

Modelización y Simulación: Ejemplos en Ciencia de Materiales y Mecánica

Ana Carpio, Universidad Complutense de Madrid

Diciembre 2011

1 Contenido

- Defectos en grafeno
- Dislocaciones en cristales
 - Modelos continuos para apilamientos de dislocaciones
 - Modelos discretos para dislocaciones aisladas
 - Nucleación de dislocaciones
- Nucleación de partículas y burbujas
 - Nucleación homogénea de partículas
 - Nucleación heterogénea
 - * Formación de burbujas de helio en residuos radioactivos
 - * Precipitación a partir de vapor y partículas
- Propagación de impulsos eléctricos en semiconductores
 - Modelos discretos para dinámica de paredes de dominio en superredes
 - Modelos hiperbólicos y cinéticos para el efecto Gunn
- Testado no destructivo de materiales
 - Imagen acústica
 - Imagen térmica

Referencias

2 Defectos en grafeno

Grafeno es el nombre de un material bidimensional con propiedades mecánicas y electrónicas prometedoras. Su estructura cristalina consiste en un retículo hexagonal formado por átomos de carbón en dos dimensiones. Distintos tipos de defectos alteran su estructura, influenciando sus propiedades mecánicas y electrónicas.

Los modelos de elasticidad discreta periodizada [25, 23] describen defectos típicos en grafeno y su dinámica, explicándolos en términos de dislocaciones.

Consideremos un retículo hexagonal plano e ignoremos las desviaciones en la dirección vertical. En el límite continuo, las deformaciones en el plano se describen mediante las ecuaciones de Navier de la elasticidad lineal para el vector de desplazamiento (u, v) ,

$$\begin{aligned}\rho_2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y}, \\ \rho_2 \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} &= \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y},\end{aligned}$$

donde ρ_2 es la densidad de masa en dos dimensiones λ y μ las constantes de Lamé bidimensionales ($\lambda = C_{12}$, $\mu = C_{66}$, $\lambda + 2\mu = C_{11}$).

A nivel de la red, obtenemos un modelo de elasticidad discreta para la dinámica de los átomos como sigue. Consideramos un punto A en la red hexagonal con coordenadas (x, y) . Sus 9 (3+6) vecinos próximos tienen coordenadas

$$\begin{aligned}n_1 &= \left(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2\sqrt{3}}\right), n_2 = \left(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2\sqrt{3}}\right), n_3 = \left(x, y + \frac{a}{\sqrt{3}}\right), \\ n_4 &= \left(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a\sqrt{3}}{2}\right), n_5 = \left(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a\sqrt{3}}{2}\right), n_6 = (x - a, y), \\ n_7 &= (x + a, y), n_8 = \left(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a\sqrt{3}}{2}\right), n_9 = \left(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a\sqrt{3}}{2}\right).\end{aligned}$$

Definimos los siguientes operadores que actúan en función de las coordenadas (x, y) del nodo A :

$$\begin{aligned}Tu &= [u(n_1) - u(A)] + [u(n_2) - u(A)] + [u(n_3) - u(A)], \\ Hu &= [u(n_6) - u(A)] + [u(n_7) - u(A)], \\ D_1 u &= [u(n_4) - u(A)] + [u(n_9) - u(A)], \\ D_2 u &= [u(n_5) - u(A)] + [u(n_8) - u(A)],\end{aligned}$$

Realizando desarrollos de Taylor de estas combinaciones de diferencias finitas

en torno a (x, y) obtenemos

$$\begin{aligned} Tu &\sim (\partial_x^2 u + \partial_y^2 u) \frac{a^2}{4}, \\ Hu &\sim (\partial_x^2 u) a^2, \\ D_1 u &\sim \left(\frac{1}{4} \partial_x^2 u + \frac{\sqrt{3}}{2} \partial_x \partial_y u + \frac{3}{4} \partial_y^2 u \right) a^2, \\ D_2 u &\sim \left(\frac{1}{4} \partial_x^2 u - \frac{\sqrt{3}}{2} \partial_x \partial_y u + \frac{3}{4} \partial_y^2 u \right) a^2, \end{aligned}$$

cuando $a \rightarrow 0$. A continuación, introducimos en las ecuaciones de movimiento Hu/a^2 , $(4T - H)u/a^2$ y $(D_1 - D_2)u/(\sqrt{3}a^2)$ en lugar de $\partial_x^2 u$, $\partial_y^2 u$ y $\partial_x \partial_y u$, respectivamente, con sustituciones similares para las derivadas de v . En cada punto de la red obtenemos las ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned} \rho_2 a^2 \frac{\partial_t^2 u}{\partial t^2} &= 4\mu Tu + (\lambda + \mu) Hu + \frac{\lambda + \mu}{\sqrt{3}} (D_1 - D_2)v, \\ \rho_2 a^2 \frac{\partial_t^2 v}{\partial t^2} &= 4(\lambda + 2\mu) Tv - (\lambda + \mu) Hv + \frac{\lambda + \mu}{\sqrt{3}} (D_1 - D_2)u. \end{aligned}$$

Las ecuaciones de Navier isotrópicas tienen soluciones singulares como e

$$\begin{aligned} u &= \frac{a}{2\pi} \left[\tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right) + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right], \\ v &= \frac{a}{2\pi} \left[-\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln \left(\frac{x^2 + y^2}{b^2} \right) + \frac{y^2}{2(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right], \end{aligned}$$

donde $\nu = \lambda/[2(\lambda + \mu)]$ para toda a . Estas soluciones representan dislocaciones en arista. Elegimos (x_0, y_0) distinto de un punto de la red y resolvemos una versión sobreamortiguada de las ecuaciones discretas

$$\begin{aligned} \rho_2 a^2 \frac{\partial_t^2 u}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial u}{\partial t} &= 4\mu Tu + (\lambda + \mu) Hu + \frac{\lambda + \mu}{\sqrt{3}} (D_1 - D_2)v, \\ \rho_2 a^2 \frac{\partial_t^2 v}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial v}{\partial t} &= 4(\lambda + 2\mu) Tv - (\lambda + \mu) Hv + \frac{\lambda + \mu}{\sqrt{3}} (D_1 - D_2)u, \end{aligned}$$

con $\gamma > 0$. Partiendo del valor inicial $(u(x - x_0, y - y_0), v(x - x_0, y - y_0))$ con velocidad cero, el sistema relaja a una solución estacionaria que contiene un típico defecto heptágono-pentágono (en ocasiones octágonos), comúnmente observado en grafeno.

Para permitir el movimiento y la interacción de estos defectos teniendo en cuenta las direcciones de la red efectuamos un cambio de variable. Pasamos de coordenadas cartesianas a las coordenadas primitivas de la red hexagonal. Tras ello periodizamos las diferencias en las direcciones primitivas (las sustituimos por funciones periódicas con periodo igual a la constante de red) [25, 23, 34]. De

esa forma, los pares heptágono-pentágono orientados de forma diferente interactúan a través de sus campos elásticos, se atraen y se repelen, formando otros defectos conocidos tales como diferentes tipos de dipolos y lazos, incluyendo defectos que son sólo temporalmente estables como los defectos de Stone-Wales.

3 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 interactúan 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/cm² 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.

3.1 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

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

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

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

donde λ y μ son las constantes de Lamé. Las ecuaciones de equilibrio elástico son

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

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]

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

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].

3.2 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

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

Todos los parámetros son positivos: m representa la masa atómica, α 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 ∞ .
- 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 ∞ . 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 [14]. 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 [15]. 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 $F_d(A)$. Estas simulaciones se hacen en redes finitas por razones computacionales y requieren condiciones de contorno no reflectantes como las derivadas en [32] por ejemplo.

Podemos estudiar dislocaciones bidimensionales en una red cúbica mediante redes bidimensionales [11, 13]. 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 θ es la función ángulo de 0 a 2π 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 [13]. 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 [17, 20]. 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 [17, 20].

4 Nucleación de dislocaciones

Podemos usar modelos de elasticidad discreta periodizados para comprender los procesos matemáticos que están detrás de la nucleación de defectos en una red. A diferencia de los modelos que se implementan en simulaciones de dinámica molecular de gran escala, que implementan truncamientos discontinuos para reducir el coste computacional, estos modelos involucran no linealidades regulares y pueden ser analizados.

Consideremos una red cúbica bidimensional con constante de red $a = 2\pi$. El desplazamiento $u_{i,j}(t)$ del punto (i, j) en la dirección x obedece las ecuaciones

$$m \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial t^2} + \alpha \frac{\partial u_{i,j}}{\partial t} = u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j} + A(\sin(u_{i,j-1} - u_{i,j}) \sin(u_{i,j+1} - u_{i,j}))$$

en una red cuadrada $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$. Imponemos condiciones de contorno $u_{i,j} = F(j - (N_y + 1)/2)$ [21]. A medida que F crece, observamos que la solución inicial nula se transforma lentamente en nuevas soluciones estacionarias hasta alcanzar un valor crítico F_c pasado el cual la estructura de la red se distorsiona en dos formas distintas. Linearizando el problema en $F = F_c$ encontramos un autovalor nulo para la matriz resultante, mientras que todos los autovalores eran negativos para $F < F_c$. La rama de soluciones estacionarias $s_{i,j}(F)$ es estable hasta $F = F_c$, cuando dos ramas distintas aparecen. Tiene lugar en el sistema una bifurcación de tipo pitchfork [21].

Cambiando la geometría podemos estudiar otros fenómenos, por ejemplo, el proceso de indentación del cristal. Denotamos ahora por $v_{i,j}(t)$ el desplazamiento vertical, gobernado por

$$m \frac{\partial^2 v_{i,j}}{\partial t^2} + \alpha \frac{\partial v_{i,j}}{\partial t} = v_{i-1,j} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j} + A(\sin(v_{i,j-1} - v_{i,j}) \sin(v_{i,j+1} - v_{i,j}))$$

en una red cuadrada $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$. Las condiciones de contorno representan el empuje de un indentador en la zona central superior:

- Lado izquierdo: $v_{1,j} = v_{0,j}$.
- Lado derecho: $v_{N_x,j} = v_{N_x+1,j}$.
- Parte izquierda de la pared superior ($1 \leq i < p_1$): $v_{i,N_y} = v_{i,N_y+1}$.
- Parte derecha de la pared superior ($p_2 < i \leq N_x$): $v_{i,N_y} = v_{i,N_y+1}$.
- Pared inferior: $v_{i,0} = 0$.
- Los átomos centrales ($p_1 \leq i \leq p_2$) son empujados hacia abajo: $v_{i,N_y+1} - v_{i,N_y} = -f(i)$, donde f tiene un perfil triangular. Se empuja hacia abajo, con magnitud $F > 0$.

A medida que F crece, observamos que la solución inicial nula para $F = 0$ desarrolla distorsiones localizadas en la red que se mueven hacia abajo. A medida que decrecemos F esas distorsiones viajan hacia arrib y pueden desaparecer salvo que queden ancladas en algún obstáculo [29]. La rama de soluciones estacionarias que comienza en $F = 0$ desarrolla bifurcaciones en valores específicos de F en los cuales se van creado nuevos defectos. Las nuevas ramas creadas son estables para algunos rangos de F , para los que los defectos existentes simplemente se recolocan. Cada vez que ha una nueva bifurcación un nuevo defecto se crea, y así sucesivamente. Cuando decrecemos F la situación se revierte. Los defectos creados se recolocan en posiciones más altas y pueden desaparecer.

5 Formación de partículas y burbujas

5.1 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 ρ_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 [16, 18].

5.2 Nucleación heterogénea

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

5.2.1 Formación de burbujas en residuos radioactivos

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 [19] muestran que este sistema genera un perfil de onda que describe la evolución del número de clusters de distintos tamaños con el tiempo. Un estudio analítico más riguroso es posible tras reformular el sistema mediante cambios de variable y transformaciones adecuadas [33].

5.2.2 Precipitación de vapor y partículas

Consideremos la condensación heterogénea de vapor mezclado con un gas portador en un flujo de punto de estancamiento cerca de una pared fría en presencia de partículas sólidas más grandes que el camino libre medio de las partículas de vapor. El vapor supersaturado se condensa en las partículas por difusión y las partículas y gotas se dirigen a la pared atraídas por termoforesis.

Tenemos vapor diluido con densidad numérica $c(x)$ en un gas portador con una pequeña cantidad de partículas sólidas individuales. La fracción de masa del vapor y de partículas sólidas es suficientemente pequeña con respecto a la fracción de masa del gas portador, de modo que la velocidad y la temperatura (estacionaria) $u(x)$ y $T(x)$ no están afectadas por el proceso de condensación y deposición. Las partículas sólidas pueden actuar como sitios de condensación

del vapor. Sea n^* el volumen de una partícula dividido por el volumen molecular del vapor condensado, de modo que una partícula sólida equivale a n^* moléculas de vapor. Entonces, una gota de líquido que baña una partícula sólida equivale a $n(x)$ moléculas de vapor, en el sentido de que n es igual al volumen de una gota (partícula más vapor condensado) dividida por el volumen molecular del vapor condensado. Por tanto, el número de moléculas líquidas que bañan una partícula sólida es $n(x) - n^*$. Sea $\rho(x)$ la densidad numérica de gotas, de modo que $\rho(x)[n(x) - n^*]$ es la densidad numérica del condensado.

En una geometría de flujo de punto de estancamiento cerca de una pared, las ecuaciones para $u(x)$, $n(x)$, $T(x)$ y $c(x)$ son[27]

$$\begin{aligned}
u''' + uu'' + 1 - (u')^2 &= 0, & x > 0, \\
u(0) = u'(0) = 0, & u'(\infty) = 1, \\
T'' + Pr uT' &= 0, & x > 0, \\
T(0) = T_w, & T(\infty) = 1, \\
\left(u + \alpha \frac{T'}{T}\right) \rho' &= -\alpha \rho \left(\frac{T'}{T}\right)', & x > 0, \\
\rho(\infty) &= 1, \\
\left(u + \alpha \frac{T'}{T}\right) n' &= -Nn^{1/3}(c - c_e) & x_* > x > 0, \\
n(x_*) &= 1, \\
c_e(x) &= \frac{T_d}{T(x)} \exp\left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{1}{T_d} - \frac{1}{T(x)}\right)\right], \\
c'' + Sc uc' &= R\rho n^{1/3}(c - c_e), & 0 < x < x_*, \\
c(0) &= c_e(0), & c(x_*) = c_e(x_*), \\
c'' + Sc uc' &= 0, & x > x_*, \\
c(x_*) &= c_e(x_*), & c'(x_*^-) = c'(x_*^+) & c(\infty) = 1,
\end{aligned}$$

donde el punto x^* viene dado como parte de la solución del problema de frontera libre [27].

6 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.

6.1 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 ν 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 ∞ .
- 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 ∞ . 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 ξ_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

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

6.2 Modelos hiperbólicos y cinéticos 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 ρ, ϕ, 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 ϕ el voltaje.

Modelos microscópicos más detallados de este fenómeno conducen a ecuaciones de tipo Boltzmann para semiconductores [9, 28]. La densidad de portadores $f(x, k, t)$ viene dada por

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{\Delta l}{2\hbar v_M} \sin(k) \partial_x f + \frac{\tau_e}{\eta} F \partial_k f = \\ \frac{1}{\eta} \left[f^{FDa}(k; \mu(n)) - \left(1 + \frac{\nu_{imp}}{2\nu_{en}} \right) f + \frac{\nu_{imp}}{2\nu_{en}} f(x, -k, t) \right], \end{aligned}$$

$$\partial_x^2 V = \partial_x F = n - 1$$

$$n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x, k, t) dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f^{FDa}(k; \mu(n)) dk$$

$$f^{FDa}(k; \mu) = \alpha \ln [1 + \exp(\mu - \delta + \delta \cos(k))]$$

$$\eta = \frac{v_M}{\nu_{en} x_0} \quad \delta = \frac{\Delta}{2k_B T}.$$

La condiciones de contorno son, en $x = 0$:

$$f^+ = \beta F - \frac{f^{(0)}}{\int_0^\pi \sin(k) f^{(0)} dk} \int_{-\pi}^0 \sin(k) f^- dk$$

con

$$\beta = \frac{2\pi\hbar\sigma F_M}{e\Delta N_D}$$

y en $x = L/x_0$:

$$f^- = \frac{f^{(0)}}{(1/(2\pi)) \int_{-\pi}^0 f^{(0)} dk} \left(1 - \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi f^+ dk \right)$$

Las condiciones de contorno para el potencial eléctrico V son

$$V(0, t) = 0, \quad V(L, t) = \phi_L \sim \frac{\phi}{F_M} \frac{L}{x_0}.$$

La condición inicial es

$$f^{(0)}(k; n) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \exp(\imath jk) \frac{1 - \imath jF/\tau_e}{1 + j^2(F)^2} f_j^{FD}(n)$$

$$f_j^{FD}(n) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi f^{FD}(k; \mu(n)) \cos(jk) dk$$

con $x \in [0, L = L/x_0]$ y f periodico en k con periodo 2π . La energía promedio E se define como

$$E = \frac{E}{k_B T} = \frac{\int_{-\pi/l}^{\pi/l} \varepsilon(k) f(x, k, t) dk}{k_B T \int_{-\pi/l}^{\pi/l} f(x, k, t) dk} = \delta \frac{\int_{-\pi}^{\pi} (1 - \cos k) f(x, k, t) dk}{\int_{-\pi}^{\pi} f(x, k, t) dk}.$$

Este modelo implementa una aproximación BGK del núcleo de colisión en la ecuación para la densidad de portadores. El modelo completo involucra un núcleo de colisión no local así como ecuaciones para distintos tipos de portadores de carga [9].

7 Testado no destructivo de materiales

En muchas situaciones necesitamos extraer información sobre la estructura interna de un medio a partir de observaciones externas indirectas. Se han desarrollado numerosas herramientas para distintos fines: prospecciones geofísicas, testado de materiales, detección de objetos . . . Todas ellas se basan en emitir algún tipo de onda que interacciona con el medio en estudio y a continuación se mide el resultado en una red de receptores. Conociendo los datos medidos en los receptores y las ondas emitidas, se trata de reconstruir la geometría interna y/o las propiedades materiales del medio. Consideramos aquí dos técnicas de testado no destructivo de materiales basadas en el uso de ondas acústicas y ondas térmicas.

7.1 Ondas acústicas

Consideremos un medio que contiene inclusiones en su interior. Para simplificar consideramos que la estructura del medio está definida por $\Omega_e := \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i$, donde $\Omega_i \subset \mathbb{R}^2$ son las inclusiones. Ω_i es un dominio abierto con frontera regular $\Gamma := \partial\Omega_i$ no necesariamente conexo. Puede constar de un número indeterminado de componentes aisladas $\Omega_i = \cup_{j=1}^d \Omega_{i,j}$ donde $\Omega_{i,j}$ son abiertos conexos que satisfacen $\overline{\Omega}_{i,l} \cap \overline{\Omega}_{i,j} = \emptyset$ para $l \neq j$.

Iluminamos esta configuración mediante una onda incidente armónica plana $U_{inc}(\mathbf{x}, t) = e^{i\omega t} \exp(i\kappa^0 \mathbf{x} \cdot \mathbf{d})$ con frecuencia ω , número de onda κ^0 y dirección de propagación \mathbf{d} , $|\mathbf{d}| = 1$. La onda incidente interactúa con el medio y los objetos, generando una onda dispersa y una onda transmitida. El campo de onda total se mide en detectores situados en Γ_{meas} , lejos de las inclusiones. Γ_{meas} puede ser un círculo que engloba las inclusiones o una colección de receptores en reconstrucciones más realistas. Normalmente, se conoce el campo total en una colección de receptores Γ_{meas} para diversas ondas incidentes \mathbf{d}^j .

La interacción entre las inclusiones, el medio y la onda incidente queda descrita mediante un modelo de transmisión para propagación de ondas acústicas. Al ser la onda incidente armónica en tiempo, la solución también es armónica en tiempo $U(\mathbf{x}, t) = e^{i\omega t} u(\mathbf{x}, t)$. La amplitud $u = u_{inc} + u_{sc}$ en Ω_e y la amplitud transmitida $u = u_{tr}$ en Ω_i satisfacen

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\alpha_e \nabla u) + \lambda_e^2 u = 0, & \text{en } \Omega_e, \\ \nabla \cdot (\alpha_i \nabla u) + \lambda_i^2 u = 0, & \text{en } \Omega_i, \\ u^- - u^+ = 0, & \text{en } \Gamma, \\ \alpha_i \partial_{\mathbf{n}} u^- - \alpha_e \partial_{\mathbf{n}} u^+ = 0, & \text{en } \Gamma, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r^{1/2} (\partial_r(u - u_{inc}) - i\kappa^0(u - u_{inc})) = 0, & r = |\mathbf{x}|, \end{cases}$$

con parámetros

$$\lambda_e(\mathbf{x}) \geq \lambda_e^1 > 0, \quad \lambda_i(\mathbf{x}) \geq \lambda_i^1 > 0, \quad \alpha_e(\mathbf{x}) \geq \alpha_e^1 > 0, \quad \alpha_i(\mathbf{x}) \geq \alpha_i^1 > 0.$$

El vector normal \mathbf{n} exterior a Ω_e apunta al interior de Ω_i . u^+ y u^- denotan los límites de u desde el exterior y el interior de Ω_i respectivamente. $\partial_{\mathbf{n}}$ y ∂_r representan derivadas normales y radiales.

Conociendo los valores de u en un número de receptores, u_{meas} , para diferentes ondas incidentes deseamos recuperar información sobre las inclusiones presentes en el medio. Esto nos conduce al problema de optimización

$$J(\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i) := \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M \int_{\Gamma_{meas}} |u^j - u_{meas}^j|^2 dl,$$

siendo u^j las soluciones de M problemas de transmisión con ondas incidentes $u_{inc}^j(\mathbf{x}) = \exp(i\kappa^0 \mathbf{x} \cdot \mathbf{d}^j)$. Este funcional depende de la variable Ω_i a través del problema de transmisión, que actúa como una restricción.

Las derivadas topológicas del funcional de coste nos permiten obtener información sobre las inclusiones. Se define la derivada topológica de un funcional de forma $\mathcal{J}(\mathcal{R})$ como

$$D_T(\mathbf{x}, \mathcal{R}) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{J}(\mathcal{R}_\varepsilon) - \mathcal{J}(\mathcal{R})}{\mathcal{V}(\varepsilon)}, \quad \mathbf{x} \in \mathcal{R},$$

donde \mathcal{R}_ε es \mathcal{R} menos una bola centrada en \mathbf{x} con radio ε . $\mathcal{V}(\varepsilon)$ es la medida de la bola. En nuestro caso, $\mathcal{V}(\varepsilon) = -\pi\varepsilon^2$. Obtenemos fórmulas más fáciles de implementar mediante desarrollos asintóticos [22, 24]:

$$D_T(\mathbf{x}, \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^M \operatorname{Re} \left[\frac{2(\alpha_e(\mathbf{x}) - \alpha_i(\mathbf{x}))}{1 + \frac{\alpha_i(\mathbf{x})}{\alpha_e(\mathbf{x})}} \nabla u^j(\mathbf{x}) \nabla \bar{p}^j(\mathbf{x}) + (\lambda_i^2(\mathbf{x}) - \lambda_e^2(\mathbf{x})) u^j(\mathbf{x}) \bar{p}^j(\mathbf{x}) \right],$$

para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i$ cuando los coeficientes son funciones regulares. El campo directo u^j es solución del problema de transmisión con la j -ésima onda incidente. El campo adjunto p^j es solución de

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\alpha_e \nabla p^j) + \lambda_e^2 p = (u_{meas}^j - u^j) \delta_{\Gamma_{meas}}, & \text{en } \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i, \\ \nabla \cdot (\alpha_i \nabla p^j) + \lambda_i^2 p^j = 0, & \text{en } \Omega_i, \\ (p^j)^- - (p^j)^+ = 0, & \text{en } \partial\Omega_i, \\ \alpha_i \partial_{\mathbf{n}} (p^j)^- - \alpha_e \partial_{\mathbf{n}} (p^j)^+ = 0, & \text{en } \partial\Omega_i, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r^{1/2} (\partial_r p^j + i\kappa^0 p^j) = 0. \end{cases}$$

$\delta_{\Gamma_{meas}}$ es una masa de Dirac con soporte en Γ_{meas} . Visualizando la derivada topológica para $\Omega_i = \emptyset$, las inclusiones suelen estar localizadas en regiones de grandes valores negativos de la derivada topológica. Un procedimiento iterativo permite mejorarla [24, 30]. Se pueden considerar condiciones diferentes en la interfaz, como Dirichlet o Neumann, cuando se trata de inclusiones ‘duras’ o ‘blandas’ al sonido [31, 22].

7.2 Ondas térmicas

La descripción anterior corresponde a un problema de imagen mediante ondas acústicas armónicas en tiempo. Se puede aplicar una estrategia similar a ondas térmicas dependientes del tiempo [26], considerando problemas de transmisión para ondas térmicas

$$\begin{cases} U_t - \kappa_e \Delta U = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N \setminus \overline{\Omega}_i \times (0, \infty), \\ U_t - \alpha_i \kappa_i \Delta U = 0, & \text{en } \Omega_i \times (0, \infty), \\ U^- - U^+ = U_{inc}, & \text{en } \partial\Omega_i \times (0, \infty), \\ \alpha_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} U^- - \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} U^+ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} U_{inc}, & \text{en } \partial\Omega_i \times (0, \infty), \\ U(\cdot, 0) = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N, \end{cases}$$

Los métodos de derivadas topológicas nos permiten aproximar las inclusiones solución del problema inverso empleando estas ondas [26]. Combinando estas técnicas con métodos de gradiente podemos encontrar, no sólo la geometría de los objetos, sino también sus constantes materiales κ_i , α_i .

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, Edge dislocations in crystal structures considered as traveling waves in discrete models, *Physical Review Letters* 90 (13), 135502, 2003
- [14] A Carpio, LL Bonilla, Oscillatory wave fronts in chains of coupled nonlinear oscillators, *Physical Review E* 67 (5), 056621, 2003
- [15] A Carpio, Nonlinear stability of oscillatory wave fronts in chains of coupled oscillators, *Physical Review E* 69 (4), 046601, 2004
- [16] JC Neu, LL Bonilla, A Carpio, Igniting homogeneous nucleation, *Physical Review E* 71 (2), 021601, 2005
- [17] A Carpio, LL Bonilla, Discrete models of dislocations and their motion in cubic crystals, *Physical Review B* 71 (13), 134105, 2005
- [18] 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
- [19] 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
- [20] 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
- [21] I Plans, A Carpio, LL Bonilla, Homogeneous nucleation of dislocations as bifurcations in a periodized discrete elasticity model, *EPL (Europhysics Letters)* 81 (3), 36001, 2008
- [22] A Carpio, ML Rapún, Topological derivatives for shape reconstruction, In: Bonilla, L.L. (eds) *Inverse Problems and Imaging. Lecture Notes in Mathematics*, vol 1943. Springer, Berlin, Heidelberg, 2008
- [23] A Carpio, LL Bonilla, F de Juan, MAH Vozmediano, Dislocations in graphene, *New Journal of Physics* 10 (5), 053021, 2008
- [24] A Carpio, ML Rapún, Solving inhomogeneous inverse problems by topological derivative methods, *Inverse Problems* 24 (4), 045014, 2008
- [25] A Carpio, LL Bonilla, Periodized discrete elasticity models for defects in graphene, *Physical Review B* 78 (8), 085406, 2008
- [26] A Carpio, ML Rapún, Domain reconstruction using photothermal techniques, *Journal of Computational Physics* 227 (17), 8083-8106, 2008

- [27] JC Neu, A Carpio, LL Bonilla, Theory of surface deposition from boundary layers containing condensable vapour and particles, *Journal of fluid mechanics* 626, 183-210, 2009
- [28] E Cebrián, LL Bonilla, A Carpio, Self-sustained current oscillations in the kinetic theory of semiconductor superlattices, *Journal of Computational Physics* 228 (20), 7689-7705, 2009
- [29] I Plans, A Carpio, LL Bonilla, Toy nanoindentation model and incipient plasticity, *Chaos, Solitons & Fractals* 42 (3), 1623-1630, 2009
- [30] A Carpio, ML Rapún, An iterative method for parameter identification and shape reconstruction, *Inverse Problems in Science and Engineering* 18 (1), 35-50, 2010
- [31] A Carpio, BT Johansson, ML Rapún, Determining planar multiple sound-soft obstacles from scattered acoustic fields, *Journal of Mathematical Imaging and Vision* 36 (2), 185-199, 2010
- [32] A Carpio, B Tapiador, Nonreflecting boundary conditions for discrete waves, *Journal of Computational Physics* 229 (5), 1879-1896, 2010
- [33] A Carpio, B Tapiador, Analysis of helium bubble growth in radioactive waste, *Nonlinear Analysis: Real World Applications* 11 (5), 4174-4184, 2010
- [34] LL Bonilla, A Carpio, Theory of defect dynamics in graphene: defect groupings and their stability, *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 23 (4), 337-346, 2011