

# Modelización y Simulación: Ejemplos en Materiales y Biología

Ana Carpio, Universidad Complutense de Madrid

Diciembre 2007

## 1 Contenido

- Dislocaciones en cristales
  - Modelos continuos para apilamientos de dislocaciones
  - Modelos discretos para dislocaciones aisladas
- Propagación de impulsos biológicos
  - Impulsos en nervios con mielina
  - Contracción de fibras musculares
- Nucleación de partículas y burbujas
  - Nucleación homogénea de partículas
  - Nucleación heterogénea de burbujas de helio en residuos radioactivos
- Propagación de impulsos eléctricos en semiconductores
  - Modelos discretos para dinámica de paredes de dominio en superredes
  - Modelos continuos para el efecto Gunn

Referencias

## 2 Dislocaciones en cristales

Las dislocaciones son defectos soportados por curvas que se forman en los materiales cristalinos [6]. Cuando se aplica una tensión suficientemente grande, las dislocaciones se deslizan a lo largo de los planos cristalográficos del cristal e interaccionan con otras dislocaciones que encuentran en su camino. Además, se crean nuevas dislocaciones en ciertas posiciones. Como resultado, se forman en números muy grandes ( $10^{12}$  dislocaciones/cm<sup>2</sup> en metales muy trabajados) y modifican las propiedades mecánicas del material. En particular, se cree que

las dislocaciones controlan las propiedades plásticas de los sólidos cristalinos a baja temperatura.

Es conocido que al aplicar una tensión los cristales se deforman elásticamente hasta alcanzar un valor crítico de la tensión. Para tensiones más altas, la deformación se convierte en plástica (irreversible) y termina eventualmente en fractura. Se cree que la tensión crítica es aquella para la cual se empiezan a mover grandes números de dislocaciones. Una vez en el régimen plástico, la creación, movimiento, e interacción de dislocaciones resulta en la formación de complicadas redes de defectos en la estructura microscópica del material. Cuando esas redes son tan densas que las dislocaciones no se pueden mover libremente, el cristal se endurece. Este efecto es muy importante al trabajar con metales, porque los metales muy trabajados son más duros que los no trabajados.

Podemos describir las dislocaciones de distintas formas, dependiendo de la escala en la que las estudiemos. A nivel microscópico, aparecen como defectos en la red cristalina. Si la separación entre dislocaciones no es demasiado pequeña, hay una escala mesoscópica en la que podemos modelarlas como singularidades del campo de tensiones de un material continuo. A escala macroscópica, podemos describir grandes números de dislocaciones en términos de densidades.

## 2.1 Modelos continuos para apilamientos

En plasticidad de metales, podemos definir una escala exterior en la que las dislocaciones pueden considerarse singularidades, es decir, soluciones exteriores de las ecuaciones de Navier de la elasticidad. El tensor de esfuerzos de segundo orden se define como

$$\boldsymbol{\epsilon} = (\nabla \mathbf{u})^S$$

donde  $\mathbf{u}$  es el desplazamiento elástico, y el superíndice  $S$  denota la parte simétrica. El tensor de esfuerzos se relacionan con el tensor de tensiones a través de la segunda ley de Hooke

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\epsilon}$$

donde  $\lambda$  y  $\mu$  son las constantes de Lamé. Las ecuaciones de equilibrio elástico son

$$\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0.$$

Una dislocación aislada se puede modelar como una solución singular de estas ecuaciones en la que el desplazamiento no es univaluado [1]. Este es el modelo clásico del Volterra. En general, se pueden caracterizar por el vector tangente y un parámetro microscópico llamado el vector de Burgers, que mide la distorsión local de la red.

Consideramos a continuación un modelo para la interacción de dos familias de dislocaciones en arista. Tomamos la primera familia tangente a la dirección  $z$  con vector de Burgers en la dirección  $x$ . Tomamos la segunda familia tangente a la dirección  $y$  con vector de Burgers en la dirección  $x$ . Por tanto, la primera familia desliza sobre el plano  $xz$  mientras que la segunda familia desliza sobre el plano  $xy$ . Si asumimos que las dislocaciones permanecen rectas, ambas familias

se deslizan en la dirección  $x$ . Nos referimos a ellas como ‘dislocaciones de tipo 1’ y ‘dislocaciones de tipo 2’, respectivamente. Por simetría, el problema se puede convertir en un problema uni-dimensional [2], dando lugar a dos poblaciones con densidades  $w_1(x, t)$  y  $w_2(x, t)$ , respectivamente. Deseamos determinar cómo esas densidades evolucionan con el tiempo.

La conservación de dislocaciones de cada familia implica [6]

$$\begin{aligned}\frac{\partial w_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(w_1 v_1) &= 0, \\ \frac{\partial w_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(w_2 v_2) &= 0,\end{aligned}$$

donde  $v_i$  es la velocidad de la familia  $i$ . En nuestro contexto, la primera familia de dislocaciones se puede ver como rectas paralelas al eje  $y$ -axis, y la segunda, como rectas paralelas al eje  $z$ . Sin embargo, a medida que las dislocaciones de la primera familia se mueven han de atravesar y cortar las de la segunda. Suponemos que hay una fuerte resistencia a este corte dependiendo de la densidad que consideremos, lo que nos lleva a velocidades de la forma [2]

$$\begin{aligned}v_1 &= \text{sign}(\sigma_{1,2})(|\sigma_{1,2}| - a\sqrt{w_1}), \\ v_2 &= \text{sign}(\sigma_{1,3})(|\sigma_{1,3}| - a\sqrt{w_2}),\end{aligned}$$

con  $a > 0$ . Resulta un sistema de leyes de conservación que puede cambiar tipo de hiperbólico a elíptico. Este cambio de tipo corresponde al inicio de un proceso de formación de patrones, la formación de apilamientos. Cuando regularizamos el modelo, obtenemos un problema de frontera libre parabólico que nos permite estudiar el proceso [6].

## 2.2 Modelos discretos para dislocaciones aisladas

Un modelo elemental para la dinámica de dislocaciones en redes cristalinas viene dado por las ecuaciones de Frenkel-Kontorova para el desplazamiento  $u_n(t)$  de los átomos respecto a su posición de equilibrio siguiendo una fila de una red cúbica

$$m u_n'' + \alpha u_n' = d(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - Ag(u_n) + F.$$

Todos los parámetros son positivos:  $m$  representa la masa atómica,  $\alpha$  la fricción,  $d$  los muelles elásticos entre átomos (fuerza de interacción)  $F$  la fuerza aplicada para poner en movimiento los defectos.  $g(u_n)$  es una función periódica cuyo periodo viene dado por la constante de red  $a$ . En el equilibrio todos los átomos están situados en posiciones de la red separadas una distancia  $a$  en una red cúbica. En este marco, las dislocaciones se representan mediante soluciones de tipo frente, es decir, soluciones que crecen de un cero estable  $z_1(F/A)$  de  $-Ag(z)+F$  al siguiente cero estable  $z_3(F/A)$ , pasando a través del cero inestable  $z_2(F/A)$ . Cuando  $F = 0$ ,  $z_1(F/A) = 0$  y  $z_3(F/A) = a$ .

Si la fricción es alta, el movimiento es sobreamortiguado. Podemos tomar  $m = 0$  para estudiarlo. En este caso, se puede encontrar un valor crítico  $F_c(A)$  tal que [3]

- Si  $|F| \leq F_c(A)$ , tenemos soluciones de tipo frente estacionarias  $u_n$  que crecen monótonamente desde  $z_1(F/A)$  en  $-\infty$  a  $z_3(F/A)$  en  $\infty$ .
- Si  $|F| > F_c(A)$  y está próximo a  $A$ , existen soluciones de tipo onda viajera  $u_n(t) = u(n - ct)$  con velocidad  $c(F)$  y perfil  $u(z)$  solución de

$$-cu(z) = u(z - 1) - 2u(z) + u(z + 1) - Ag(u(z)) + F$$

que crece monótonamente desde  $z_1(F/A)$  en  $-\infty$  a  $z_3(F/A)$  en  $\infty$ . Esta solución es única módulo translaciones

- Frentes estacionarios y viajeros no pueden coexistir.

Los frentes estacionarios representan dislocaciones ancladas. Los frentes viajeros representan dislocaciones en movimiento.  $F_c(A)$  representa la tensión de Peierls necesaria para mover dislocaciones en la red. A medida que  $|F| \rightarrow F_c(A)$ , tenemos que  $c(F) \rightarrow 0$ , los perfiles  $u(z)$  desarrollan saltos y se hacen discontinuos en  $F_c(A)$ . Tiene lugar una bifurcación global en el sistema, que localmente es de tipo nodo silla y se puede usar para estimar las velocidades como  $|c(F)| \sim \alpha(F_c)(|F| - F_c(A))^{1/2}$ , véase [12].

En ausencia de fricción, o, para fricción pequeña, debemos estudiar el problema con inercia. Para  $g$  lineal a trozos, por ejemplo,  $g(u) = u + 1$  si  $u < 0$  y  $g(u) = u - 1$  si  $u > 0$ , es posible construir explícitamente todas las ramas de ondas viajeras [15]. En este caso, los perfiles de ondas desarrollan colas oscilatorias. En principio, son posibles diferentes perfiles y velocidades para el mismo valor de  $F$ . En la práctica, se puede probar que son estables las familias con frentes delanteros monótonos, en los que las oscilaciones se producen en la otra cola y cuya velocidad supera una velocidad mínima [16]. Encontramos dos umbrales, identificables con la tensión de Peierls estática  $F_c(A)$  y la tensión de Peierls dinámica  $F_d(A)$ . Como antes, los frentes estacionarios existen si  $|F| \leq F_c(A)$ . Sin embargo, los frentes viajeros existen para  $|F| > F_d(A)$ . Ambos coexisten si  $F_d(A) < |F| < F_c(A)$ . Por tanto, el sistema presenta comportamientos de histéresis. Según incrementamos la fuerza aplicada desde cero, las soluciones tipo frente que representan las dislocaciones empiezan a moverse cuando  $F$  supera  $F_c(A)$ . Una vez las dislocaciones se mueven en la red, podemos decrecer la fuerza por debajo de  $F_c(A)$ . Las dislocaciones seguirán moviéndose aún cuando  $F$  caiga por debajo de  $F_d(A)$ .

Podemos estudiar dislocaciones bidimensionales en una red cúbica mediante redes bidimensionales [11, 14]. En su versión más simple, el desplazamiento de los puntos de la red  $u_{i,j}(t)$  en la dirección de movimiento (digamos, la dirección  $x$ ) obedece la dinámica

$$\frac{\partial u_{i,j}}{\partial t} = u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j} + A(\sin(u_{i,j-1} - u_{i,j}) \sin(u_{i,j+1} - u_{i,j})), \quad A > 0.$$

Soluciones que representan dislocaciones se pueden generar usando los campos elásticos de dislocaciones como datos iniciales y de contorno [11]. El sistema relaja a soluciones estacionarias que representan la distorsión en la red.

Por ejemplo, si elegimos condiciones iniciales y de contorno dadas por  $s_{i,j} = \theta(i, j/\sqrt{A}) + Fj$  donde  $\theta$  es la función ángulo de 0 a  $2\pi$  y  $F > 0$  es un parámetro de control, obtenemos soluciones estacionarias que representan dislocaciones en arista para  $F$  pequeño. Según  $F$  crece, las soluciones estacionarias desaparecen y se observan los patrones viajeros [14]. Nótese que si linealizamos el operador espacial alrededor de  $s_{i,j}$ , tenemos un problema elíptico discreto para  $F$  pequeño que cambia de tipo a medida que  $F$  crece.

Esta idea se puede extender a situaciones plenamente bi y tridimensionales desarrollando modelos de elasticidad discreta periodizados [18, 23]. Discretizamos las derivadas que aparecen en la expresión del tensor de tensiones de la elasticidad con la simetría cristalina requerida mediante diferencias finitas en las direcciones principales del cristal, con paso igual a la constante de red, y entonces periodizamos, es decir, reemplazamos las diferencias por funciones periódicas de las mismas con periodicidad igual a la constante de red. Tras ello, derivamos las ecuaciones de movimiento usando el tensor de tensiones discreto y periódico resultante. Por ejemplo, en dos dimensiones tenemos

$$\begin{aligned} Mu_1'' &= C_{11}D_1^- [g(D_1^+ u_1)g'(D_1^+ u_1)] + C_{12}D_1^- [g(D_2^+ u_2)g'(D_1^+ u_1)] \\ &\quad + C_{44}D_2^- [(g(D_2^+ u_1) + g(D_1^+ u_2))g'(D_2^+ u_1)], \\ Mu_2'' &= C_{11}D_2^- [g(D_2^+ u_2)g'(D_2^+ u_2)] + C_{12}D_2^- [g(D_1^+ u_1)g'(D_2^+ u_2)] \\ &\quad + C_{44}D_1^- [(g(D_1^+ u_2) + g(D_2^+ u_1))g'(D_1^+ u_2)]. \end{aligned}$$

Ecuaciones similares se establecen para redes tridimensionales. Soluciones de tipo dislocación correspondientes a distintos tipos de cristales se generan usando los campos elásticos conocidos para cada una [18, 23].

### 3 Propagación de impulsos biológicos

Entender los fenómenos de propagación de ondas en medios excitables discretos es una tarea compleja debido a la necesidad de abordar estructuras espaciales discretas. Consideramos aquí dos ejemplos paradigmáticos: la propagación de impulsos nerviosos a lo largo de nervios con mielina [12, 13, 19] y la contracción de fibras musculares [20]

#### 3.1 Nervios mielínicos

Las fibras mielínicas, como los nervios motores de los vertebrados, están recubiertas casi en su totalidad por una capa gruesa y aislante de mielina. Sólo una fracción de la membrana queda expuesta, una secuencia de pequeños nodos activos, llamados nodos de Ranvier, separados por zonas recubiertas de mielina. El axon mielínico de los nervios motores puede ser muy largo, y contener cientos, o miles, de nodos. El impulso nervioso salta de un nervio al siguiente, dando lugar a una propagación 'a saltos' del impulso nervioso. Este tipo de propagación conlleva dos características importantes. Una de ellas es la posibilidad de incrementar la velocidad del impulso nervioso al tiempo que se disminuye el

diámetro de la fibra nerviosa. La otra son los fallos de propagación que ocurren cuando el recubrimiento de mielina se daña, lo que causa esclerosis múltiple.

### 3.1.1 Ecuaciones de Hodgkin-Huxley para nervios mielínicos

Un axon mielínico es una secuencia de nodos de Ranvier separada por zonas recubiertas de mielina. La mielina se considera un aislante perfecto. Podemos representar el axon mielínico mediante un circuito equivalente donde  $C$  and  $R$  representan la capacitancia y la resistencia. Denotamos por  $V_k$ ,  $I_k$  y  $I_{ion}(k)$  el potencial de la membrana y la corriente iónica en el nodo  $k$ -ésimo. Aplicando las leyes de Kirchoff al circuito tenemos

$$V_{k-1} - V_k = RI_k, \quad I_k - I_{k+1} = C \frac{dV_k}{dt} + I_{ion}(k)$$

Adoptamos en cada nodo la expresión propuesta por Hodgkin-Huxley para la corriente de iones  $I_{ion}(V_k, M_k, N_k, H_k)$ , una cúbica asimétrica en función de  $V_k$  que varía con los valores de las variables adicionales  $M_k, N_k, H_k$ . Obtenemos así el modelo de Hodgkin-Huxley discreto para nervios mielínicos

$$\begin{aligned} C \frac{dV_k}{dt} + I_{ion}(V_k, M_k, N_k, H_k) &= \\ \bar{D}(V_{k+1} - 2V_k + V_{k-1}), & \\ \frac{dM_k}{dt} &= \bar{\lambda}_M \bar{\Lambda}_M(V_k)(M_\infty(V_k) - M_k), \\ \frac{dN_k}{dt} &= \bar{\lambda}_N \bar{\Lambda}_N(V_k)(N_\infty(V_k) - N_k), \\ \frac{dH_k}{dt} &= \bar{\lambda}_H \bar{\Lambda}_H(V_k)(H_\infty(V_k) - H_k), \end{aligned}$$

donde el índice  $k$  denota el nodo  $k$ -th del axon. La variable  $V_k$  denota la desviación del potencial de la membrana respecto al equilibrio, mientras que  $N_k$  es la activación de potasio,  $M_k$  la activación de sodio y  $H_k$  la desactivación de sodio. La corriente de iones viene dada por:

$$\begin{aligned} I_{ion}(V, M, N, H) &= \bar{g}_{Na} M^3 H (V - \bar{V}_{Na,R}) \\ &+ \bar{g}_L (V - \bar{V}_{L,R}) + \bar{g}_K N^4 (V - \bar{V}_{K,R}). \end{aligned}$$

La fracción de canales  $K^+$  abiertos se calcula como  $N_k^4$ . La fracción de canales  $Na^+$  abiertos se calcula como  $M_k^3 H_k$ . Los parámetros tienen la interpretación siguiente.  $\bar{g}_{Na}$  y  $\bar{g}_K$  son las conductancias máximas para las vías de  $Na^+$  y  $K^+$ , respectivamente.  $\bar{g}_L$  es una conductancia de pérdida. Los potenciales de equilibrio correspondientes son  $\bar{V}_{Na}$ ,  $\bar{V}_K$  y  $\bar{V}_L$ , respectivamente. Definimos,  $\bar{V}_{Na,R} = \bar{V}_{Na} - \bar{V}_R$ ,  $\bar{V}_{K,R} = \bar{V}_K - \bar{V}_R$  y  $\bar{V}_{L,R} = \bar{V}_L - \bar{V}_R$ , donde  $\bar{V}_R$  es el potencial de reposo. El coeficiente  $\bar{D} = \frac{1}{L(r_i + r_e)} = \frac{1}{R}$ , siendo  $L$  la longitud de la capa de mielina entre nodos y  $r_i, r_e$  la resistencia por unidad de longitud de los medios intracelular y extracelular.

Este modelo es adecuado para los largos axones de los nervios periféricos de los vertebrados. Simulaciones numéricas del mismo [19] reproducen la propagación de impulsos nerviosos, que pueden ser además reconstruidos a trozos de forma asintótica para estudiar la influencia de los parámetros. La propagación del impulso nervioso falla cuando el frente delantero se ancla [12], lo que ocurre cuando las capas de mielina se deterioran o en presencia de drogas [19].

### 3.1.2 Ecuaciones de FitzHugh-Nagumo

El modelo de Fitz Hugh-Nagumo (FHN) discreto es una simplificación del modelo de Hodgkin-Huxley que es útil para comprender las claves matemáticas de la propagación de impulsos nerviosos y sus fallos [12, 13]:

$$\begin{aligned}\frac{du_k}{dt} &= d(u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}) + f(u_k) - v_k, \\ \frac{dv_k}{dt} &= \epsilon(u_k - Bv_k),\end{aligned}$$

$k = 0, \pm 1, \dots$ . En este modelo,  $u_k$  y  $v_k$  son el potencial de excitación de la membrana y una variable de recuperación (que actúa como una corriente saliente de iones) en el nodo  $k$ -ésimo. El término fuente es una función cúbica que representa la corriente de iones. El término difusivo es proporcional a la diferencia de corrientes internodales en un nodo determinado. La constante  $B$  se selecciona de modo que los términos fuente en el sistema FHN son  $O(1)$  para  $u_k$  y  $v_k$ , que la única solución estacionaria constante es  $u_k = 0 = v_k$ , de modo que el sistema tiene dinámica excitable. La constante  $\epsilon > 0$  es el cociente entre las escalas de tiempo características de ambas variables. Suponemos que  $\epsilon \ll 1$  para que sean distintas, es decir, excitación rápida y recuperación lenta.

### 3.2 Contracción de fibras musculares

Modelos similares describen la contracción y recuperación de fibras musculares. Por ejemplo, el modelo tipo Morris-Lecar

$$\begin{aligned}\frac{dv_k}{dt} &= D(v_{k+1} - 2v_k + v_{k-1}) + f(v_k, w_k) - 2I, \\ \frac{dw_k}{dt} &= \lambda \cosh\left(\frac{v_k - V_3}{2V_4}\right) \left[1 + \tanh\left(\frac{v_k - V_3}{V_4}\right) - 2w_k\right],\end{aligned}$$

con

$$f(v, w) = 2w(v - V_K) + 2g_L(v - V_L) + g_{Ca} \left[1 + \tanh\left(\frac{v - V_1}{V_2}\right)\right](v - 1).$$

donde  $v_k$  es la desviación del potencial de la membrana respecto a un potencial de referencia y  $w_k$  es la fracción de canales  $K^+$  abiertos. La escala de tiempo es  $\frac{\bar{g}_K}{2C_m}$ , donde  $\bar{g}_K$  es la conductancia de iones  $K^+$  y  $C_m$  la capacitancia de la membrana.

Este sistema es una versión simplificada del modelo de Morris-Lecar completo, que involucra una variable rápida adicional. Exhibe una dinámica rica, que varía según la estabilidad de sus soluciones constantes. Puede haber dos posibilidades. Si existe una única solución constante y es estable, el sistema genera dinámicas excitables con impulsos o trenes de impulsos que se propagan. Si la solución constante es inestable, el sistema exhibe un comportamiento oscilatorio y puede dar lugar a fenómenos de sincronización [20].

## 4 Formación de partículas y burbujas

### 4.1 Nucleación homogénea de partículas

La nucleación homogénea se produce en muchos ejemplos de transiciones de primera fase, como la condensación de gotas líquidas a partir de un vapor supersaturado, la nucleación de cristales en líquidos subenfriados, la cristalización de coloides, el crecimiento de agregados esféricos superada una concentración micelar o la segregación de aleaciones binarias.

Consideramos un modelo de nucleación en una red en la que hay más ubicaciones disponibles  $M$ , que partículas,  $N$ . Nos situamos en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$ , con una densidad de partículas fijada por ubicación  $\rho = N/M$ . Sea  $p_k$  el número de clusters con  $k$  partículas ( $k$ -clusters) y sea  $\rho_k = p_k/M$  la densidad de  $k$ -clusters. La conservación de partículas implica que la densidad total de partículas es constante

$$\sum_{k=1}^{\infty} k\rho_k = \rho.$$

En la teoría cinética de Becker-Döring, un  $k$ -cluster puede crecer o decrecer capturando o emitiendo monómeros con el tiempo. La evolución con el tiempo viene dada por

$$\begin{aligned} \rho'_k &= j_{k-1} - j_k, \quad k \geq 2, \\ j_k &= d_k(e^{(\epsilon_{k+1}-\epsilon_k)/(K_B T)}\rho_1\rho_k - \rho_{k+1}). \end{aligned}$$

La densidad de monómeros  $\rho_1$  se puede obtener a partir de la identidad de conservación que relaciona todas las densidades de los diferentes tipos de cluster. Se observan distintas eras en el proceso de formación de clusters que se pueden analizar mediante métodos asintóticos adecuados [17, 21].

### 4.2 Nucleación heterogénea de burbujas en residuos radioactivos

La nucleación heterogénea ocurre en sitios preferenciales donde se encuentran irregularidades.

La formación y crecimiento de burbujas de helio debidas a auto-irradiación en plutonio se ha modelado mediante ecuaciones cinéticas discretas para la densidad numérica de burbujas con  $k$  átomos. Éste es un importante fenómeno que ocurre en residuos radioactivos y puede dañar los contenedores creando contaminación radioactiva en el medio ambiente. A medida que una aleación envejece, se produce un estado transitorio inicial durante el cual la auto-irradiación produce lazos de dislocación que saturan aproximadamente en dos años. Las partículas alpha que se crean durante este proceso se convierten en átomos de helio. Estos átomos migran hasta encontrar huecos sin rellenar generados durante el proceso, hasta que son capturados por las burbujas de helio existentes. Un átomo

de helio se difunde hasta que encuentra otro átomo de helio y forma un dímero estable, o encuentra una burbuja de helio (un  $k$ -cluster estable con  $k$  átomos), que lo absorbe. Las burbujas de helio se anclan en los defectos, no se mueven y no emiten átomos de helio porque el balance energético es desfavorable.

Denotamos por  $\rho_k(t)$  la densidad numérica de  $k$ -clusters que tienen radio efectivo  $a_k$  (cuando el centro de un monómero está a distancia  $a_k$  del centro del cluster, se absorbe).  $\rho_1(t)$  es el número de monómeros por unidad de volumen,  $D$  es el coeficiente de difusión y  $g(t)$  el número de monómeros creados por unidad de volumen y por unidad de tiempo. El siguiente modelo cinético discreto describe el proceso

$$\begin{aligned}\rho'_k &= 4\pi D\rho_1 a_{k-1}\rho_{k-1} - 4\pi D\rho_1 a_k \rho_k, \quad k \geq 3, \\ \rho'_2 &= 8\pi D\rho_1^2 a_1 - 4\pi D\rho_1 a_2 \rho_2, \\ \rho_1 + \sum_{k=2}^{\infty} k\rho_k &= \int_0^t g(s) ds.\end{aligned}$$

Estudios asintóticos [22] muestran que este sistema genera un perfil de onda que describe la evolución del número de clusters de distintos tamaños con el tiempo.

## 5 Propagación de impulsos eléctricos en un semiconductor

Los semiconductores son materiales de gran interés en microelectrónica. Son la base de numerosos dispositivos que explotan los fenómenos de formación de patrones y oscilaciones en el campo eléctrico.

### 5.1 Modelos discretos para dinámica de paredes de dominio en superredes

Las superredes semiconductoras están formadas por una secuencia de capas alternas de distintos semiconductores. A menudo se forman en ellas paredes de dominio, que separan regiones con distinto campo eléctrico. La dinámica de estas paredes la gobiernan sistemas de la forma

$$\frac{dE_i}{dt} + \frac{v(E_i)}{\nu}(E_i - E_{i-1}) - \frac{D(E_i)}{\nu}(E_{i+1} - 2E_i + E_{i-1}) = J - v(E_i),$$

donde  $E_i$  es el campo eléctrico en el pozo  $i$ , siendo  $v, D$  funciones positivas y  $\nu > 0$  grande.  $v$  es una cúbica que crece desde 0 a un máximo local, decrece a un mínimo positivo, y luego crece hacia el infinito. Para un rango de  $J$  tenemos tres ceros  $z_1(J) < z_2(J) < z_3(J)$ , dos de los cuales son estables. Para  $\nu$  suficientemente grande, podemos construir soluciones de tipo frente [4], en una situación similar a la descrita para modelos de dislocaciones discretos. Encontramos umbrales  $J_{c_1}(\nu) < J_{c_2}(\nu)$  tales que [8]

- Si  $J_{c_1}(\nu) < J < J_{c_2}(\nu)$ , tenemos frentes estacionarios  $E_i$  que crecen monótonicamente de  $z_1(J)$  en  $-\infty$  a  $z_3(J)$  en  $\infty$ .
- Si  $J_{c_1}(\nu) > J$  o  $J > J_{c_2}(\nu)$ , tenemos frentes viajeros  $E_i(t) = E(i - ct)$  con velocidad de onda  $c(J)$  y perfil  $E(z)$  que crece monótonamente de  $z_1(J)$  en  $-\infty$  a  $z_3(J)$  en  $\infty$ . Tales ondas viajan con velocidades de signo opuesto para cada rango de  $J$ , algunas de ellas en el sentido de los electrones, otras en sentido contrario.
- Frentes viajeros y estacionarios no pueden coexistir.

Los frentes estacionarios representan paredes de dominio ancladas. Los frentes viajeros representan paredes de dominio en movimiento. A medida que  $J \rightarrow J_{c_1}(\nu)$  o  $J \rightarrow J_{c_2}(\nu)$ ,  $c(J) \rightarrow 0$ , los perfiles  $E(z)$  desarrollan escalones en los valores críticos de  $J$ . Este hecho está relacionado con una bifurcación global en el sistema, que es localmente una bifurcación de tipo nodo silla, lo que se puede usar para estimar la velocidad como  $|c(J)| \sim |\alpha(J_c)|(|J - J_c|)^{1/2}$ .

Podemos añadir ruido  $\gamma\xi_i$  a la corriente aplicada  $J$ , donde  $\gamma > 0$  caracteriza la magnitud del desorden y  $\xi_i$  es una variable aleatoria de media cero que toma valores en el intervalo  $(-1, 1)$  con igual probabilidad [10]. Tomando  $\gamma = 0$ , tenemos una velocidad que escala como  $|J - J_c|^{1/2}$ . Sin embargo, cuando añadimos ruido, para cada realización del ruido, los umbrales  $J_c$  se desplazan ligeramente hacia arriba o hacia abajo. La velocidad observada será la media de las velocidades observadas para un número alto de realizaciones. Para  $J > J_c$ ,

$$|c_R| \sim \frac{1}{\pi} \sqrt{\alpha(J_c)\beta(J_c)(J - J_c) + \gamma\beta(J_c)\xi_0}$$

la media

$$\bar{c} = \frac{1}{N} \sum_{R=1}^N |c_R| = \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 (\alpha\beta(J - J_c) + \gamma\beta\xi)^{1/2} d\xi \sim (J - J_c^*)^{3/2}$$

donde el nuevo valor crítico es  $J_c^* = J_c - \frac{\gamma}{\alpha}$ .

A medida que  $\nu \rightarrow 0$ , sólo persisten los frentes que viajan en una dirección, la misma que en el límite continuo, que toma la forma de una ecuación de reacción-convección-difusión

$$\frac{dE}{dt} + v(E)E_x - D(E)E_{xx} = J - v(E).$$

## 5.2 Modelos continuos para el efecto Gunn

Cuando añadimos paredes y deseamos describir efectos de tipo Gunn, es decir, la generación de sucesivos pulsos eléctricos autosostenidos. Se crean en un extremo, viajan hacia el otro, donde desaparecen para volver a generarse en el primer extremo [5]. A nivel macroscópico, este fenómeno se describe mediante

el sistema

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E}{\partial x \partial t} + A \frac{\partial E}{\partial t} + B \frac{\partial E}{\partial x} + C \frac{\partial J}{\partial t} + D &= 0, & x \in (0, L), t > 0, \\ E(x, 0) &= 0, & x \in (0, L), \\ E(0, t) &= \rho J(t), & t \geq 0, \\ \int_0^L E(x, t) dx &= \phi, & t \geq 0, \end{aligned}$$

donde  $\rho, \phi, L$  son positivos y  $A, B, C, D$  son funciones acotadas, siendo  $A$  y  $B$  positivas, mientras que  $C$  es negativa.  $E(x, t)$  representa el campo eléctrico,  $J(t)$  la corriente y  $\phi$  el voltaje.

Modelos microscópicos más detallados de este fenómeno conducen a ecuaciones de tipo Boltzmann para semiconductores [9].

## Referencias

- [1] A Carpio, SJ Chapman, SD Howison, JR Ockendon, Dynamics of line singularities, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 355(1731), 2013-2024, 1997
- [2] A Carpio, SJ Chapman, On the modelling of instabilities in dislocation interactions, Philosophical Magazine B 78 (2), 155-157, 1998
- [3] A Carpio, SJ Chapman, S Hastings, JB McLeod, Wave solutions for a discrete reaction-diffusion equation, European Journal of Applied Mathematics 11 (4), 399-412, 2000
- [4] A Carpio, LL Bonilla, A Wacker, E Schöll, Wave fronts may move upstream in semiconductor superlattices, Physical Review E 61 (5), 4866, 2000
- [5] A Carpio, P Hernando, M Kindelan, Numerical study of hyperbolic equations with integral constraints arising in semiconductor theory, SIAM Journal on Numerical Analysis 39 (1), 168-191, 2001
- [6] A Carpio, SJ Chapman, JJJ Velázquez, Pile-up solutions for some systems of conservation laws modelling dislocation interaction in crystals, SIAM Journal on Applied Mathematics 61 (6), 2168-2199, 2001
- [7] A Carpio, LL Bonilla, Wave front depinning transition in discrete one-dimensional reaction-diffusion systems, Physical Review Letters 86 (26), 6034, 2001
- [8] A Carpio, LL Bonilla, G Dell'Acqua, Motion of wave fronts in semiconductor superlattices, Physical Review E 64 (3), 036204, 2001

- [9] A Carpio, E Cebrian, FJ Mustieles, Long time asymptotics for the semiconductor Vlasov-Poisson-Boltzmann equations, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 11 (09), 1631-1655, 2001
- [10] A Carpio, LL Bonilla, A Luzón, Effects of disorder on the wave front depinning transition in spatially discrete systems, *Physical Review E* 65 (3), 035207, 2002
- [11] A Carpio, Wavefronts for discrete two-dimensional nonlinear diffusion equations, *Applied Mathematics Letters* 15 (4), 415-421, 2002
- [12] A Carpio, LL Bonilla, Depinning transitions in discrete reaction-diffusion equations, *SIAM Journal on Applied Mathematics* 63 (3), 1056-1082, 2003
- [13] A Carpio, LL Bonilla, Pulse propagation in discrete systems of coupled excitable cells, *SIAM Journal on Applied Mathematics* 63 (2), 619-635, 2003
- [14] A Carpio, LL Bonilla, Edge dislocations in crystal structures considered as traveling waves in discrete models, *Physical Review Letters* 90 (13), 135502, 2003
- [15] A Carpio, LL Bonilla, Oscillatory wave fronts in chains of coupled nonlinear oscillators, *Physical Review E* 67 (5), 056621, 2003
- [16] A Carpio, Nonlinear stability of oscillatory wave fronts in chains of coupled oscillators, *Physical Review E* 69 (4), 046601, 2004
- [17] JC Neu, LL Bonilla, A Carpio, Igniting homogeneous nucleation, *Physical Review E* 71 (2), 021601, 2005
- [18] A Carpio, LL Bonilla, Discrete models of dislocations and their motion in cubic crystals, *Physical Review B* 71 (13), 134105, 2005
- [19] A Carpio, Asymptotic construction of pulses in the discrete Hodgkin-Huxley model for myelinated nerves, *Physical Review E* 72 (1), 011905, 2005
- [20] A Carpio, Wave trains, self-oscillations and synchronization in discrete media, *Physica D: Nonlinear Phenomena* 207 (1-2), 117-136, 2005
- [21] LL Bonilla, A. Carpio, Y. Farjoun, JC Neu, Asymptotic and numerical studies of the Becker-Döring model for transient homogeneous nucleation, Markov processes and related fields, 12, 341-365, 2006
- [22] LL Bonilla, A Carpio, JC Neu, WG Wolfer, Kinetics of helium bubble formation in nuclear materials, *Physica D: Nonlinear Phenomena* 222 (1-2), 131-140, 2006
- [23] LL Bonilla, A Carpio, I Plans, Dislocations in cubic crystals described by discrete models, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 376, 361-377, 2007