27) y (4.28), en la ecuación anterior, la siguiente cuadratura para α es obtenida:

$$\frac{1}{2}(\alpha')^2 + V(\alpha) = c, \quad (4.36)$$

donde:

$$V(\alpha) = -\frac{\operatorname{Cos}^4 \alpha}{2} - f \operatorname{Sen} \alpha - m \operatorname{Cos} \alpha.$$

Este resultado fue derivado en [31]. El análisis nuevamente se facilita, al explotar la analogía de una partícula, dentro de un pozo de potencial periódico.

Notemos que una segunda combinación lineal de los parámetros f y m , da como resultado:

$$-f \operatorname{Cos} \alpha + m \operatorname{Sen} \alpha = \kappa'_g - 2\kappa_n \tau_g, \quad (4.37)$$

o en términos de α :

$$\alpha'' + 2\operatorname{Cos}^3 \alpha \operatorname{Sen} \alpha - f \operatorname{Cos} \alpha + m \operatorname{Sen} \alpha = 0. \quad (4.38)$$

Es sencillo comprobar, que esta relación surge al diferenciar la Ec.(4.36).

La energía de doblamiento, del anillo confinado por el cilindro, consta de la suma de las partes geodésica y normal, reflejando la descomposición de la curvatura de Frenet, $\kappa^2 = \kappa_g^2 + \kappa_n^2$:

$$H = \frac{1}{2} \int ds (\alpha'^2 + \operatorname{Cos}^4 \alpha). \quad (4.39)$$

Con ayuda de la cuadratura (4.36), la energía puede ser expresada en términos de α :

$$H = \int ds (\operatorname{Cos}^4 \alpha + f \operatorname{Sen} \alpha + m \operatorname{Cos} \alpha + c). \quad (4.40)$$

De igual manera, la fuerza confinante sobre el cilindro dada por la Ec.(2.21), puede ser expresada en términos de α , como se hizo en [31]:

$$\begin{aligned}
-\lambda &= 6c \operatorname{Cos} 2\alpha + 2 \operatorname{Cos}^4 \alpha (6 \operatorname{Cos}^2 \alpha - 5) \\
&+ 5m \operatorname{Cos} \alpha (3 \operatorname{Cos}^2 \alpha - 2) + 3f \operatorname{Sen} \alpha (5 \operatorname{Cos}^2 \alpha - 2) . \quad (4.41)
\end{aligned}$$

En un anillo aislado, libre de fuentes de tensión externas, se espera que $f = 0$. Entonces, el potencial que aparece en la cuadratura (4.36), posee simetría arriba-abajo, es decir, simetría bajo cambios de $\alpha \rightarrow -\alpha$. Sin embargo, la constante m no desaparece; esto rompe la simetría izquierda-derecha, $\alpha \rightarrow 2\pi - \alpha$. No existe solución analítica para α en función de s , cuando $m \neq 0$.⁴ Es por esto que, a continuación se presenta una solución perturbativa, para anillos débilmente confinados, que será útil para después presentar la solución numérica.

4.3.1. Confinamiento cilíndrico débil

Supongamos que en un principio, existe contacto completo entre la elástica y las paredes del cilindro. Un anillo circular, que yace en el plano ortogonal al eje del cilindro, cumple con $\alpha = 0$ en cualquier punto. El confinamiento débil, ocurre para lazos con una longitud un poco mayor a la de este anillo circular. En este régimen, se cumple que $\alpha \ll 1$ y es posible realizar una aproximación armónica de la Ec.(4.36), alrededor de $\alpha = 0$, lo cual da como resultado:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\alpha}{d\varphi} \right)^2 + \left(1 + \frac{1}{2}m \right) \alpha^2 = c + m + \frac{1}{2} . \quad (4.43)$$

A este orden, la longitud del lazo es $2\pi R_0$ y s es reemplazado por $R_0\varphi$, donde φ es el ángulo azimutal sobre el cilindro. Además, se ha considerado que el lazo, posee simetría arriba-abajo. Como en el caso de confinamiento esférico, existen soluciones periódicas con simetrías de orden n , de la forma $\alpha = \alpha_1 \operatorname{Sen} n\varphi$, donde n es un entero positivo y α_1 una constante. En contraste con la descripción de confinamiento por una esfera, la deformación con $n = 1$, no es identificada con una rotación.

Las constantes m y c , se expanden a segundo orden:

$$m = m_0 + m_2 + \dots , \quad c = c_0 + c_2 + \dots .$$

⁴Si se multiplican ambos lados de la Ec.(4.36) por $\operatorname{Sec}^4 \alpha$, entonces:

$$\frac{1}{2} (\operatorname{Tan} \alpha)'^2 - \frac{1}{2} - f \operatorname{Sec}^3 \alpha \operatorname{Tan} \alpha - m \operatorname{Sec}^3 \alpha = c \operatorname{Sec}^4 \alpha . \quad (4.42)$$

Si tanto f como m se anulan, es posible resolver la cuadratura en términos de las funciones elípticas.

Al sustituir la solución armónica para α en la cuadratura (4.43) y respetando el orden de las ecuaciones, encontramos m_0 y c_0 , en términos de n y α_1 :

$$m_0 = n^2 - 2 \quad (4.44)$$

$$c_0 = \frac{3}{2} - n^2. \quad (4.45)$$

La suma de la corrección a segundo orden, está restringida por la amplitud α_1 :

$$c_2 + m_2 = \frac{1}{2}n^2\alpha_1^2.$$

Reconstrucción de la curva

Las funciones de encajamiento para este caso son $\mathbf{Y} = (\text{Cos } \varphi, \text{Sen } \varphi, z)$. Para encontrar z como función de s , empleamos la primera relación de la Ec.(C.11), y se realiza una expansión en serie de Taylor alrededor de $\alpha = 0$:

$$z' = \text{Sen}(\alpha_1 \text{Sen } n\varphi) \simeq \alpha_1 \text{Sen } n\varphi$$

Integrando la ecuación anterior, se obtiene z como función del ángulo azimutal:

$$z(\varphi) = \frac{\alpha_1}{n}(\text{Cos } n\varphi - 1) \quad (4.46)$$

Sólo falta por determinar la amplitud, α_1 , en términos del exceso de longitud del lazo, ΔR . Observemos que la longitud de arco puede ser escrita como:

$$ds^2 = \left[\left(\frac{dl}{d\varphi} \right)^2 + R^2 \right] d\varphi^2.$$

Usando las Ecs.(C.11), encontramos la relación $\left(\frac{dl}{d\varphi} \right)^2 = R^2 \text{Tan}^2 \alpha$. Por lo tanto, con correcciones de orden cuadrático en este régimen, la longitud de arco toma la forma:

$$ds = d\varphi (1 + \tan^2 \alpha)^{1/2} \approx d\varphi \left(1 + \frac{1}{2}\alpha^2 \right). \quad (4.47)$$

Considerando que la longitud del anillo, en términos del exceso de longitud es, $2\pi R = 2\pi (1 + \Delta R)$, al integrar la relación anterior, se encuentra:

$$\Delta R \approx \frac{1}{4}\alpha_1^2. \quad (4.48)$$

Con este resultado, es posible escribir las funciones de encajamiento, en términos del exceso de longitud del anillo ΔR .

Condiciones de frontera

La primera condición de frontera, surge de la longitud fija de la elástica. Escribiendo en su forma integral la cuadratura, esta condición implica:

$$\frac{2\pi R}{2n} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\alpha_1} \frac{d\alpha}{\sqrt{c - V(\alpha)}}, \quad (4.49)$$

Mientras que la condición de cerradura tras un periodo del ángulo azimutal, es obtenida al reescribir la segunda de las Ecs.(C.11), en su forma integral:

$$\frac{2\pi}{2n} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\alpha_1} \frac{\cos \alpha \, d\alpha}{\sqrt{c - V(\alpha)}}. \quad (4.50)$$

Para anillos débilmente confinados, tenemos la relación:

$$c - V(\alpha) \approx \gamma (\alpha_1^2 - \alpha^2)(\alpha_2^2 - \alpha^2),$$

donde:

$$\gamma = (18 + n^2)/24, \quad \text{y} \quad \alpha_2^2 \approx \frac{n^2}{2\gamma} \left(1 + \frac{m_2}{n^2} - \frac{2\gamma}{n^2} \alpha_1^2 \right)$$

Por lo tanto:

$$\frac{1}{\sqrt{c - V(\alpha)}} \approx \frac{\sqrt{2}}{n} \frac{1}{\sqrt{\alpha_1^2 - \alpha^2}} \left(1 - \frac{m_2}{2n^2} - \frac{\gamma}{n^2} [\alpha_1^2 + \alpha^2] \right).$$

De la Ec.(4.49), se sigue que:

$$\Delta R \approx \frac{1}{2n^2} (3\gamma\alpha_1^2 - m_2).$$

Así, obtenemos c_2 y m_2 , como función del exceso de longitud del anillo:

$$m_2 \approx \frac{3}{2}(6 - n^2)\Delta R. \quad c_2 \approx \frac{1}{2}(7n^2 - 18)\Delta R.$$

La segunda condición de frontera (4.50), es equivalente a la Ec.(4.48).

Energía y fuerza confinante

En la aproximación cuadrática, la energía puede ser escrita en la forma:

$$\begin{aligned} H &\approx \pi \left[1 + \frac{1}{2}(n^2 - \frac{3}{2})\alpha_0^2 \right] \\ &\approx H_{\text{loop}} [1 + 2(n^2 - 1)\Delta R] , \end{aligned} \quad (4.51)$$

donde $H_{\text{loop}} = \pi/R$, es la energía de la elástica circular. El estado base, es el descrito por un lazo elíptico con $n = 1$. A este orden, su energía coincide con la del lazo circular original.

La fuerza λ , dada por la Ec.(4.41), en esta aproximación adquiere la forma:

$$\begin{aligned} \lambda &= -6c - 5m - 2 + \left(16 + 12c + \frac{35}{2}m \right) \alpha^2 \\ &= n^2 - 1 - \frac{7}{2}n^2\alpha_1^2 + \left(\frac{11}{2}n^2 - 1 \right) \alpha^2. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Notemos que es positiva para $n \geq 2$, en el límite $\Delta R \rightarrow 0$. Este comportamiento es completamente análogo a la inestabilidad de Euler, asociada a la simetría de grado n , confinada por la esfera. Para el estado elíptico confinado con $n = 1$, λ se reduce a la expresión:

$$\lambda = 4\Delta R \left(1 - \frac{9}{2}\text{Cos}^2\varphi \right) , \quad (4.53)$$

Que desaparece en el límite $\Delta R \rightarrow 0$. Para valores en los que Δ sigue siendo pequeño, pero no es nulo, λ no es positivo en todas partes. Es importante identificar los lugares en los que será negativo.

Estabilidad

A continuación, se examina la estabilidad de los estados con simetría de orden n , para anillos débilmente confinados, que han sido descritos en las secciones anteriores. Para hacer esto, se requiere la segunda variación de la energía, con respecto a pequeñas deformaciones del lazo.

$$\delta^2 H = \int ds \Psi_{\perp} \delta\varepsilon_1 , \quad (4.54)$$

donde $\delta\varepsilon_1$, se determina a partir de la Ec.(4.29), al expandir a segundo orden en α , las funciones trigonométricas involucradas y aplicando la variación a

la expresión resultante, obteniendo así:

$$\delta\varepsilon_1 = -\delta\alpha''' - \delta\alpha' \left(\frac{3}{2} - c + \frac{3}{2}(\alpha')^2 \right) + 9(\alpha^2\delta\alpha)' . \quad (4.55)$$

Debido a que una deformación de la elástica, $\delta\mathbf{Y}$, debe yacer sobre la superficie, esta puede ser descompuesta con respecto a la base $\{\mathbf{T}, \mathbf{l}\}$:

$$\delta\mathbf{Y} = \Psi_{\parallel}\mathbf{T} + \Psi_{\perp}\mathbf{l}, \quad (4.56)$$

por lo que Ψ_{\parallel} y Ψ_{\perp} , representan la deformación del lazo, a lo largo de los vectores \mathbf{T} y \mathbf{l} , respectivamente. Así, la variación del vector tangente, puede ser expresada en el marco de Darboux, como:

$$\delta\mathbf{T} = \delta\mathbf{Y}' = (\Psi'_{\parallel} - \kappa_g\Psi_{\perp})\mathbf{T} + (\kappa_n\Psi_{\parallel} + \tau_g\Psi_{\perp})\mathbf{n} + (\Psi'_{\perp} + \kappa_g\Psi_{\parallel})\mathbf{l}. \quad (4.57)$$

La normalización de \mathbf{T} , impone la siguiente relación, entre las dos componentes de la variación del campo:

$$\Psi'_{\parallel} - \kappa_g\Psi_{\perp} = 0. \quad (4.58)$$

Mientras que la constricción de longitud fija, a lo largo de la superficie cilíndrica, a su vez, implica una constricción global sobre la deformación normal:

$$\oint ds \kappa_g\Psi_{\perp} = 0. \quad (4.59)$$

Al comparar la variación de $\delta\mathbf{T}$ en (4.57) y la variación de la expresión en términos de α en (C.10), se encuentra:

$$\delta\alpha = -\Psi'_{\perp} - \kappa_g\Psi_{\parallel} = -\Psi'_{\perp} + \alpha'\Psi_{\parallel}. \quad (4.60)$$

Este resultado, junto con la condición de longitud fija (4.58), permiten determinar $\delta\varepsilon_1$ de la Ec.(4.55), como función de las componentes de la variación del campo:

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_1 &= \Psi_{\perp}'''' + \left[\frac{3}{2} - c - 9\alpha^2 + \frac{5}{2}(\alpha')^2 \right] \Psi_{\perp}'' + [5\alpha'\alpha'' - 18\alpha\alpha'] \Psi'_{\perp} \\ &\quad + \left[4\alpha'\alpha''' + 3(\alpha'')^2 + (\alpha')^2 \left(\frac{3}{2} - c - 9\alpha^2 + \frac{3}{2}(\alpha')^2 \right) \right] \Psi_{\perp} \\ &\quad - \left[\alpha'''' + \alpha'' \left(\frac{3}{2} - c - 9\alpha^2 + \frac{3}{2}(\alpha')^2 \right) - 18\alpha(\alpha')^2 \right] \Psi_{\parallel} \end{aligned}$$

Utilizando la aproximación armónica de α a segundo orden, en la ecuación anterior, la segunda variación de la energía (4.54), toma la forma:

$$\begin{aligned}
\delta^2 H = & \oint ds \Psi_{\perp} \left\{ \Psi_{\perp}'''' + \left[\frac{3}{2} - c - 9\alpha^2 + \frac{5}{2}(\alpha')^2 \right] \Psi_{\perp}'' \right. \\
& + [5\alpha'\alpha'' - 18\alpha\alpha'] \Psi_{\perp}' \\
& + \left[4\alpha'\alpha''' + 3(\alpha'')^2 + (\alpha')^2 \left(\frac{3}{2} - c \right) \right] \Psi_{\perp} \\
& \left. - \left[\alpha'''' + \alpha'' \left(\frac{3}{2} - c \right) \right] \Psi_{\parallel} \right\}. \tag{4.61}
\end{aligned}$$

Es fácil demostrar que el último término, es la derivada respecto a s , de la aproximación armónica de la ecuación de Euler-Lagrange:

$$\varepsilon_1 \simeq -\alpha'''' - \alpha'' \left(\frac{3}{2} - c \right) = 0. \tag{4.62}$$

Mientras que el tercer término, puede ser expresado como:

$$\frac{1}{2}(\Psi_{\perp}^2)'(5\alpha'\alpha'' - 18\alpha\alpha'),$$

que al ser integrado por partes, da como resultado una derivada total, (que no contribuye a la variación de la energía) y una expresión proporcional a Ψ_{\perp}^2 , que puede ser sumada con el cuarto término de la Ec.(4.61), para así, expresar la segunda variación de la energía, como función únicamente de Ψ_{\perp} :

$$\delta^2 H = \oint ds \Psi_{\perp} (\Psi_{\perp}'''' + V_1 \Psi_{\perp}'' + V_2 \Psi_{\perp}), \tag{4.63}$$

donde:

$$\begin{aligned}
V_1 &= \frac{3}{2} - c - 9\alpha^2 + \frac{5}{2}(\alpha')^2 \\
V_2 &= \frac{1}{2}\alpha'\alpha''' + \frac{1}{2}(\alpha'')^2 + 9((\alpha')^2 + \alpha\alpha''), \tag{4.64}
\end{aligned}$$

y se ha usado la Ec.(4.62), para obtener la expresión de V_2 .

Para el caso de confinamiento débil, se tiene que $\alpha \rightarrow 0$ y $c \rightarrow c_0 = 3/2 - n^2$, por lo que V_1 y V_2 son constantes; $V_1 = n^2$ y $V_2 = 0$, por lo tanto, (4.63) puede ser reescrita en la forma:

$$\delta^2 H = \oint ds \Psi_{\perp} \mathcal{L} \Psi_{\perp}, \tag{4.65}$$

donde el operador lineal de cuarto orden \mathcal{L} , está dado por:

$$\mathcal{L} = \frac{\partial^4}{\partial s^4} + n^2 \frac{\partial^2}{\partial s^2}. \tag{4.66}$$

Se observa que \mathcal{L} es auto-adjunto, por lo tanto, sus eigenvalores son reales. Si todos sus valores propios son positivos, entonces, la configuración de equilibrio correspondiente será estable. En caso contrario, si alguno de ellos es negativo, indicaría la presencia de deformaciones que podrían disminuir la energía de doblamiento, por lo que la configuración correspondiente será inestable.

La periodicidad implica que los modos de deformación son: $1, \text{Cos } m\varphi, \text{Sen } m\varphi$. Para un valor de n fijo, los eigenvalores de \mathcal{L} , son etiquetados por el entero $m = 0, 1, 2, \dots$, y dados por:

$$\Lambda_m = m^2 (m^2 - n^2) . \quad (4.67)$$

En la Fig.(4.6), los eigenvalores Λ_m , son graficados como función de m , para los valores más bajos de n . Debido a que por cada m , hay un par de modos de deformación, todos los valores propios con $m \geq 1$, son doblemente degenerados. Existen cuatro modos cero con $\Lambda_m = 0$, que ocurren en $m = 0$ y $m = n$.

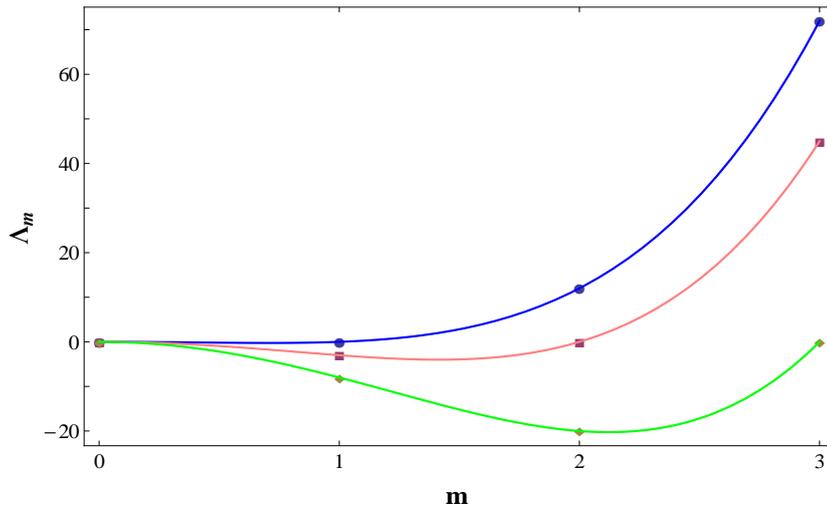


Figura 4.6: Eigenvalores Λ_m para el confinamiento cilíndrico débil, como función del número de modo m , para $n = 1$ (círculos), $n = 2$ (cuadrados), y $n = 3$ (diamantes). Las líneas de unión, no tienen significado físico para valores de m no enteros; son usados para facilitar la visualización de la gráfica.

El estado con $n = 1$, es el único estado estable en esta aproximación, ya que todos sus eigenvalores son positivos. Los estados con $n \geq 2$, poseen algunos valores propios negativos, por lo que son inestables. Habrá $2(n - 2)$ modos de deformación inestables, correspondientes a $m = 1, \dots, n - 1$ yaciendo entre los modos cero ubicados en $m = 0$ y $m = n$.

4.3.2. Confinamiento cilíndrico fuerte

Examinamos la forma adoptada por una elástica de longitud finita L , confinada dentro de una cavidad cilíndrica. A diferencia del confinamiento esférico, la cuadratura (4.36), no puede ser resuelta de manera analítica.

Al diferenciar respecto a s la Ec.(4.36), se obtiene la ecuación de Euler-Lagrange (4.38). Con esto, se logra eliminar al parámetro c , de la ecuación diferencial resultante y a cambio se ha aumentado el orden de la derivada de α . Notemos que la condición de cerradura en z , tras abarcar la longitud total de la elástica, puede ser escrita en forma integral, como:

$$\int d\alpha \frac{\text{Sen } \alpha}{\sqrt{2(c - V(\alpha))}} = 0.$$

Para que esta condición se cumpla, es necesario que el denominador en el integrando sea una función par, lo cual implica que $f = 0$. Por lo tanto, la ecuación que describe el sistema de interés, es:

$$\alpha'' + \text{Sen } \alpha (2 \text{Cos}^3 \alpha + m) = 0. \quad (4.68)$$

Que se encuentra sujeta a la condición de longitud fija (4.49) y cerradura del lazo (4.50). En términos de α , la primera condición requiere que se cumpla $\alpha(s = 0) = 0$ y $\alpha(s = L/2n) = 0$, mientras que la condición de cerradura es $\varphi' = \text{Cos } \alpha$. Los detalles de la solución a esta ecuación diferencial, que arrojan como resultado α en función de s , para cada L y n dados, se muestran en el Apéndice D.

Estados como trayectorias en el espacio de parámetros

Como se ha mencionado, cada estado de equilibrio, puede ser representado como una trayectoria en el espacio de parámetros. Una vez encontrado α , como solución de la ecuación de Euler-Lagrange (4.68), es posible encontrar los parámetros m y c , como función de la longitud de la elástica. Con esta información, la curva de la Fig.4.7(a) es generada, misma que representa la trayectoria $(c(L), m(L))$, para los estados de equilibrio con simetría $n = 1$. El punto inicial en el espacio de parámetros es $(1/2, -1)$, lo que es consistente con el análisis perturbativo de las Ecs. (4.44) y (4.45), donde para $n = 1$, se encuentran los valores de $c_0 = 1/2$ y $m_0 = -1$, para elásticas de longitud cercana a 2π . Conforme la longitud del anillo aumenta, la trayectoria tiende al origen $(0, 0)$ y lo hace de la siguiente manera: inicialmente, la constante c tiene un valor positivo de $1/2$, el cual disminuye con la longitud de la elástica, hasta sufrir un cambio de signo para $L = 2.39\pi$, después aumenta y tiende a cero. Por otra parte, la constante m , en un principio es negativa, aumenta con la longitud y al igual que c sufre un cambio de signo, pero para una longitud mayor, $L = 2.61\pi$, finalmente m tiende a cero.

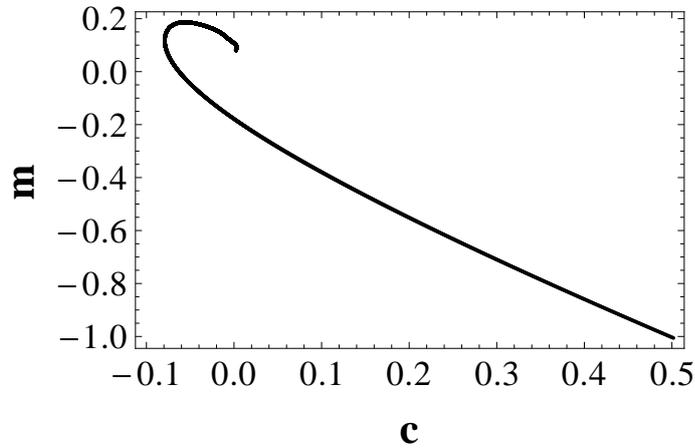
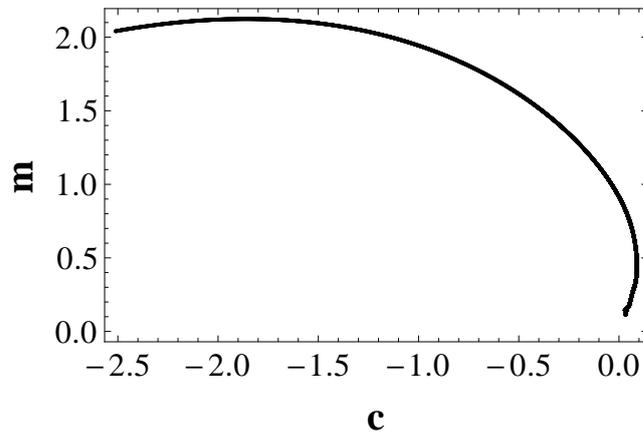
(a) Estados con simetría $n = 1$ (b) Estados con simetría $n = 2$

Figura 4.7: Trayectoria en el espacio de parámetros $(c(L), m(L))$, para los estados con simetrías $n = 1$ y $n = 2$

De manera completamente análoga, la trayectoria en el espacio de parámetros, para el estado con simetría de orden $n = 2$, es obtenida, (ver Fig.4.7(b)). Esta vez, el punto inicial es el $(-5/2, 2)$, lo que coincide con el tratamiento perturbativo del problema. Al incrementar la longitud, la curva también tiende al origen, pero ahora, el comportamiento de las constantes m y c , es totalmente opuesto al de $n = 1$. En este caso, c comienza con un valor negativo de $-5/2$, el cual aumenta con la longitud, sufre un cambio de signo para una longitud $L = 4.62\pi$, (casi dos veces mayor que para $n = 1$) y en seguida tiende a cero. Mientras que el parámetro m inicialmente tiene un valor positivo, el cual decrece con la longitud y tiende a cero, sin cambiar de signo durante la trayectoria.

Curvas elásticas para el estado $n=1$

El estado con simetría $n = 1$, es ilustrado en la Fig.(4.8), para valores de L en el intervalo $[2\pi, 5.5\pi]$. Cuando la longitud del anillo es cercana a 2π , la elástica resulta consistente con el círculo geodésico, (ver Fig.4.8(a)). Conforme la longitud del anillo incrementa, la mitad de este, comienza a separarse del plano transversal al eje del cilindro (ver Fig.4.8(b)), pareciera que intenta girar para adoptar la configuración vertical de la Fig.(4.3). En la Fig.4.8(c), se muestra la primera elástica para la cual α adquiere el valor de $\pi/2$, lo que implica $\varphi' = 0$, su longitud es $L = 5.43\pi$.

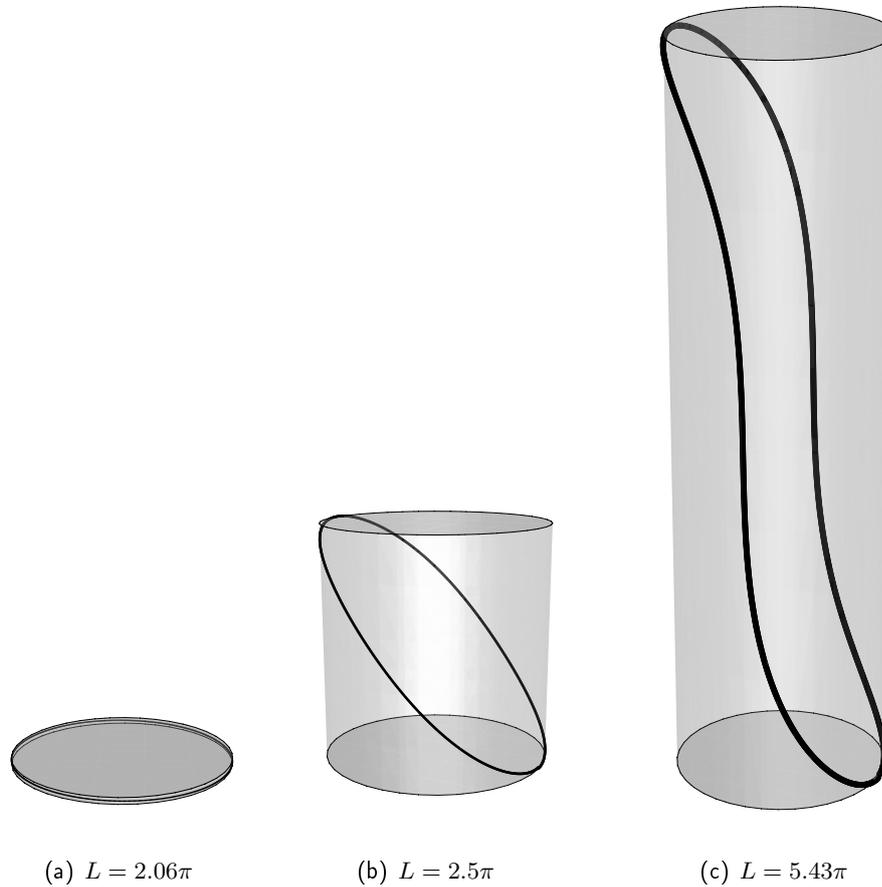


Figura 4.8: Estado con simetría $n = 1$, para valores de L , en el intervalo $[2\pi, 5.5\pi]$, dentro de un cilindro unitario: (a) muestra la configuración próxima al círculo geodésico; (b) la separación de la elástica con respecto al plano transversal al eje del cilindro; (c) la primera elástica con $\alpha = \pi/2$.

Curvas elásticas para el estado $n=2$

En la Fig.(4.9), se aprecia el estado con simetría $n = 2$, para valores de L en el intervalo $[2\pi, 4.5\pi]$. Nuevamente, para $L = 2.06\pi$, la curva se aproxima al círculo geodésico, (ver Fig.4.9(a)). Mientras que en la Fig.4.9(b), se observa la manera en la que evoluciona la elástica con la longitud, los cuatro puntos en los que $\alpha = 0$ se ven claramente. En la Fig.4.9(c), se muestra la elástica de longitud $L = 4.51\pi$, para la cual, α adquiere el valor de $\pi/2$ por primera vez y por lo tanto, a partir de este valor de L , los estados de equilibrio presentan traslapes, pero a diferencia del caso esférico, no existen autointersecciones, ya que el confinamiento por cilindros, permite a la elástica crecer a lo largo del eje axial. Notemos que $\varphi' = 0$, ocurre por vez primera, para una elástica de menor longitud en el caso con simetría $n=2$, que para el caso $n = 1$.

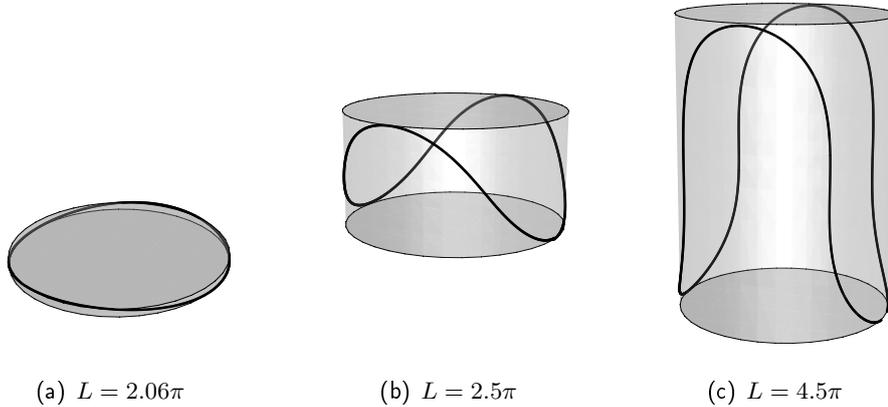


Figura 4.9: Estado con simetría $n = 2$, para valores de L , en el intervalo $[2\pi, 4.5\pi]$, dentro de un cilindro unitario: (a) muestra la configuración próxima al círculo geodésico; (b) los cuatro puntos con $\alpha = 0$ se muestran claramente; (c) la primera elástica para la cual α adquiere un valor de $\pi/2$.

4.4. Energía del lazo

En la Fig.(4.10), la energía es graficada como función de la longitud, para los estados con simetría $n = 1$ y $n = 2$, esto se logra al sustituir la solución para α , en la Ec.(4.40). Así mismo, se muestra la energía para el confinamiento vertical. Para $L = 2\pi$, la energía de todas las configuraciones, es la misma que la del lazo sin constricción, $E_0 = \pi$.

El estado con menor energía, está dado por la configuración vertical, en

este caso, la elástica sufre la transición a un círculo deformado,⁵ alineado a lo largo del eje del cilindro y haciendo contacto con él en dos puntos; esto sucede para longitudes en el intervalo $[2\pi, 2.78\pi]$. Para longitudes mayores, el contacto con las paredes del cilindro aumenta, este proceso no contribuye a la energía de la elástica y por lo tanto, para $L > 2.78\pi$, no hay cambio en la energía, esta permanece en el valor $E_{min} = 0.912\pi$.

La energía del estado con simetría $n = 1$, también decrece con la longitud, hasta alcanzar su valor mínimo $E_{min} = 0.9\pi$, para $L = 2.54\pi$. Durante este proceso, pareciera que la elástica intenta girar, para así adoptar la configuración vertical, que tiene una menor energía. Para longitudes mayores a 2.54π , la energía comienza a crecer hasta alcanzar su máximo valor, $E_{max} = 1.063\pi$, sólo un poco mayor a la energía de la elástica sin constricción.

Para $n = 2$, la energía crece con la longitud, hasta alcanzar su valor máximo, $E_{max} = 2.85\pi$, para $L = 4.45\pi$. Para $L > 4.45\pi$, E decrece, esto se debe a que la elástica alcanzará el valor de $\alpha = \pi/2$, por lo que se desarrollan traslapes, lo que permite que la elástica se relaje. Para un lazo de longitud 4π , que cubre dos veces el círculo geodésico, la energía es $2E_0 = 2\pi$, que resulta menor a 2.83π , la energía del estado con simetría $n = 2$, para un lazo de la misma longitud.

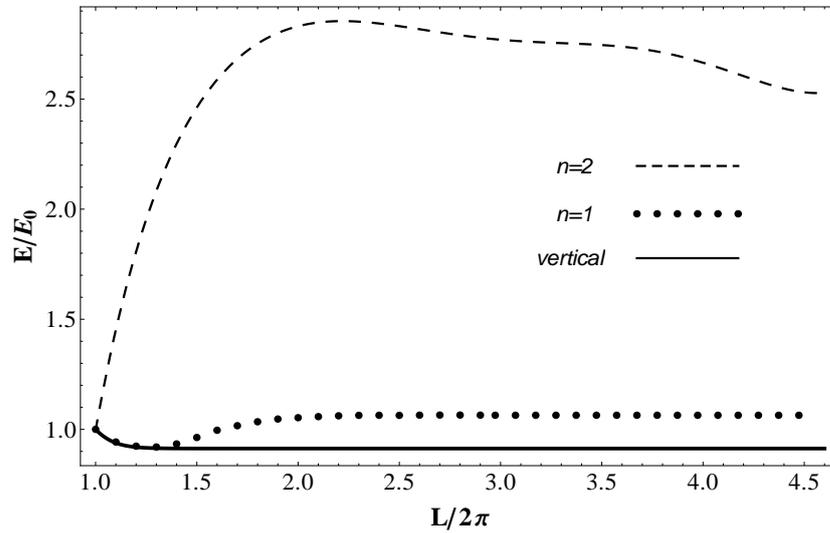


Figura 4.10: Energía total de los estados con simetría $n = 2$, $n = 1$ y vertical, como función de L .

⁵Este círculo deformado es de mayor longitud, menor curvatura y por lo tanto de menor energía que el círculo geodésico

Se podría pensar que la energía asintótica del estado con $n = 1$, debería ser el doble de la del estado con $n = 2$, ya que al comparar las Figs.4.8(c) y 4.9(c), parecería que la curva para el estado con simetría $n = 2$, está formada por la unión de dos curvas para el estado con simetría $n = 1$. Sin embargo, se encuentra que la energía asintótica de $n = 2$, es 2.3 veces la de $n = 1$. Esto nos permite realizar la conjetura, de que el estado con simetría $n = 3$, tendrá una energía asintótica de 3.93π .

También es importante notar que, la energía para $n = 1$ se satura para $L = 4.73\pi$, mientras que para $n = 2$ se satura en $L = 9.2\pi$. Es decir que la longitud para la cual el estado con simetría $n = 2$ se satura, es casi el doble de la longitud para la cual lo hace el estado con simetría $n = 1$. Esto nos hace pensar, que la energía del estado con simetría $n = 3$, se saturará para una longitud aproximada de $L \simeq 14.19\pi$.

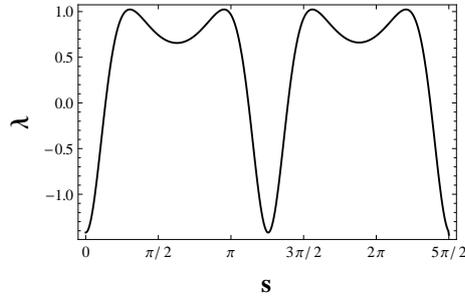
4.5. Fuerzas transmitidas

Usando la Ec.(4.41), es posible encontrar la fuerza local por unidad de longitud, transmitida al cilindro, como función de s , una vez dada la longitud de la elástica. Esto se muestra, para el estado con simetría $n = 1$ y para dos longitudes: $L = 2.5\pi$ en la Fig.4.11(a) y para $L = 5.43\pi$ en la Fig.4.11(b). Se encontró que para $L = 2\pi$, el valor de la fuerza es cero, mientras que para $L > 2\pi$, todas las configuraciones poseen secciones en las que la fuerza es negativa. Este resultado fue previsto en el análisis perturbativo de la Ec.(4.53). Además, las secciones de fuerza negativa, ocurren cerca de los puntos donde se satisface $\alpha = 0$; conforme la longitud de la elástica aumenta, la fuerza se vuelve más negativa en estos puntos. Las regiones con $\lambda < 0$, aumentan con la longitud del lazo.

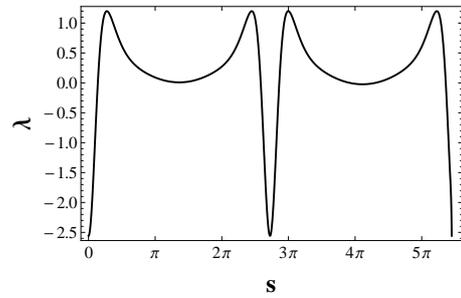
Para el estado con simetría $n = 2$ y longitudes en el intervalo $(2\pi, 2.15\pi)$, la fuerza por unidad de longitud, es positiva en todo punto, lo que confirma el resultado de la Ec.(4.52), realizado en el régimen de confinamiento débil. Para $L \geq 2.15\pi$, existen secciones del lazo donde λ es negativo, esto ocurre nuevamente cerca de los puntos donde $\alpha = 0$, como se aprecia en la Fig.4.11(c). De manera análoga al estado con simetría $n = 1$, las regiones donde la fuerza es negativa, aumentan con la longitud de la elástica, así como su magnitud, (ver Fig.4.11(d)).

Para elásticas de la misma longitud, las regiones en las que la fuerza es negativa, son mayores en el caso $n = 2$ que para $n = 1$. Más importante aún, las fuerzas negativas encontradas para las configuraciones con $n = 2$, son de mayor magnitud, que las encontradas para $n = 1$. Esto se debe a que $n = 2$, presenta el doble de veces regiones con $\alpha = 0$, de las que presenta $n = 1$, por

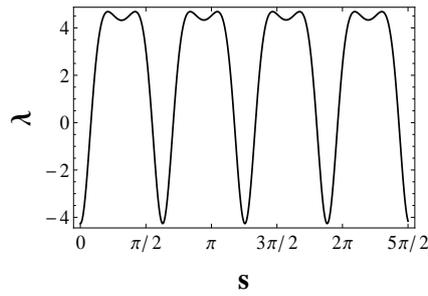
lo tanto, la elástica tiene que sufrir más deformaciones durante su trayectoria.



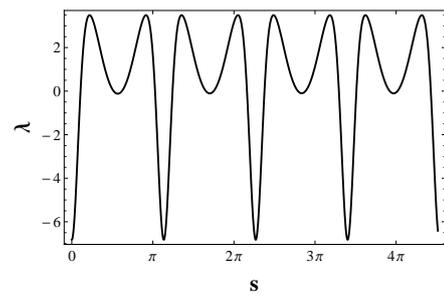
(a) Fuerza como función de s , para el estado con simetría $n = 1$ y una longitud $L = 2.50\pi$



(b) Fuerza como función de s , para el estado con simetría $n = 1$ y una longitud $L = 5.43\pi$



(c) Fuerza como función de s , para el estado con simetría $n = 2$ y una longitud $L = 2.5\pi$



(d) Fuerza como función de s , para el estado con simetría $n = 2$ y una longitud $L = 4.51\pi$

Figura 4.11: Fuerza como función de la longitud de arco, para diferentes estados: a) y b), representan el estado con simetría $n = 1$, para $L = 2.5\pi$ y $L = 5.43$ respectivamente; mientras que c) y d) muestran el estado con $n = 2$, para $L = 2.5\pi$ y $L = 4.51\pi$. Nótese que la amplitud de la fuerza, aumenta con la longitud de la elástica, en ambos casos.

La fuerza λ , sólo depende de la geometría local, esta geometría es determinada por el comportamiento global del lazo, a través de las condiciones de frontera. Si el lazo es cortado en algún lugar, el estado se relajará inmediatamente en una geodésica, con λ constante y positiva en todas partes. La existencia de regiones con $\lambda < 0$, a lo largo del lazo, no indican necesariamente tendencias de separarse de la superficie. Esto dependerá de los detalles de la energía, presentes en las diferentes configuraciones.

Intuitivamente, uno puede pensar que la fuerza total transmitida al cilin-

dro, $\Lambda = \int ds \lambda$, incrementará con la longitud del lazo. Sin embargo, esto no es cierto en general, ya que dependerá del estado y configuración adoptados por el lazo. Para la configuración vertical, Λ incrementa hasta saturarse con un valor de 1.48, al alcanzar una longitud de 2.78π , misma en la que se satura la energía y para la cual, la elástica empieza el contacto con las paredes verticales del cilindro. Para el estado con simetría $n = 1$, la fuerza total aumenta hasta alcanzar su valor máximo de 3.86, con una longitud $L = 3.2\pi$, para después disminuir y saturarse en el valor 2.84, para $L = 6.7\pi$. Mientras que para $n = 2$, Λ tiene un valor inicial de 18.77 y disminuye hasta saturarse en el valor 6.4, con $L = 6.58\pi$. Esto indica, que nuevamente, la saturación ocurre para longitudes menores en el caso vertical, que para el caso $n = 1$ y a su vez, $n = 1$ se satura para longitudes menores que $n = 2$. Estos comportamientos se muestran en la Fig.(4.12), donde se aprecia Λ , como función de la longitud L , para los diferentes estados.

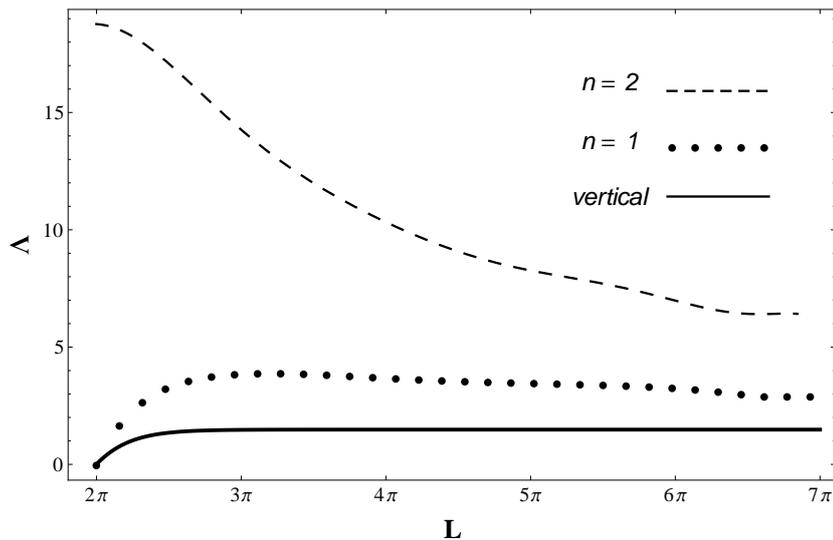


Figura 4.12: Fuerza total de los estados con simetría $n = 2$, $n = 1$ y vertical, como función de L .

4.6. Conclusiones del capítulo

Se examino el confinamiento cilíndrico de una superficie. Con los resultados encontrados en este proceso, es claro que el estado base, es el producido por el confinamiento vertical, ya que resulta ser la configuración con menor energía y fuerza total. Como se ha visto en el análisis perturbativo, el estado con simetría $n = 1$ es estable inicialmente. Sin embargo, al aumentar

un poco la longitud, pareciera que intenta adoptar la configuración vertical. Por otra parte, el estado con simetría $n = 2$, resulta ser inestable en el régimen de confinamiento débil, es por esto, que para longitudes pequeñas de la elástica, se cree que la configuración con $n = 2$, se desdobra, decayendo así, al estado con simetría $n = 1$. Conforme la longitud aumenta, las configuraciones se vuelven estables, ya que las paredes del cilindro, impedirán el desdoblamiento de la elástica, para decaer en configuraciones con menor energía y fuerza.

Capítulo 5

Conclusiones

Los avances relativamente recientes, en técnicas computacionales y experimentales, han permitido estudiar con mayor detalle el comportamiento elástico de los biopolímeros, proporcionando de esta manera, información relevante acerca de las propiedades estructurales de los mismos. Este tipo de avances, requiere de un incremento similar en el entendimiento teórico del sistema, para poder interpretar de manera adecuada cada resultado experimental, y por que no, utilizar técnicas diferentes para entender el problema desde otro punto de vista. Con este fin, se desarrolló un marco teórico, que involucra técnicas relacionadas con la geometría diferencial, para entender el confinamiento de un polímero semiflexible por una superficie. Las constricciones sobre los grados de libertad espaciales del polímero, fueron aplicadas en el principio variacional, usando el método de multiplicadores de Lagrange. Además, la pérdida de la invariancia Euclidiana de la energía, de la varilla sin constricción, bajo confinamiento, fue cuantificada a través del multiplicador de Lagrange que, en equilibrio, es identificado como la fuerza por unidad de longitud, transmitida a la superficie por el anillo confinado.

Nos hemos centrado en la búsqueda del estado base, dado por la configuración, en la que una elástica planar, yace de manera vertical dentro de la cavidad cilíndrica confinante. En este caso, sólo existen cambios en la energía y fuerza total, para longitudes en el intervalo $[2\pi, 2.78\pi]$, para esta última longitud, el lazo comienza el contacto finito con las paredes verticales del cilindro, lo cual no produce cambio alguno en la configuración y es consistente con la física del problema. Si el anillo es pequeño, las configuraciones de equilibrio, consisten de oscilaciones alrededor del círculo geodésico, que yace en el plano perpendicular al eje del cilindro. Estas configuraciones, exhiben una simetría dihedral de orden n . En este régimen, el único estado estable, está dado por $n = 1$, cabe mencionar, que este orden no esta presente para el caso de confinamiento esférico. Se encontró, que el estado con simetría $n = 2$, en el caso de confinamiento débil, es inestable y decae a $n = 1$. Sin embar-

go, conforme la longitud de la elástica incrementa, las paredes del cilindro impiden el desdoblamiento de la elástica y por ende, el decaimiento de los estados, en uno con menor energía.

A diferencia del confinamiento esférico, los estados examinados no presentan ni autocontacto, ni autointersecciones. Esto se debe a que la superficie confinante, para el caso cilíndrico, permite que la elástica crezca de manera longitudinal. Sin embargo, para simetrías con n grande, esto no es obvio. Además, el confinamiento cilíndrico, no exhibe las discontinuidades en la energía y fuerza transmitidas, presentes en el caso esférico, y que son asociadas a los cambios de simetría.

Al preguntar por la relevancia de estos resultados teóricos, en el caso biológico real, se debe tomar en cuenta que hemos realizado simplificaciones y aproximaciones al modelo, lo que nos permitió resolver un problema concreto, relativamente simple y bien definido. Los resultados obtenidos y las técnicas discutidas en esta tesis, deben ser consideradas una parte más de la información necesaria, en la construcción de la imagen final del problema. Debemos ser conscientes, que muchos son las incógnitas que aún guardan los sistemas biológicos y que a penas hemos iniciado la investigación de los mismos, por lo que todavía falta mucho por hacer.

El problema que hemos abordado, muestra varias características de interés desde un punto de vista geométrico y su aplicación para describir algunos procesos biológicos, por su simplicidad, resulta seductora. Por esto, se considera que sería interesante, utilizar el marco desarrollado, para describir el proceso de endocitosis en trabajos futuros. Esto se lograría, reemplazando la superficie confinante por un catenoide, lo que presentaría simetrías relevantes. En este trabajo, el papel que juega la superficie confinante, ha sido pasivo: no se ha considerado la posibilidad, de que la superficie pueda deformarse, debido a la presencia del polímero confinado. Estas deformaciones, podrían tener repercusiones importantes, en la morfología de membranas biológicas, por lo que se considera un problema interesante por estudiar.

El marco desarrollado, puede ser generalizado para casos en que el doblamiento sea promovido o inhibido por alguna interacción. Si se considera la posibilidad, de una energía de contacto, proporcional a la longitud de la curva en contacto con la superficie, descrita por un potencial ω ; entonces, se tiene que añadir a H_c , una energía $\omega L_{contacto}$. La competencia originada entre la energía de doblamiento de la elástica, la energía de doblamiento de la superficie y la energía de contacto, resulta útil en la descripción, por ejemplo, de la secuencia llevada a cabo por el virus del ébola, en el proceso de emisión del virus, después de la infección de una célula.

Apéndice A

Geometría diferencial de superficies bidimensionales

RESUMEN: Esta sección pretende introducir, algunos conceptos básicos, así como dar un panorama general de las nociones y herramientas utilizadas en la geometría diferencial clásica. Es necesario mencionar que el enfoque no será el desarrollar un rigor matemático.

A.1. Introducción

La geometría diferencial clásica, es el estudio de las propiedades locales de curvas y superficies, es decir, aquellas propiedades que dependen del comportamiento de las mismas, en la vecindad de un punto. En el estudio de estas propiedades, resulta conveniente el uso de las técnicas que provee el cálculo diferencial, por lo que las curvas y superficies con las que trabajamos, se consideran suaves y suficientemente diferenciables. Es importante resaltar, que algunas propiedades locales de curvas, aparecen de manera natural como parte del estudio de superficies, como se verá en las secciones subsecuentes.

A.2. Parametrización de una superficie

Sea Σ una superficie contenida en \mathbb{E}^3 , definida por la función que asumiremos, es suficientemente diferenciable:

$$\mathbf{y} = \mathbf{Y}(u^a), \tag{A.1}$$

donde u^a para $a = 1, 2$, son dos parámetros independientes, que pueden ser considerados, como las coordenadas locales que determinan un punto P en

la superficie Σ y se conocen como *coordenadas de Gauss*.

El vector $\mathbf{y} = y^\mu$, con $\mu = 1, 2, 3$, representa las coordenadas locales del mismo punto P , pero referidas a \mathbb{E}^3 y que consideramos, son coordenadas cartesianas ortogonales.

A.3. Primera forma fundamental

Definiendo los vectores tangentes a la superficie, que en general no son unitarios:

$$\mathbf{e}_a := \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial u^a}, \quad (\text{A.2})$$

junto con el vector unitario normal a la superficie:

$$\mathbf{n} := \frac{\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2}{\|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2\|}, \quad (\text{A.3})$$

es posible formar una base local en \mathbb{E}^3 :

$$\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{y} \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1. \quad (\text{A.4})$$

Para una curva definida sobre nuestra superficie, la longitud de arco adquiere la forma:

$$\begin{aligned} ds^2|_\Sigma &= d\mathbf{Y} \cdot d\mathbf{Y} \\ &= \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial u^a} \cdot \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial u^b} du^a du^b \\ &= (\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b) du^a du^b \\ &= \gamma_{ab} du^a du^b, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

donde el término al lado derecho de la igualdad, se denomina *primera forma fundamental* de la superficie, y además, hemos definido el *tensor¹ métrico covariante* de la superficie, γ_{ab} , como:

$$\gamma_{ab} := \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b, \quad (\text{A.6})$$

que resulta ser, un tensor de segundo orden simétrico ($\gamma_{ab} = \gamma_{ba}$) y sirve para determinar la distancia Euclidiana infinitesimal, en términos de las coordenadas diferenciales.

¹Un tensor es una entidad algebraica de varias componentes, que generaliza los conceptos de: escalar, vector y matriz, de una manera que sea independiente de cualquier sistema de coordenadas. En algunos casos, pueden ser representados por matrices, como el tensor de energía momento $T_{\mu\nu}$.

El tensor dual al tensor métrico, se denota por γ^{ab} y es definido por la siguiente relación:

$$\gamma_{ac}\gamma^{cb} := \delta_a^b := \begin{cases} 1 & \text{si } a = b \\ 0 & \text{si } ab \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

donde δ_a^b , es la *delta de Kronecker*. Debido a esta propiedad, el tensor γ_{ab} , puede ser usado para subir y bajar índices en ecuaciones tensoriales, consideremos por ejemplo, el tensor de segundo orden β_{ab} y formemos los productos internos:

$$\gamma^{ac}\beta_{ab} = \beta_b^c, \quad \text{y} \quad \gamma^{ac}\beta_{ba} = \beta_b^c,$$

en general, se tiene que, β_b^c no es igual a β_b^c , a menos que β_{ab} sea simétrico. Análogamente, es posible bajar los índices de algún tensor, realizando el producto interno con γ_{ab} .

Es directo demostrar que el determinante del tensor métrico, puede ser escrito como:

$$\gamma := |\gamma_{ab}| := \frac{1}{2}\varepsilon^{ac}\varepsilon^{bd}\gamma_{ab}\gamma_{cd} = \gamma_{11}\gamma_{22} - \gamma_{12}\gamma_{21}, \quad (\text{A.8})$$

con ε^{ac} , el símbolo bidimensional y antisimétrico de *Levi-Civita*, definido por:

$$\varepsilon^{ac} := \begin{vmatrix} \delta_1^a & \delta_2^a \\ \delta_1^c & \delta_2^c \end{vmatrix}, \quad (\text{A.9})$$

que además, satisface $\varepsilon^{ac} = \varepsilon_{ac}$. El determinante de la métrica, puede ser utilizado para calcular el elemento infinitesimal de área, dA ; sea ϕ el ángulo entre los vectores tangentes \mathbf{e}_1 y \mathbf{e}_2 . Entonces:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2\|^2 &= \|\mathbf{e}_1\|^2 \|\mathbf{e}_2\|^2 \text{Sen}^2\phi = \gamma_{11}\gamma_{22}(1 - \text{Cos}^2\phi) \\ &= \gamma_{11}\gamma_{22} - (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 = \gamma_{11}\gamma_{22} - \gamma_{12}\gamma_{12} = \gamma. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

A.4. Derivada Covariante

La derivada covariante, ∇_a , es una generalización del concepto de derivada parcial ∂_a , que permite extender, el cálculo diferencial sobre \mathbb{R}^n con coordenadas cartesianas, al caso de coordenadas curvilíneas en \mathbb{R}^n . La definición de ∇_a involucra a los símbolos de Christoffel, que son introducidos a continuación.

Los símbolos de Christoffel de primera especie, se encuentran definidos por:

$$\Gamma_{abc} := \frac{1}{2}(\partial_a \gamma_{bc} + \partial_b \gamma_{ac} - \partial_c \gamma_{ab}), \quad (\text{A.11})$$

donde $\partial_a = \frac{\partial}{\partial u^a}$. Mientras que los símbolos de Christoffel de segunda especie, se obtienen a partir de los de primera especie, subiendo el último índice:

$$\Gamma_{ab}^c := \gamma^{cd} \Gamma_{abd}. \quad (\text{A.12})$$

Evidentemente, estos símbolos son simétricos en sus dos primeros índices. Además, es directo demostrar que la derivada del tensor métrico, en términos de los símbolos de Christoffel, es:

$$\partial_c \gamma_{ab} = \Gamma_{acb} + \Gamma_{bca}. \quad (\text{A.13})$$

La derivada parcial de un tensor, generalmente no transforma como un tensor. Por lo tanto, es necesario generalizar el concepto de derivada, lo que nos permite definir, la derivada covariante con respecto a γ_{ab} , del tensor covariante A_b , como el conjunto de funciones $\frac{\partial A_b}{\partial x^a} - \Gamma_{ab}^c A_c$ y la denotaremos por $\nabla_a A_b$:

$$\nabla_a A_b = \frac{\partial A_b}{\partial x^a} - \Gamma_{ab}^c A_c. \quad (\text{A.14})$$

Análogamente, se puede definir la derivada covariante, de un tensor contravariante de rango uno como:

$$\nabla_a A^b = \frac{\partial A^b}{\partial x^a} + \Gamma_{ac}^b A^c. \quad (\text{A.15})$$

Nótese que si los γ_{ab} son constantes, los símbolos de Christoffel se anulan, dando como resultado que la derivada covariante, se reduce a la derivada parcial. Podemos extender de manera natural la definición de derivada covariante, para tensores de rango mayor, como:

$$\nabla_c A_{ab} = \partial_c A_{ab} - \Gamma_{ac}^m A_{mb} - \Gamma_{bc}^m A_{am}, \quad (\text{A.16a})$$

$$\nabla_c A^{ab} = \partial_c A^{ab} + \Gamma_{cm}^a A^{mb} + \Gamma_{cm}^b A^{am}, \quad (\text{A.16b})$$

$$\nabla_c A_b^a = \partial_c A_b^a - \Gamma_{bc}^m A_m^a + \Gamma_{mc}^a A_b^m. \quad (\text{A.16c})$$

Es importante mencionar, que para la derivación covariante de sumas y productos de tensores, las reglas usuales que se utilizan en la derivación ordinaria, aún son válidas. En el caso de derivación covariante, las deltas de Kronecker, son el análogo de constantes, para la derivación ordinaria:

$$\nabla_c \delta_b^a = \partial_c \delta_b^a - \Gamma_{bc}^m \delta_m^a + \Gamma_{mc}^a \delta_b^m = 0. \quad (\text{A.17})$$

También, es fácil demostrar que el tensor métrico satisface:

$$\nabla_c \gamma_{ab} = \nabla_c \gamma^{ab} = \nabla_c \gamma = 0, \quad (\text{A.18})$$

a estos resultados, se les conoce como el lema de Ricci, lo que implica que subir o bajar índices, conmuta con el proceso de derivación covariante.

Sin embargo, las derivadas covariantes no conmutan entre ellas. Para un tensor contravariante A^c , uno obtiene:

$$[\nabla_a, \nabla_c] A^c = (\nabla_a \nabla_b - \nabla_b \nabla_a) A^c = R_{ab}{}^c{}_d A^d, \quad (\text{A.19})$$

donde $R_{ab}{}^c{}_d$, es el tensor de curvatura de Riemann.

A.5. Segunda forma fundamental

A.5.1. Curvatura

Supongamos una curva C en \mathbb{E}^3 , con vector de posición \mathbf{Y} . Su curvatura κ , en un punto P , tiene magnitud igual al recíproco del radio de un círculo osculante, es decir, un círculo que toca la curva en el punto dado, teniendo la misma tangente, (ver Fig.(A.1)). En otras palabras, la curvatura es una medida del cambio de dirección del vector tangente a una curva, cuanto más rápido cambia éste, a medida que nos desplazamos a lo largo de la curva, se dice que más grande es la curvatura. Para una curva parametrizada por algún parámetro t , la curvatura es igual a:

$$\kappa(t) = \frac{\|\dot{\mathbf{Y}}(t) \times \ddot{\mathbf{Y}}(t)\|}{\|\dot{\mathbf{Y}}(t)\|^3},$$

donde $\dot{\cdot}$, representa diferenciación con respecto al parámetro t . Si la curva está parametrizada por longitud de arco, s , y $'$ representa diferenciación con respecto a s , la ecuación anterior se reduce a:

$$\kappa(s) = \|\mathbf{Y}''(s)\|.$$

Sin embargo, para describir las propiedades de la curvatura de una superficie encajada en \mathbb{E}^3 , es necesario el tensor de curvatura extrínseca, K_{ab} .

Comentario: A partir de aquí, s y $'$ representarán: el parámetro longitud de arco y derivada con respecto a este parámetro, respectivamente, a no ser que se diga lo contrario.

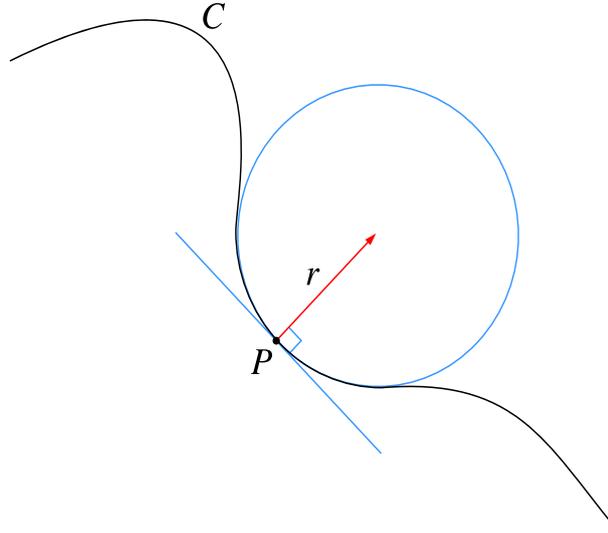


Figura A.1: En el punto P , se muestra el círculo osculante de radio r , y por lo tanto, la magnitud de la curvatura en ese punto resulta ser, $\kappa = 1/r$.

A.5.2. Tensor de curvatura extrínseca

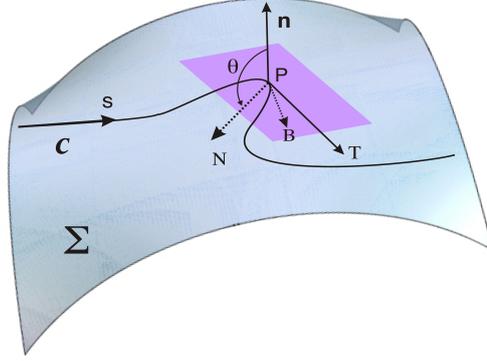
Consideremos una curva C , definida sobre la superficie Σ , con parametrización $\mathbf{Y}(u^1(s), u^2(s))$. En cada punto P de la curva, donde su curvatura satisface $\kappa > 0$, es posible definir una base ortonormal, $\{\mathbf{T}, \mathbf{N}, \mathbf{B}\}$, conocida como base de Frenet-Serret, (ver Apéndice B). Donde $\mathbf{T} = \mathbf{Y}'$, es el vector unitario tangente a la curva; $\mathbf{N} = \frac{\mathbf{T}'}{\|\mathbf{T}'\|} = \frac{\mathbf{T}'}{\kappa}$, es el vector normal principal unitario, este establece la dirección en la cual C , localmente se curva y $\mathbf{B} = \mathbf{T} \times \mathbf{N}$, representa el vector binormal unitario.

En el mismo punto P , es posible definir un vector normal a la superficie, \mathbf{n} , que satisface la Ec.(A.4) y que no coincide necesariamente con el vector normal principal, \mathbf{N} , como se muestra en la Fig.(A.2).

Si θ representa el ángulo entre los dos vectores unitarios, \mathbf{N} y \mathbf{n} , se satisface:

$$\mathbf{N} \cdot \mathbf{n} = \text{Cos } \theta. \quad (\text{A.20})$$

Entonces, la curvatura κ de la curva, puede ser descompuesta en dos partes: la primera, se debe al hecho de que la superficie está curvada en \mathbb{R}^3 , a la cual llamamos *curvatura normal* y se denota por κ_n ; la segunda, se debe a que la curva en si misma está curvada, se denota por κ_g y es conocida como

Figura A.2: Curva C , sobre la superficie Σ .

curvatura geodésica. Su definición aparece a continuación:

$$\kappa_n := -\mathbf{T}' \cdot \mathbf{n} = -\kappa \mathbf{N} \cdot \mathbf{n} = -\kappa \cos \theta, \quad (\text{A.21})$$

$$\kappa_g := \mathbf{T} \cdot (\mathbf{T}' \times \mathbf{n}) = \kappa \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = \kappa \sin \theta \operatorname{sign}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{n}). \quad (\text{A.22})$$

Estudiemos un poco más a fondo, las propiedades de la curvatura normal, para esto, observemos que el vector \mathbf{T}' , puede ser escrito como:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}' &= \mathbf{Y}'' = \frac{d}{ds} \left(\frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial u^a} \frac{du^a}{ds} \right) = \frac{d\mathbf{e}_a}{ds} u^{a'} + \mathbf{e}_a u^{a''} \\ &= (\partial_b \mathbf{e}_a) u^{a'} u^{b'} + \mathbf{e}_a u^{a''}, \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

por lo tanto, la Ec.(A.21) toma la forma:

$$\kappa_n = (-\mathbf{n} \cdot \partial_a \mathbf{e}_b) u^{a'} u^{b'}, \quad (\text{A.24})$$

donde el término del lado derecho de la igualdad, es conocido como *segunda forma fundamental* y la cantidad entre paréntesis, es un tensor de segundo orden, simétrico, conocido como *tensor de curvatura extrínseca*, al cual se denota por K_{ab} :

$$K_{ab} = -\mathbf{n} \cdot \partial_a \mathbf{e}_b. \quad (\text{A.25})$$

Sustituyendo la Ec.(A.5) en la Ec.(A.24), es posible ver que la curvatura normal, es igual a:

$$\kappa_n = K_{ab} \frac{du^a}{ds} \frac{du^b}{ds}. \quad (\text{A.26})$$

Otra manera de obtener una expresión para el tensor de curvatura extrínseca, resulta al derivar la segunda relación de la Ec.(A.4), con respecto a, u^b . Esto es:

$$K_{ab} = \mathbf{e}_a \cdot \partial_b \mathbf{n}, \quad (\text{A.27})$$

por lo tanto, se concluye que: K_{ab} , mide la proyección tangencial sobre la superficie, del cambio del vector normal en \mathbb{R}^3 , para un desplazamiento infinitesimal, en la dirección de una curva coordenada, esto sucede para cada punto sobre la superficie.

Finalmente, podemos escribir al tensor de curvatura extrínseca, en términos de la derivada covariante, al utilizar la Ec.(A.14), lo cual es posible, ya que la derivada parcial $\partial_a \mathbf{e}_b$, difiere de la derivada covariante $\nabla_a \mathbf{e}_b$, por los símbolos de Christoffel, que a su vez, son términos proporcionales a los vectores tangentes \mathbf{e}_a y desaparecen al hacer el producto interno, con el vector normal a la superficie \mathbf{n} :

$$K_{ab} = -\mathbf{n} \cdot \nabla_a \mathbf{e}_b, \quad (\text{A.28})$$

A.6. Curvaturas principales

En 1760, Euler introdujo los fundamentos de la geometría de superficies, en su obra titulada, *Recherches sur la courbure des surfaces*, donde da, la primera aproximación del concepto de curvatura de una superficie. La idea básica de Euler fue, reducir el estudio de la curvatura de una superficie en un punto P , al estudio de la curvatura en dicho punto, de las curvas que se obtienen al cortar transversalmente la superficie, por planos perpendiculares a esta, en P .

Una manera ilustrativa de calcular las curvaturas principales de una superficie Σ , que está contenida en \mathbb{R}^3 , es la siguiente:

- Nos fijamos en un punto P sobre la superficie y su vector normal \mathbf{n} en dicho punto. Elegimos un plano Π , que pase por P y que contenga a \mathbf{n} , (el plano es perpendicular a la superficie en el punto P). Entonces, el plano Π , corta la superficie a lo largo de una curva plana C , con dirección tangente a la superficie, \mathbf{v} .

- Calculamos la curvatura κ_n de la curva C .
- Repetimos el procedimiento anterior, fijándonos esta vez, en la curva C , con otra dirección tangente.

Ocurre entonces, que fijado el punto P de la superficie, existen dos direcciones tangentes privilegiadas, que son precisamente aquellas direcciones, en las que la curvatura normal, alcanza su valor mínimo y máximo (Ver Fig.(A.3)). Estas dos direcciones privilegiadas, tangentes a la superficie en el punto P , que son perpendiculares entre sí, se llaman las *direcciones principales de la superficie* y los correspondientes valores de la curvatura normal en dichas direcciones, son las *curvaturas principales de la superficie*.

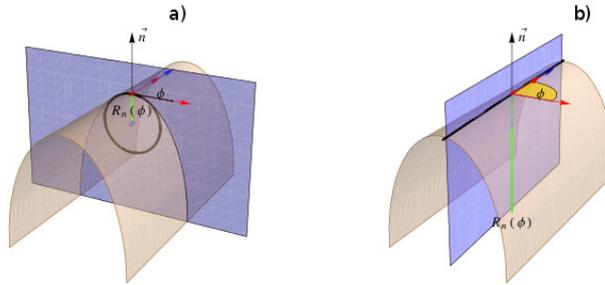


Figura A.3: Se muestran los dos planos perpendiculares sobre la superficie, que cortan a esta, en las direcciones donde la curvatura es máxima a) y mínima b).

La manera formal de determinar las direcciones principales, es la siguiente: notemos que para un punto fijo P sobre la superficie, K_{ab} y γ_{ab} también son fijos, entonces, el valor de κ_n sólo depende de la dirección de la curva, dada por el vector tangente a esta, (y a la superficie), \mathbf{T} . Es posible encontrar los valores extremos de κ_n , al reescribir la Ec. (A.26) como:

$$(K_{ab} - \kappa_n \gamma_{ab})u^{a'}u^{b'} = 0. \quad (\text{A.29})$$

Derivando la expresión anterior con respecto a $u^{c'}$ y tratando a κ_n como constante, debido a que $d\kappa_n = 0$ es una condición para que κ_n sea un extremo, encontramos:

$$(K_{ac} - \kappa_n \gamma_{ac})u^{a'} = 0,$$

o equivalentemente al subir uno de los índices:

$$(K_a^b - \kappa_n \delta_a^b)u^{a'} = 0, \quad (\text{A.30})$$

La Ec.(A.30), resulta ser un problema de eigenvalores para K_a^b . Los eigenvectores de esta ecuación, representan las direcciones tangentes, a lo largo de las cuales la curvatura normal toma valores extremos, a estas direcciones, las llamamos direcciones principales y son ortogonales entre ellas. A los eigenvalores, que denotamos por κ_1 y κ_2 , se les da el nombre de curvaturas principales de la superficie en el punto P . Si la curva sigue una misma dirección principal en cada punto, es denominada *línea de curvatura*.

Ahora podemos introducir dos conceptos fundamentales: la *traza del tensor de curvatura extrínseca* K :

$$K := Tr(K_a^b) = \gamma^{ab}K_{ab} = \kappa_1 + \kappa_2, \quad (\text{A.31})$$

y la *curvatura Gaussiana* K_G , definida como el determinante del tensor de curvatura extrínseca:

$$K_G := \kappa_1 \kappa_2 = \det(K_a^b) = \det(\gamma^{cb}K_{ac}) = \det(\gamma^{cb}) \det(K_{ac}) = \frac{k}{\gamma}, \quad (\text{A.32})$$

donde k , es el determinante de K_{ac} . Las cantidades K y K_G , son invariantes bajo reparametrizaciones de la superficie, ya que sólo involucran eigenvalores del tensor de curvatura extrínseca.

A.7. Ecuaciones de Gauss y Weingarten

Las ecuaciones de Gauss y Weingarten, describen el cambio del sistema coordenado local de una superficie, debido a desplazamientos infinitesimales sobre esta. Se puede pensar en ellas, como el análogo de las ecuaciones de Frenet-Serret para superficies.

El sistema coordenado local, se encuentra formado por dos vectores tangentes a la superficie \mathbf{e}_a y un vector normal \mathbf{n} . Debido a que \mathbf{n} es unitario, (ver Ec.(A.4)), la diferenciación con respecto a u^a , da como resultado:

$$\mathbf{n} \cdot \partial_a \mathbf{n} = 0,$$

esto implica que $\partial_a \mathbf{n}$, se puede expresar como una combinación lineal de los vectores tangentes:

$$\partial_a \mathbf{n} = (\partial_a \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}^b) \mathbf{e}_b = K_a^b \mathbf{e}_b, \quad (\text{A.33})$$

donde se utilizó la Ec.(A.27). Estas ecuaciones, son conocidas como *ecuaciones de Weingarten*.

Por otra parte, el cambio de los vectores tangentes, se puede descomponer a lo largo de las tres coordenadas:

$$\partial_a \mathbf{e}_b = (\partial_a \mathbf{e}_b \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + (\partial_a \mathbf{e}_b \cdot \mathbf{e}^c) \mathbf{e}_c, \quad (\text{A.34})$$

donde el primer término entre paréntesis, está dado por la Ec.(A.25) y la proyección tangencial, se puede expresar en términos de los símbolos de Christoffel. Para esto, consideremos las siguientes relaciones:

$$\partial_a \gamma_{bc} = (\partial_a \mathbf{e}_b) \cdot \mathbf{e}_c + \mathbf{e}_b \cdot (\partial_a \mathbf{e}_c),$$

$$\partial_b \gamma_{ac} = (\partial_b \mathbf{e}_a) \cdot \mathbf{e}_c + \mathbf{e}_a \cdot (\partial_b \mathbf{e}_c),$$

$$\partial_c \gamma_{ab} = (\partial_c \mathbf{e}_a) \cdot \mathbf{e}_b + \mathbf{e}_a \cdot (\partial_c \mathbf{e}_b),$$

sustituyendo estas ecuaciones en la Ec.(A.11) y utilizando que $\partial_a \mathbf{e}_b = \partial_a \partial_b \mathbf{Y} = \partial_b \partial_a \mathbf{Y} = \partial_b \mathbf{e}_a$, encontraremos el resultado esperado:

$$\Gamma_{abc} = (\partial_a \mathbf{e}_b) \cdot \mathbf{e}_c \quad \implies \quad \Gamma_{ab}^c = (\partial_a \mathbf{e}_b) \cdot \mathbf{e}^c. \quad (\text{A.35})$$

Por lo tanto, la Ec.(A.34) adquiere la forma:

$$\partial_a \mathbf{e}_b = -K_{ab} \mathbf{n} + \Gamma_{ab}^c \mathbf{e}_c, \quad (\text{A.36})$$

conocidas como las *ecuaciones de Gauss*. Finalmente, notemos que las ecuaciones de Weingarten y Gauss, pueden ser expresadas en forma covariante como:

$$\nabla_a \mathbf{n} = K_a^b \mathbf{e}_b, \quad (\text{A.37})$$

$$\nabla_a \mathbf{e}_b = -K_{ab} \mathbf{n}. \quad (\text{A.38})$$

A.8. Condiciones de integrabilidad

Como se mencionó en la sección anterior, las ecuaciones de Gauss y Weingarten, son el análogo para superficies de las ecuaciones de Frenet-Serret.

Sin embargo, mientras que en el caso unidimensional, dadas las funciones de curvatura y torsión, podemos reconstruir la curva, (hasta un movimiento euclidiano), lo mismo no es verdad para superficies: *No se cumple que para cada primera y segunda forma fundamental dadas, se determine una superficie*. Otra manera de decirlo es que dados K_{ab} y γ_{ab} , para que las ecuaciones (A.37) y (A.38) tengan solución, se deben satisfacer ciertas condiciones de integrabilidad. Estas condiciones son derivadas a continuación, partiendo de la identidad $\partial_a \partial_b \mathbf{e}_c = \partial_b \partial_a \mathbf{e}_c$ y utilizando las ecuaciones de Gauss y Weingarten:

$$\begin{aligned}
\partial_a \partial_b \mathbf{e}_c &= \partial_b \partial_a \mathbf{e}_c, \\
\partial_a (-K_{bc} \mathbf{n} + \Gamma_{bc}^l \mathbf{e}_l) &= \partial_b (-K_{ac} + \Gamma_{ac}^l \mathbf{e}_l), \\
\\
-(\partial_a K_{cb}) \mathbf{n} - K_{cb} \partial_a \mathbf{n} &= -(\partial_b K_{ca}) \mathbf{n} - K_{ca} \partial_b \mathbf{n} \\
+(\partial_a \Gamma_{bc}^l) \mathbf{e}_l + \Gamma_{bc}^l \partial_a \mathbf{e}_l &= +(\partial_b \Gamma_{ca}^l) \mathbf{e}_l + \Gamma_{ca}^l \partial_b \mathbf{e}_l, \\
\\
-(\partial_a K_{cb}) \mathbf{n} - K_{cb} K_a^l \mathbf{e}_l &= -(\partial_b K_{ca}) \mathbf{n} - K_{ca} K_b^l \mathbf{e}_l \\
+(\partial_a \Gamma_{bc}^l) \mathbf{e}_l + \underbrace{\Gamma_{bc}^l (-K_{al} \mathbf{n} + \Gamma_{al}^m \mathbf{e}_m)}_{l \leftrightarrow m} &= +(\partial_b \Gamma_{ca}^l) \mathbf{e}_l + \underbrace{\Gamma_{ca}^l (-K_{bl} \mathbf{n} + \Gamma_{bl}^m \mathbf{e}_m)}_{l \leftrightarrow m}, \\
\\
(-K_{cb} K_a^l + \partial_a \Gamma_{bc}^l + \Gamma_{bc}^m \Gamma_{am}^l) \mathbf{e}_l &= (-K_{ca} K_b^l + \partial_b \Gamma_{ca}^l + \Gamma_{ca}^m \Gamma_{bm}^l) \mathbf{e}_l \\
-(\partial_a K_{cb} + K_{am} \Gamma_{bc}^m) \mathbf{n} &= -(\partial_b K_{ca} + K_{bm} \Gamma_{ca}^m) \mathbf{n}.
\end{aligned}$$

Debido a que los vectores \mathbf{e}_l y \mathbf{n} son linealmente independientes, sus coeficientes deben ser iguales por separado. Al igualar los coeficientes de los vectores normales, encontramos la relación:

$$\partial_a K_{cb} - \Gamma_{ca}^m K_{bm} = \partial_b K_{ca} - \Gamma_{bc}^m K_{am},$$

restando de ambos lados de la igualdad el término $\Gamma_{ab}^m K_{cm}$ y utilizando la Ec.(A.16a), encontramos la *ecuación de Mainardi-Codazzi*:

$$\nabla_a K_{cb} - \nabla_b K_{ca} = 0. \quad (\text{A.39})$$

Al igualar los coeficientes de la parte tangencial, encontramos:

$$R_{cab}^l = K_{cb} K_a^l - K_{ca} K_b^l, \quad (\text{A.40})$$

donde se ha definido el *tensor de curvatura de Riemann mixto*, R_{cab}^l , como:

$$R_{cab}^l := \partial_a \Gamma_{bc}^l - \partial_b \Gamma_{ca}^l + \Gamma_{bc}^m \Gamma_{am}^l - \Gamma_{ca}^m \Gamma_{bm}^l, \quad (\text{A.41})$$

que es antisimétrico en sus dos últimos índices. También es común encontrar el tensor de Riemann en expresiones como:

$$\begin{aligned}
[\nabla_a, \nabla_b]A^c &= (\nabla_a \nabla_b - \nabla_b \nabla_a)A^c \\
&= R^c{}_{lab} A^l,
\end{aligned} \tag{A.42}$$

por lo tanto, el tensor de Riemann se puede interpretar, como una medida de la no conmutatividad de la derivada covariante.

El tensor de Riemann covariante es definido como:

$$\begin{aligned}
R_{lcab} &= \gamma_{ls} R^s{}_{cab} \\
&= \gamma_{ls} (\partial_a \Gamma_{bc}^s - \partial_b \Gamma_{ca}^s + \Gamma_{bc}^m \Gamma_{am}^s - \Gamma_{ca}^m \Gamma_{bm}^s) \\
&= \partial_a (\gamma_{ls} \Gamma_{bc}^s) - (\partial_a \gamma_{ls}) \Gamma_{bc}^s - \partial_b (\gamma_{ls} \Gamma_{ca}^s) + (\partial_b \gamma_{ls}) \Gamma_{ca}^s \\
&\quad + \Gamma_{bc}^m \Gamma_{aml} - \Gamma_{ca}^m \Gamma_{bml} \\
&= \partial_a \Gamma_{bcl} - \underbrace{(\Gamma_{las} + \Gamma_{sal}) \Gamma_{bc}^s}_{s \leftrightarrow m} - \partial_b \Gamma_{cal} + \underbrace{(\Gamma_{lbs} + \Gamma_{sbl}) \Gamma_{ca}^s}_{s \leftrightarrow m} \\
&\quad + \Gamma_{bc}^m \Gamma_{aml} - \Gamma_{ca}^m \Gamma_{bml} \\
&= \partial_a \Gamma_{bcl} - \partial_b \Gamma_{cal} + \Gamma_{lbm} \Gamma_{ca}^m - \Gamma_{lam} \Gamma_{bc}^m,
\end{aligned} \tag{A.43}$$

nótese que este tensor es antisimétrico respecto a sus dos primeros índices, como a sus dos últimos índices.

Resulta conveniente definir algunos conceptos antes de continuar, como lo es el *tensor de Ricci*, que resulta de la contracción no trivial del tensor de Riemann mixto:

$$R_{cb} := R^a{}_{cab} = K_{cb} K_a^a - K_{ca} K_b^a = K K_{cb} - K_{ca} K_b^a, \tag{A.44}$$

que es un tensor simétrico.

Contrayendo una vez más el tensor de Ricci, obtenemos la *curvatura escalar de Ricci*:

$$R := \gamma^{cb} R_{cb} = K^2 - K^{ac} K_{ac}. \tag{A.45}$$

Podemos escribir la curvatura escalar de Ricci, en términos de la curvatura Gaussiana, para el caso de dos dimensiones, (los subíndice tienen dos posibles valores $a=1,2$). Debido a la simetría del tensor de Riemann, las únicas componentes diferentes de cero son:

$$\begin{aligned}
R_{1212} = R_{2121} &= \det(K_{ab}), \\
R_{2112} = R_{1221} &= -\det(K_{ab}),
\end{aligned}$$

donde se ocupó la Ec.(A.40) para establecer la última igualdad. Entonces:

$$\begin{aligned}
R &= \gamma^{bd}\gamma^{ac}R_{abcd} \\
&= R_{1212}(\gamma^{11}\gamma^{22} + \gamma^{22}\gamma^{11}) + R_{2112}(\gamma^{12}\gamma^{21} + \gamma^{21}\gamma^{12}) \\
&= 2R_{1212}(\gamma^{11}\gamma^{22} - \gamma^{12}\gamma^{21}) \\
&= 2\det(K_{ab}) \det(\gamma^{ab}) = 2\frac{k}{\gamma} \\
&= 2K_G \quad \text{válido en dos dimensiones.}
\end{aligned} \tag{A.46}$$

Otras relaciones que involucran a la curvatura Gaussiana, son las siguientes:

$$R_{ab} = \gamma_{ab}K_G. \tag{A.47}$$

$$R_{abcd} = K_G(\gamma_{ac}\gamma_{bd} - \gamma_{bc}\gamma_{ad}). \tag{A.48}$$

A.9. Teorema Egregio de Gauss

Las ecuaciones (A.46), (A.47) y (A.48), confirman el teorema egregio de Gauss, el cual establece que la curvatura Gaussiana, K_G , aunque originalmente es definida de manera extrínseca, depende únicamente de la primera forma fundamental y por lo tanto, es una propiedad intrínseca de la superficie.

Apéndice B

Dos marcos de referencia importantes

B.1. Marco de Frenet-Serret

Consideremos una curva $\Gamma(s)$, parametrizada por longitud de arco. Para cada valor del parámetro s , se pueden asociar tres vectores ortonormales: $\mathbf{T}(s)$, $\mathbf{N}(s)$ y $\mathbf{B}(s)$, a este triedro se le conoce como el marco de Frenet-Serret. Las derivadas, $\mathbf{T}' = \kappa\mathbf{N}$, $\mathbf{B}' = -\tau\mathbf{N}$ de los vectores \mathbf{T} y \mathbf{B} , cuando son expresadas en la base de Frenet-Serret, dan lugar a entidades geométricas, (la curvatura κ y la torsión τ), que dan información acerca del comportamiento de Γ en la vecindad de s .

Las ecuaciones de Frenet-Serret, describen las derivadas del triedro $\{\mathbf{T}, \mathbf{N}, \mathbf{B}\}$, en términos de los mismos:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T}' \\ \mathbf{N}' \\ \mathbf{B}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & 0 \\ -\kappa & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{N} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Es interesante que, para una partícula física desplazándose en el espacio, el vector tangente es paralelo a la velocidad, mientras que el vector normal da el cambio de dirección por unidad de tiempo de la velocidad o aceleración normal. Esto tiene implicaciones físicas interesantes, por ejemplo, la trayectoria de una partícula, queda especificada si se conocen: la posición inicial, la velocidad inicial y la variación en el tiempo de las derivadas segundas, (que están relacionadas con la curvatura y la torsión). Es por esto, que las leyes de Newton o las ecuaciones de Euler-Lagrange, se expresan en términos de derivadas de segundo orden, (que es necesario complementar con la posición y velocidades iniciales).

B.2. Marco de Darboux

Consideremos una curva parametrizada por longitud de arco, $\Gamma(s)$, sobre una superficie M . Esta curva puede ser descrita, tanto en el marco de Frenet-Serret, $\{\mathbf{T}, \mathbf{N}, \mathbf{B}\}$, como en el marco de Darboux, $\{\mathbf{T}, \mathbf{n}, \mathbf{l}\}$. Estos dos marcos se encuentran relacionados mediante una rotación alrededor de \mathbf{T} , un ángulo ω . Por esta razón, tanto \mathbf{N} como \mathbf{B} , tienen componentes a lo largo de \mathbf{n} y \mathbf{l} . Así, podemos expresar la primera ecuación de (B.1), en el marco de Darboux:

$$\mathbf{T}' = \kappa_n \mathbf{n} + \kappa_g \mathbf{l}, \quad (\text{B.2})$$

donde se ha definido la curvatura geodésica, $\kappa_g = \mathbf{T}' \cdot \mathbf{l}$ y la curvatura normal $\kappa_n = \mathbf{T}' \cdot \mathbf{n}$. También se define la torsión geodésica como, $\tau_g = \mathbf{l}' \cdot \mathbf{n}$. De esta manera, las ecuaciones de estructura que describen el marco de Darboux, están dadas por:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T}' \\ \mathbf{n}' \\ \mathbf{l}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa_n & \kappa_g \\ -\kappa_n & 0 & -\tau_g \\ -\kappa_g & \tau_g & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{n} \\ \mathbf{l} \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

donde la primera, es la Ec.(B.2), misma que involucra las definiciones de κ_n y κ_g . Para obtener la parte tangencial de \mathbf{n}' y \mathbf{l}' , hay que notar que:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}' \cdot \mathbf{n} &= (\mathbf{T} \cdot \mathbf{n})' - \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}' \implies \mathbf{n}' \cdot \mathbf{T} = -\kappa_n. \\ \mathbf{T}' \cdot \mathbf{l} &= (\mathbf{T} \cdot \mathbf{l})' - \mathbf{T} \cdot \mathbf{l}' \implies \mathbf{l}' \cdot \mathbf{T} = -\kappa_g. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Mientras que para obtener sus componentes normales, recurrimos a la definición de τ_g :

$$\mathbf{n}' \cdot \mathbf{l} = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{l})' + \mathbf{n} \cdot \mathbf{l}' \implies \mathbf{l}' \cdot \mathbf{n} = \tau_g$$

La curvatura normal, la curvatura geodésica y la torsión geodésica, pueden ser expresadas en términos de las componentes de los vectores $\mathbf{T} = T^a \mathbf{e}_a$ y $\mathbf{l} = l^a \mathbf{e}_a$, donde \mathbf{e}_a , son los vectores tangentes a la superficie, así como del tensor

de curvatura extrínseca, $K_{ab} = \mathbf{e}_a \cdot \partial_b \mathbf{n}$ y la derivada covariante ∇_a :

$$\begin{aligned}\kappa_n &= \mathbf{n} \cdot \frac{d(T^a \mathbf{e}_a)}{ds} = \mathbf{n} \cdot \frac{\partial(T^a \mathbf{e}_a)}{\partial u^b} \frac{du^b}{ds} \\ &= T^b \mathbf{n} \cdot \left[T^a \frac{\partial \mathbf{e}_a}{\partial u^b} + \frac{\partial T^a}{\partial u^b} \mathbf{e}_a \right] \\ &= -K_{ab} T^a T^b,\end{aligned}\tag{B.5a}$$

$$\begin{aligned}\kappa_g &= l^a \mathbf{e}_a \cdot \frac{d(T^c \mathbf{e}_c)}{ds} = l^a \mathbf{e}_a \cdot \frac{\partial(T^c \mathbf{e}_c)}{\partial u^b} T^b \\ &= T^b l^a \mathbf{e}_a \cdot [(\nabla_b T^c) \mathbf{e}_c - T^c K_{bc} \mathbf{n}] \\ &= T^b l^a \nabla_b T_a,\end{aligned}\tag{B.5b}$$

$$\begin{aligned}\tau_g &= \mathbf{n} \cdot \frac{d(l^a \mathbf{e}_a)}{ds} = \mathbf{n} \cdot \frac{\partial(l^a \mathbf{e}_a)}{\partial u^b} \frac{du^b}{ds} \\ &= T^b \mathbf{n} \cdot \left[l^a \frac{\partial \mathbf{e}_a}{\partial u^b} + \frac{\partial l^a}{\partial u^b} \mathbf{e}_a \right] \\ &= -K_{ab} T^b l^a.\end{aligned}\tag{B.5c}$$

aquí κ_n y τ_g , dependen de la curvatura extrínseca, mientras que κ_g es definida intrínsecamente, ya que depende de la métrica de la superficie $\gamma_{ab} = \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b$.

Como se dijo al principio del apéndice, ambos marcos se encuentran relacionados por una rotación alrededor de \mathbf{T} , un ángulo ω , por lo que se cumple que:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{N} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \text{Cos } \omega & \text{Sen } \omega \\ 0 & -\text{Sen } \omega & \text{Cos } \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{n} \\ \mathbf{l} \end{pmatrix},\tag{B.6}$$

Estas relaciones, junto con las ecuaciones de estructura de Frenet-Serret, permiten expresar el ángulo de rotación, en términos del radio de curvatura:

$$\kappa_g = \mathbf{T}' \cdot \mathbf{l} = \kappa \mathbf{N} \cdot \mathbf{l} = \kappa \text{Sen } \omega,\tag{B.7}$$

$$\kappa_n = \mathbf{T}' \cdot \mathbf{n} = \kappa \mathbf{N} \cdot \mathbf{n} = \kappa \text{Cos } \omega,\tag{B.8}$$

$$\tau = \omega' - \tau_g.\tag{B.9}$$

Lo que implica que $\kappa^2 = \kappa_g^2 + \kappa_n^2$. Por lo tanto, las curvaturas de Frenet, pueden ser descompuestas en sus partes intrínseca y extrínseca. La torsión de Frenet, resulta de la suma entre la torsión geodésica y la tasa de rotación de un marco con respecto al otro, ω' .

Las identidades (B.7), (B.8) y (B.9) implican las siguientes:

$$\kappa'_g = \frac{\kappa'}{\kappa} \kappa_g + \kappa_n (\tau + \tau_g), \quad (\text{B.10})$$

$$\kappa'_n = \frac{\kappa'}{\kappa} \kappa_n - \kappa_g (\tau + \tau_g). \quad (\text{B.11})$$

Estas relaciones son utilizadas en la sección 2.3, para expresar los modos de oscilación de la curva, en términos de κ_g , κ_n , τ_g y sus derivadas.

Apéndice C

Superficies con simetría axial

Una superficie axialmente simétrica, puede ser parametrizada por la longitud de arco a lo largo del meridiano, l , y por el ángulo azimutal φ , a lo largo del paralelo, como sigue:

$$\mathbf{X}(l, \phi) = (\mathcal{R}(l)\text{Cos } \varphi, \mathcal{R}(l)\text{Sen } \varphi, Z(l)) , \quad (\text{C.1})$$

donde $\dot{\mathcal{R}}(l)^2 + \dot{Z}(l)^2 = 1$ y el punto representa derivación con respecto a longitud de arco. Los dos vectores tangentes adaptados a esta parametrización, son:

$$\mathbf{e}_l = \left(\dot{\mathcal{R}}\text{Cos } \varphi, \dot{\mathcal{R}}\text{Sen } \varphi, \dot{Z} \right) , \quad (\text{C.2})$$

$$\mathbf{e}_\varphi = \left(-\mathcal{R}\text{Sen } \varphi, \mathcal{R}\text{Cos } \varphi, 0 \right) . \quad (\text{C.3})$$

Por lo que el elemento de línea sobre la superficie, está dado por: $ds^2 = dl^2 + \mathcal{R}(l)^2 d\varphi^2$, y el tensor métrico adquiere la forma:

$$\gamma_{ab} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathcal{R}^2 \end{pmatrix} . \quad (\text{C.4})$$

y su correspondiente tensor dual:

$$\gamma^{ab} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/\mathcal{R}^2 \end{pmatrix} . \quad (\text{C.5})$$

El vector unitario normal es:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{e}_\varphi \times \mathbf{e}_l}{\|\mathbf{e}_\varphi \times \mathbf{e}_l\|} = \left(\dot{Z}\text{Cos } \varphi, \dot{Z}\text{Sen } \varphi, -\dot{\mathcal{R}} \right) ; \quad (\text{C.6})$$

el tensor de curvatura extrínseca resulta ser diagonal:

$$K_{ab} = \begin{pmatrix} \dot{\mathcal{R}}\ddot{Z} - \ddot{\mathcal{R}}\dot{Z} & 0 \\ 0 & \mathcal{R}\dot{Z} \end{pmatrix} . \quad (\text{C.7})$$

Los eigenvectores del operador de forma, $K^a_b = \gamma^{ac} K_{cb}$, yacen a lo largo de los meridianos, (curvas con φ constante) y los paralelos, (curvas con l constante), respectivamente; y las curvaturas principales son los eigenvalores correspondientes:

$$C_{\perp} = \dot{\mathcal{R}}\ddot{Z} - \ddot{\mathcal{R}}\dot{Z}, \quad C_{\parallel} = \dot{Z}/\mathcal{R}. \quad (\text{C.8})$$

Los dos invariantes simétricos del operador de forma son: la curvatura Gaussiana $K_G = C_{\perp}C_{\parallel}$ y la curvatura media $K = C_{\perp} + C_{\parallel}$. Sea Θ el ángulo que el vector tangente a lo largo del meridiano hace con el plano $x - y$, entonces, $\dot{\mathcal{R}} = \text{Cos } \Theta$ y $\dot{Z} = \text{Sen } \Theta$. Por lo que:

$$C_{\perp} = \dot{\Theta}, \quad C_{\parallel} = \frac{\text{Sen } \Theta}{\mathcal{R}}. \quad (\text{C.9})$$

Al considerar una curva sobre la superficie confinante, $\Gamma : s \rightarrow \mathbf{Y}(s)$, es posible expresar sus vectores tangentes \mathbf{T} y \mathbf{l} , referidos desde el marco de Darboux, con respecto al ángulo α , que hacen con las dos direcciones principales:

$$\mathbf{T} = \text{Cos } \alpha \hat{\mathbf{e}}_{\varphi} + \text{Sen } \alpha \mathbf{e}_l, \quad \mathbf{l} = \text{Sen } \alpha \hat{\mathbf{e}}_{\varphi} - \text{Cos } \alpha \mathbf{e}_l, \quad (\text{C.10})$$

donde $\hat{\mathbf{e}}_{\varphi} = \mathbf{e}_{\varphi}/\mathcal{R}$. Reescribiendo la primera relación de la ecuación anterior, en coordenadas cartesianas, usando (C.2) y (C.3), y comparando con la derivada respecto a longitud de arco de la expresión (C.1), se obtiene:

$$\text{Sen } \alpha = l' \quad \text{Cos } \alpha = \mathcal{R}\varphi'. \quad (\text{C.11})$$

Usando las Ecs. (C.10) y (C.11), es posible expresar la aceleración \mathbf{T}' , a lo largo de la curva, como:

$$\mathbf{T}' = \left(-\alpha' + \frac{\mathcal{R}'}{\mathcal{R}} \text{Cot } \alpha\right) \mathbf{l} - (\text{Sen}^2 \alpha C_{\perp} + \text{Cos}^2 \alpha C_{\parallel}) \mathbf{n}. \quad (\text{C.12})$$

Por lo tanto, la curvatura geodésica de Γ , $\kappa_g = \mathbf{T}' \cdot \mathbf{l}$, está dada por:

$$\kappa_g = \frac{(\mathcal{R} \text{Cos } \alpha)'}{\mathcal{R} \text{Sen } \alpha}; \quad (\text{C.13})$$

la curvatura normal correspondiente, $\kappa_n = \mathbf{T}' \cdot \mathbf{n}$, es:

$$\kappa_n = -\text{Sen}^2 \alpha C_{\perp} - \text{Cos}^2 \alpha C_{\parallel}. \quad (\text{C.14})$$

De manera análoga, la torsión geodésica τ_g , está dada por:

$$\tau_g = \text{Sen } \alpha \text{Cos } \alpha (C_{\perp} - C_{\parallel}). \quad (\text{C.15})$$

Apéndice D

Solución de la cuadratura para confinamiento cilíndrico

Al resolver el problema de la elástica confinada al cilindro, es necesario resolver la Ec.(4.68). Este sistema tiene dos puntos de frontera, $s = 0$ y $s = L/2n$, con condiciones de frontera, $\alpha(s = 0) = 0$ y $\alpha(s = L/2n) = 0$, impuestas por la longitud fija de la elástica, L . Entonces, cada solución estará etiquetada por un entero, $n \geq 1$, y dependerá de la longitud de la elástica, $L \geq 2\pi$. Aún eligiendo un valor de n y asignando un valor numérico a L , se encuentra que este tipo de sistemas, no puede ser resuelto de manera analítica. Por lo cual, se emplea un método, conocido como *método de Shooting*. La idea crucial, consiste en reemplazar la condición de frontera, $\alpha(s = L/2n) = 0$, con la condición inicial, $\alpha'(s = 0) = v$. Para cada valor numérico de v , tenemos una ecuación que puede ser resuelta. Sólo nos faltaría encontrar un valor v_0 de v , tal que la solución correspondiente para α del sistema modificado, (con la condición inicial), cumpla que $\alpha(s = L/2n) = 0$, haciéndolo de esta manera, la solución a la ecuación original.

Dicho de una forma práctica, debido a que tenemos varios parámetros, (n, L, c, m) , en la Ec.(4.68), lo que se hace, es asignar valores numéricos a cada uno de ellos, para así encontrar la solución a la ecuación diferencial. Este procedimiento se explica a continuación:

- Primero seleccionamos el valor de $n \geq 1$. Número que resulta importante, ya que $2n$, indica el número total de veces, que α adquirirá el valor de cero, al recorrer por completo la longitud de la elástica. Por ejemplo, si fijamos el valor de $n = 1$, sin importar la longitud de la elástica, el valor de $\alpha = 0$, será encontrado dos veces en el lazo.
- Se le asigna un valor numérico a la constante m de la Ec.(4.68). Este valor no es elegido de manera arbitraria, partiendo de la Ec.(4.44), para

confinamiento débil, se encuentra que $m_0 = -1$, dado que se ha elegido $n = 1$ en el paso anterior. Entonces, se le da un valor a m , alrededor de -1 . Continuando con el mismo ejemplo, supongamos que le asignamos el valor de $m = -1.5$.

- Posteriormente, se fija la longitud de la elástica, que satisface $L \geq 2\pi$. En el ejemplo dado, se le asigna el valor de 2π . Por lo tanto, las condiciones de frontera para α serán: $\alpha(s = 0) = 0$ y $\alpha(s = \pi) = 0$.
- Ahora utilizamos el método de shooting, reemplazando la segunda condición de frontera, por la condición inicial, $\alpha'(s = 0) = v$. Aquí, se le dan diferentes valores numéricos y arbitrarios a v , hasta encontrar aquel que satisfaga, la condición original $\alpha(s = L/2) = 0$.
- Se repiten los dos pasos anteriores, incrementando el valor de L en 0.5 y resolviendo la ecuación diferencial, hasta llegar a $L = 7\pi$. Con esto, se logra tener v , como función de L , para el m elegido, que para el caso que nos ocupa, resulta ser $m = -1.5$.
- Si repetimos el procedimiento a partir del segundo paso, incrementando el valor de m en 0.1 , hasta llegar a $m = 2.5$, encontraríamos a v , como función de L y m , en el rango de valores dados: $L \in [2\pi, 7\pi]$ y $m \in [-1.5, 2.5]$. Esto es análogo a encontrar a α , como función de s , m y L .
- Utilizando la condición de cerradura en su forma integral, $\int_0^L \text{Cos}\alpha \, ds = 2\pi$, es posible determinar a m , como función de L . En consecuencia, encontramos v como función únicamente de L y por lo tanto, α como función de s , para cada L dada, que era nuestro objetivo principal.
- Finalmente, mediante la cuadratura (4.36) y recordando que $f = 0$, fácilmente se encuentra c en función de L , para cada n .

Bibliografía

- [1] Phillip Nelson, *Física biológica. Energía, Información, Vida*. Reverté, first edition, 2005
- [2] V. Shankar, Matteo Pasquali, and David C. Morse *J. Rheology* **46**, 1111 (2002).
- [3] R. Vafabakhsh, T. Ha, *Science* **337**, 1097 (2012).
- [4] C. Bustamante, J. F. Marko, E. D. Siggia, S. Smith, *Science* **265**, 1599 (1994).
- [5] Taylor W.H. and Hagerman P.J., *J. Mol. Biol.*, **212** (1990) 363.
- [6] Gittes F., Mickey B., Nettleton J., and Howard J., *J. Cell. Biol.*, **120** (1993) 923.
- [7] Kas J., Strey H., and Sackmann E., *Nature*, **368** (1994) 226.
- [8] A. E. H. Love, *A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity*, Cambridge University Press, Cambridge, England 1927.
- [9] L. Boué, M. Adda-Bedia and A. Boudaoud *Confinement isotrope d'un cylindre élastique*, in Proceedings of Rencontres du non-linéaire, edited by R. Ribotta (Paris Onze Editions, 2006)
- [10] E. Katzav, M. Adda-Bedia, and A. Boudaoud, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **103** 18900 (2006); L. Boué and E. Katzav, *EPL* **80**, 54002 (2007)
- [11] J. Guven and P. Vázquez-Montejo, *Phys. Rev. E* **85**, 026603 (2012)
- [12] H. K. Nickerson and G. S. Manning, *Geometria Dedicata* **27** 127 (1988)
- [13] Carlos Bustamante and Jeffrey R. Moffitt, *Viral DNA Packaging: One Step at a Time* Single Molecule Spectroscopy in Chemistry, Physics and Biology; Springer Series in Chemical Physics, 2010, Vol 96, Part 5, 237-269
- [14] A. J. Spakowitz and Z. G. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 166102 (2003)

-
- [15] M. Kardar http://www.mit.edu/~kardar/teaching/projects/dna_packing_website/index.h
- [16] R. Levien, *The elastica: a mathematical history*, Technical Report No. UCB/EECS-2008-103, University of California at Berkeley (2008)
- [17] J. Langer and D. A. Singer, *J. Diff. Geom.* **20**, 1 (1984)
- [18] T. A. Ivey and D. A. Singer, *Proc. Lond. Math. Soc.* **79** 429 (1999)
- [19] D. A. Singer, *Lectures on Elastic Curves and Rods*, in Proceedings of Curvature and Variational Modelling in Physics and Biophysics, Edited by O. J. Garay, E. García-Río and R. Vázquez-Lorenzo, (American Institute of Physics, 2008)
- [20] R. Capovilla, C. Chryssomalakos and J. Guven, *J. Phys. A: Math. Gen.* **35** 6571 (2002)
- [21] J. Guven *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** L313 (2004)
- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz *Theory of Elasticity* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1999)
- [23] G. Brunnett and P.E. Crouch, *Advances in Computational Mathematics* **2** 23 (1994)
- [24] J. Arroyo, O. J. Garay and J. Mencía *J. Phys. A: Math. Gen.* **39** 2307 (2006)
- [25] J. Guven and M. M. Müller *J. Phys. A: Math. Gen.* **41** 055203 (2008)
- [26] J. Guven, M. M. Müller and M. Ben Amar, *Phys. Rev. Lett* **101** 156104 (2008)
- [27] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Dover Publications, New York, 1965)
- [28] N. Stoop, F. K. Wittel, M. Ben Amar, M. M. Müller and H. J. Herrmann, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 068101 (2010).
- [29] G. S. Manning, *Quart. Appl. Math.* **45** 515 (1987)
- [30] G. H. M. Van der Heijden, M. A. Peletier and R. Planqué, *Arch. Rat. Mech. Anal.* **182** 471 (2006)
- [31] Pablo Vazquez Montejó, *Papel de la curvatura en la mediación de los esfuerzos en superficies*. Universidad Nacional Autónoma de México, Tesis (2012)

-
- [32] Ya Liu, Bulbul Chakraborty, *Shapes of semiflexible polymers in confined spaces* Phys. Biol. **5** (2008) 026004
- [33] C. Bouchiat, M.D. Wang, J.-F. Allemand, T. Strick, S.M. Block and V. Croquette, *Estimating the Persistence Length of a Worm-Like Chain Molecule from Force-Extension Measurements* Biophysical Journal, Volume 76, Issue 1, 409-413, 1 January 1999