

Universidad Carlos III de Madrid

Departamento de Matemáticas

Tesis Doctoral



ESTUDIO DE MODELOS DISCRETOS CON  
APLICACIONES EN MATERIA  
CONDENSADA

Ana María Luzón Cordero

Septiembre 2002

DIRECTORES

Profesor Luis Lopez Bonilla

Profesora Ana Carpio



*A mis padres*

# Agradecimientos

Quiero dar las gracias al profesor Luis L. Bonilla porque accediera a dirigirme la tesis, por su paciencia y comprensión, porque me introdujera en su grupo de trabajo y, en especial, por ponerme en contacto con la profesora Ana Carpio, codirectora de este trabajo.

Quiero dar las gracias a la profesora Ana Carpio, por su entusiasmo y optimismo, por trabajar a mi lado y su ánimo constante.

Quiero dar las gracias al profesor Manuel Alonso, que me animó a iniciar el programa de doctorado de Ingeniería Matemática y desde entonces siempre ha estado apoyándome.

Quiero dar las gracias a la Escuela de Técnica Superior de Ingenieros de Montes por proporcionarme todos los medios materiales para poder llevar a cabo este trabajo. En especial, quiero dar las gracias, al profesor Eduardo Cuchillo por procurar que siempre tuviera el mejor ordenador posible a mi disposición, incluso cediendo los que le correspondían (PII a 333 MHz con 4 Gb, PIII a 550 MHz con 8 Gb y el actual PIV a 1.9 GHz con 40 Gb).

Quiero agradecer a la profesora Pilar Cristobal su colaboración siempre que me ha surgido cualquier duda de Estadística o Probabilidad y a Ramón Escobedo, mi hermano mayor científico, que siempre esta ahí para ayudarme en todo, mantenerme en contacto con la Carlos III y ser mi animador constante a través del correo electrónico.

Quiero agradecer a mi padre que me metiera en el cuerpo el gusto por las mediciones y los cálculos y el interés por el porqué de las cosas, a imaginar. Por enseñarme, con su ejemplo, el valor del trabajo y la constancia.

Quiero agradecer a mi madre que me enseñara a tener la mente abierta, a tener interés por buscar y encontrar, a seguir siempre adelante y disfrutar.

Quiero agradecer a mi hermana Mary que sea mi hermana mayor, que siempre se preocupe por mi y confíe en mi capacidad. Sin su apoyo nunca habría escrito esta tesis.

Quiero agradecer que esté ahí a toda mi familia: a mis hermanos Julián y Joaquín, a Jose Luis *Manubrio*, a Rosa, a Ana, a mis sobrinos Quimi y Helena. Y a mis amigos: Isabel, Mari Luz, Ana, Eduardo, Ramón, Cristina, Belén, etc.

Quiero agradecer a Manolo que siempre esté a mi lado, que me comprenda y que comparta conmigo tantas cosas. Quiero agradecerle su fuerza, su confianza y su cariño. Sin él la tesis habría sido imposible.

# Índice General

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	Capítulo 2: Frentes de onda en sistemas discretos sobreamortiguados. Efectos del desorden. . . . .	3
1.2	Capítulo 3: Estabilidad de frentes de onda en sistemas discretos amortiguados . . . . .	5
1.3	Capítulo 4: Frentes de onda en sistemas discretos conservativos . . . . .	7
1.4	Capítulo 5: Un modelo discreto vectorial: fotoexcitación en superredes semiconductoras . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Frentes de onda en sistemas discretos sobreamortiguados. Efectos del desorden</b>	<b>13</b>
2.1	Introducción . . . . .	13
2.2	Transiciones anclaje-propagación en modelos de Reacción-Difusión sin desorden . . . . .	15
2.3	Efectos del desorden espacial en la transición anclaje-propagación en modelos de reacción-difusión . . . . .	22
2.4	Transiciones anclaje propagación en modelos para superredes semiconductoras débilmente acopladas . . . . .	24
2.5	Efectos del desorden en superredes semiconductoras . . . . .	28
2.6	Conclusiones . . . . .	30
2.7	Apéndice: Teorema Central del Límite . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Estabilidad de frentes de onda en sistemas discretos amortiguados</b>	<b>35</b>
3.1	Introducción . . . . .	35

3.2	Resultados numéricos . . . . .	37
3.2.1	El potencial de doble pozo . . . . .	37
3.2.2	Un potencial periódico . . . . .	40
3.3	Resultados asintóticos . . . . .	42
3.3.1	Estimación de la velocidad . . . . .	42
3.3.2	Construcción asintótica de las soluciones del problema de valores iniciales . . . . .	50
3.4	Estimaciones auxiliares . . . . .	52
3.4.1	Estimaciones de energía . . . . .	52
3.4.2	Ecuaciones integrales . . . . .	55
3.5	Estabilidad de los frentes de onda para $\epsilon$ pequeño . . . . .	58
3.6	Estabilidad de frentes estacionarios para $\epsilon > 0$ . . . . .	61
3.7	Coexistencia de frentes viajeros y estacionarios . . . . .	63
3.8	Conclusiones . . . . .	66
<b>4</b>	<b>Frentes de onda en sistemas discretos conservativos</b>	<b>69</b>
4.1	Introducción . . . . .	69
4.2	Análisis de las modulaciones en el modelo de Frenkel-Kontorova conservativo . . . . .	72
4.3	Condiciones necesarias para la existencia de frentes de onda . . . . .	77
4.4	Construcción de soluciones explícitas . . . . .	80
4.4.1	Soluciones estacionarias . . . . .	80
4.4.2	Soluciones de tipo onda viajera . . . . .	81
4.4.3	Trenes de onda periódicos viajeros . . . . .	83
4.5	Fuentes no lineales definidas a trozos . . . . .	87
4.5.1	El límite continuo para un término fuente lineal a trozos . . . . .	89
4.5.2	El problema discreto: términos fuente lineales a trozos y métodos de variable compleja . . . . .	95
4.5.3	El problema discreto: el método inverso aplicado a perfiles definidos a trozos . . . . .	100
4.6	Conclusiones . . . . .	103

---

<b>5</b>	<b>Un modelo discreto vectorial: fotoexcitación en superredes semiconductoras</b>	<b>105</b>
5.1	Introducción . . . . .	105
5.2	Ecuaciones . . . . .	107
5.2.1	Adimensionalización . . . . .	112
5.2.2	Valores numéricos típicos de variables y parámetros . . . . .	113
5.3	Soluciones estacionarias del sistema . . . . .	117
5.3.1	Modelo final . . . . .	119
5.3.2	Soluciones estacionarias uniformes . . . . .	120
5.3.3	Soluciones estacionarias no uniformes . . . . .	120
5.4	Conclusiones . . . . .	123
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>125</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>127</b>

# Índice de Figuras

2.1	<i>Perfiles de los frentes de onda para el modelo de Frenkel-Kontorova sobrearmortiguado cuando <math>A = 1</math> tomando <math>F</math> próximo a <math>F_c</math>.</i> . . . . .	17
2.2	<i>Frentes estacionarios estables para el modelo de Frenkel-Kontorova cuando <math>A = 1, 2, 10, 100</math> y <math>F = 0</math>.</i> . . . . .	18
2.3	<i>Frentes estacionarios estables para el modelo de Frenkel-Kontorova cuando <math>A = 10</math> y <math>F = 4, 6.102</math>.</i> . . . . .	19
2.4	<i>Comparación de velocidades teóricas y numéricas para los frentes viajeros cerca de <math>F_c</math>, en el caso del modelo de Frenkel-Kontorova usando <math>N</math> puntos activos y los siguientes valores del parámetro <math>A</math>: (a) <math>A = 100</math>, (b) <math>A = 10</math>, (c) <math>A = 2</math>, (d) <math>A = 1</math>.</i> . . . . .	20
2.5	<i>Comparación de frentes calculados conforme a predicciones teóricas y resolución numéricas cerca de <math>F_c</math> para <math>A = 2</math> usando <math>N = 8</math> puntos activos: (a) Trayectoria de un punto. (b) perfil del frente, <math>u(z) = u_0(z/ c )</math>.</i> . . . . .	21
2.6	(a) <i>Velocidad media <math> \bar{c} </math> en función de <math>F</math> para <math>A = 10</math>, <math>F_c = 6.102281</math> y <math>\gamma = 0.1</math>. (b) <i>Gráfica de <math>\ln \bar{c} /\ln F</math> mostrando la transición al exponente crítico <math>3/2</math>.</i> . . . . .</i>	31
2.7	<i>Velocidad promedio adimensional para la superred <math>9/4</math> SL con parámetros adimensionales <math>\nu = 3</math>, <math>J_1 = 0.179203</math>, <math>\gamma = 0.01</math>.</i> . . . . .	32
2.8	<i>Velocidad promedio adimensional para la superred <math>9/4</math> SL con parámetros adimensionales <math>\nu = 40</math>, <math>J_2 = 0.790203</math>, <math>\gamma = 0.01</math>.</i> . . . . .	32
3.1	<i>Trayectorias correspondientes a (3.2) para <math>A = 10</math>, <math>F = 2.53</math> y diferentes valores de <math>\epsilon</math>. Las curvas dibujadas con trazo sólido representan <math>u_n(t)</math> y las curvas discontinuas <math>u'_n(t)</math> para <math>n = -5, -10, -15, \dots</math>. Las curvas punteadas representan las trayectorias <math>v_n(t)</math> del modelo sobrearmortiguado con <math>\epsilon = 0</math></i> . . . . .	38



3.2	<i>Análogo a la figura 3.1 con valores crecientes de <math>\epsilon</math>.</i> . . . . .	39
3.3	<i>Análogo a la figura 3.1 con valores crecientes de <math>\epsilon</math>.</i> . . . . .	40
3.4	<i>Velocidad de los frentes viajeros en función de <math>\epsilon</math> para (3.2) cuando <math>A = 10</math> y <math>F = 2.53</math>: (a) Zoom en la región <math>\epsilon</math> pequeño (b) Gráfica completa comparando la predicción asintótica (3.12) y los valores numéricos para <math>\epsilon</math> grande.</i> . . . . .	41
3.5	<i>Traectorias correspondientes a (3.3) para <math>A = 10</math>, <math>F = 8</math> y diferentes valores de <math>\epsilon</math>. Las curvas dibujadas con trazo sólido representan <math>u_n(t)</math> y las curvas discontinuas <math>u'_n(t)</math> para <math>n = -5, -10, -15, \dots</math>. Las curvas punteadas representan las trayectorias <math>v_n(t)</math> del modelo sobreamortiguado con <math>\epsilon = 0</math>.</i> . . . . .	42
3.6	<i>Análogo a 3.5 para <math>\epsilon</math> grande.</i> . . . . .	43
3.7	<i>Traectorias para (3.3) cuando <math>A = 10</math>, <math>F = 8</math>: si <math>\epsilon</math> es suficientemente grande se pierden los frentes de onda.</i> . . . . .	44
3.8	<i>Traectorias correspondientes a (3.3) para <math>A = 10</math>, <math>F = 6.2</math> y diferentes valores de <math>\epsilon</math>. Las curvas dibujadas con trazo sólido representan <math>u_n(t)</math> y las curvas discontinuas <math>u'_n(t)</math> para <math>n = -5, -10, -15, \dots</math>. Las curvas punteadas representan las trayectorias <math>v_n(t)</math> del modelo sobreamortiguado con <math>\epsilon = 0</math>.</i> . . . . .	45
3.9	<i>Análogo a 3.8 para <math>\epsilon</math> grande.</i> . . . . .	46
3.10	<i>Análogo a 3.8 para <math>\epsilon</math> grande.</i> . . . . .	47
3.11	<i>Análogo a 3.8 para <math>\epsilon</math> grande.</i> . . . . .	48
3.12	<i>(a) Velocidad de los frentes viajeros en función de <math>\epsilon</math> para (3.3) cuando <math>A = 10</math> y <math>F = 6.2</math>. (b) Velocidad de los frentes de onda en función de <math>F</math> para (3.3) cuando <math>A = 10</math> y <math>\epsilon = 0.1</math>.</i> . . . . .	49
3.13	<i>Coexistencia de frentes de onda viajeros y estacionarios: (a) potencial de doble pozo, (b) potencial periódico. A la izquierda de la línea discontinua vertical existen frentes estacionarios para cualquier valor de <math>\epsilon</math>. A la derecha, se observan frentes de onda viajeros. Para algunos valores de <math>\epsilon</math>, los frentes viajeros no se extinguen al traspasar la línea vertical <math>F = F_c(A)</math>, persisten hasta una nueva curva crítica <math>\epsilon(F)</math>.</i> . . . . .	50
3.14	<i>Plano de fases asociado a (3.51) para <math>A = 10</math>, <math>\epsilon = 0.5</math>, <math>g(u) = \sin(u)</math>: (a) <math>F = 4</math>, (b) <math>F = 4</math> zoom cerca del primer cero, (c) <math>F=5.6</math>, (d) <math>F=5.6</math> zoom cerca del primer cero.</i> . . . . .	65

3.15 Trayectorias que entran en los dos ceros estables para  $A = 10, F = 5.6$ . . . . . 66

3.16 Potencial asociado a  $h(u) = 2u_0 + Ag(u_0) - F - U_1(F/A) - U_3(F/A), F = 5.6$ . 67

3.17 Perfiles de las trayectorias  $u_n(t)$  para  $A = 10$  y  $F = 5.9$ . . . . . 67

4.1 (a) Propagación sin distorsión. (b) Perfil del frente. . . . . 73

4.2 Ley de dispersión (4.7) cuando  $c = 0$  y  $g(s) = \sin(s)$ . . . . . 74

4.3 (a)  $\alpha = 0.1$  (b)  $\alpha = 0.01$ . La escala temporal que hemos usado no es suficientemente fina para apreciar la forma precisa de las oscilaciones de la parte superior, la hemos elegido para estudiar si la velocidad se mantiene constante o disminuye con el tiempo. A medida que  $\alpha$  decrece la amplitud y frecuencia de las oscilaciones de la cola superior aumenta hasta el punto de que es difícil dilucidar si los perfiles se repiten u oscilan de forma variable. Sin embargo, parecen avanzar todos ellos a la misma velocidad. . . . . 79

4.4 Término fuente  $g(u)$  dado por (4.24): (a)  $\alpha = 0, \epsilon = 1, c = 0.1$  (b)  $\alpha = 1, \epsilon = 0, c = 0.1$ . Nótese que al incluir un  $al \neq 0$  se pierde la forma cúbica por tanto éste resultado sólo vale para el problema estacionario o el de evolución conservativo. 82

4.5 Término fuente  $g(u)$  dado por (4.25): (a)  $A = 1, \epsilon = 1, c = 0.1$  (b)  $\alpha = 1, \epsilon = 0, c = 0.1$  . . . . . 83

4.6 Potenciales: (a)  $V_1(u) = 1 - \cos(u)$ , (b)  $V_2(u) = u^4/4 - u^2/2$  . . . . . 85

4.7 Planos de fases para (4.26) con  $F = 0$ : (a)  $g_1(u) = \sin(u)$ , (b)  $g_2(u) = u(u^2 - 1)$  85

4.8 Potenciales para  $F = 0.2$ : (a)  $V_1(u) - Fu = 1 - \cos(u) - 0.2u$ , (b)  $V_2(u) - Fu = u^4/4 - u^2/2 - 0.2u$  . . . . . 86

4.9 Planos de fases para (4.26) con  $F = 0.2$ : (a)  $g_1(u) = \sin(u)$ , (b)  $g_2(u) = u(u^2 - 1)$  86

4.10 Perfiles para  $\alpha = 0, A = 10, \epsilon = 1$ : (a) Perfil monótono (4.42) con  $c = 0.5$ , (b) Perfil oscilatorio (4.45) con  $c = 1.5$ , (c) Perfil escalonado para  $c = 1$ : la función signo . . . . . 91

4.11 Curvas  $c(A, \epsilon, \alpha, F)$  para  $A = 10$ , (a)  $\epsilon = 0, \alpha = 1$ , (b)  $\epsilon = 1, \alpha = 1$ . Para el caso  $\epsilon = 1, \alpha = 0$  el único valor posible es  $F = 0$  . . . . . 94

4.12 (a) Contorno sencillo para la expresión integral de la función escalón 4.58 (b) Contorno de integración final usado en la representación integral de los perfiles. 97

4.13	<i>Perfil de la onda viajera calculado con un número pequeño de polos imaginarios. Las dos colas están ya definidas. Para determinar la configuración de la zona de transición sería preciso sumar la serie de residuos. . . . .</i>	99
4.14	<i>Términos fuente para <math>\gamma = \beta = 1</math> y <math>r_1 = r_2 = 1</math> (a) <math>g_0(v)</math> (4.66), (b) <math>g_c(v)</math> (4.67) con <math>c = 0.01</math>, <math>\alpha = 1</math>, (c) <math>g_c(v)</math> (4.67) con <math>c = -0.01</math>, <math>\alpha = 1</math>, (d) <math>f_c(v)</math> (4.69) con <math>c = 0.1</math>, <math>\alpha = 1</math>, <math>\epsilon = 1</math>, (e) <math>f_c(v)</math> (4.69) con <math>c = -0.1</math>, <math>\alpha = 1</math>, <math>\epsilon = 1</math>. .</i>	102
5.1	<i>Intensidad de la fotoluminiscencia de las muestras A (a) y B (b) como función del voltage. En las imágenes el brillo representa la intensidad de la intensidad de la fotoluminiscencia . . . . .</i>	106
5.2	<i>Resonancias a 1.5 V . . . . .</i>	108
5.3	<i>Resonancias a 17 V . . . . .</i>	108
5.4	<i>Resonancias a 25 V . . . . .</i>	108
5.5	<i>Resonancias a 38 V . . . . .</i>	109
5.6	<i>Recombinaciones . . . . .</i>	109
5.7	<i>Función velocidad adimensional, zoom entorno de los dos máximos . . . . .</i>	114
5.8	<i>J-V. Soluciones Estacionarias Uniformes para diferentes valores de <math>g</math> . . . . .</i>	121
5.9	<i>Perfil para una solución con dos dominios con <math>g = 500</math> y <math>j = 0.01</math> . . . . .</i>	123

# Índice de Tablas

5.1	<i>Variables con dimensiones</i>	107
5.2	<i>Campos criticos</i>	115
5.3	<i>Tiempos de Resonancia</i>	116
5.4	<i>Tiempos de Relajación</i>	117
5.5	<i>Tiempos de Recombinación</i>	117

# Capítulo 1

## Introducción

Infinidad de sistemas físicos y biológicos tienen en común el estar formados por la agrupación organizada de 'entes' más pequeños. Tal es el caso de los metales (átomos formando una red cristalina), los tejidos nerviosos y musculares (formados por agrupación de células), las superredes semiconductoras (formadas de capas de semiconductores)... Tradicionalmente, se ha tendido a modelizar tales sistemas ignorando la estructura espacial discreta y pasando al límite del continuo. Tal enfoque conduce típicamente a modelos en ecuaciones en derivadas parciales. La ventaja de este enfoque estriba en que resulta más sencillo obtener resultados analíticos (soluciones explícitas, predicciones asintóticas, información cualitativa) sobre las soluciones de estos modelos, funciones que dependen con un cierto grado de continuidad y diferenciabilidad de variables continuas. Este hecho permite utilizar herramientas matemáticas tan básicas y potentes como el cálculo diferencial e integral o la variable compleja. A lo largo de los años se han desarrollado numerosas técnicas de análisis adecuadas al estudio de distintos modelos de ecuaciones en derivadas parciales. No obstante, a la hora de simular numéricamente estos modelos, hay que volver a trabajar con variables discretas.

El estudio de modelos continuos ha proporcionado resultados muy útiles. Sin embargo, hay evidencia experimental de una amplia gama de fenómenos que no se pueden describir con modelos continuos. Tales fenómenos son debidos a la estructura discreta subyacente y se pierden en el límite del continuo. En estos casos, es preciso

considerar modelos espacialmente discretos, en los que las soluciones dependen de una variable temporal continua y de variables espaciales discretas. Obtener información analítica sobre las soluciones de estos modelos resulta complicado al no ser posible asumir ni siquiera continuidad en espacio. En esta tesis hemos pretendido avanzar en el estudio de un tipo de soluciones concretas: los frentes de onda discretos.

El estudio de las ondas discretas genera problemas en diversos frentes:

- A nivel de análisis, se plantean principalmente dos cuestiones:
  - Las ondas viajeras discretas corresponden a perfiles y velocidades que son solución de problemas de autovalores no lineales para ecuaciones diferenciales en diferencias. El carácter no local de este tipo de ecuaciones (intervienen las derivadas y los valores del perfil buscado en distintos puntos [6]) dificulta notablemente la obtención de condiciones para la existencia de soluciones.
  - Los argumentos perturbativos usuales en ecuaciones en derivadas parciales o diferenciales ordinarias no se pueden aplicar en problemas espacialmente discretos. Es preciso idear estrategias para ser capaz de construir soluciones asintóticas y analizar la estabilidad de soluciones particulares sorteando las dificultades derivadas de la presencia de una variable espacial discreta.
- A nivel numérico, se plantea la cuestión fundamental de relacionar el comportamiento cualitativo de las soluciones de los esquemas numéricos con el comportamiento cualitativo de las soluciones de los modelos originales, que se desearía reproducir correctamente.

Las ondas solución de modelos espacialmente continuos se suelen aproximar numéricamente resolviendo problemas discretizados. Tales discretizaciones han de ser diseñadas para evitar patologías: las ondas discretas pueden anclarse o moverse en una dirección errónea, sus perfiles pueden presentar rugosidades anómalas y sus velocidades pueden diferir drásticamente de las velocidades esperadas para las ondas continuas [80, 74, 73]. La simulación de modelos espacialmente discretos conlleva igualmente la discretización del tiempo. El compor-

tamiento cualitativo de las aproximaciones numéricas puede no corresponder al esperado: ejemplos de caos numérico, oscilaciones y efectos dispersivos espúreos son relativamente frecuentes [1, 2].

En esta tesis estudiamos la dinámica de ondas en sistemas espacialmente discretos. He organizado los resultados obtenidos en cuatro capítulos:

- En el capítulo 2 investigamos los frentes de onda en sistemas de reacción-difusión (eventualmente con términos de convección) unidimensionales espacialmente discretos y el efecto del desorden espacial en su propagación.
- En el capítulo 3 estudiamos las soluciones de tipo frente viajero en modelos que incluyen términos de inercia (derivadas segundas respecto al tiempo) y de fricción (derivadas primeras respecto al tiempo).
- En el capítulo 4 investigamos la existencia de frentes viajeros en modelos conservativos.
- En el capítulo 5 iniciamos el estudio de un modelo discreto vectorial. Derivamos este modelo para la dinámica de superredes semiconductoras fotoexcitadas usando datos experimentales para determinar los coeficientes y estudiamos los estados estacionarios del modelo.

Describo a continuación las aportaciones al estudio de modelos discretos realizadas en cada capítulo de la tesis.

## **1.1 Capítulo 2: Frentes de onda en sistemas discretos sobreamortiguados. Efectos del desorden.**

Los avances en la comprensión de los fenómenos de propagación en sistemas discretos comenzaron en 1987, con un trabajo de Keener [42]. Keener demostró que, genéricamente, los frentes de onda de una ecuación de reacción-difusión unidimensional espacialmente discreta están anclados para valores de un parámetro de control (la 'fuerza externa') en un cierto intervalo y se mueven en caso contrario. Un frente

de onda o 'kink' es una solución cuyo perfil es monótonamente creciente o decreciente conforme aumenta la variable espacial y une dos estados uniformes estables. En ecuaciones espacialmente continuas, el intervalo de valores de la fuerza en que hay anclaje de los frentes se reduce a un punto, por lo que el anclaje es un fenómeno puramente discreto que no tiene analogía en el caso continuo. Zinner demostró en 1992 [82] que existen soluciones de tipo frente que se mueven con velocidad constante  $c$  y que son derivables en la variable  $(n-ct)$ , donde  $n$  es la variable discreta espacial y  $t$  el tiempo. Resultados de este tipo permiten estudiar sistemas discretos con técnicas asintóticas.

En ecuaciones sobreamortiguadas no pueden coexistir frentes de onda anclados y viajeros para el mismo valor de la fuerza externa aplicada [22]. Recientemente se ha logrado describir la transición entre frentes anclados y en movimiento para estas ecuaciones. Fáth [24] ha estudiado de manera analítica ecuaciones con términos fuente lineales a trozos. En [15, 18] se introdujo una estrategia para describir las transiciones anclaje-propagación en problemas con fuentes no lineales. Estos métodos permiten reducir el movimiento del frente cerca de la transición de anclaje al de unos pocos puntos activos (que pueden reducirse a un punto en el límite fuertemente discreto), calcular la fuerza crítica y la velocidad y perfil del frente de manera analítica. En el límite del continuo, se puede describir la transición mediante 'asymptotics beyond all orders', es decir, técnicas asintóticas que controlan términos exponencialmente pequeños [44].

En este capítulo, consideramos el efecto del desorden espacial en la transición anclaje-propagación de sistemas espacialmente discretos unidimensionales. Las aplicaciones incluyen sistemas de reacción-difusión sujetos a un campo aleatorio externo, el deslizamiento de ondas de densidad de carga y la dinámica de paredes de dominio en superredes semiconductoras débilmente acopladas.

Los modelos se formulan en términos de cadenas de osciladores sobreamortiguados acoplados difusivamente en un potencial  $V$ , sujetos a un campo de fuerzas  $F + \gamma\xi_n$ :

$$\frac{du_n}{dt} = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} + F - A g(u_n) + \gamma\xi_n, \quad g = V' \quad (1.1)$$

o bien, en el caso de las superredes semiconductoras,

$$\begin{aligned} \frac{dE_n}{dt} + v(E_n) \frac{E_n - E_{n-1}}{\nu} - D(E_n) \frac{E_{n+1} + E_{n-1} - 2E_n}{\nu} \\ = \gamma D(E_n) \xi_{n+1} - \gamma [v(E_n) + D(E_n)] \xi_n + J - v(E_n) \end{aligned} \quad (1.2)$$



siendo  $E_n$  el campo eléctrico en el pozo  $n$ ,  $J$  la corriente,  $\nu$  el dopaje y  $v(E)$ ,  $D(E)$  las curvas de velocidad y difusividad.

En estos ejemplos, el mayor efecto del desorden consiste en ‘suavizar’ la transición, modificando el exponente crítico en la dependencia de la velocidad del campo aplicado de  $1/2$  a  $3/2$ . El exponente  $3/2$  fue obtenido por D. Fisher en un modelo de campo medio para el deslizamiento de ondas de densidad de carga usando argumentos de cambio de escala [28, 29].

El resultado se obtiene aplicando el Teorema central del límite a los promedios de las velocidades (usando las fórmulas establecidas en [15] y [18] para los modelos sin desorden), tras descomponerlos en grupos de variables aleatorias independientes. Las predicciones de la velocidad promedio obtenidas de esta forma ajustan razonablemente las velocidades promedio medidas numéricamente.

## 1.2 Capítulo 3: Estabilidad de frentes de onda en sistemas discretos amortiguados

El objetivo de este capítulo es estudiar fenómenos de anclaje y propagación de frentes en modelos espacialmente discretos unidimensionales que incluyen términos de fricción (derivadas primeras respecto al tiempo) y de inercia (derivadas segundas respecto al tiempo). En particular, estudiamos la existencia y estabilidad de soluciones de tipo frente en cadenas de osciladores amortiguados acoplados difusivamente sujetos a un potencial  $V$  y una fuerza externa  $F$ :

$$\epsilon u_n'' + u_n' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F \quad g = V' \quad (1.3)$$

La comprensión del efecto de los términos de inercia y fricción es fundamental para desarrollar una teoría que describa la dinámica de defectos (dislocaciones [16] o microfisuras [72]) en materiales cristalinos. Simulaciones numéricas de modelos atómicos para microfisuras reflejan fenómenos de inestabilidad en la propagación de fisuras en ausencia de términos de fricción [68]. El control de la dinámica de defectos es importante en el diseño de nanodispositivos [76].

Desde el punto de vista de la estructura matemática, la inclusión de derivadas segundas en estas ecuaciones tiene una consecuencia inmediata: los principios del máximo válidos para ecuaciones discretas de reacción-difusión dejan de ser aplicables. Los principios del máximo son importantes para controlar las soluciones de tipo frente, que unen dos estados constantes. En problemas con dos derivadas temporales, se suele recurrir a argumentos de energía para controlar las soluciones. La energía potencial de las soluciones con estructura de frente de onda suele ser infinita (salvo en casos excepcionales) por lo que la aplicabilidad de técnicas de energía en nuestro caso es limitada y en general requiere el uso de funcionales de energía convenientemente modificados.

Este capítulo combina resultados numéricos con predicciones asintóticas y resultados de estabilidad rigurosos. Los resultados de nuestras simulaciones numéricas conducen a algunas conclusiones relevantes:

- Para valores de  $\epsilon$  pequeños los perfiles y velocidades de las soluciones de tipo frente viajero son pequeñas perturbaciones de los perfiles y velocidades para el modelo sobreamortiguado con  $\epsilon = 0$ . Se observan tres regímenes de propagación diferentes según el valor de  $F$  (si la velocidad inicial es suficientemente pequeña). Datos iniciales de tipo escalón evolucionan conforme el tiempo crece hacia frentes anclados, frentes viajeros con velocidad positiva o negativa, en los mismos rangos de  $F$  que en el caso  $\epsilon = 0$ .
- A medida que  $\epsilon$  crece se observa la formación de oscilaciones en los perfiles de los frentes viajeros: se pierde la monotonía de los frentes del modelo sobreamortiguado. Según el tipo de no linealidad sea periódico o confinante, se observa que los frentes viajeros se vuelven inestables para valores de  $\epsilon$  moderados (caso periódico) o persisten para valores de  $\epsilon$  grande (caso confinante). En este caso, describimos la transición propagación-anclaje mediante técnicas asintóticas y obtenemos predicciones analíticas de la velocidad que reflejan su dependencia del parámetro  $\epsilon$ , para  $\epsilon$  grande.
- A medida que  $\epsilon$  crece se observan fenómenos de coexistencia de frentes estacionarios y viajeros para el mismo valor de  $F$ . Los frentes estacionarios dejan de

existir para  $|F| > F_{ce}$  mientras que los frentes viajeros persisten hasta un valor de  $F_{cd} < F_{ce}$ .

Las contribuciones principales al estudio matemático de los frentes de onda en estas ecuaciones son las siguientes:

- En el límite  $\epsilon$  pequeño obtenemos resultados rigurosos de estabilidad para las soluciones de tipo frente, estacionario o viajero, mediante una técnica de ecuaciones integrales.
- Para  $\epsilon > 0$  arbitrario, obtenemos resultados de estabilidad para las soluciones estacionarias cuando los datos iniciales están suficientemente próximos a ellas usando funcionales de energía modificados.
- Obtenemos predicciones asintóticas para la velocidad de los frentes en los límites  $\epsilon$  pequeño y, si el potencial es confinante, para  $\epsilon$  grande.
- Introducimos una teoría que permite explicar la coexistencia de frentes estacionarios y viajeros. Esta teoría nos conduce a un nuevo tipo de bifurcación global en el sistema. En el estudio de la dinámica de defectos en cristales, el valor mínimo de  $F$  para el cual se observan frentes viajeros se corresponde con la llamada ‘tensión de Peierls dinámica’ (tensión mínima para la cual un defecto inicialmente en movimiento sigue moviéndose). El valor máximo de  $F$  a partir del cual no existen frentes estacionarios se corresponde con la llamada ‘tensión de Peierls estática’ (tensión necesaria para que un defecto estático comience a moverse). Nuestra descripción matemática del fenómeno de coexistencia de frentes viajeros y estacionarios proporciona una base matemática a la observación experimental de la existencia de tensiones de Peierls estáticas y dinámicas.

### 1.3 Capítulo 4: Frentes de onda en sistemas discretos conservativos

El panorama general de la propagación y anclaje de frentes de onda está menos claro si en lugar de una ecuación de reacción-difusión discreta consideramos ecuaciones es-

parcialmente discretas con inercia y sin fricción [12]. En estos casos pueden existir pulsos viajeros (perfiles que tienden a la misma constante cuando  $|n|$  tiende a infinito) [1, 2, 30] o trenes de onda [41]. Estas ondas también presentan el fenómeno del anclaje y de coexistencia entre frentes anclados y en movimiento para el mismo valor del parámetro de control. Esto último se concluye de los resultados que proporciona un método inverso ideado por Flach, Zolotaryuk y Kladko [30]: dado un perfil de onda viajera (frente o pulso), se generan potenciales para los cuales el modelo discreto con interacción elástica de vecinos próximos sujetos a ese potencial admite como solución una onda viajera con el perfil dado. Sin embargo, no está claro si una elección tan clásica como un potencial periódico de tipo coseno conduce a modelos que admiten soluciones viajeras tipo frente. Se tiende a creer que tales ondas radiarían energía y terminarían anclándose [12, 67]. Dicho de otra forma, efectos dispersivos no lineales en las colas del frente terminarían parándolo o inestabilizándolo. Desde el punto de vista de la simulación numérica de estos sistemas, en ausencia de fricción ha de ponerse especial cuidado en elegir discretizaciones que reflejen correctamente el comportamiento cualitativo del sistema hamiltoniano en estudio.

En este capítulo consideramos dos cuestiones principales:

- La estabilidad débilmente no lineal de las colas constantes de los frentes.
- La existencia de soluciones explícitas de tipo frente, con perfiles monótonos u oscilatorios, o bien con estructura de tren de ondas periódico.

En la Sección 4.2 estudiamos la estabilidad débilmente no lineal de las soluciones constantes linealmente estables. Para no linealidades como el seno, sin términos cuadráticos en su desarrollo de Taylor en torno a los ceros estables, deducimos que las perturbaciones con número de onda  $k$  pequeño son estables pero pueden hacerse inestables para números de onda grandes. Estos argumentos no parecen aplicables a no linealidades con términos cuadráticos como la estudiada en [30].

En las Secciones 4.3, 4.4 y 4.5 consideramos desde diversos puntos de vista el problema de la existencia de soluciones de tipo frente viajero. El estudio 'abstracto' de la existencia de ondas viajeras en sistemas discretos con términos fuente fijados ha sido abordado con estrategias distintas: métodos de punto fijo [82, 35], métodos de

perturbación para ecuaciones diferenciales en diferencias [22, 49, 48], métodos variacionales [33, 27, 41]. En problemas conservativos sólo se dispone de resultados generales de existencia relativos a ondas viajeras con estructura de pulso o de tren de ondas periódico en torno a un cero estable. Por lo que respecta a soluciones de tipo frente viajero sólo se conoce un ejemplo explícito, construido en [30] mediante un ‘método inverso’. Los perfiles de frente viajero obtenidos en [30] son crecientes. Sin embargo, los resultados numéricos descritos en el Capítulo 3 indican que los modelos amortiguados (1.3) poseen soluciones de tipo frente viajero con perfiles oscilatorios. Los resultados numéricos que hemos descrito en el Capítulo 3, sugieren que los frentes monótonos son casos excepcionales en los problemas con términos de inercia: en general los frentes viajeros presentarían oscilaciones en torno a las colas constantes. Esos resultados indican además la existencia de dos valores críticos de  $F$ :  $F_{cd} \leq F_{ce}$ . Para  $F \in (F_{cd}, F_{ce})$ , coexisten soluciones de tipo frente viajero y estacionario. Por encima de  $F_{ce}$ , los frentes estacionarios desaparecen y por debajo de  $F_{cd}$  desaparecen los frentes viajeros. El análisis realizado por Atkinson y Cabrera en [5] para modelos conservativos con fuentes lineales a trozos parece sugerir un panorama similar y apunta la posibilidad de la coexistencia de familias de ondas viajeras con velocidades diferentes. En este capítulo ahondamos en las cuestiones de existencia de frentes viajeros para problemas conservativos, la coexistencia de frentes estacionarios y viajeros con distintas velocidades y su estabilidad para la dinámica del sistema.

Los resultados principales descritos en las secciones 4.3-4.5 son los siguientes:

- Obtención de condiciones necesarias para la existencia de frentes viajeros.
- Construcción de soluciones explícitas de tipo frente estacionario, frente viajero y tren de ondas periódico viajero mediante métodos de Fourier o bien métodos inversos.
- Construcción de fuentes no lineales definidas a trozos para algunos perfiles monótonos y oscilatorios simples.

El trabajo llevado a cabo en este capítulo sugiere que en general no cabe esperar la existencia de frentes viajeros en problemas conservativos con fuentes impares: datos

iniciales con estructura de frente evolucionan hacia estructuras oscilantes viajeras o ancladas, que asemejan trenes de onda en algunas circunstancias o, más frecuentemente, estructuras oscilantes de apariencia caótica. Cuando el grado de asimetría de la fuente es suficientemente grande, cabe esperar la existencia de soluciones viajeras (frentes no monótonos) con velocidades suficientemente grandes. Se presenta además una compleja panorámica de coexistencia de distintos tipos de soluciones especiales que pueden actuar como atractores y complican la descripción de la dinámica del problema de valores iniciales.

## 1.4 Capítulo 5: Un modelo discreto vectorial: fotoexcitación en superredes semiconductoras

En este capítulo derivó un modelo para la dinámica de superredes semiconductoras no dopadas, débilmente acopladas y fotoexcitadas, estudiadas experimentalmente por Ohtani y colaboradores [37, 38]. El transporte de carga tiene lugar mediante efecto túnel resonante entre subbandas electrónicas situadas tanto en los pozos como en las barreras de potencial, mientras que los huecos son pesados y no dan lugar a corriente por efecto túnel. Las ecuaciones del modelo se adimensionalizan con los parámetros de los experimentos de Ohtani y colaboradores [37, 38] y se simplifican adecuadamente. El modelo resultante es:

$$\epsilon \frac{dn_i}{dt} = -a v(e_i) n_i + g - n_i p_i \quad (1.4)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = g - (e_i - e_{i-1} + p_i + n_i) p_i \quad (1.5)$$

$$\frac{de_i}{dt} = a [j(t) - v(e_i) n_i] \quad (1.6)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i = V \quad (1.7)$$

donde  $n_i$ ,  $p_i$  y  $e_i$  son las densidades de electrones y huecos y el campo eléctrico en el  $i$ -ésimo periodo espacial de la superred, que tiene  $N$  periodos. La densidad de electrones en el estado  $X$  de la barrera  $i$ -ésima es, aproximadamente,  $x_i = e_i - e_{i-1} + n_i + p_i$ ,  $v(e_i)$  es una función no lineal del campo eléctrico que corresponde a la velocidad local

de los electrones y  $j(t)$  es la densidad total de corriente en la superred. Los parámetros  $V$  y  $g$  denotan el voltaje entre los extremos de la superred y la intensidad de la fotoexcitación respectivamente. Los parámetros adimensionales,  $a \approx 0.1$  y  $\epsilon \approx 10^{-3}$  son pequeños. Una vez derivado este modelo, se calculan sus soluciones estacionarias, tanto uniformes como no uniformes. Estas últimas se buscan en la clase de soluciones cuyo perfil del campo eléctrico es una función creciente de  $i$ , por corresponder a soluciones con dos dominios del campo eléctrico como las observadas experimentalmente. Queda abierto el problema de estudiar la dinámica del modelo y encontrar soluciones estables que describan su comportamiento para tiempos grandes.







# Capítulo 2

## Frentes de onda en sistemas discretos sobreamortiguados. Efectos del desorden

### 2.1 Introducción

Una gran diversidad de fenómenos en campos distintos se pueden describir en términos de modelos espacialmente discretos: el movimiento de dislocaciones en cristales [55], la adsorción de átomos en substratos periódicos [23], la dinámica de cadenas de diodos resonantes acoplados [47], la dinámica de paredes de dominio en superredes semiconductoras débilmente acopladas (SL) [8, 9, 78, 18], el deslizamiento de ondas de densidad de carga (CDW) [34, 52], las uniones de superconductores de tipo Josephson [81], la propagación de impulsos nerviosos a lo largo de fibras recubiertas de mielina [42, 43], la propagación de impulsos a través de células cardíacas [43], las ondas de descarga de calcio en células vivas [13], etc.

En muchos de estos sistemas el desorden debido a diferencias en los parámetros de los componentes individuales es importante porque tiene un fuerte impacto sobre el comportamiento colectivo. Un ejemplo distintivo del comportamiento colectivo en sistemas discretos (ausente en modelos continuos en espacio) es el fenómeno de anclaje de frentes de onda: para valores de un parámetro de control dentro de un cierto inter-

valo, los frentes de onda que unen dos estados constantes estables quedan atrapados y no se propagan [43]. Cuando el parámetro de control supera un cierto umbral, el frente de onda comienza a deslizarse a una cierta velocidad [42]. La existencia de estos umbrales es un fenómeno intrínsecamente discreto, que se pierde en el límite del continuo. Recientemente, se ha propuesto una teoría matemática para describir las transiciones anclaje-propagación y el movimiento de los frentes cerca de los umbrales en modelos discretos unidimensionales (1D) de reacción difusión (RD) [15]. En esta teoría, el anclaje y el la propagación de los frentes se describe estudiando el comportamiento de unos pocos elementos, siempre y cuando los efectos de la discretización espacial sean suficientemente fuertes [18, 15].

En este capítulo, consideramos el efecto del desorden espacial en la transición anclaje-propagación de sistemas espacialmente discretos unidimensionales. Las aplicaciones incluyen sistemas de reacción difusión sujetos a un campo aleatorio externo, el deslizamiento de ondas de densidad de carga y la dinámica de paredes de dominio en superredes semiconductoras débilmente acopladas. En estos ejemplos, el mayor efecto del desorden consiste en ‘suavizar’ la transición, modificando el exponente crítico en la dependencia de la velocidad del campo aplicado de  $1/2$  a  $3/2$ . El exponente  $3/2$  fue obtenido por D. Fisher en un modelo de campo medio para el deslizamiento de ondas de densidad de carga usando argumentos de cambio de escala [28, 29].

Vamos a considerar en primer lugar cadenas de osciladores sobreamortiguados acoplados difusivamente en un potencial  $V$ , sujetos a un campo de fuerzas  $F + \gamma\xi_n$ :

$$\frac{du_n}{dt} = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} + F - A g(u_n) + \gamma\xi_n. \quad (2.1)$$

Aquí, el término no lineal  $g(u) = V'(u)$  presenta una no linealidad de tipo ‘cúbico’, tal que  $A g(u) - F$  tiene tres ceros,  $U_1(F/A) < U_2(F/A) < U_3(F/A)$  en un intervalo de valores de  $F$ , de modo que  $g'(U_i(F/A)) > 0$  para  $i = 1, 3$  y  $g'(U_2(F/A)) < 0$ . La parte fluctuante del campo de fuerzas es  $\gamma\xi_n$ . El parámetro  $\gamma \geq 0$  caracteriza la magnitud del desorden y  $\xi_n$  es una variable aleatoria de media cero que toma valores en el intervalo  $(-1, 1)$  con igual probabilidad. Un ejemplo de modelo con la estructura descrita por eq. (2.1) lo proporciona (dejando al margen la aproximación de campo medio que nosotros no hacemos) la modificación del modelo de Fukuyama-Lee para ondas de densidad de

carga propuesta por D. Fisher [28, 29]. En ella,  $u_n = \theta_n - \chi_n$ ,  $g(u) = \sin u$ ,  $\gamma\xi_n = \chi_{n+1} - 2\chi_n + \chi_{n-1}$ , donde  $\theta_n$  es la fase de la onda de densidad de carga en la posición  $n$  y  $\chi_n$  es una variable aleatoria que toma valores equiprobables en  $(0, 2\pi)$ .

Posteriormente, extendemos nuestro estudio a modelos para superredes semiconductoras que incluyen términos de convección y difusión no lineal.

## 2.2 Transiciones anclaje-propagación en modelos de Reacción-Difusión sin desorden

En esta sección recordamos la descripción de las transiciones anclaje-propagación obtenida en [15] para modelos de reacción-difusión unidimensionales con no linealidades cúbicas. Su estructura viene dada por (2.1) con  $\gamma = 0$ :

$$\frac{du_n}{dt} = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} + F - A g(u_n) \quad (2.2)$$

Si  $g(u)$  es impar respecto a  $U_2(0)$ , existe un intervalo simétrico  $|F| \leq F_c$  en el cual los frentes de onda que unen los dos ceros estables  $U_1(F/A)$  y  $U_3(F/A)$  están anclados. Para  $|F| > F_c$ , se observan *frentes de onda viajeros con perfiles regulares*,  $u_n(t) = u(n - ct)$ , con  $u(-\infty) = U_1(F/A)$  y  $u(\infty) = U_3(F/A)$ . La velocidad  $c(A, F)$  depende de  $A$  y  $F$  y satisface  $cF < 0$  y  $|c| \propto (|F| - F_c)^{\frac{1}{2}}$  cuando  $|F| \rightarrow F_c$  [15]. Como ejemplos podemos citar el modelo de Frenkel-Kontorova (FK) sobreamortiguado ( $g = \sin u$ ) [31, 12] y el potencial cuártico de doble pozo ( $V = (u^2 - 1)^2/4$ ). No linealidades menos simétricas dan lugar a intervalos de anclaje menos simétricos y nuestro análisis se aplica a ellas con pequeñas modificaciones [18].

Recordemos las principales características de la teoría de puntos activos para la descripción de la transición anclaje-propagación en ausencia de desorden [15, 18]. Excepcionalmente el caso en que  $A$  es demasiado pequeño (límite del continuo en el cual  $F_c \rightarrow 0$ ), los frentes de onda estables difieren apreciablemente de  $U_1$  o  $U_3$  en un número finito de puntos,  $u_n$ ,  $n = -L, \dots, -1, 0, 1, \dots, M$ , llamados los *puntos activos*. Para  $n < -L$ ,  $u_n \approx U_1(F/A)$  y para  $n > M$ ,  $u_n \approx U_3(F/A)$ . Reconstruimos el perfil del frente  $u(n - ct)$  analizando el comportamiento de los puntos activos  $u_n(t)$ ,  $n = -L, \dots, -1, 0, 1, \dots, M$ ,

a medida que el frente se mueve para  $F > F_c > 0$  (el caso  $F < 0$  se obtiene por simetría). La fase arbitraria (invariante por traslaciones) del frente de onda se fija imponiendo que la solución del sistema de puntos activos en el tiempo  $t = 0$  (cuando  $F$  es ligeramente mayor que  $F_c$ ) sea igual a la solución estacionaria en  $F = F_c$ ,  $u_n(A, F_c)$ ,  $n = -L, \dots, M$  salvo términos de orden  $(F - F_c)$ .

El campo crítico  $F_c$  se obtiene a partir de la condición siguiente: la matriz de coeficientes del sistema de puntos activos linealizado en torno a la solución estacionaria tiene un autovalor cero. Si  $V_n$  ( $V_{-L}^2 + \dots + V_M^2 = 1$ ) es el autovector normalizado asociado al autovalor cero, una aproximación exterior a la solución  $u_n(t)$  viene dada por  $u_n(t) \sim u_n(A, F_c) + \varphi(t)V_n$ , donde la amplitud  $\varphi$  obedece la ecuación

$$d\varphi/dt = \alpha(F - F_c) + \beta\varphi^2 \quad (2.3)$$

en la cual

$$\alpha = \sum_{i=-L}^M V_i + A^{-1} [V_{-L}/g'(U_1(F_c/A)) + V_M/g'(U_3(F_c/A))] > 0 \quad (2.4)$$

$$\beta = -(A/2) \sum_{i=-L}^M g''(u_i(A, F_c))V_i^3 > 0 \quad (2.5)$$

La solución de esta ecuación tal que  $\varphi(0) = 0$  [equivalente a  $u_n(0) = u_n(A, F_c)$  para  $n = -L, \dots, M$ ] es  $\varphi = [\alpha(F - F_c)/\beta]^{1/2} \tan(\sqrt{\alpha\beta(F - F_c)}t)$ . La amplitud  $\varphi$  explota en el tiempo  $t = \pm t_b$ ,

$$t_b = \pi/(2\sqrt{\alpha\beta(F - F_c)}). \quad (2.6)$$

El recíproco de la anchura de este intervalo de tiempo proporciona una aproximación a la velocidad del frente de onda,

$$|c| \sim \sqrt{\alpha\beta(F - F_c)}/\pi. \quad (2.7)$$

En el tiempo de explosión, la aproximación exterior a  $u_n(t)$  calculada anteriormente ha de ser acoplada a una aproximación interior apropiada. En el tiempo de explosión  $t_b$ , la solución interior apropiada es la solución del sistema de puntos activos en  $F = F_c$  con condiciones frontera elegidas de forma que  $u_n = u_n(A, F_c)$  cuando  $t \rightarrow -\infty$  y

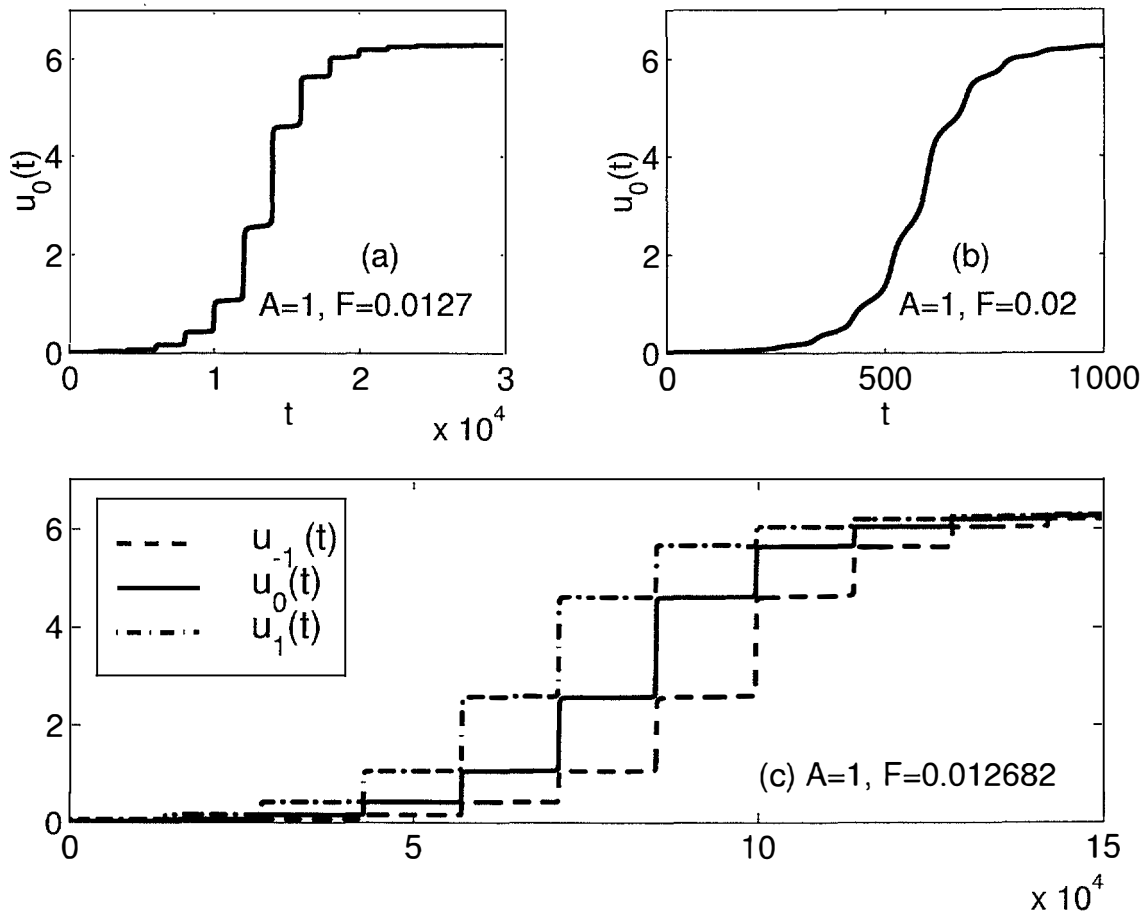


Figura 2.1: Perfiles de los frentes de onda para el modelo de Frenkel-Kontorova sobre-amortiguado cuando  $A = 1$  tomando  $F$  próximo a  $F_c$ .

$u_n = u_{n+1}(A, F_c)$  cuando  $t \rightarrow \infty$ . En el tiempo de explosión  $-t_b$ , la solución interior obedece el mismo sistema de ecuaciones que en  $F = F_c$ , pero las condiciones frontera son ahora  $u_n = u_{n-1}(A, F_c)$  cuando  $t \rightarrow -\infty$  y  $u_n = u_n(A, F_c)$  cuando  $t \rightarrow \infty$  [17].

Las Figuras 2.1, 2.3, 2.4, 2.5 muestran la forma de los frentes estacionarios y viajeros, así como el resultado de comparar las predicciones obtenidas mediante la teoría de puntos activos y los resultados de simulaciones numéricas.

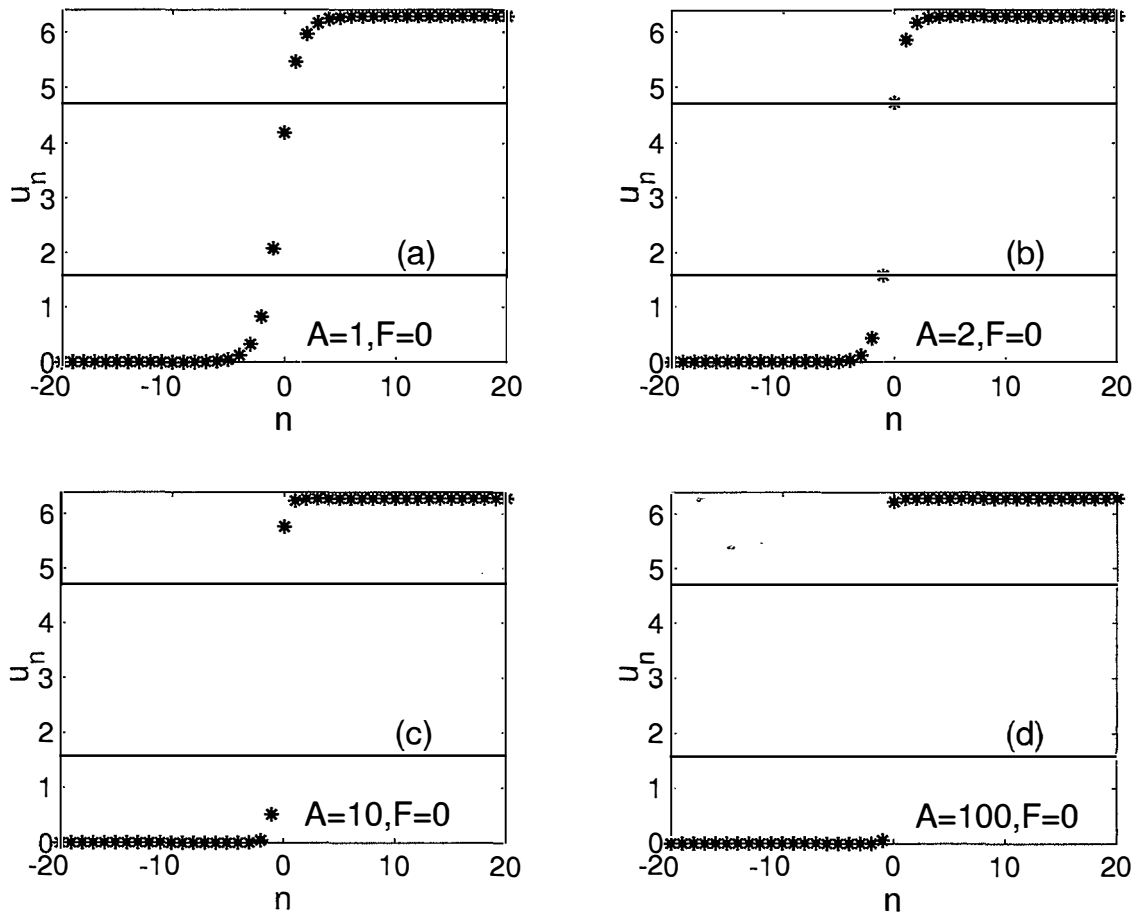


Figura 2.2: Frentes estacionarios estables para el modelo de Frenkel-Kontorova cuando  $A = 1, 2, 10, 100$  y  $F = 0$ .

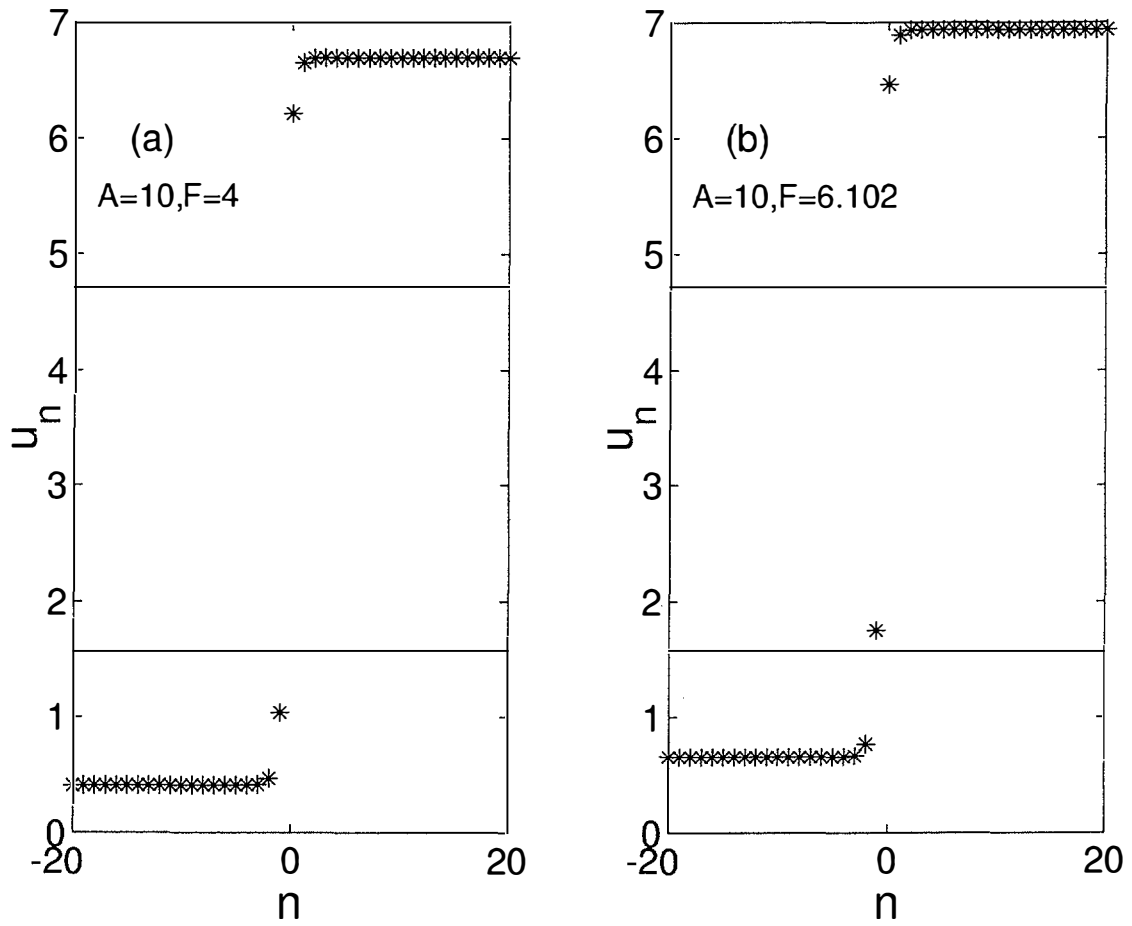


Figura 2.3: *Frentes estacionarios estables para el modelo de Frenkel-Kontorova cuando  $A = 10$  y  $F = 4, 6.102$ .*

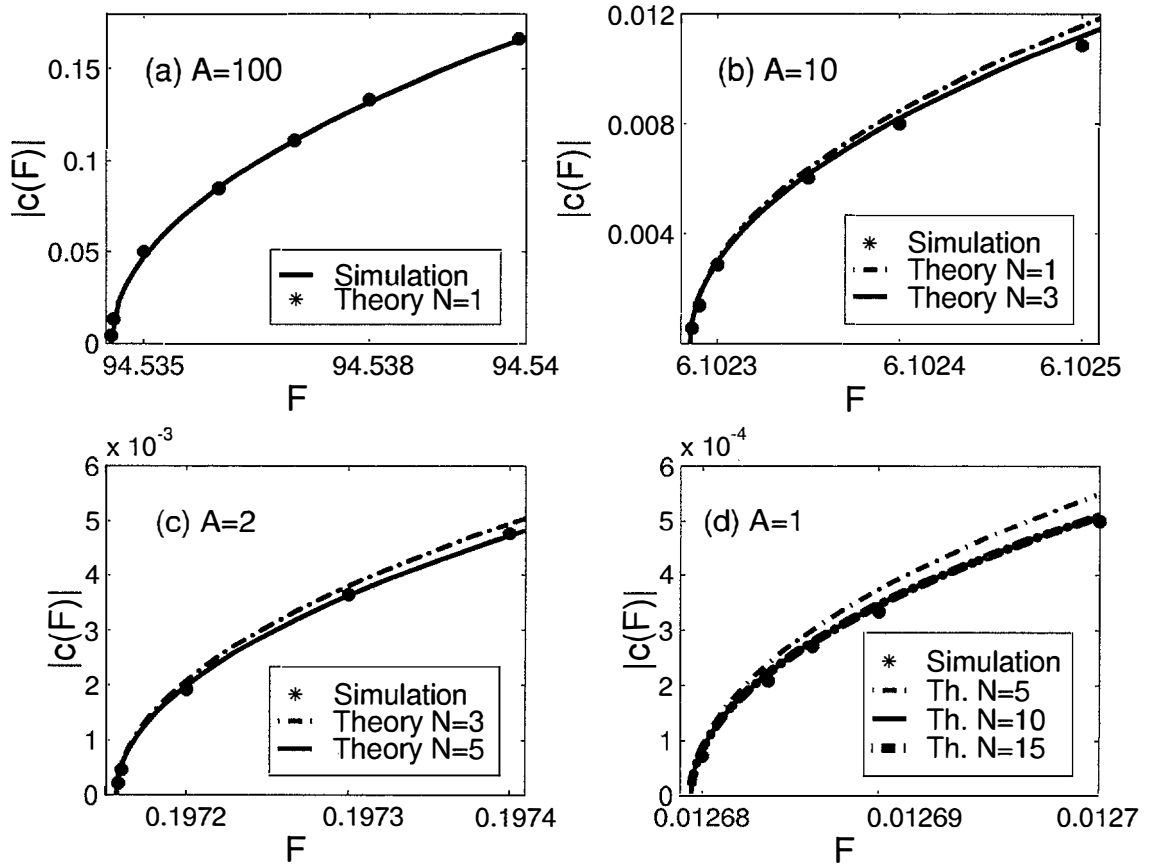


Figura 2.4: Comparación de velocidades teóricas y numéricas para los frentes viajeros cerca de  $F_c$ , en el caso del modelo de Frenkel-Kontorova usando  $N$  puntos activos y los siguientes valores del parámetro  $A$ : (a)  $A = 100$ , (b)  $A = 10$ , (c)  $A = 2$ , (d)  $A = 1$ .



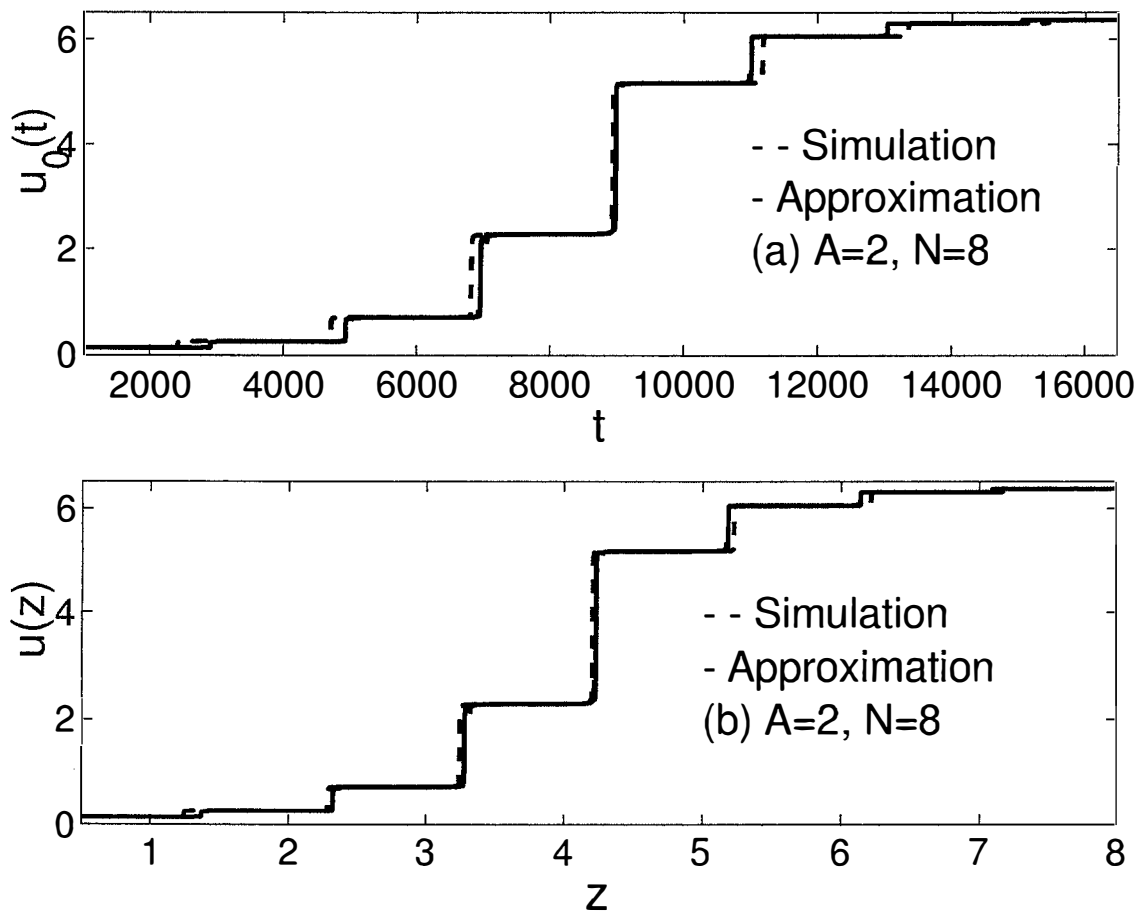


Figura 2.5: Comparación de frentes calculados conforme a predicciones teóricas y resolución numérica cerca de  $F_c$  para  $A = 2$  usando  $N = 8$  puntos activos: (a) Trayectoria de un punto. (b) perfil del frente,  $u(z) = u_0(z/|c|)$ .

## 2.3 Efectos del desorden espacial en la transición anclaje-propagación en modelos de reacción-difusión

En esta sección estudiamos cómo altera el desorden la transición anclaje-propagación descrita en el apartado anterior. La idea principal consiste en encontrar un balance dominante de los efectos de desorden con las no linealidades y con  $(F - F_c)$  cerca de la transición.

En vista de la construcción usando puntos activos descrita en el apartado anterior, el balance dominante se encuentra cuando  $(F - F_c) = O(\gamma)$  si  $\gamma \rightarrow 0$ . La ecuación de amplitud pasa a ser

$$\frac{d\varphi}{dt} = \alpha(F - F_c) + \gamma \sum_{n=-L}^M V_n \xi_n + \beta\varphi^2, \quad (2.8)$$

y la condición de acoplamiento (matching) es la misma que antes. La solución de (2.8) explota en los extremos de intervalos de longitud  $1/|c_R|$ , donde

$$|c_R| = \frac{1}{\pi} \sqrt{\alpha\beta(F - F_c) + \gamma\beta \sum_{n=-L}^M V_{R+n} \xi_{R+n}}, \quad (2.9)$$

siempre y cuando el argumento de la raíz cuadrada sea positivo. En otro caso, el movimiento del frente se detiene y el frente queda anclado. Nótese que hemos elegido  $u_R(t)$  como el punto activo central que era distinguido con el índice 0 en fórmulas anteriores. Después de la explosión,  $u_R$  salta aproximadamente a  $u_{R+1}(A, F_c)$ , y permanece allí hasta que ha transcurrido un tiempo  $1/|c_{R+1}|$ . Entonces salta a  $u_{R+2}(A, F_c)$ , aproximadamente, y así sucesivamente.

La magnitud de interés en estos sistemas suele ser la velocidad media sobre un conjunto suficientemente grande de puntos. Por ejemplo, esta magnitud es proporcional a la corriente debida a una onda de densidad de carga deslizante y es importante conocer tanto su comportamiento cerca del campo umbral para la transición como su magnitud. Mostraremos a continuación que la velocidad promedio viene dada aproximada-

mente por:

$$|\bar{c}| \equiv \frac{1}{N} \sum_{R=1}^N |c_R| = \langle |c_R(\xi)| \rangle, \quad (2.10)$$

$$\langle |c_R(\xi)| \rangle \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 \{ \alpha\beta(F - F_c) + \gamma\beta\sigma\xi \}_+^{\frac{1}{2}} d\xi. \quad (2.11)$$

Aquí,  $N \gg (L + M + 1)$  es suficientemente grande,  $\sigma = 1$ , y  $\{x\}_+^{\frac{1}{2}}$  es  $\sqrt{x}$  si  $x > 0$  y cero en otro caso.

La idea de la demostración es la siguiente. Supongamos en primer lugar que  $A$  es lo suficientemente grande para que  $L = M = 0$  y por tanto haya sólo un único punto activo. El Teorema Central del Límite aplicado a la ecuación con  $V_R = 1$  nos da las ecuaciones (2.10) - (2.11). Ver apéndice 2.7.

Asumamos ahora que hay dos puntos activos. Entonces el argumento anterior falla porque ahora la suma la ecuación (2.9) posee dos términos en lugar de uno. Entonces los términos en la media aritmética no son independientes: cuando  $u_R = u_1$  por ejemplo, la ecuación (2.9) contiene  $\xi_1$  y  $\xi_2$ . Después del tiempo de explosión,  $u_R = u_2$  y la ecuación (2.9) contiene  $\xi_2$  y  $\xi_3$ , etc. Sin embargo, podemos agrupar las sumas que aparecen en la media aritmética de (2.10) en dos grupos que contienen sólo variables aleatorias independientes:  $R = 2r - 1$  y  $R = 2r$ , con  $r = 1, 2, \dots$ . La variable  $V_1\xi_1 + V_2\xi_2$  tiene media cero y correlación  $2\sigma^2/3$ , donde  $\sigma^2 = V_1^2 + V_2^2 = 1$ . Esta correlación es exactamente la misma que la variable  $\xi_1$ . Entonces el teorema central del límite aplicado a cada grupo (de sumas de 'dimer' variables aleatorias) da la mitad de la integral en (2.11), y la suma de las dos mitades nos permite recuperar la ecuación (2.10). Si tenemos más puntos activos, sólo hay que subdividir la media aritmética en tantos grupos como puntos activos y repetir el argumento anterior para probar (2.10).

La integral elemental que aparece en (2.11) implica que  $\bar{c} = 0$  si  $F < F_c - \gamma\sigma/\alpha$  (nótese que  $\sigma = 1$ ),

$$|\bar{c}| = \frac{\sqrt{\beta\sigma}}{3\pi\gamma} \begin{cases} |\frac{\alpha}{\sigma}(F - F_c) + \gamma|^{\frac{3}{2}}, & \text{if } |F - F_c| \leq \frac{\gamma\sigma}{\alpha}, \\ |\frac{\alpha}{\sigma}(F - F_c) + \gamma|^{\frac{3}{2}} - |\frac{\alpha}{\sigma}(F - F_c) - \gamma|^{\frac{3}{2}} & \end{cases} \quad (2.12)$$

si  $(F - F_c) > \gamma\sigma/\alpha$ . Claramente tenemos un nuevo campo crítico  $F_c^* = F_c - \gamma\sigma/\alpha$ , y un nuevo exponente crítico  $3/2$  (en lugar de  $1/2$  para el caso sin desorden),  $|\bar{c}| \propto$



$(F - F_c^*)^{3/2}$ . Hemos comparado nuestra teoría a la solución numérica directa de (2.1) en la Figura 2.6, obteniendo un buen ajuste entre predicciones teóricas y simulaciones numéricas.

## 2.4 Transiciones anclaje propagación en modelos para superredes semiconductoras débilmente acopladas

La dinámica de las superredes débilmente acopladas a corriente constante puede ser descrita mediante las ecuaciones adimensionales:

$$\frac{dE_i}{dt} + v(E_i) n_i - D(E_i) (n_{i+1} - n_i) = J, \quad (2.13)$$

$$E_i - E_{i-1} = \nu (n_i - 1), \quad (2.14)$$

o, equivalentemente,

$$\frac{dE_i}{dt} + v(E_i) \frac{E_i - E_{i-1}}{\nu} - D(E_i) \frac{E_{i+1} + E_{i-1} - 2E_i}{\nu} = J - v(E_i). \quad (2.15)$$

donde  $E_i$  denota el campo eléctrico en el pozo  $i$ ,  $J$  la corriente y  $\nu$  el dopaje. El coeficiente  $D(E_i)$  es positivo y acotado. El coeficiente  $v(E_i)$  se anula en cero, es positivo para campos positivos y muestra un máximo  $v_M = 1$  positivo seguido de un mínimo  $v_m$ . Tras el mínimo se puede suponer que crece indefinidamente.

Tenemos tres soluciones estacionarias espacialmente homogéneas,

$$E^{(1)}(J) < E^{(2)}(J) < E^{(3)}(J)$$

soluciones de  $v(E^{(k)}) = J$ . Dos de ellas son estables,  $E^{(1)}(J)$  y  $E^{(3)}(J)$ . El sistema posee además soluciones no uniformes de tipo frente que unen los dos estados estacionarios constantes estables:  $E_i \rightarrow E^{(1)}(J)$  cuando  $i \rightarrow -\infty$  y  $E_i \rightarrow E^{(3)}(J)$  cuando  $i \rightarrow \infty$ . Estas soluciones pueden ser estacionarias o dependientes del tiempo. En el segundo caso, son frentes de onda viajeros con un perfil regular que se mueven a velocidad constante  $c = c(J, \nu)$  (medida en pozos atravesados por unidad de tiempo), tal que

$E_i(t) = E(i - ct)$ ,  $i = 0, \pm 1, \dots$  y  $E(\tau)$  es una solución de un problema de autovalores no lineal para  $c$  y  $E(\tau)$ :

$$c \frac{dE}{d\tau} = v(E) - J + v(E) \frac{E - E(\tau - 1)}{\nu} - D(E) \frac{E(\tau + 1) + E(\tau - 1) - 2E}{\nu}, \quad (2.16)$$

$$E(-\infty) = E^{(1)}(J), \quad E(\infty) = E^{(3)}(J). \quad (2.17)$$

Sabemos por [22] que hay dos valores críticos del dopaje  $\nu$ ,  $\nu_1 < \nu_2$ , tales que:

- Si  $0 < \nu < \nu_1$  y  $J \in (v_m, 1)$  se observan únicamente frentes viajeros que se mueven a la derecha.
- Si  $\nu_1 < \nu < \nu_2$ , los frentes se mueven a la derecha cuando  $J \in (v_m, J_1(\nu))$ , donde  $J_1(\nu) \in (v_m, 1)$  es un valor crítico de la corriente. Si  $J \in (J_1(\nu), 1)$ , las soluciones no uniformes estables son frentes anclados.
- Para  $\nu > \nu_2$  se observan nuevas soluciones. Como antes, hay frentes viajeros que se propagan a la derecha si  $J \in (v_m, J_1(\nu))$  y que están anclados si  $J \in (J_1(\nu), J_2(\nu))$ .  $J_2(\nu) < 1$  es una nueva corriente crítica. Para  $J_2(\nu) < J < 1$ , las soluciones no uniformes estables son frentes viajeros que se mueven a la izquierda (en contra del flujo de portadores de carga).

Las transiciones anclaje-propagación que tienen lugar en las corrientes críticas  $J_1(\nu)$  y  $J_2(\nu)$  se pueden describir de forma análoga a la expuesta en la Sección 2.2 para ecuaciones de reacción difusión [18]. Para  $\nu$  grande y  $J$  próximo a un valor crítico, el movimiento de los frentes está controlado por el comportamiento de un sólo pozo: *el pozo activo*. Denotamos por  $E_0$  el campo eléctrico en el pozo activo. Se puede reconstruir el perfil del frente  $E(i - ct)$  conociendo la evolución en el tiempo de un sólo pozo:  $E_0(t) = E(-ct)$ . La evolución de  $E_0(t)$  se puede obtener partiendo del hecho de que antes de que el pozo activo salte de las proximidades un estado constante al otro se tiene  $E_i \approx E^{(1)}(J)$  para  $i < 0$  y  $E_i \approx E^{(3)}(J)$  para  $i > 0$ . De (2.15) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{dE_0}{dt} \approx & J - v(E_0) - v(E_0) \frac{E_0 - E^{(1)}}{\nu} \\ & + D(E_0) \frac{E^{(1)} + E^{(3)} - 2E_0}{\nu}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Si  $J_1 < J < J_2$  el segundo miembro tiene tres ceros, dos estables y uno inestable. En  $J_1$  y  $J_2$ , dos ceros colapsan y tenemos un cero doble más otro cero estable. Más allá de las corrientes críticas el segundo miembro posee un único cero. Las corrientes críticas se obtienen imponiendo que el segundo miembro en (2.18) tenga un cero doble  $E_0$ :

$$\begin{aligned} J - v(E_0) - v(E_0) \frac{E_0 - E^{(1)}}{\nu} \\ + D(E_0) \frac{E^{(1)} + E^{(3)} - 2E_0}{\nu} = 0, D'_0(E^{(1)} + E^{(3)} - 2E_0) - 2D_0 \\ - v'_0(E_0 - E^{(1)}) - v_0 - \nu v'_0 = 0. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Usamos la convención  $D'_0 = D'(E_0)$ , etc. La dinámica reducida (2.18) muestra una bifurcación de tipo nodo silla en las corrientes críticas  $J_1$  y  $J_2$  cuya forma normal puede usarse para estimar la velocidad de los frentes, como veremos.

Al decrecer  $\nu$  es preciso incluir más pozos activos. Se estudia entonces un sistema reducido de pozos activos:

$$\frac{dE_i}{dt} + v(E_i) \frac{E_i - E_{i-1}}{\nu} - D(E_i) \frac{E_{i+1} + E_{i-1} - 2E_i}{\nu} = J - v(E_i) \quad (2.20)$$

$$i = -L, \dots, M$$

$$E_{-L-1} = E^{(1)}, E_{M+1} = E^{(3)} \quad (2.21)$$

Para  $J_1 \leq J \leq J_2$ , el sistema (2.20), (2.21) posee soluciones estacionarias. Como en el caso anterior, este sistema muestra una bifurcación de tipo nodo-silla en dos valores de la corriente  $J_1$  y  $J_2$ . La forma normal de la bifurcación viene dada por:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \alpha(J - J_c) + \beta\varphi^2 \quad (2.22)$$

Los coeficientes se determinan linealizando (2.20),(2.21) en torno a las soluciones estacionarias  $E_i(J, \nu)$  hasta llegar a las corrientes críticas, en que los problemas linealizados tienen todos sus autovalores negativos, excepto un autovalor cero. Llamamos  $U_i^\dagger$  y  $U_i$  a los autovectores a izquierda y derecha correspondientes al autovalor cero de la matriz de coeficientes del problema linealizado, normalizados de modo que  $\sum_{i=-L}^M U_i^\dagger U_i = 1$ . Cerca de la corriente crítica  $J_c$ , el campo eléctrico toma la forma  $E_i(t) \sim E_i(J_c, \nu) + U_i \varphi(t)$  más términos que decrecen exponencialmente con el tiempo.

La amplitud  $\varphi$  satisface la ecuación (2.22) con los coeficientes:

$$\alpha = \sum_{i=-L}^M U_i^\dagger + \frac{v_0 + D_0}{\nu v'_{-L-1}} U_0^\dagger + \frac{D_M U_M^\dagger}{\nu v'_{M+1}}, \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \beta = \frac{1}{2\nu} \sum_{i=-L}^M [D_i'' U_i^2 (E_{i+1} + E_{i-1} - 2E_i) \\ + 2D_i' U_i (U_{i+1} + U_{i-1} - 2U_i) - 2v_i' U_i (U_i - U_{i-1}) \\ + v_0'' (E_{i-1} - E_i - 2\nu) U_i^2] U_i^\dagger. \end{aligned} \quad (2.24)$$

En estas fórmulas  $U_{-L-1} = U_{M+1} = 0$ ,  $E_{-L-1} = E^{(1)}$ ,  $E_{M+1} = E^{(3)}$ ,  $v_i = v(E_i)$ ,  $v_i' = v'(E_i)$ ,  $D_i = D(E_i)$ , etc. Todas las cantidades se evalúan en  $J = J_c$ . Nuestras simulaciones numéricas muestran que los coeficientes así obtenidos para las curvas  $D(E)$  y  $v(E)$  de una superred 9/4 son tales que  $\alpha\beta$  tiene el mismo signo que  $J - J_c$ . En general, sólo es posible probar este hecho para  $\nu$  grande, de modo que  $M = L = 0$  y estamos en la aproximación con un pozo activo.

La ecuación (2.22) posee soluciones que explotan en tiempo finito y, como en la Sección 2.2, el tiempo de explosión proporciona la aproximación a la velocidad

$$|c(\nu, J)| \sim \frac{1}{\pi} \sqrt{\alpha\beta(J - J_c)} \quad (2.25)$$

El número de pozos activos que es preciso utilizar para que estas fórmulas proporcionen una buena aproximación a la velocidad depende del valor de  $\nu$ , que controla el decaimiento de los autovectores asociados al autovector cero según  $L$  y  $M$  crecen. Conforme  $\nu$  decrece el decaimiento se ralentiza y hacen falta más pozos para aproximar correctamente el sistema. Obsérvese que la fórmula (2.25) se basa en dos aproximaciones:  $J \sim J_c$  y truncamiento a un sistema finito. Absteniéndose de truncar el sistema a un número finito de pozos se obtiene una fórmula válida para  $J \sim J_c$ . El truncar a un número finito de pozos constituye una manera práctica de calcular numéricamente los coeficientes y los perfiles.

La evolución del frente una vez comienza a moverse se puede describir mediante las soluciones de (2.20) para  $i = -L, \dots, M$ , con  $J = J_c$ ,  $E_i(t) = E_i(J_c, \nu) + U_i \varphi(t)$ , y condiciones de matching análogas a las de la Sección 2.2. Se obtienen así perfiles escalonados, con escalones situados en los valores  $E_i(J_c, \nu)$  de longitud  $\sim \frac{1}{|c|}$ . A medida

que  $J \rightarrow J_c, |c| \rightarrow 0$ . En  $J = J_c$ , los perfiles de los frentes viajeros se hacen discontinuos y los frentes quedan anclados.

Si bien no se dispone todavía de una demostración rigurosa se conjetura que la transición anclaje-propagación en el sistema infinito es del mismo tipo que la observada en los sistemas reducidos de pozos activos.

## 2.5 Efectos del desorden en superredes semiconductoras

De forma similar a la descrita en la Sección 2.3 podemos analizar efectos débiles del desorden en el dopaje de los pozos sobre el movimiento de frentes de onda (paredes de dominio para el campo eléctrico) en superredes semiconductoras con un bias  $dc$  sobre la corriente.

Si la densidad de corriente total está próxima a un valor de anclaje, la corriente de desplazamiento es casi nula excepto en ciertos tiempos del movimiento del frente durante los cuales el frente salta de un pozo al siguiente. La velocidad promedio dada por (2.10) es proporcional a la media aritmética de los promedios temporales de la corriente de desplazamiento sobre los intervalos de tiempo entre los máximos. La velocidad promedio es básicamente la velocidad media a la cual el frente atraviesa  $N$  pozos. Para calcularla, usamos la teoría de propagación de frentes en superredes establecida en [18] y descrita en la Sección 2.4.

Usamos las mismas ecuaciones que en [18] con la excepción de que la ecuación de Poisson adimensionalizada toma ahora la forma:  $E_i - E_{i-1} = \nu(n_i - 1 - \gamma\xi_i)$  donde  $\gamma$  y  $\xi$  están definidos como en (2.1) y representan el desorden en el dopaje de los pozos. En las ecuaciones para superredes, los papeles de la fuerza  $F$  y el parámetro  $A$  los desempeñan la densidad de corriente total  $J$  y el dopaje adimensional  $\nu$ . El panorama descrito en la Sección 2.4 muestra que si  $\gamma = 0$  y  $\nu$  sobrepasa un valor crítico mínimo, hay dos valores críticos de la corriente,  $J_1$  and  $J_2$ , tales que un frente está anclado si  $J_1 \leq J \leq J_2$  y se mueve a velocidad constante  $c(J, \nu)$  en otro caso. La velocidad  $c$  es positiva si  $J < J_1$  y negativa si  $J > J_2$ . Además, cerca de las corrientes críticas,  $|c| \propto |J - J_c|^{1/2}$  ( $J_c$  representa  $J_1$  o bien  $J_2$ ) [18].

Veamos cómo altera el desorden este panorama. El efecto del desorden es añadir un



término  $\gamma D(E_j)\xi_{j+1} - \gamma[v(E_j) + D(E_j)]\xi_j$  a la densidad de corriente  $J$  en la ecuaciones de Ampère discretas adimensionales. La ecuaciones del modelo toman la forma:

$$\begin{aligned} \frac{dE_i}{dt} + v(E_i) \frac{E_i - E_{i-1}}{\nu} - D(E_i) \frac{E_{i+1} + E_{i-1} - 2E_i}{\nu} \\ = \gamma D(E_j)\xi_{j+1} - \gamma[v(E_j) + D(E_j)]\xi_j + J - v(E_i). \end{aligned} \quad (2.26)$$

De la Sección 2.4 deducimos que se puede obtener una ecuación similar a (2.9) para la velocidad del frente:

$$|c_R| = \frac{1}{\pi} \sqrt{\alpha\beta(J - J_c) - \gamma\beta \sum_{n=-L}^M U_{R+n}^\dagger W_{R+n}}, \quad (2.27)$$

$$W_{R+n} = (v_{R+n} + D_{R+n}) \xi_{R+n} - D_{R+n} \xi_{R+n+1}. \quad (2.28)$$

En esta fórmula:

- (i)  $U_{R+n}^\dagger$  representa el autovector a izquierda asociado al autovalor cero del problema linealizado en torno a la solución estacionaria en  $J = J_c$  (elegido de forma que  $\sum_{n=-L}^M U_{R+n}^\dagger U_{R+n} = 1$ ; siendo  $U_{R+n}$  el autovector a derecha),
- (ii) Definimos  $v_{R+n} = v(E_{R+n})$ , etc.,
- (iii)  $\alpha$  and  $\beta$  están dados por las ecuaciones (2.23) y (2.24) de la Sección 2.4.

Los valores  $E_{R+n}$  corresponden al perfil del campo eléctrico estacionario en  $J = J_c$ . El término de ruido en la ecuación (2.28) se puede reescribir como  $\sum [U_{R+n}^\dagger (v_{R+n} + D_{R+n}) - U_{R+n-1}^\dagger D_{R+n-1}] \xi_{R+n}$ , si tomamos  $U_{R+n}^\dagger = 0$  para  $n < -L$  y  $n > M + 1$ . El término de ruido tiene media cero y correlación  $2\sigma^2/3$ , con

$$\sigma^2 = \sum [U_{R+n}^\dagger (v_{R+n} + D_{R+n}) - U_{R+n-1}^\dagger D_{R+n-1}]^2. \quad (2.29)$$

Retomando el argumento introducido en la Sección 2.3 sobre splitting de la media aritmética en grupos de variables aleatorias independientes se muestra que la velocidad promedio viene dada por

$$|\bar{c}| \equiv \frac{1}{N} \sum_{R=1}^N |c_R| = \langle |c_R(\xi)| \rangle, \quad (2.30)$$

$$\langle |c_R(\xi)| \rangle \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 \{\alpha\beta(J - F_c) + \gamma\beta\sigma\xi\}_+^{\frac{1}{2}} d\xi. \quad (2.31)$$

con el parámetro  $\sigma$  de la ecuación (2.31) dado por (2.29).

Hemos comparado las predicciones teóricas de la velocidad media de los frentes  $\bar{c}$  con las velocidades obtenidas resolviendo numéricamente las ecuaciones para las superredes. Las Figuras 2.7 y 2.8 comparan los resultados obtenidos para corrientes próximas a  $J_1$  y  $J_2$ , respectivamente.

## 2.6 Conclusiones

En conclusión, en este capítulo hemos mostrado que los efectos débiles de desorden cambian cualitativamente la transición anclaje-propagación en modelos unidimensionales sobreamortiguados. El desorden reduce el intervalo de anclaje y modifica el exponente crítico en la velocidad de  $1/2$  a  $3/2$ . Queda por ver si estas características son robustas y se mantienen bajo efectos fuertes de desorden. Una indicación interesante la proporciona el hecho de que el exponente crítico  $3/2$  se obtiene independientemente de la fuerza del ruido en modelos de campo medio de ondas de densidad de carga [28, 29].

## 2.7 Apéndice: Teorema Central del Límite

En este apéndice vamos a recordar brevemente el Teorema Central del Límite.

Nuestras variables aleatorias  $\xi_n$  tienen una distribución uniforme en el intervalo  $(-1, 1)$ . Tenemos pues que su media es,  $\mu = 0$ , su desviación típica es,  $\sigma = \frac{1}{\sqrt{3}}$  y su función de densidad  $f(\xi) = \frac{1}{2}$  en  $(-1, 1)$  y 0 en el resto.

Recordamos que el Teorema Central del Límite (ver [26], [14], [32]), nos da la distribución de probabilidad de la media estandarizada de  $n$  variables aleatorias cuando  $n$  tiende a infinito (en la práctica vale con  $n \geq 30$ , nosotros hemos utilizado en los cálculos  $n \geq 80$ ).

**Teorema Central del Límite** Si  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$  constituyen una muestra aleatoria de una población infinita con la media  $\mu$  y la varianza  $\sigma^2$ , entonces la distribución límite

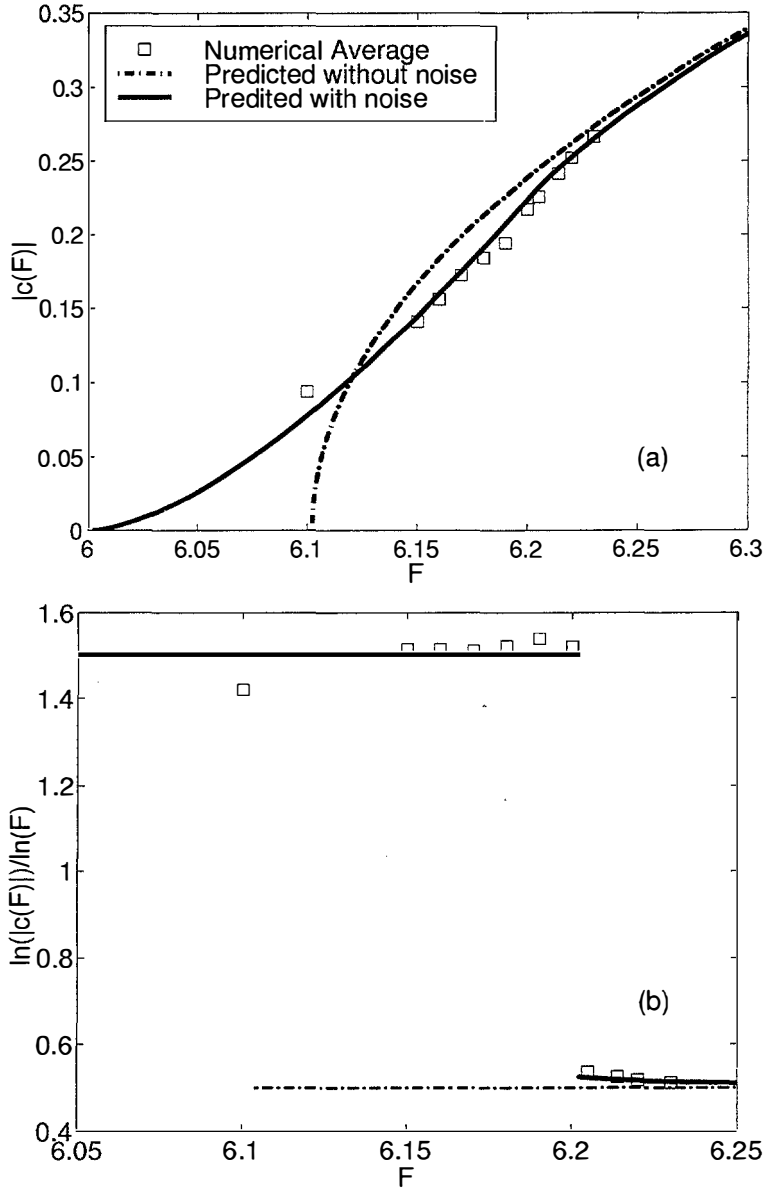


Figura 2.6: (a) Velocidad media  $|\bar{c}|$  en función de  $F$  para  $A = 10$ ,  $F_c = 6.102281$  y  $\gamma = 0.1$ .  
 (b) Gráfica de  $\ln|\bar{c}|/\ln F$  mostrando la transición al exponente crítico  $3/2$ .

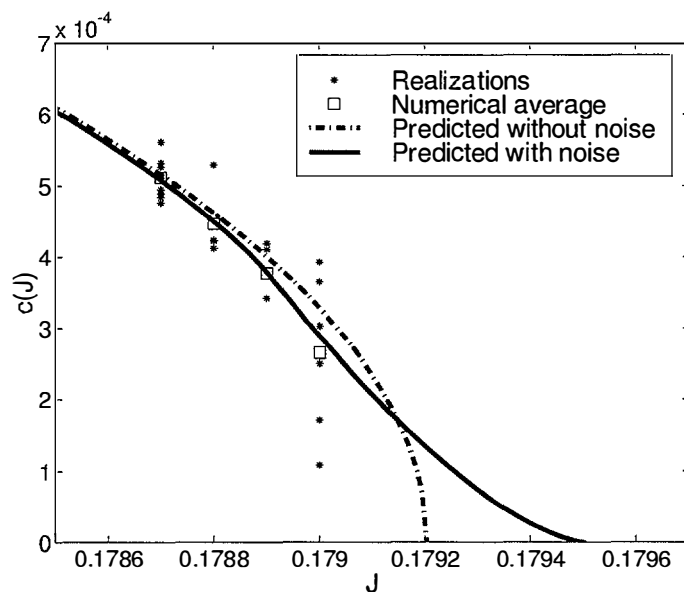


Figura 2.7: Velocidad promedio adimensional para la superred 9/4 SL con parámetros adimensionales  $\nu = 3$ ,  $J_1 = 0.179203$ ,  $\gamma = 0.01$ .

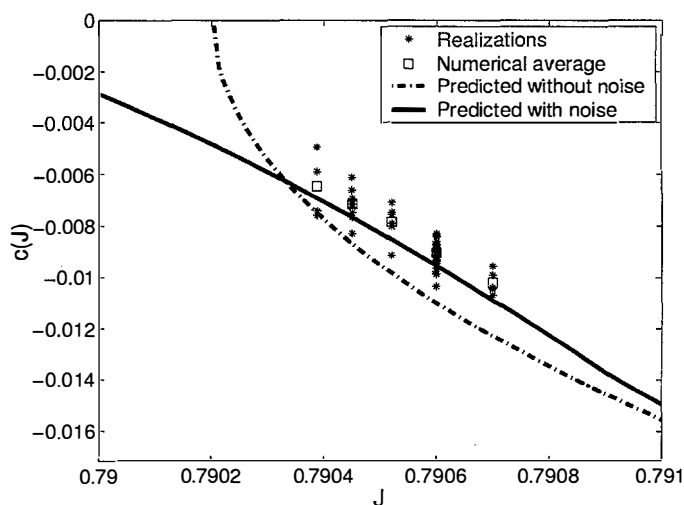


Figura 2.8: Velocidad promedio adimensional para la superred 9/4 SL con parámetros adimensionales  $\nu = 40$ ,  $J_2 = 0.790203$ ,  $\gamma = 0.01$ .

de la media estandariza

$$Z = \frac{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^R \xi_n - \mu}{\sigma/\sqrt{n}}$$

es la distribución normal estándar, esto es, una normal de media 0 y varianza 1.

En nuestro caso tenemos las variables aleatorias  $|c_1|, |c_2|, \dots, |c_n|$  que nos dan una muestra aleatoria de  $|c_R|$  (2.9). El parámetro que nos interesa es la media de estas velocidades,  $|c_R|$ , esto es:  $|\bar{c}| = \frac{1}{N} \sum_{R=1}^N |c_R|$ . Como conocemos la distribución de las  $|c_R|$  ya que vienen de las variables aleatorias  $\xi_n$  tenemos entonces que la esperanza de la media es:

$$E[|\bar{c}|] = E\left[\frac{1}{N} \sum_{R=1}^N |c_R|\right] = E[|c_R|] = \int_{-1}^1 |c_R| f(\xi) d\xi$$

Esto es, la velocidad media vendrá dada por la expresión (2.11).



# Capítulo 3

## Estabilidad de frentes de onda en sistemas discretos amortiguados

### 3.1 Introducción

En el capítulo anterior se ha descrito la fenomenología asociada a la propagación de frentes en modelos sobreamortiguados y hemos estudiado el efecto del desorden espacial en las transiciones propagación-anclaje. El objetivo de este capítulo es estudiar fenómenos de anclaje y propagación de frentes en modelos espacialmente discretos unidimensionales incluyendo términos de fricción (derivadas primeras respecto al tiempo) y de inercia (derivadas segundas respecto al tiempo).

En particular, estudiamos la existencia y estabilidad de soluciones de tipo frente en cadenas de osciladores amortiguados acoplados difusivamente sujetos a un potencial  $V$  y una fuerza externa  $F$ :

$$\epsilon u_n'' + u_n' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F \quad (3.1)$$

El parámetro  $A > 0$  mide la fuerza del acoplamiento entre los osciladores y  $\epsilon > 0$  mide la magnitud relativa de los términos de inercia y fricción. El término no lineal es la derivada del potencial  $g(u) = V'(u)$ . Suponemos que  $g$  es una función de clase  $C^1$  y que el término fuente  $Ag(u) - F$  tiene tres ceros,  $U_1(F/A) < U_2(F/A) < U_3(F/A)$

para un cierto intervalo de valores de  $F$ . Además,  $g'(U_i(F/A)) > 0$  para  $i = 1, 3$  y  $g'(U_2(F/A)) < 0$ , con lo que el primer y el tercer cero del término fuente son soluciones constantes estables de (3.1). Supondremos además que  $g$  es impar respecto al cero inestable  $U_2(0)$ . Como ejemplos podemos citar el modelo de Frenkel-Kontorova amortiguado ( $g = \sin u$ ) o el potencial cuártico ( $V = (u^2 - 1)^2/4$ ) para pozos dobles. Las soluciones de tipo frente  $u_n$  unen los dos ceros estables, creciendo desde  $U_1(F/A)$  hasta  $U_3(F/A)$  según  $n$  crece de  $-\infty$  hasta  $\infty$ .

La comprensión del efecto de los términos de inercia es fundamental para desarrollar una teoría que describa la dinámica de defectos (dislocaciones [16] o microfisuras [72]) en materiales cristalinos. Simulaciones numéricas de modelos atómicos para microfisuras reflejan fenómenos de inestabilidad en la propagación de fisuras en ausencia de términos de fricción [68]. El control de la dinámica de defectos es importante en el diseño de nanodispositivos [76].

En el caso concreto del modelo (3.1), se espera que los términos de fricción garanticen la no coexistencia de frentes viajeros y anclados para el mismo valor de  $F$ . Esto asegura que a cada valor de  $F$  corresponde un régimen de propagación bien definido: frentes que se propagan a la izquierda, frentes que se propagan a la derecha y frentes anclados. No obstante, la velocidad inicial  $u'_n(0)$  interfiere con el campo aplicado  $F$  y aparece una etapa inicial transitoria en la que se pueden desestabilizar los frentes o en la que se puede observar propagación en una dirección distinta a la esperada. El estudio de estas cuestiones se complica por el hecho de que la energía de las soluciones de tipo frente es infinita cuando  $F \neq 0$ . Por otra parte, la presencia de derivadas segundas respecto al tiempo excluye el uso de principios del máximo, que son una herramienta fundamental en el caso sobreamortiguado. En este capítulo desarrollamos herramientas para sortear estas dificultades en el estudio de la estabilidad de las soluciones de tipo frente. Los argumentos de energía tienen reducida aplicabilidad y en su lugar recurrimos a estimaciones usando expresiones integrales.

El capítulo está organizado como sigue. En la sección 2 describimos los resultados numéricos obtenidos en función del tamaño de  $\epsilon$ . Cuando  $\epsilon$  es suficientemente pequeño la dinámica del sistema es similar a la observada en el caso sobreamortiguado. Para  $\epsilon$  grande se observan nuevos fenómenos: coexistencia de frentes viajeros y



estacionarios, transiciones anclaje-propagación que corresponden a una nueva clase de universalidad. La dinámica de los frentes para  $\epsilon$  grande está influenciada por el tipo de potencial. Potenciales confinantes como el de doble pozo y potenciales periódicos dan lugar a una fenomenología diversa. En la sección 3 establecemos estimaciones asintóticas para la velocidad. La sección 4 está dedicada a la obtención de estimaciones auxiliares sobre los problemas de valores iniciales. En las secciones 5 y 6 establecemos condiciones de estabilidad para frentes de onda estáticos y viajeros.

## 3.2 Resultados numéricos

En esta sección describo los resultados numéricos obtenidos para (3.1). Hemos elegido dos potenciales distintos: un potencial confinante de doble pozo  $V(u) = (u^2 - 1)^2/4$  y el potencial periódico de Frenkel y Kontorova  $V(u) = 1 - \cos(u)$ .

### 3.2.1 El potencial de doble pozo

Hemos resuelto numéricamente

$$\epsilon u_n'' + u_n' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Au_n(u_n^2 - 1) + F \quad (3.2)$$

para cadenas finitas  $-N \leq n \leq N$ , con  $N$  grande, eligiendo como dato inicial  $u_n(0) = U_1(F/A)$  para  $-N \leq n \leq 0$  y  $u_n(0) = U_3(F/A)$  para  $0 < n \leq N$ ,  $u_n'(0) = 0$  para  $-N \leq n \leq N$ . Como dato frontera hemos fijado  $u_{-N-1} = U_1(F/A)$ ,  $u_{N+1} = U_3(F/A)$ . Nos restringimos a valores de  $F$  dentro del rango en el que el término fuente tiene tres ceros.

El problema estacionario es exactamente el mismo que en el caso sobreamortiguado. Sabemos por el capítulo anterior que si  $|F| \leq F_c(A)$  existen frentes de onda estáticos. Si  $|F| > F_c(A)$ , sabemos que el modelo sobreamortiguado ( $\epsilon = 0$ ) tiene soluciones de tipo onda viajera  $v(n - ct)$ . Para  $\epsilon$  suficientemente pequeño (dependiente de  $A$  y  $F$ ), la solución numérica  $u_n(t)$  de (3.2) muestra el siguiente comportamiento

- Si  $|F| \leq F_c(A)$ ,  $u_n(t)$  tiende a un frente estacionario cuando  $t$  crece.

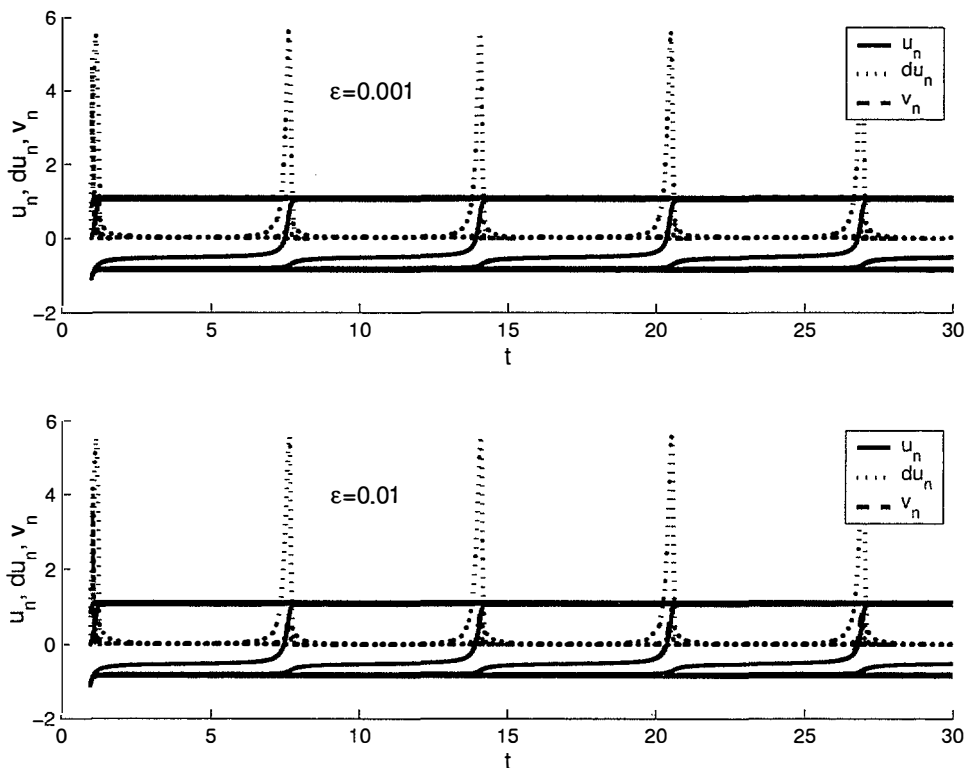


Figura 3.1: Trayectorias correspondientes a (3.2) para  $A = 10$ ,  $F = 2.53$  y diferentes valores de  $\epsilon$ . Las curvas dibujadas con trazo sólido representan  $u_n(t)$  y las curvas discontinuas  $u'_n(t)$  para  $n = -5, -10, -15, \dots$ . Las curvas punteadas representan las trayectorias  $v_n(t)$  del modelo sobreamortiguado con  $\epsilon = 0$

- Si  $|F| > F_c(A)$ ,  $u_n(t)$  evoluciona rápidamente a una solución de tipo onda viajera  $u(n - st)$ . El perfil y la velocidad de la onda viajera son pequeñas correcciones de los perfiles y las velocidades del caso sobreamortiguado. A medida que  $\epsilon$  crece se generan oscilaciones de magnitud creciente cerca de la región de transición entre las constantes.

Se observa una evolución similar para pequeñas perturbaciones de los datos iniciales y frontera.

Al incrementar el valor de  $\epsilon$  observamos la siguiente evolución:

- Si  $|F| < F_c(A)$  es suficientemente grande y  $\epsilon$  supera un valor crítico  $\epsilon_c(F)$ , dejamos de observar frentes estacionarios. En su lugar se forman ondas viajeras.

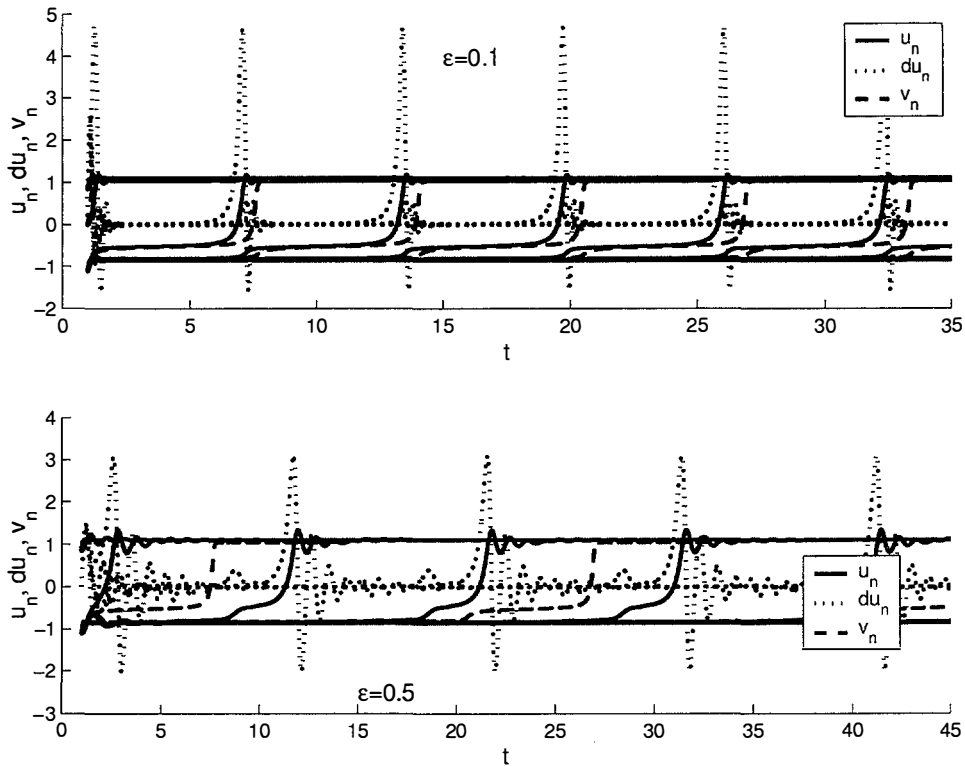


Figura 3.2: Análogo a la figura 3.1 con valores crecientes de  $\epsilon$ .

La figura 3.13 muestra la curva  $\epsilon_c(F)$  que delimita la región de coexistencia de soluciones estacionarias y viajeras cuando  $A = 10$ .

- Si  $|F| > F_c(A)$ , se siguen formando ondas viajeras pero la velocidad se ve fuertemente alterada por el valor de  $\epsilon$  y se observan fuertes oscilaciones. Para valores grandes de  $\epsilon$  es difícil distinguir si las estructuras oscilatorias observadas constituyen una onda viajera. La figura 3.4 muestra la velocidad de la onda en función de  $\epsilon$  cuando  $A = 10$  y  $F = 2.53$ . Se observa que la velocidad tiende a cero a medida que  $\epsilon$  crece. Las figuras 3.1, 3.2, 3.3 representan las trayectorias  $u_n(t), u'_n(t)$  para  $n = -5, -10, -15, \dots$  y valores crecientes de  $\epsilon$ .

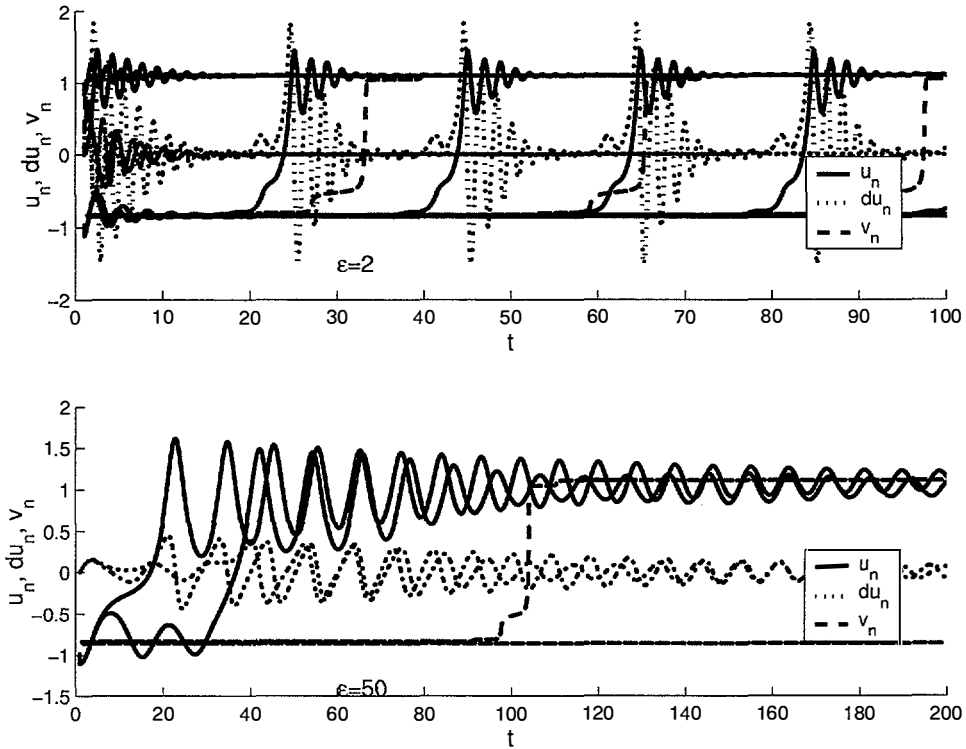


Figura 3.3: Análogo a la figura 3.1 con valores crecientes de  $\epsilon$ .

### 3.2.2 Un potencial periódico

Resolvemos numéricamente

$$\epsilon u_n'' + u_n' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - A \sin(u_n) + F \quad (3.3)$$

en cadenas finitas  $-N \leq n \leq N$ , con  $N$  grande, eligiendo como dato inicial  $u_n(0) = U_1(F/A)$  si  $-N \leq n \leq 0$  y  $u_n(0) = U_3(F/A)$  si  $0 < n \leq N$ ,  $u_n'(0) = 0$  para  $-N \leq n \leq N$ . Como condición frontera elegimos  $u_{-N-1} = U_1(F/A)$ ,  $u_{N+1} = U_3(F/A)$ , si  $|F| < A$ . Otras elecciones de datos iniciales (kinks continuous,  $u_n'(0)$  pequeño ...) proporcionan resultados parecidos.

Para  $\epsilon$  suficientemente pequeño (dependiente de  $A$  y  $F$ ), la solución numérica  $u_n(t)$  de (3.2) muestra el siguiente comportamiento

- Si  $|F| \leq F_c(A)$ ,  $u_n(t)$  tiende a un frente estacionario cuando  $t$  crece.
- Si  $|F| > F_c(A)$ ,  $u_n(t)$  evoluciona rápidamente a una solución de tipo onda viajera

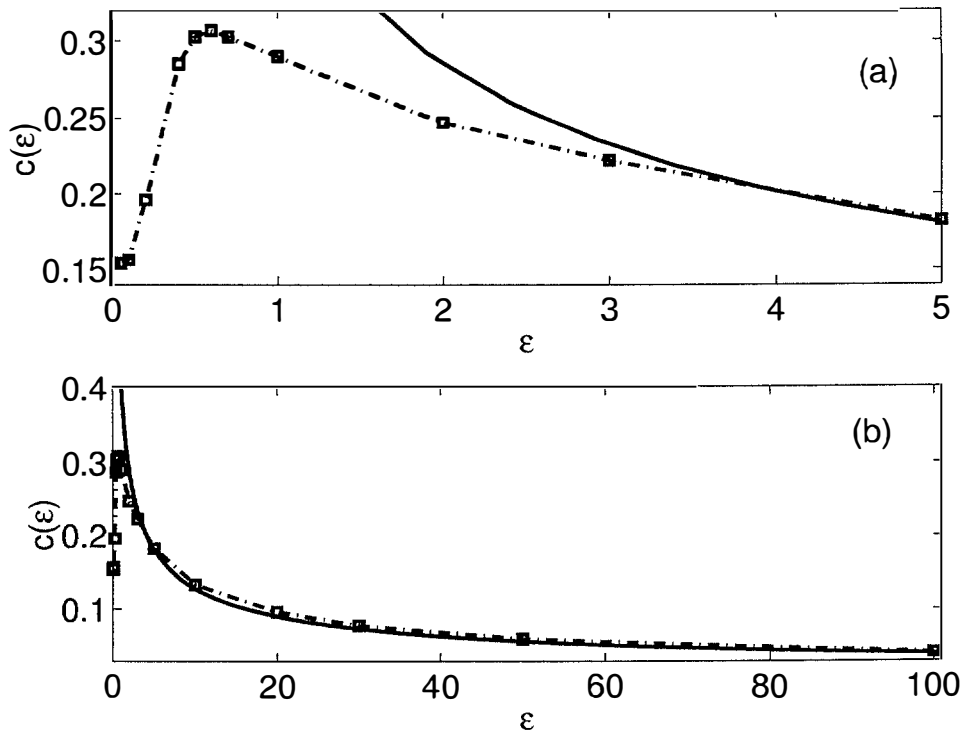


Figura 3.4: Velocidad de los frentes viajeros en función de  $\epsilon$  para (3.2) cuando  $A = 10$  y  $F = 2.53$ : (a) Zoom en la región  $\epsilon$  pequeño (b) Gráfica completa comparando la predicción asintótica (3.12) y los valores numéricos para  $\epsilon$  grande.

$u(n - st)$ . El perfil y la velocidad de la onda viajera son pequeñas correcciones de los perfiles y las velocidades del caso sobreamortiguado. A medida que  $\epsilon$  crece se generan oscilaciones de magnitud creciente cerca de la región de transición entre las constantes.

En las Figuras 3.5, 3.6, 3.7, 3.8, 3.9, 3.10, 3.11 dibujamos las trayectorias  $u_n(t)$  cuando  $A = 10$ , para  $F = 8$ ,  $F = 6.2 \approx F_c(A)$  y valores crecientes de  $\epsilon$ .

Como en el caso anterior, a medida que  $\epsilon$  crece se generan fuertes oscilaciones en los perfiles de las ondas. Sin embargo, en este caso la no linealidad es periódica y tan pronto como las oscilaciones en torno a las constantes son suficientemente amplias, las partículas saltan a otros pozos y se van al infinito, véanse las Figuras 3.7, 3.11. Si  $\epsilon$  sobrepasa un valor crítico, los frentes de onda desaparecen. La Figura 3.12 muestra

la dependencia de la velocidad del frente respecto a  $\epsilon$  y  $F$ . La Figura 3.13 muestra la región de coexistencia de frentes estacionarios y viajeros.

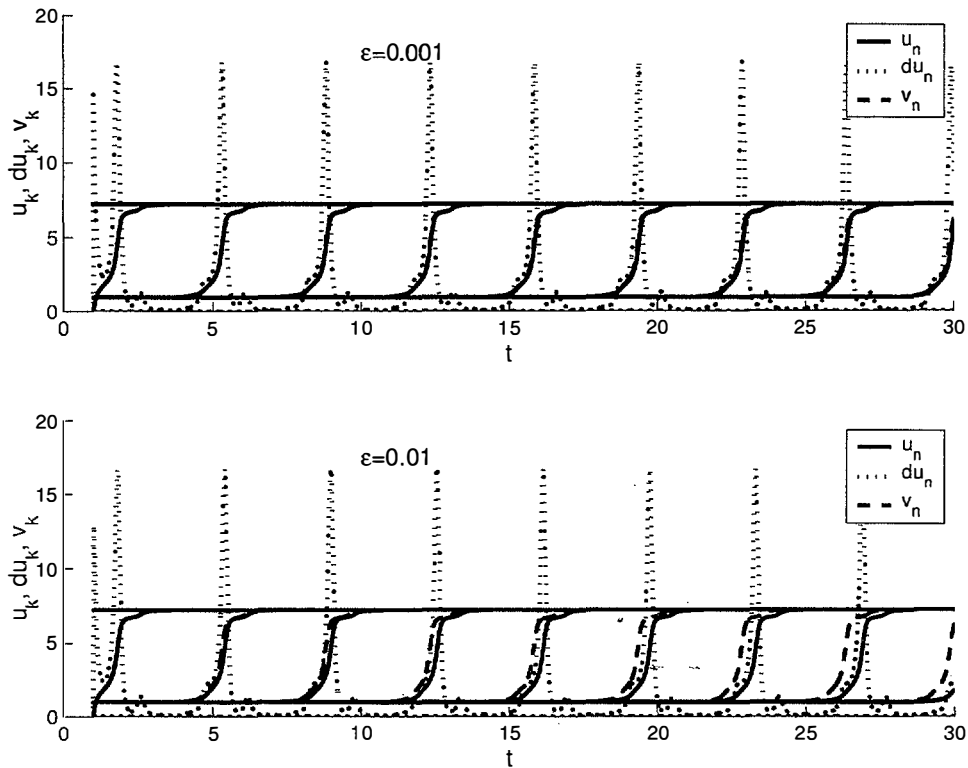


Figura 3.5: Trayectorias correspondientes a (3.3) para  $A = 10$ ,  $F = 8$  y diferentes valores de  $\epsilon$ . Las curvas dibujadas con trazo sólido representan  $u_n(t)$  y las curvas discontinuas  $u'_n(t)$  para  $n = -5, -10, -15, \dots$ . Las curvas punteadas representan las trayectorias  $v_n(t)$  del modelo sobreamortiguado con  $\epsilon = 0$ .

### 3.3 Resultados asintóticos

#### 3.3.1 Estimación de la velocidad

Obtenemos predicciones analíticas para las velocidades de los frentes estudiando las transiciones anclaje-propagación cerca de  $|F_c(A)|$ . Esto puede hacerse en principio para los frentes viajeros que aparecen una vez los frentes estacionarios se extinguen, es decir,

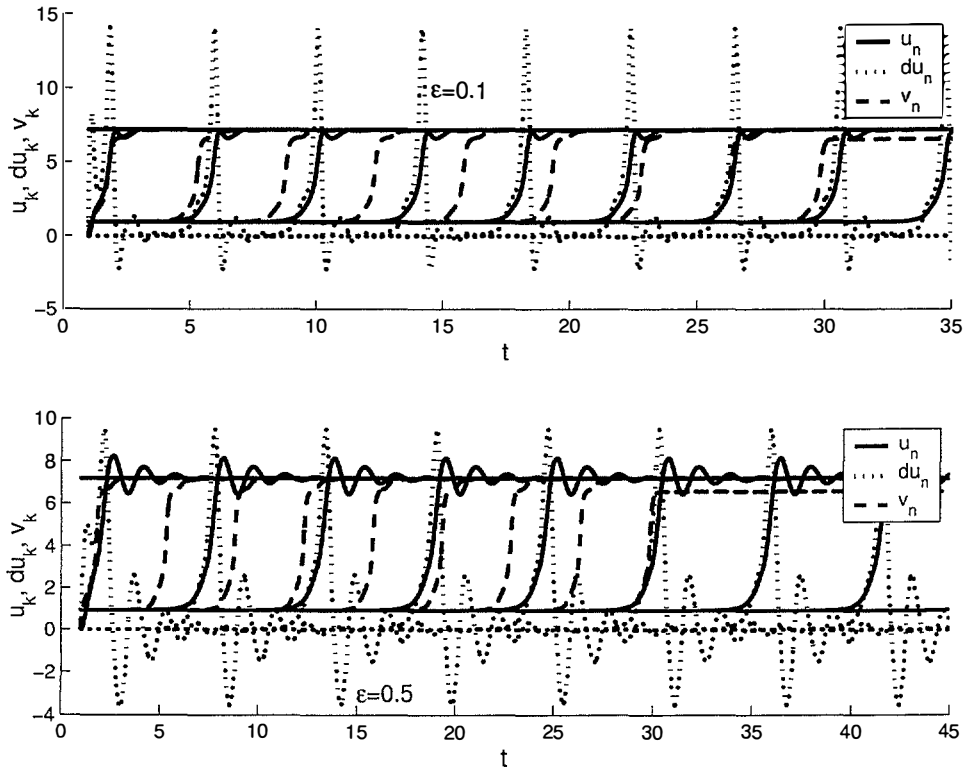


Figura 3.6: Análogo a 3.5 para  $\epsilon$  grande.

para  $|F| > F_c(A)$ . Estudiamos las velocidades en dos límites:  $\epsilon$  grande o pequeño. Los resultados de esta sección no se aplican en principio a valores intermedios de  $\epsilon$  ni a los frentes viajeros que coexisten con los estacionarios para  $|F| \leq F_c(A)$ .

Las transiciones anclaje-propagación son particularmente sencillas en el límite fuertemente discreto:  $A \gg 1$  [15]. Describimos a continuación el procedimiento cuando  $F > 0$ , si  $F < 0$  se obtienen fórmulas análogas por simetría. La solución estacionaria estable para  $F = 0$  está formada por dos ‘colas’ aproximadamente constantes (próximas a  $U_1(0)$  y  $U_3(0)$  respectivamente) unidas por una región de transición entre las constantes formada por dos puntos simétricos,  $u_0$  y  $u_1$ . A medida que  $F > 0$  crece, el perfil cambia ligeramente. Las dos colas permanecen próximas a  $U_1(F/A)$  y  $U_3(F/A)$ . Por lo que respecta a los puntos intermedios,  $u_1$  se aproxima más y más a  $U_3(F/A)$  mientras que  $u_0$  se aleja de  $U_1(F/A)$ . Esta estructura es preservada por los frentes de onda viajeros por encima del campo crítico  $F_c(A)$ : se observa únicamente un punto cruzando



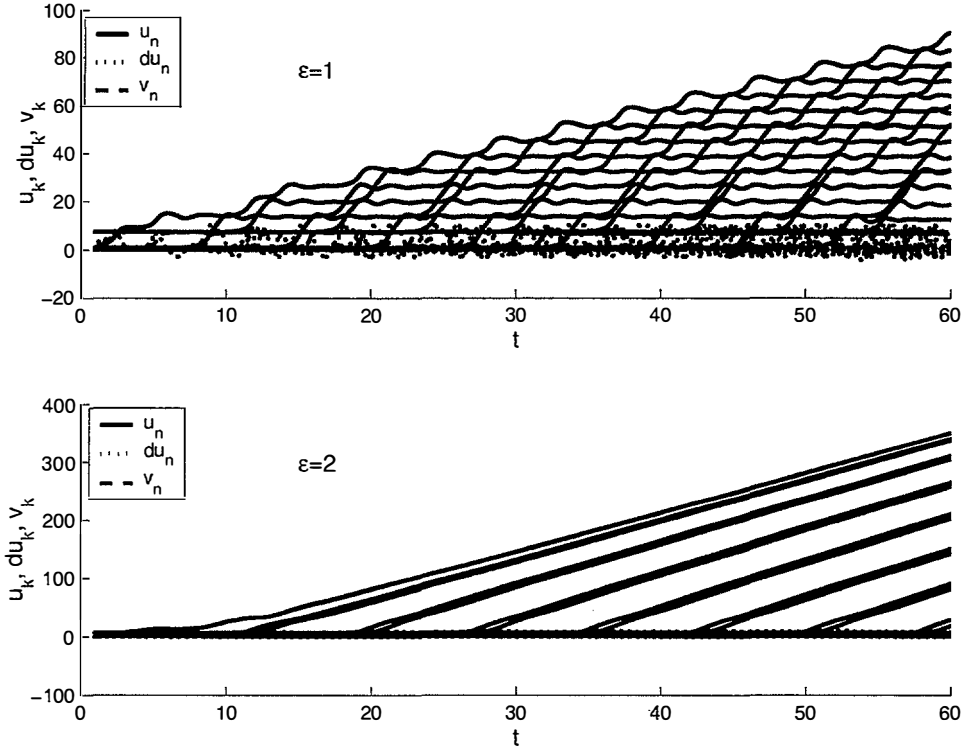


Figura 3.7: Trayectorias para (3.3) cuando  $A = 10$ ,  $F = 8$ : si  $\epsilon$  es suficientemente grande se pierden los frentes de onda.

el hueco entre las dos constantes, que tomamos como  $u_0$ . Llamamos a este punto el ‘punto activo’.

Insertando las aproximaciones  $u_{-1} \sim U_1(F/A)$ ,  $u_1 \sim U_3(F/A)$  en (3.1), obtenemos

$$\epsilon u_0'' + u_0' \approx U_1\left(\frac{F}{A}\right) + U_3\left(\frac{F}{A}\right) - 2u_0 - Ag(u_0) + F. \quad (3.4)$$

Esta ecuación tiene tres soluciones estacionarias para  $F < F_c$ , dos estables y una inestable. Cuando  $F > F_c$  posee sólo una solución estacionaria, que es estable. En  $F = F_c$  dos soluciones estacionarias, una estable y otra inestable, colapsan, dando lugar a un cero doble. El campo crítico  $F_c$  es tal que el segundo miembro en (3.4) tiene un cero doble,  $2 + Ag'(u_0) = 0$ , y

$$2u_0 + Ag(u_0) \sim U_1\left(\frac{F_c}{A}\right) + U_3\left(\frac{F_c}{A}\right) + F_c. \quad (3.5)$$

La velocidad y el perfil de las ondas para  $F$  ligeramente por encima de  $F_c$  se pueden



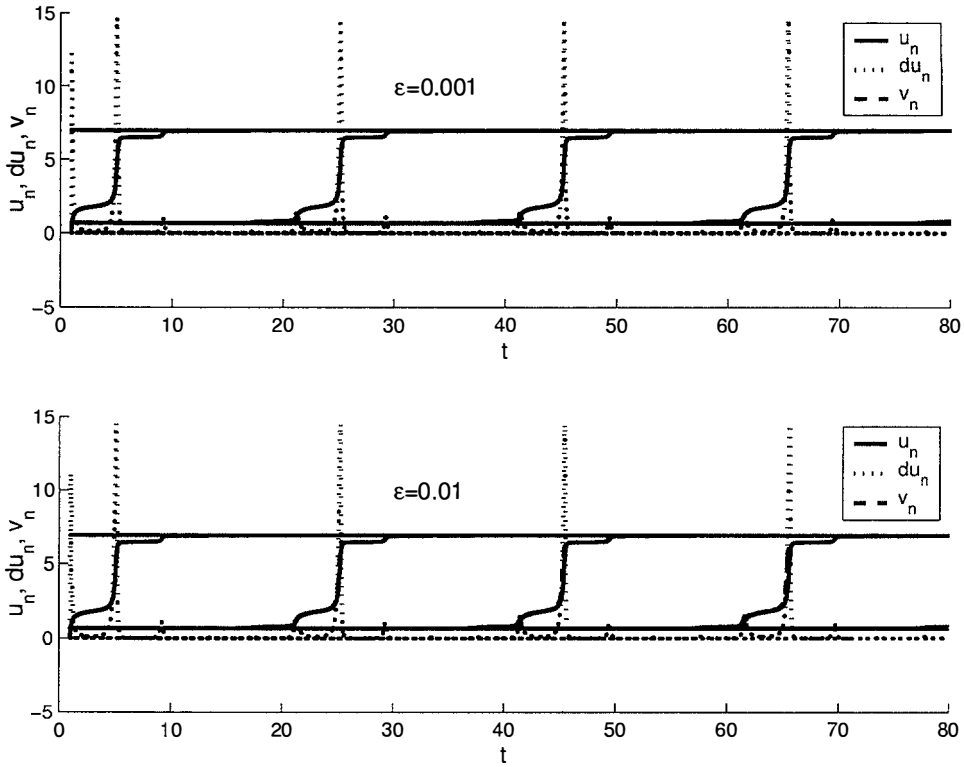


Figura 3.8: Trayectorias correspondientes a (3.3) para  $A = 10$ ,  $F = 6.2$  y diferentes valores de  $\epsilon$ . Las curvas dibujadas con trazo sólido representan  $u_n(t)$  y las curvas discontinuas  $u'_n(t)$  para  $n = -5, -10, -15, \dots$ . Las curvas punteadas representan las trayectorias  $v_n(t)$  del modelo sobreamortiguado con  $\epsilon = 0$ .

aproximar a partir de un análisis de estabilidad. Linealizando en torno a  $u_0(A, F_c)$  y  $F_c$  vemos que  $u_0(t) = u_0(A, F_c) + v_0(t)$  satisface la ecuación:

$$\epsilon v_0'' + v_0' = \alpha (F - F_c) + \beta v_0^2, \tag{3.6}$$

$$\alpha = 1 + \frac{1}{A g'(U_1(F_c/A))} + \frac{1}{A g'(U_3(F_c/A))}, \tag{3.7}$$

$$\beta = -\frac{A}{2} g''(u_0), \tag{3.8}$$

Hemos usado  $2 + A g'(u_0) = 0$ , (3.5) e ignorado términos de orden mayor que  $(F - F_c)$ .

La ecuación (3.6) tiene soluciones que explotan en tiempo finito. El recíproco del inverso del tiempo para blow up proporciona una aproximación a la velocidad del frente de onda. Cuando  $\epsilon$  es pequeño, el tiempo de explosión es esencialmente el mis-

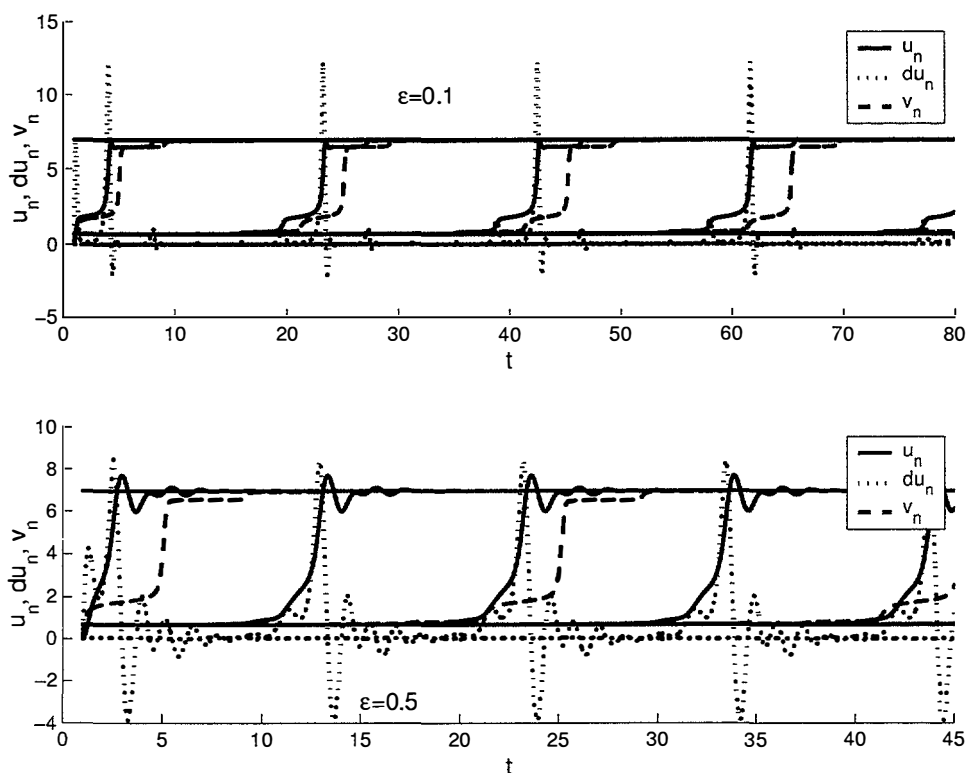


Figura 3.9: Análogo a 3.8 para  $\epsilon$  grande.

mo que para la ecuación con  $\epsilon = 0$ . Este caso se estudió en [15]. En el límite  $\epsilon$  pequeño obtenemos para la velocidad la aproximación

$$c(A, F) \sim -\frac{\sqrt{\alpha\beta(F - F_c)}}{\pi}, \quad (3.9)$$

El signo menos nos recuerda que el frente se mueve hacia la izquierda si  $F > F_c$  y a la derecha si  $F < -F_c$ . Las Figuras 3.4,3.12 muestran que esta fórmula proporciona una buena aproximación si  $\epsilon < 0.1$ .

Cuando  $\epsilon$  es grande, el tiempo de explosión se obtiene integrando la ecuación:

$$\epsilon v_0'' = \alpha(F - F_c) + \beta v_0^2, \quad (3.10)$$

Obtenemos la fórmula:

$$t = \frac{3^{1/4}\epsilon^{1/2}}{2^{1/2}}\alpha\beta(F - F_c)\frac{-1}{4} \int_0^\infty du(u(1+u^2))^{1/2} \quad (3.11)$$

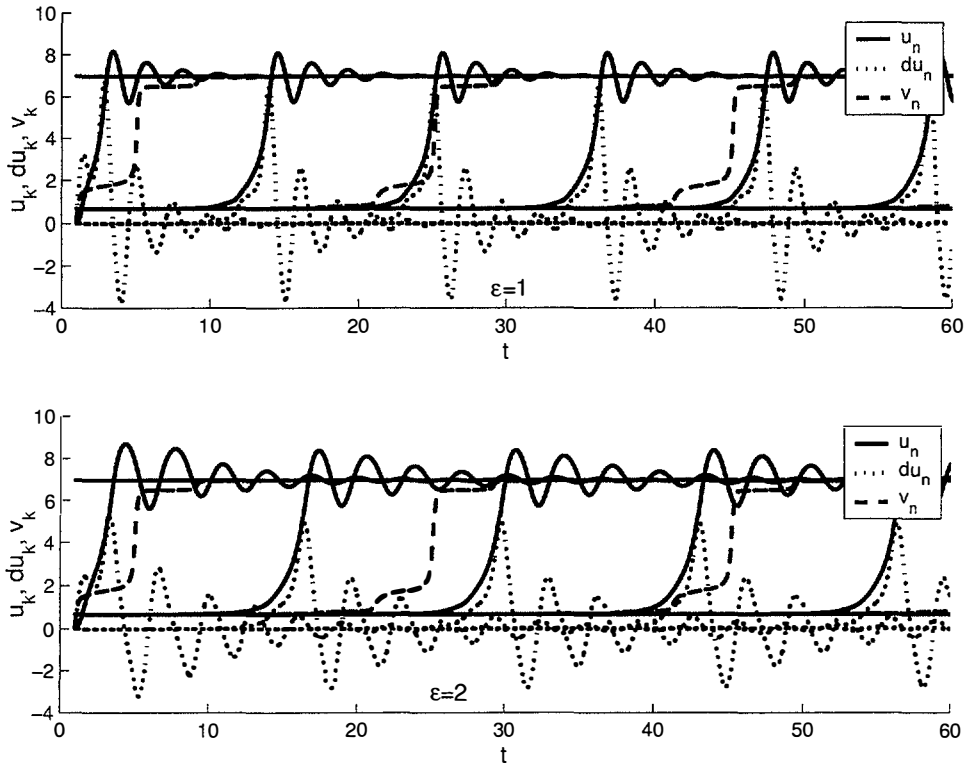


Figura 3.10: Análogo a 3.8 para  $\epsilon$  grande.

lo que proporciona la siguiente aproximación para la velocidad:

$$c = \frac{2^{1/2}}{3.7083^{1/4} \epsilon^{1/2}} \left( \alpha \beta (F - F_c) \right)^{1/4} \tag{3.12}$$

La Figura 3.4 muestra que esta fórmula proporciona una buena aproximación a las velocidades medidas numéricamente para el potencial de doble pozo si  $\epsilon > 4$ . En el caso periódico los frentes viajeros se hacen inestables antes de que  $\epsilon$  sea lo suficientemente grande para que (3.12) pueda usarse como aproximación.

Para valores intermedios de  $\epsilon$ , no hemos encontrado una fórmula explícita simple para la velocidad. En las Figuras 3.4,3.12 se observa la evolución de la velocidad en función de  $\epsilon$ , calculada numéricamente.

Los perfiles de las ondas viajeras se pueden reconstruir mediante técnicas de desarrollos asintóticos encajados ('matched asymptotics expansions') como en [15]. La aproximación que hemos descrito deja de ser válida para  $A$  pequeño. A medida que  $A$  decrece, hemos de modificar la aproximación considerando perfiles formados por

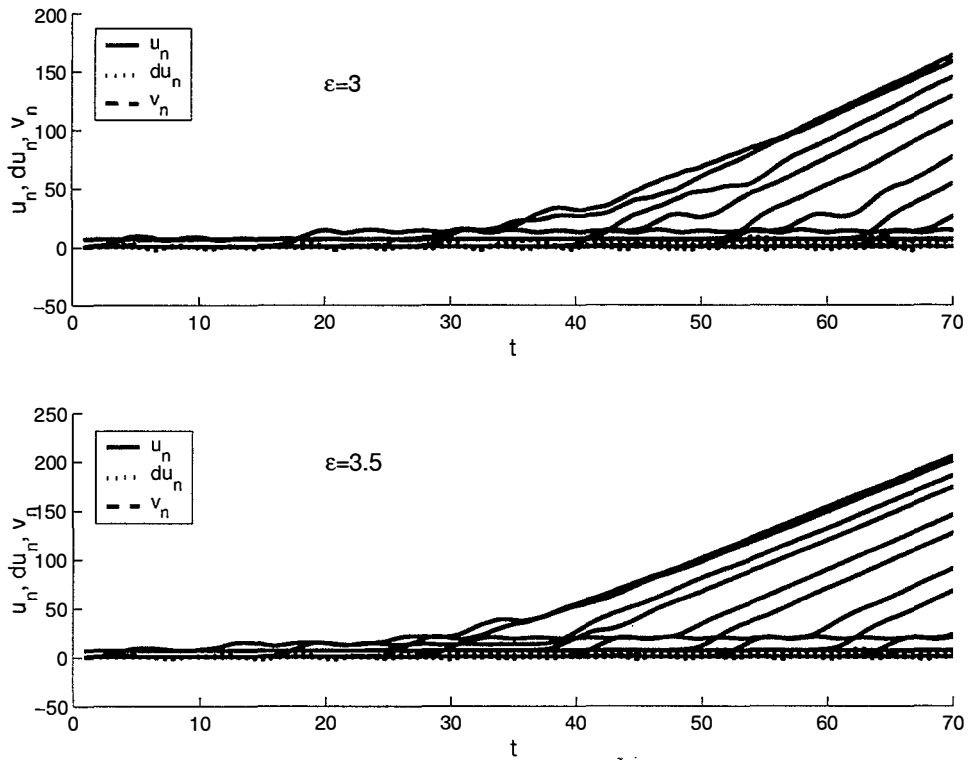


Figura 3.11: Análogo a 3.8 para  $\epsilon$  grande.

unos pocos puntos que unen dos estados constantes y la ecuación (3.6) debiera ser reemplazada por un sistema pequeño, que puede ser tratado de una forma similar, véase [15, 18]. Este sistema presenta una bifurcación tipo nodo-silla en  $\approx F_c(A)$ . El número de puntos que necesitamos tener para una buena aproximación crece como  $A$  decrece y esta determinado por el decaimiento de la autofunción asociada al autovalor cero del problema linealizado.

Esbozamos cómo se trata el caso general. El valor crítico  $F_c(A)$  anterior para el cual el frente deja de existir está caracterizado por el hecho de que la linealización del problema en la solución estacionaria estable  $u_n(A, F_c(A))$ :

$$-(v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1}) + Ag'(u_n(A, F_c(A)))v_n = \lambda v_n$$

$$v_n \rightarrow 0 \quad n \rightarrow \pm\infty$$

tiene el autovalor más pequeño  $\lambda_1(A, F_c(A)) = 0$ . Linealizando el problema de evolu-

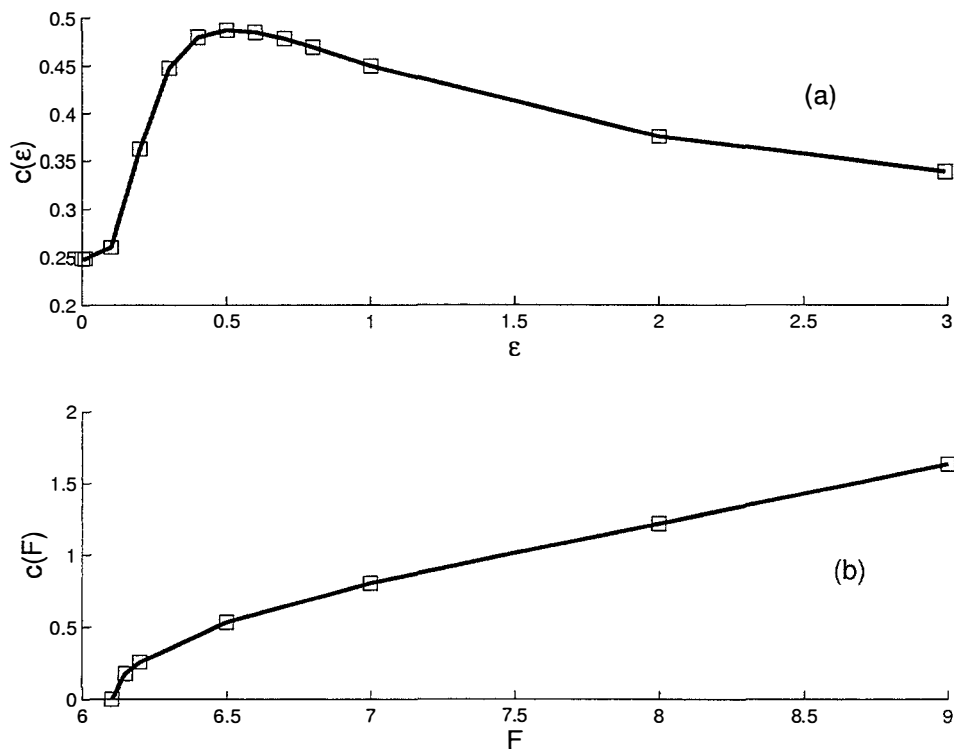


Figura 3.12: (a) Velocidad de los frentes viajeros en función de  $\epsilon$  para (3.3) cuando  $A = 10$  y  $F = 6.2$ . (b) Velocidad de los frentes de onda en función de  $F$  para (3.3) cuando  $A = 10$  y  $\epsilon = 0.1$ .

ción (3.1) entorno a  $u_n(A, F_c(A))$  y  $F_c(A)$ , obtenemos la ecuación de la amplitud:

$$\epsilon \phi(t)'' + \phi(t)' = \alpha (F - F_c) + \beta \phi(t)^2$$

con  $\alpha = \sum_n v_n > 0$  y  $\beta = -\frac{A}{2} \sum_n g'(u_n(A, F_c(A))) v_n^2$  donde  $v_n$  es una autofunción positiva asociada al autovalor  $\lambda_1 = 0$  tal que  $\sum_n v_n^2 = 1$ . Típicamente  $\beta > 0$  y el tiempo de blow up se sigue manteniendo para las fórmulas (3.9), (3.12) con los nuevos coeficientes  $\alpha$  y  $\beta$  en el límite de  $\epsilon$  grande y  $\epsilon$  pequeño. Las aproximaciones descritas en la sección anterior dependen del hecho de que las autofunciones  $v_n$  decaen exponencialmente a infinito. En el límite fuertemente discreto  $A$  grande, esta autofunción está concentrada en un punto y una buena aproximación a la velocidad y al frente se obtiene utilizando un 'punto activo' como describimos. Cuando  $A$  decrece, el número de puntos activos donde  $v_n$  es grande crece y son necesarios más 'puntos activos' en la aproximación de

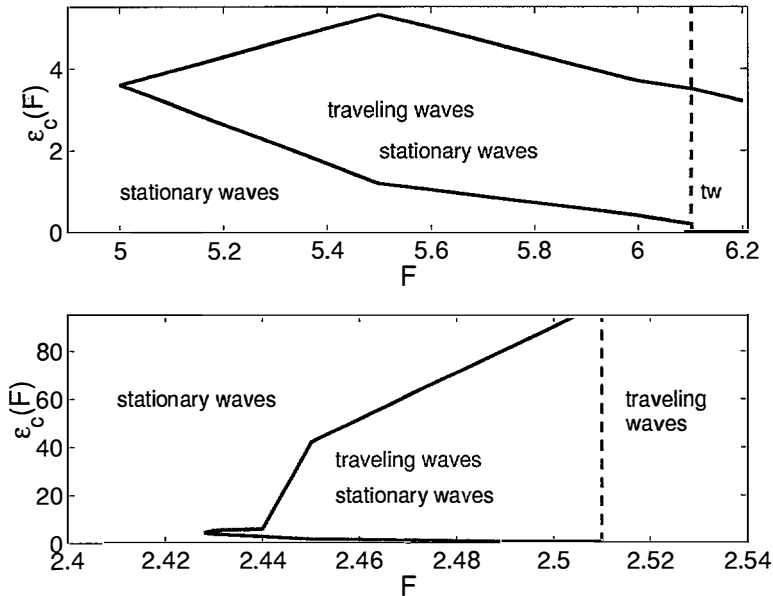


Figura 3.13: Coexistencia de frentes de onda viajeros y estacionarios: (a) potencial de doble pozo, (b) potencial periódico. A la izquierda de la línea discontinua vertical existen frentes estacionarios para cualquier valor de  $\epsilon$ . A la derecha, se observan frentes de onda viajeros. Para algunos valores de  $\epsilon$ , los frentes viajeros no se extinguen al traspasar la línea vertical  $F = F_c(A)$ , persisten hasta una nueva curva crítica  $\epsilon(F)$ .

la velocidad y los perfiles del frente.

### 3.3.2 Construcción asintótica de las soluciones del problema de valores iniciales

Argumentos asintóticos muestran que el término  $\epsilon u_n''$  en (3.1) es relevante únicamente durante un breve intervalo de tiempo de orden  $\epsilon$  (initial boundary layer) en el cual se 'amortigua' el valor de  $u_n'(0)$ . Fuera de esa capa inicial, el término  $u_n''$  se puede despreciar y la dinámica del sistema viene dada por la ecuación sobreamortiguada.

Denotando  $f(\{u_n\}) = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F$ , se reescribe (3.1) en forma

de sistema:

$$\begin{aligned} u_{n,t} &= v_n \\ v_{n,t} &= \frac{f(\{u_n\}) - v_n}{\epsilon} \end{aligned} \quad (3.13)$$

con condiciones iniciales  $u_n(0) = \alpha_n$ ,  $v_n(0) = \beta_n$ .

Para determinar la capa inicial, calculamos primero las soluciones del problema interior (inner) y el problema exterior (outer). En el problema exterior desarrollamos  $u_n$  y  $v_n$  en potencias de  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} u_n(t) &= u_n^0 + \epsilon u_n^1 + O(\epsilon^2) \\ v_n(t) &= v_n^0 + \epsilon v_n^1 + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

Insertando estas expresiones en (3.13) obtenemos para el primer orden:

$$u_{n,t}^0 = v_n^0, \quad v_n^0 = f(\{u_n^0\}) \quad (3.14)$$

Para estudiar el problema interior, introducimos una nueva variable temporal  $\tau = \frac{t}{\epsilon}$  y desarrollamos  $u_n$ ,  $v_n$  como sigue:

$$\begin{aligned} u_n(\tau) &= U_n^0(\tau) + \epsilon U_n^1(\tau) + O(\epsilon^2) \\ v_n(\tau) &= V_n^0(\tau) + \epsilon V_n^1(\tau) + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

Al primer orden, obtenemos las ecuaciones:

$$\begin{aligned} U_{n,\tau} &= 0 \\ V_{n,\tau} &= \frac{f(\{U_n^0\}) - V_n^0}{\epsilon} \end{aligned}$$

con condiciones iniciales  $U_n^0(0) = \alpha_n$ ,  $V_n^0(0) = \beta_n$ . La solución viene dada por:

$$\begin{aligned} U_n^0 &= \alpha_n \\ V_n^0(\tau) &= f(\{\alpha_n\})(1 - e^{-\tau}) + \beta_n e^{-\tau} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Acoplando las soluciones interior y exterior en la región  $\epsilon \ll t \ll 1$  y  $1 \ll \tau \ll \frac{1}{\epsilon}$ , resultan las condiciones  $u_n^0 - \alpha \ll 1$  y  $v_n^0 - f(\{\alpha_n\})(1 - e^{-\frac{t}{\epsilon}}) - \beta_n e^{-\frac{t}{\epsilon}} \ll 1$ . Por tanto,  $u_n^0(0) = \alpha$  y  $v_n^0(0) = f(\{\alpha_n\})$ .

La solución de (3.13) viene dada aproximadamente por:

$$\begin{aligned} u_n &\sim u_n^0(t) \\ v_n &\sim f(\{u_n^0(t)\}) + (\beta_n - f(\{\alpha_n\}))e^{-\frac{t}{\epsilon}} \end{aligned} \quad (3.16)$$

donde  $u_n^0(t)$  es solución de la ecuación

$$u_{n,t}^0 = u_{n+1}^0 - 2u_n^0 + u_{n-1}^0 - Ag(u_n^0) + F, \quad u_n^0(0) = \alpha_n \quad (3.17)$$

De las expresiones asintóticas (3.16) se concluye que para tiempos  $t \gg \epsilon$ , las soluciones de (3.1) se comportan como las soluciones del problema sobreamortiguado.

Estos argumentos asintóticos se pueden hacer rigurosos bajo ciertas condiciones. Probamos a continuación dos resultados de estabilidad, uno para las soluciones estacionarias estables y otro para las ondas viajeras sobreamortiguadas. La demostración rigurosa de estos resultados requiere condiciones más fuertes sobre los datos iniciales de las que se observan en la práctica. Nos ocupamos de estas cuestiones en las siguientes secciones.

## 3.4 Estimaciones auxiliares

En esta sección obtenemos estimaciones para las soluciones del problema de valores iniciales:

$$\begin{aligned} \epsilon u_n'' + u_n' &= u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F \\ u_n(0) &= u_n^0, \quad u_n'(0) = u_n^1 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Seguiremos dos estrategias distintas: técnicas de energía y ecuaciones integrales.

### 3.4.1 Estimaciones de energía

La energía de la cadena viene dada por:

$$\begin{aligned} E(u_n(t), u_n'(t)) &= \frac{\epsilon}{2} \sum_n |u_n'(t)|^2 + \frac{1}{2} \sum_n |u_{n+1}(t) - u_n(t)|^2 + \\ &\quad \sum_n (AV(u_n(t)) - Fu_n(t)) \end{aligned} \quad (3.19)$$



donde  $V(u) = \int_0^u g(s)ds$  es un potencial asociado a  $g$ , que es único salvo constantes aditivas. La energía de las configuraciones con estructura de frente que une los dos ceros estables  $U_1(F/A)$  y  $U_3(F/A)$  es infinita excepto en casos particulares. Cuando  $F = 0$  y  $g$  es impar en torno a  $U_2(0)$  se puede elegir la constante del potencial de forma que el término  $n$ -ésimo en la serie tiende a cero y la suma es finita. Por ejemplo, si  $g(u) = \sin(u)$  se suele elegir como potencial  $V(u) = (1 - \cos(u))$ . Este potencial es una función positiva y el funcional de energía resultante toma valores positivos. Los frentes que unen 0 y  $2\pi$  tienen energía finita con esta elección.

**Teorema: Caso  $F = 0$**  Sea  $g(u)$  una función 'cúbica', con tres ceros  $U_1(0) < U_2(0) < U_3(0)$ , impar respecto a  $U_2(0)$ . Suponemos que  $g$  es de clase  $C^2$  y que el primer y tercer cero son estables. Sea  $u_n(A, 0)$  la solución estacionaria estable de (3.1) para  $F = 0$ . Suponemos que los datos iniciales  $u_n^0, u_n^1$  satisfacen:

- $E(u_n^0, u_n^1) < \infty$
- $\sum (u_n^0 - u_n(A, 0))^2 < \infty$

Entonces, existe una única solución  $u_n(t)$  con energía finita de (3.18) y su energía  $E(u_n(t), u_n'(t)) \geq 0$  decrece cuando  $t \rightarrow \infty$ .

**Demostración.** En lo sucesivo denotamos por  $l^2$  el espacio de Banach formado por las sucesiones  $v_n$  tales que  $\sum v_n^2 = \|v_n\|^2 < \infty$ . La existencia de una solución única se obtiene reescribiendo (3.18) como un sistema de primer orden  $w = ((v_n), (v_n'))^t$ ,  $v_n = u_n - u_n(A, 0)$ :

$$w' = F(w)$$

con  $w(0) \in l^2 \times l^2$  y  $F(w) = ((v_n'), (v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1} - A(g(v_n + u_n(A, 0)) - g(u_n(A, 0)) - v_n'))^t$ . Si  $g \in C^1$  la no linealidad  $F$  es localmente Lipschitz en  $l^2 \times l^2$ . Esto implica la existencia de una única solución con energía finita de  $(u_n(t), u_n'(t))$  para (3.18). Multiplicando (3.18) por  $u_n'(t)$ , sumando e integrando en  $t$ , obtenemos:

$$0 \leq E(u_n(t), u_n'(t)) = E(u_n(0), u_n'(0)) - \int_0^t \sum u_n^2(s) ds$$

$$E(u_n, u_n') = \frac{\epsilon}{2} \sum_n |u_n'|^2 + \frac{1}{2} \sum_n |u_{n+1} - u_n|^2 + A \sum_n V(u_n(t))$$

Elegimos el potencial  $V(u) = \int_0^u g(s)ds + k \geq 0$  con  $k = -\int_0^{U_1} g = -\int_0^{U_3} g$ . Esta identidad de energía implica que  $u_n(t), u'_n(t)$  están uniformemente acotadas en  $t$  y, por tanto, están definidas globalmente para todo  $t > 0$ .

**Observación.** Cuando  $F \neq 0$  no podemos garantizar que la energía es positiva o está acotada inferiormente. Sin embargo, se puede trabajar con las energías de diferencias de frentes de onda.

**Teorema: Existencia.** Sea  $A > 0$  y  $|F| \leq F_c(A)$ . Denotamos por  $u_n(A, F)$  una solución con estructura de frente estacionario de (3.1) tal que  $\lambda_1(A, F) > 0$ . Dadas dos sucesiones  $u_n^0, u_n^1$  tales que  $\sum_n |u_n^0 - u_n(A, F)|^2 + |u_n^1|^2 < \infty$ , existe una solución local  $u_n(t)$  de (3.18) tal que  $\sum_n |u_n(t) - u_n(A, F)|^2 + |u'_n(t)|^2 < \infty$  para todos  $t \leq T$ . Si  $g$  es globalmente Lipschitz, la solución  $u_n(t)$  es global en tiempo y  $T = \infty$ .

**Demostración.** La diferencia  $v_n(t) = u_n(t) - u_n(A, F)$  es solución de:

$$\begin{aligned} \epsilon v_n'' + v_n' &= v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1} - A(g(v_n + u_n(A, F)) - g(u_n(A, F))) \\ v_n(0) &= u_n^0 - u_n(A, F), \quad v_n'(0) = u_n^1 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Reescribiendo esta ecuación como un sistema de primer orden con una no linealidad localmente Lipschitz en  $l^2 \times l^2$  concluimos la existencia de una solución local (global si  $g$  es globalmente Lipschitz) que satisface la cota buscada.

**Teorema: Estimaciones** La solución  $u_n(t)$  construida en el teorema anterior es global y satisface  $E(u_n(t) - u_n(A, F), u'_n(t)) < C$  para todo  $t > 0$  y algún  $C > 0$  siempre y cuando  $E(u_n(0) - u_n(A, F), u'_n(0))$  sea suficientemente pequeño.

**Demostración.** Multiplicando (3.20) por  $v_n'$  y sumando obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( \frac{\epsilon}{2} \sum_n v_n'^2 + \frac{1}{2} \sum_n (v_{n+1} - v_n)^2 + A \sum_n (V(v_n + u_n(A, F)) - V(u_n(A, F))) \right) \\ - A \sum_n g(u_n(A, F))v_n = - \sum_n v_n'^2 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Desarrollando por Taylor obtenemos:

$$V(v_n + u_n(A, F)) - V(u_n(A, F)) - g(u_n(A, F))v_n = \frac{1}{2}g'(u_n(A, F))v_n^2 + \frac{1}{6}g''(\xi_n)v_n^3$$

Usando la caracterización variacional para  $\lambda_1(A, F)$  deducimos que:

$$\sum_n (v_{n+1} - v_n)^2 + Ag'(u_n(A, F))v_n^2 \geq \lambda_1(A, F) \sum_n v_n^2$$

Insertando esta desigualdad en (3.21) deducimos:

$$\frac{\epsilon}{2} \sum_n v_n'^2 + \frac{\lambda_1(A, F)}{2} \sum_n v_n^2 - \frac{A}{6} \text{Max} |g''(u_n(A, F))| \sum_n v_n^3 \leq C(0) \quad (3.22)$$

con  $C(0) = \frac{\epsilon}{2} \sum_n v_n'(0)^2 + \sum_n (v_{n+1} - v_n)(0)^2 + A \sum_n (V(v_n(0) + u_n(A, F)) - V(u_n(A, F))) - g(u_n(A, F))v_n(0)$ .

Denotemos  $M = \text{Max} |g''(u_n(A, F))|$  y  $V_0 = \text{Max}_n |v_n(0)|$ . Sea  $K = \frac{\lambda_1(A, F)}{2} - \frac{AMV_0}{6} > 0$  y supongamos que  $C(0) \leq V_0^2 K$ . De (3.22) se deduce

$$|v_n|^2 \leq \frac{C(0)}{K} \leq V_0^2$$

Por tanto, cuando  $V_0 = \text{Max}_n |v_n(0)| < \frac{3\lambda_1(A, F)}{AM}$  and  $C(0) \leq V_0^2 K$ , con  $K = \frac{\lambda_1(A, F)}{2} - \frac{AMV_0}{6} > 0$ , se tiene  $|v_n(t)| \leq V_0$  para todo  $t, n$ . Por (3.22)

$$\frac{\epsilon}{2} \sum_n |v_n'(t)|^2 + K(A, F) \sum_n |v_n(t)|^2 - \int_0^t \sum_n v_n'^2(s) ds \leq C(0) \quad (3.23)$$

Esta desigualdad proporciona una cota global para  $\sum v_n(t)^2$ ,  $\sum v_n'(t)^2$  e implica que  $\sum v_n'(t)^2 \rightarrow 0$  cuando  $t \rightarrow \infty$ .

### 3.4.2 Ecuaciones integrales

Las soluciones de (3.1) se pueden expresar mediante una ecuación integral usando la función de Green del problema lineal:

$$\begin{aligned} \epsilon u'' + u' + 2u &= f(t) \\ u(0) &= u_0, \quad u'(0) = u_1 \end{aligned} \quad (3.24)$$

La solución general del problema homogéneo asociado viene dada por

$$\begin{aligned} u(t) &= u(0) \frac{r_+ e^{r_+ t} - r_- e^{r_- t}}{r_+ - r_-} + u'(0) \frac{e^{r_+ t} - e^{r_- t}}{r_+ - r_-} \\ r_{\pm} &= \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 8\epsilon}}{2\epsilon} < 0 \end{aligned} \quad (3.25)$$

si  $\epsilon < \frac{1}{8}$ . Cuando  $\epsilon > \frac{1}{8}$ , hemos de añadir efectos oscilatorios:

$$\begin{aligned} u(t) &= u(0) \frac{e^{-\frac{t}{2\epsilon}}}{\cos(r)} \left( \cos(rt) + \frac{\sin(rt)}{2\epsilon r} \right) + u'(0) \frac{e^{-\frac{t}{2\epsilon}}}{\cos(r)} \frac{\sin(rt)}{r} \\ r &= \frac{\sqrt{8\epsilon - 1}}{2\epsilon} \end{aligned} \quad (3.26)$$

En este caso, el decaimiento exponencial sólo es relevante para  $t \gg 2\epsilon$ . Trabajaremos en la región  $\epsilon < \frac{1}{8}$  para evitar comportamientos oscilatorios. En este régimen, la solución del problema no homogéneo con datos iniciales nulos viene dada por:

$$u(t) = \int_0^t f(s) \frac{e^{r_+(t-s)} - e^{r_-(t-s)}}{r_+ - r_-} ds \quad (3.27)$$

Por tanto, para  $\epsilon < \frac{1}{8}$  la solución de (3.24) es

$$u(t) = u(0)K'(t) + u'(0)K(t) + \int_0^t f(s)K(t-s)ds \quad (3.28)$$

con  $K(t) = \frac{e^{r_+t} - e^{r_-t}}{r_+ - r_-}$ . Usando la propiedad  $K(t) > 0$  se deducen algunos principios de comparación:

**Lema: Principios de comparación.** Para  $\epsilon < \frac{1}{8}$  se tiene

- Si  $u(0) = 0$ ,  $u'(0) \geq 0$ ,  $f(t) \geq 0$  for all  $t > 0$ , entonces  $u(t) \geq 0$  para todo  $t > 0$ .
- Si  $u_1(t)$  y  $u_2(t)$  son soluciones de (3.24) con datos  $u_1(0) = u_2(0) = 0$ ,  $u'_1(0) > u'_2(0)$  y  $f_1(t) > f_2(t)$  para todo  $t > 0$ , entonces  $u_1(t) > u_2(t)$  para todo  $t > 0$ .
- Si  $u(0) > 0$ ,  $r_+u(0) > u'(0) > r_-u(0)$  y  $f(t) > 0$  para todo  $t > 0$ , entonces  $u(t) > 0$  para todo  $t > 0$ .

Usando el decaimiento de  $K(t)$  obtenemos las siguientes cotas:

**Lema: Estimaciones lineales.** Si  $\epsilon < \frac{1}{8}$  la solución  $u(t)$  de (3.24) satisface:

$$\begin{aligned} |u(t)| &\leq \frac{|u(0)|}{2\sqrt{1-8\epsilon}}e^{r_+t} + \frac{\epsilon|u'(0)|}{\sqrt{1-8\epsilon}}e^{r_+t} + \frac{\epsilon \text{Max}_{[0,t]}|f|}{2\sqrt{1-8\epsilon}} \\ \|u'\|_\infty &\leq \frac{|u(0)|}{4\epsilon\sqrt{1-8\epsilon}}e^{r_+t} + \frac{|u'(0)|}{2\sqrt{1-8\epsilon}}e^{r_+t} + \frac{\epsilon \text{Max}_{[0,t]}|f|}{\sqrt{1-8\epsilon}} \\ \|u''\|_\infty &\leq \frac{|u(0)|}{8\epsilon^2\sqrt{1-8\epsilon}}e^{r_+t} + \frac{|u'(0)|}{4\epsilon\sqrt{1-8\epsilon}}e^{r_+t} + \text{Max}_{[0,t]}|f|(1 + \frac{1}{2\sqrt{1-8\epsilon}}) \end{aligned} \quad (3.29)$$

**Demostración:** Se deriva la expresión integral (3.28) y usamos las expresiones explícitas para  $r_\pm$ .

La solución  $u_n(t)$  de (3.1) resuelve la ecuación integral:

$$u_n(t) = u_n(0)K'(t) + u'_n(0)K(t) + \int_0^t K(t-s)(u_{n+1}(s) + u_{n-1}(s) - Ag(u_n) + F)ds \quad (3.30)$$

Esta ecuación integral se puede usar para probar existencia y obtener estimaciones del tamaño de la solución. Nótese que hemos incluido en el segundo miembro el término no lineal  $g(u_n)$  y los términos no locales  $u_{n+1}$ ,  $u_{n-1}$ . El hecho de que  $|K(t)| \leq \frac{2\epsilon}{\sqrt{1-8\epsilon}} e^{r+t}$  permite aplicar técnicas de punto fijo para  $\epsilon$  pequeño.

**Teorema: Existencia** Para  $\epsilon$  suficientemente pequeño y  $u_n(0), u'_n(0) \in l^\infty$ , existe una única solución global de (3.18), que satisface (3.30) y está acotada en términos de los datos iniciales.

**Demostración.** Consideramos el esquema iterativo siguiente:

$$u_n^{k+1}(t) = u_n(0)K'(t) + u'_n(0)K(t) + \int_0^t K(t-s)(u_{n+1}^k(s) + u_{n-1}^k(s) - Ag(u_n^k) + F)ds \quad (3.31)$$

eligiendo como  $u_n^0$  la solución de  $\epsilon u_n'' + u'_n + u_n = 0$  con datos inicial  $u_n(0), u'_n(0)$ . Restando obtenemos:

$$w_n^{k+1}(t) = \int_0^t K(t-s)(w_{n+1}^k(s) + w_{n-1}^k(s) - Ag'(\xi_n^k(s))w_n^k(s))ds \quad (3.32)$$

donde  $w_n^{k+1} = u_n^{k+1} - u_n^k$  para  $k \geq 0$ . Por tanto,

$$\begin{aligned} \text{Max}_{[0,t],n}|w_n^{k+1}|(s) &\leq \frac{\epsilon}{2\sqrt{1-8\epsilon}}(2 + A\text{Max}|g'|)\text{Max}_{[0,t],n}|w_n^k|(s) \\ &\leq C(\epsilon)^k \text{Max}_{[0,t],n}|w_n^0|(s) \end{aligned} \quad (3.33)$$

con  $C(\epsilon) < \frac{1}{2}$  si  $\epsilon$  es suficientemente pequeño. Esto implica que  $u_n^k$  tiende a una solución  $u_n$  que satisface (3.30). Usando (3.30) obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\text{Max}_{[0,t],n}|u_n|(s) &\leq \frac{\text{Max}_n|u_n(0)|}{2\sqrt{1-8\epsilon}} + \frac{\epsilon\text{Max}_n|u'_n(0)|}{\sqrt{1-8\epsilon}} \\ &\quad + \frac{\epsilon F}{2\sqrt{1-8\epsilon}} \end{aligned} \quad (3.34)$$

para  $\epsilon$  pequeño. Este argumento funciona si  $|g'|$  está globalmente acotado. Cuando está acotado localmente, fijamos  $R > 0$  suficientemente grande y reemplazamos  $g(u)$  por  $g_R(u) = g(u)$  cuando  $|u| \leq R$  y  $g_R(u) = 0$  cuando  $|u| > R$ . Aplicamos el argumento anterior y obtenemos una solución  $g_R$  que satisface (3.34). Eligiendo

$$R = \frac{\text{Max}_n|u_n(0)|}{2\sqrt{1-8\epsilon}} + \frac{\epsilon\text{Max}_n|u'_n(0)|}{\sqrt{1-8\epsilon}} + \frac{\epsilon F}{2\sqrt{1-8\epsilon}}$$

recuperamos la solución del problema original.

### 3.5 Estabilidad de los frentes de onda para $\epsilon$ pequeño

Las simulaciones numéricas realizadas para  $\epsilon$  pequeño descritas en la sección 2 muestran que datos iniciales correspondientes a un perfil  $u_n(0)$  de tipo frente con  $u'_n(0)$  pequeño evolucionan a perfiles de tipo frente estacionario si  $|F| \leq F_c(A)$  o viajero si  $|F| > F_c(A)$ . Estudiamos en esta sección la existencia y estabilidad de los frentes viajeros.

Cuando  $|F| > F_c(A)$ , el problema sobreamortiguado (3.1) con  $\epsilon = 0$

$$v'_n = v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1} - Ag(v_n) + F \quad (3.35)$$

tiene soluciones de tipo frente de onda viajero  $v_n(t) = v(n - ct)$  con un perfil regular que es solución de la ecuación diferencial en diferencias:

$$\begin{aligned} c^2 \epsilon v_{zz}(z) - cv_z(z) &= v(z+1) - 2v(z) + v(z-1) - Ag(v(z)) + F \\ v(-\infty) &= U_1(F/A), \quad v(\infty) = U_3(F/A) \end{aligned} \quad (3.36)$$

Los frentes de onda se propagan a la derecha si  $F > F_c(A)$  o a la izquierda si  $F < -F_c(A)$ . Para  $|F| \leq F_c(A)$ , los frentes de onda no llegan a propagarse, quedan anclados por el retículo discreto y su movimiento queda bloqueado por los frentes estacionarios.

Vamos a establecer en primer lugar condiciones sobre  $\epsilon$  y sobre los datos iniciales que garanticen una dinámica similar para las soluciones de (3.1) y (4.2).

**Teorema: Estabilidad.** *Para  $\epsilon$  suficientemente pequeño las soluciones de (3.1) y (4.2) que parten del mismo dato inicial  $u_n^0$  evolucionan ambas hacia frentes anclados o frentes viajeros si  $u_n^1$  es suficientemente pequeño.*

**Demostración.** Sea  $v_n(t)$  una solución de (4.2) con dato inicial  $u_n^0$ . Sea  $u_n(t)$  una solución de (3.1) con datos iniciales  $u_n(0) = u_n^0$  y  $u'_n(0) = u_n^1$ . La diferencia  $w_n(t) = u_n(t) - v_n(t)$  satisface:

$$\begin{aligned} \epsilon w''_n + w'_n &= w_{n+1} - 2w_n + w_{n-1} - A(g(w_n(t) + v_n(t)) - g(v_n(t))) - \epsilon v''_n \\ w_n(0) &= 0, \quad w'_n(0) = u_n^1 - (u_{n+1}^0 - 2u_n^0 + u_{n-1}^0) + Ag(u_n^0) + F \end{aligned} \quad (3.37)$$

Si  $\epsilon < \frac{1}{8}$ , este problema se puede escribir como una ecuación integral para  $w_n$  (véase

la sección 4.2)

$$w_n(t) = w'_n(0)K(t) + \int_0^t K(t-s)(w_{n+1}(s) + w_{n-1}(s))ds - \int_0^t K(t-s)(A(g(w_n + v_n) - g(v_n))(s) + \epsilon v''_n(s))ds \quad (3.38)$$

con  $K(t) = \frac{e^{r_+t} - e^{r_-t}}{r_+ - r_-}$  y  $r_{\pm} = \frac{-1 \pm \sqrt{1-8\epsilon}}{2\epsilon}$ . El procedimiento descrito en la sección 4.2 proporciona las estimaciones siguientes:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Max}_{[0,T],n} |w_n(t)| &\leq \frac{\epsilon \text{Max}_n |w'_n(0)|}{\sqrt{1-8\epsilon}} + \frac{\epsilon^2 \text{Max}_{[0,T],n} |v''_n(t)|}{2\sqrt{1-8\epsilon}} \\ |w'_n(t)| &\leq \frac{|w'_n(0)|}{2\sqrt{1-8\epsilon}} e^{r_+t} + \frac{\epsilon^2 \text{Max}_{[0,T],n} |v''_n(t)|}{\sqrt{1-8\epsilon}} \\ &\quad + \frac{\epsilon(2 + A \text{Max} |g'|)}{\sqrt{1-8\epsilon}} \text{Max}_{[0,T],n} |w_n(t)| \\ |w''_n(t)| &\leq \frac{|w'_n(0)|}{4\epsilon\sqrt{1-8\epsilon}} e^{r_+t} + \epsilon \text{Max}_{[0,T],n} |v''_n(t)| \left(1 + \frac{1}{2\sqrt{1-8\epsilon}}\right) \\ &\quad + \text{Max}_{[0,T],n} |w_n(t)| \left(1 + \frac{1}{2\sqrt{1-8\epsilon}}\right) \end{aligned} \quad (3.39)$$

para  $\epsilon$  pequeño. Concluimos que si  $t > 0$  la diferencia  $u_n(t) - v_n(t)$  es de orden  $\epsilon$ :

$$v_n(t) - \epsilon C(w'_n(0)) \leq u_n(t) \leq v_n(t) + \epsilon C(w'_n(0)) \quad (3.40)$$

Vemos que  $\epsilon w''_n$  es pequeño para  $t_0 \gg \epsilon$ . Escribimos la ecuación (3.1) para  $u_n(t)$  como

$$u'_n = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F - \epsilon u''_n \quad (3.41)$$

Si  $t \geq t_0$ ,  $|\epsilon u''_n| \leq |\epsilon w''_n| + |\epsilon v''_n| \leq \eta$ ,  $\eta$  pequeño. Esto permite usar argumentos de comparación en términos de sub y supersoluciones [42]. Sean  $W_n$  y  $L_n$  sup y subsoluciones que satisfacen:

$$W'_n = W_{n+1} - 2W_n + W_{n-1} - Ag(W_n) + F + \eta \quad (3.42)$$

$$L'_n = L_{n+1} - 2L_n + L_{n-1} - Ag(L_n) + F - \eta \quad (3.43)$$

y  $W_n(t_0) \geq u_n(t_0) \geq L_n(t_0)$ .

Si  $|F| > F_c(A)$  y  $\eta$  es suficientemente pequeño, (3.42) y (3.43) tienen soluciones de tipo onda viajera  $W(n - c_2t)$ ,  $L(n - c_1t)$ . Cuando  $u_n(t_0)$  está lo suficientemente próximo

a un perfil de tipo frente que une  $U_1(F/A)$  and  $U_3(F/A)$  como para permitir una cota de la forma  $W(n - c_2 t_0 + \tau_2) \geq u_n(t_0) \geq L(n - c_1 t_0 + \tau_1)$ , (trasladando las subsoluciones y supersoluciones si es necesario) obtenemos

$$L(n - c_1 t + \tau_1) \leq u_n(t) \leq W(n - c_2 t + \tau_2) \quad (3.44)$$

en  $[t_0, \infty)$ . Esto es posible cuando  $w'_n(0)$  en (3.37) es suficientemente pequeño dependiendo de  $\epsilon$ . La desigualdad (3.44) permite acotar  $u_n(t)$  por soluciones de tipo onda viajera de problemas vecinos: las velocidades  $c_1$  y  $c_2$ , y los perfiles  $W$  y  $L$  son perturbaciones de la velocidad  $c$  y los perfiles  $v$  de las ondas viajeras  $v(n - ct)$  de (4.2), con un error de orden  $\beta$ .

Cuando  $|F| < F_c(A)$ , el problema sobreamortiguado carece de soluciones de tipo frente pero se pueden construir super y subsoluciones estacionarias  $W_n$  y  $L_n$  que bloquean la propagación de  $u_n(t)$  para  $t \geq 0$ . No obstante, el frente se podría propagar inicialmente debido a la energía cinética inicial, hasta que ésta se haya disipado el frente quede atrapado.

Las soluciones de tipo onda viajera para (3.1) se pueden construir mediante desarrollos en serie para  $\epsilon \ll 1$ . Ponemos

$$u(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon^k v_k, \quad c = \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon^k c_k \quad (3.45)$$

y buscamos soluciones de (3.1) con la estructura  $u_n(t) = u(n - ct)$ ,  $z = n - ct$ :

$$\begin{aligned} c^2 \epsilon u_{zz}(z) - c u_z(z) &= u(z+1) - 2u(z) + u(z-1) - Ag(u(z)) + F \\ u(-\infty) &= U_1(F/A), \quad u(\infty) = U_3(F/A) \end{aligned} \quad (3.46)$$

Desarrollando en serie  $g$  podemos calcular recursivamente todos los términos del desarrollo. Los primeros términos están dados por

$$\begin{aligned} -c_0 v_{0,z}(z) &= v_0(z+1) - 2v_0(z) + v_0(z-1) - Ag(v_0(z)) + F \\ v_0(-\infty) &= U_1(F/A), \quad v_0(\infty) = U_3(F/A) \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned} -c_0 v_{1,z}(z) &= v_1(z+1) - 2v_1(z) + v_1(z-1) - Ag'(v_0(z))v_1(z) \\ &\quad - c_0^2 v_{0,zz}(z) + c_1 v_{0,z}(z) \\ v_1(-\infty) &= v_1(\infty) = 0, \quad c_1 = 0 \end{aligned} \quad (3.48)$$



$$\begin{aligned}
-c_0 v_{2,z}(z) &= v_2(z+1) - 2v_2(z) + v_2(z-1) - Ag'(v_0(z))v_2(z) \\
&\quad - c_0^2 v_{1,zz}(z) + c_2 v_{0,z}(z) - A/2 g''(v_0(z))v_1^2(z) \\
&\quad v_2(-\infty) = v_2(\infty) = 0 \\
c_2 &= \frac{c_0^2 \int v_{1,zz} v_{0,z} + A/2 \int g''(v_0)v_1^2 v_{0,z}}{\int v_{0,z}^2} \tag{3.49}
\end{aligned}$$

En (3.48) y (3.49),  $v_1$  and  $v_2$  decaen exponencialmente en el infinito. Obsérvese que  $v_{0,z} > 0$  es una autofunción del problema linealizado en torno a  $v_0$  y  $\epsilon = 0$  asociada a un autovalor cero, que decae exponencialmente en el infinito. La condición de ortogonalidad se satisface automáticamente para  $c_1 = 0$ . En (3.49) la condición de ortogonalidad proporciona un valor para  $c_2$ .

### 3.6 Estabilidad de frentes estacionarios para $\epsilon > 0$

Sabemos que (3.1) tiene soluciones estacionarias  $u_n(A, F)$  para  $|F| \leq F_c(A)$ . Cuando  $|F| < F_c(A)$ , existen al menos dos soluciones estacionarias, una de las cuales satisface  $\lambda_1(A, F) > 0$  [15]. Denotamos por  $\lambda_1(A, F)$  el menor autovalor del operador discreto en espacio linealizado en torno a  $u_n(A, F)$ :

$$\lambda_1(A, F) = \text{Min} \frac{\sum_n (v_{n+1} - v_n)^2 + Ag'(u_n(A, F))v_n^2}{\sum v_n^2} \tag{3.50}$$

donde el mínimo se toma sobre un espacio de funciones que decaen en el infinito.

Obviamente, los modelos amortiguados y sobreamortiguados poseen las mismas soluciones estacionarias. Estudiamos en esta sección la estabilidad para la dinámica (3.1) de los frentes estacionarios con  $\lambda_1(A, F) > 0$  para  $|F| \leq F_c(A)$ . En la sección 5 obtuvimos resultados de estabilidad para  $\epsilon < \frac{1}{8}$ . En esta sección obtenemos resultados de estabilidad para todo  $\epsilon > 0$  suponiendo que partimos de datos suficientemente próximos a  $u_n(A, F)$  y con energía cinética pequeña. La positividad del autovalor se realiza en forma de desigualdad

$$\lambda_i(A, F) \sum s_n^2 \leq \sum (s_{n+1} - s_n)^2 + Ag'(s_n)$$

$\forall s_n$  que decrece a una cierta velocidad exponencial.

Sea  $u_n(t)$  una solución de

$$\epsilon u_n'' + u_n' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + Fu_n(0) = u_n^0, \quad u_n'(0) = u_n^1$$

para datos iniciales tales que  $\sum_n |u_n^0 - u_n(A, F)|^2 < \infty$  y  $\sum_n |u_n^1|^2 < \infty$ . La existencia ha sido establecida en la sección 4.1. Cuando  $g$  es globalmente Lipschitz las soluciones son globales. Cuando  $g$  es localmente Lipschitz y  $\sum_n |u_n^0 - u_n(A, F)|^2$ ,  $\sum_n |u_n^1|^2$  son pequeños, las soluciones están definidas para todo  $t > 0$  y  $\sum_n |u_n(t) - u_n(A, F)|^2$ ,  $\sum_n |u_n'(t)|^2$  están uniformemente acotados para  $t > 0$ .

**Teorema: Estabilidad de frentes estacionarios.** Si  $\sum_n |u_n^0 - u_n(A, F)|^2$ ,  $\sum_n |u_n^1|^2$  son suficientemente pequeños, la solución  $u_n(t)$  de (3.51) tiende a  $u_n(A, F)$  para tiempos grandes.

**Observación:** Este resultado es válido para cualquier  $\epsilon > 0$ . Sin embargo, a medida que  $\epsilon$  crece, la restricción sobre los datos iniciales se hace más fuerte.

**Demostración.** El resultado es obvio cuando  $F = 0$  y  $g$  es impar en torno a  $U_2(0)$ . La energía es un funcional de Liapunov acotado inferiormente y esto implica la convergencia a un estado estacionario, véase la Sección 4.1.

Cuando  $F \neq 0$ , escribimos las ecuaciones para  $v_n(t) = u_n(t) - u_n(A, F)$  y multiplicamos por  $v_n'$ . Sumando en  $n$  vemos que el funcional  $C(t) = \frac{\epsilon}{2} \sum_n v_n'(t)^2 + \sum_n (v_{n+1}(t) - v_n(t))^2 + A \sum_n (V(v_n(t) + u_n(A, F)) - V(u_n(A, F)) - g(u_n(A, F))v_n(t))$  es no creciente y está acotado inferiormente para datos iniciales tales que  $C(0)$  y  $V_0 = \text{Max } |v_n(0)|$  son pequeños. Para  $t \rightarrow \infty$ ,  $C(t) \rightarrow C(\infty)$  y

$$C(\infty) - C(0) = - \int_0^\infty |v_n'(s)|^2 ds$$

Esto implica  $\sum_n |v_n'(t)|^2 \rightarrow 0$  cuando  $t \rightarrow \infty$  y  $v_n''(t)$  tiende a cero, al menos en el sentido de las distribuciones, para todo  $n$ , cuando  $t \rightarrow \infty$ . Por otra parte,

$$|v_n(t+h) - v_n(t)| = \left| \int_t^{t+h} v_n'(s) ds \right| \leq h^{\frac{1}{2}} \int_t^\infty |v_n'(s)|^2 ds \rightarrow 0$$

cuando  $t \rightarrow \infty$ , para todo  $h > 0$  fijo. La familia  $v_n(t)$  es equicontinua y uniformemente acotada. Por un procedimiento de extracción diagonal obtenemos una sucesión  $t_j \rightarrow \infty$  tal que  $v_n(t_j) \rightarrow s_n$ . El límite  $s_n$  es una solución estacionaria. Usando la cota uniforme

sobre  $\sum_n v_n(t)^2$ , concluimos que  $\sum_n |v_n(t_j) - s_n|^2 \rightarrow 0$ . La unicidad de  $s_n$  implicaría la convergencia a  $v_n(t)$ .

Veamos que  $s_n$  está caracterizada de forma única. Para ello utilizamos la positividad del autovalor  $\lambda_1(A, F) > 0$ . El límite  $s_n$  satisface las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} s_{n+1} - 2s_n + s_{n-1} &= A(g(s_n - u_n(A, F)) - g(u_n(A, F))) \\ &\quad \sum_n s_n^2 < \infty, \quad |s_n| \leq V_0 \\ \sum_n (s_{n+1} - s_n)^2 + A \sum_n (G(s_n + u_n(A, F)) - G(u_n(A, F))) \\ &\quad - A \sum_n g(u_n(A, F))s_n = C(\infty) \leq C(0) \end{aligned}$$

Obviamente  $s_n = 0$  es una solución con  $C(\infty) = 0$ . Multiplicando por  $s_n$  y sumando:

$$\begin{aligned} \lambda_1(A, F) \sum_n s_n^2 &\leq \sum_n (s_{n+1} - s_n)^2 + Ag'(u_n(A, F))s_n^2 = \\ &\quad -\frac{A}{2} \sum_n g''(\xi_n)s_n^3 \leq \frac{AMV_0}{2} \sum_n s_n^2 \end{aligned}$$

Esta desigualdad implica que  $s_n = 0$  bajo la condición  $V_0 \leq \frac{2\lambda_1(A, F)}{MA}$ ,  $M = \text{Max}|g''|$ .

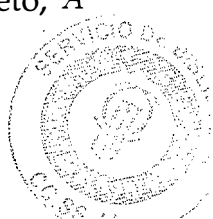
Regresando a las variables de partida, vemos que  $u_n(t)$  tiende a  $u_n(A, F)$  cuando  $t \rightarrow \infty$  siempre y cuando los datos iniciales satisfagan:

$$\begin{aligned} V_0 = \text{Max} |u_n^0 - u_n(A, F)| &\leq \frac{2\lambda_1(A, F)}{MA} \\ \frac{\epsilon}{2} \sum_n |u_n^1|^2 + \sum_n |u_{n+1}^0 - u_n(A, F)|^2 + A \sum_n (V(u_n^1 + u_n(A, F)) - V(u_n(A, F))) \\ &\quad - A \sum_n g(u_n(A, F))u_n^1 < V_0^3 \frac{MA}{12} \end{aligned}$$

### 3.7 Coexistencia de frentes viajeros y estacionarios

En la sección 3.2 hemos obtenido evidencia numérica de la existencia de soluciones de tipo frente viajero que coexisten con soluciones estacionarias estables para  $F \in (F_{cd}(A), F_{ce}(A))$ , con  $\epsilon$  suficientemente grande.

Denotamos por  $u_n(F/A)$  las soluciones estables estacionarias de (4.1) y fijamos  $F \in (F_{cd}(A), F_{ce}(A))$  en la región de coexistencia. Nos situamos en el límite discreto,  $A$



grande, de forma que la dinámica del sistema se puede entender a partir de las ecuaciones reducidas del 'punto activo'  $u_0$ , el único punto en la zona de transición de un estado constante a otro. Las simulaciones numéricas de la dinámica de (4.1) partiendo de datos iniciales  $u'_n(0) = 0, \forall n$  y  $u_n(0)$  con la estructura  $u_n(0) = U_1(F/A)$  para  $n < 0$ ,  $u_n(0) = U_3(F/A)$  para  $n > 0$ ,  $u_0(0) = u_0 \in (U_1(F/A), u_0(F_c(A)/A))$  indican que estas configuraciones evolucionan a la solución estacionaria  $u_n(F/A)$  si  $u_0(0)$  está por encima de un cierto valor crítico  $u_0(\epsilon, F)$  y a una onda viajera con perfil no monótono (oscila durante un tiempo en torno a  $U_3(F/A)$ ) si  $u_0(0)$  está por debajo de ese valor crítico.

Observamos que  $u_n(t)$  encuentra próximo a  $U_1(F/A)$  (resp.  $U_3(F/A)$ ) para  $n < 0$  (resp.  $n > 0$ ) durante un intervalo de tiempo y esto permite reducir el estudio del sistema infinito en ese intervalo al estudio de una sola ecuación:

$$\epsilon u''_0 + u'_0 = -2u_0 - Ag(u_0) + F + U_1(F/A) + U_3(F/A)u_0(0) = u_0, \quad u'_0(0) = u_1 \quad (3.51)$$

En la figura 3.14 dibujamos el plano de fases asociado a la ecuación (3.51) para  $g(u) = \sin(u)$ .

El segundo miembro tiene tres ceros (dos estables y uno inestable) para  $F < F_{c_1}$ , un cero estable para  $F > F_{c_1}$ . Uno de los ceros estables coincide con el inestable para  $F = F_{c_1}$ . En una dinámica con  $\epsilon = 0$ , las trayectorias próximas al primer cero estable  $z_1(F/A)$  del segundo miembro tienden a él para  $F < F_{c_1}$ . Para  $\epsilon > 0$ , se tiene un nuevo valor crítico  $F_{c_2}$ , tal que datos próximos a  $(z_1(F/A), 0)$  pueden evolucionar al otro cero estable  $(z_3(F/A), 0)$  para  $F \in (F_{c_2}, F_{c_1})$ . Observamos que para  $u_1 \sim 0$  y  $u_0 \in (U_1(F/A), u_0(F_c(A)/A))$ , existe un rango de  $u_0$  tal que las trayectorias que parten de  $(u_0, u_1)$  terminan en el primer cero estable y otro rango de  $u_0$  tal que las trayectorias terminan en el segundo cero estable. La figura 3.15 muestra la forma de estas trayectorias. La que entra en  $z_3(F/A)$  define prácticamente el perfil de la onda viajera.

Este fenómeno se puede explicar como sigue. La figura 3.16 representa el potencial asociado a  $h(u) = 2u_0 + Ag(u_0) - F - U_1(F/A) - U_3(F/A)$ . Si partimos de un estado próximo al primer mínimo y su energía es pequeña, el sistema (3.51) evoluciona hacia el mínimo gracias al término de fricción. Si la energía del estado inicial está por encima de un valor crítico, la fricción no es suficiente para disipar la energía cinética antes de llegar al máximo del potencial y la trayectoria alcanza el máximo con velocidad

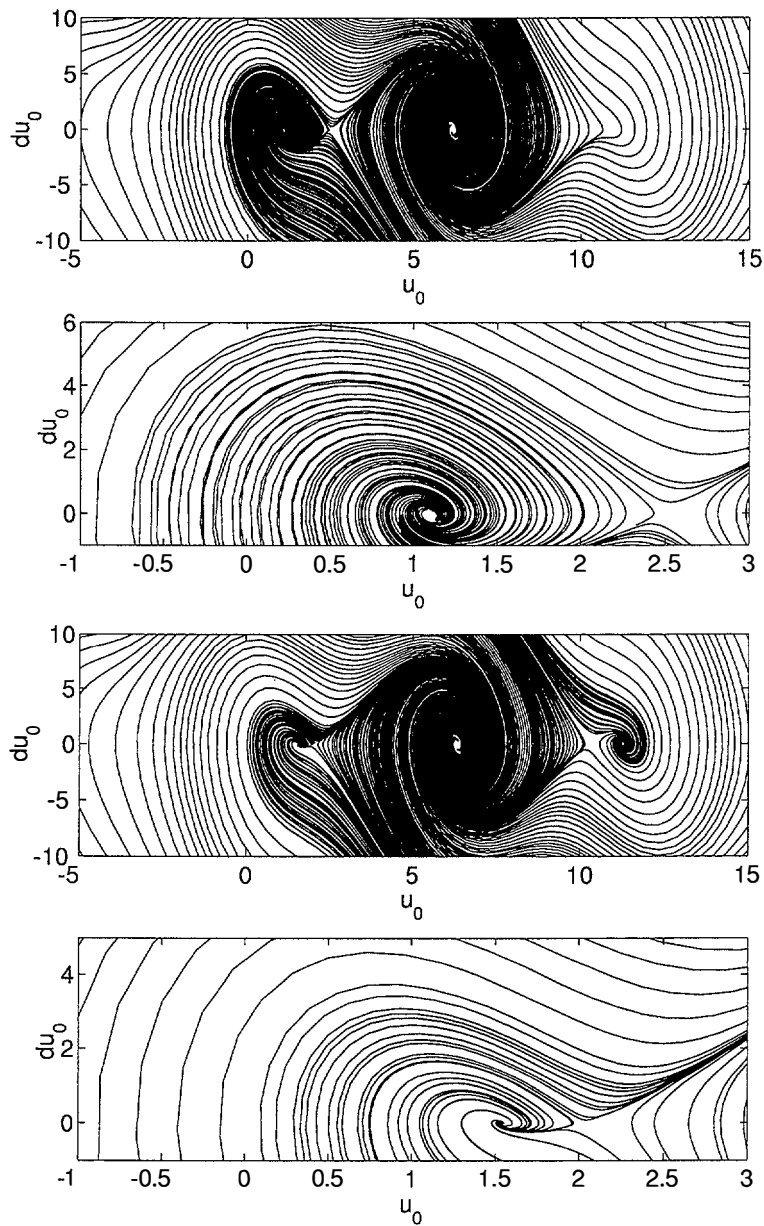


Figura 3.14: Plano de fases asociado a (3.51) para  $A = 10$ ,  $\epsilon = 0.5$ ,  $g(u) = \sin(u)$ : (a)  $F = 4$ , (b)  $F = 4$  zoom cerca del primer cero, (c)  $F=5.6$ , (d)  $F=5.6$  zoom cerca del primer cero.

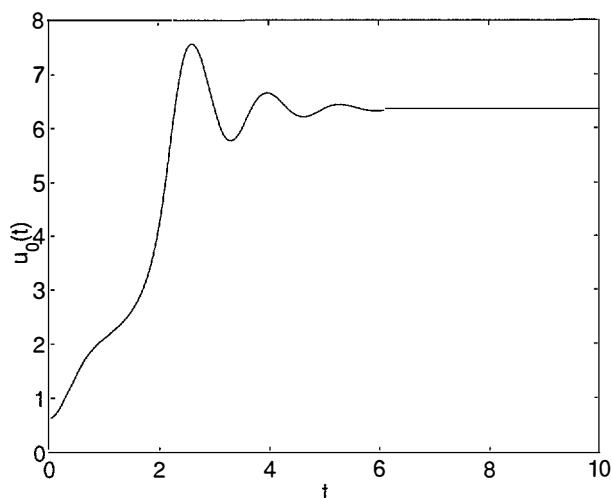


Figura 3.15: Trayectorias que entran en los dos ceros estables para  $A = 10$ ,  $F = 5.6$ .

suficiente para caer en el dominio de atracción del segundo mínimo, oscilando hasta llegar a él.

El mecanismo que hemos descrito se repite sucesivamente en el sistema infinito, pues cuando  $u_0$  ha llegado a  $U_3(F/A)$ ,  $u_{-1}$  toma el lugar de  $u_0$  y así sucesivamente, véase la figura 3.17 La velocidad del frente es esencialmente el recíproco del tiempo que tarda  $u_0(t)$  en saltar de  $z_1(F/A)$  a  $z_3(F/A)$ .

### 3.8 Conclusiones

Hemos estudiado el fenómeno de anclaje propagación y la existencia y estabilidad de soluciones de tipo frente en cadenas de osciladores amortiguados difusivamente sujetos a un potencial y a una fuerza externa  $F$ . Los resultados numéricos muestran que a medida que crece el parámetro de difusión nos vamos alejando del caso sobramortiguado y van creciendo la magnitud de las oscilaciones en la región de transición entre las constantes hasta llegar a valores donde es difícil distinguir si las estructuras observadas son ondas viajeras. También se han observado, a diferencia del caso sobramortiguado, la coexistencia de frentes estacionarios y ondas viajeras para el mismo valor de parámetro. Este fenómeno de coexistencia tiene una interpretación física en

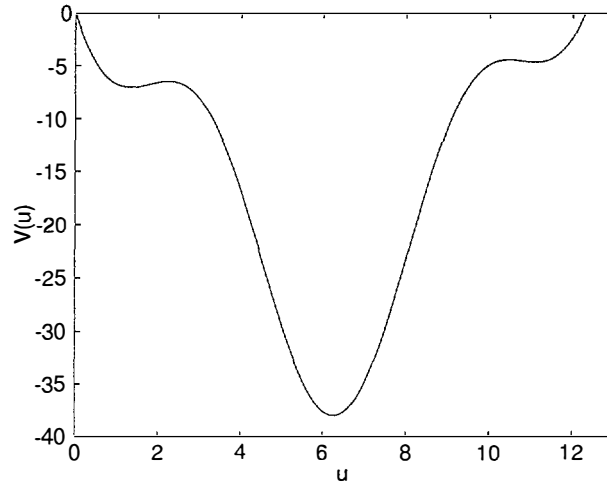


Figura 3.16: Potencial asociado a  $h(u) = 2u_0 + Ag(u_0) - F - U_1(F/A) - U_3(F/A)$ ,  $F = 5.6$ .

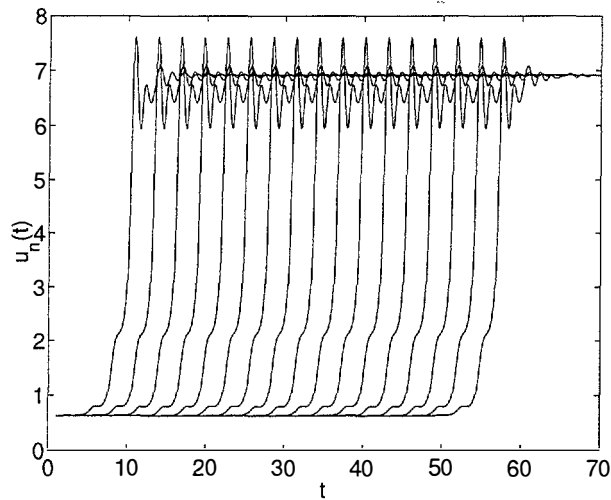


Figura 3.17: Perfiles de las trayectorias  $u_n(t)$  para  $A = 10$  y  $F = 5.9$ .

términos de tensiones de Peierls estáticas y dinámicas. El análisis asintótico nos proporciona aproximaciones para la velocidad de los frentes en los límites  $\epsilon$  pequeño y  $\epsilon$  grande. Para  $\epsilon$  pequeño obtenemos resultados de estabilidad para las ondas viajeras y estacionarias mediante ecuaciones integrales. Para  $\epsilon$  arbitrario obtenemos resultados de estabilidad para frentes estacionarios usando métodos de energía.



# Capítulo 4

## Frentes de onda en sistemas discretos conservativos

### 4.1 Introducción

En el capítulo anterior hemos visto que la dinámica del modelo amortiguado (4.1):

$$\epsilon u_n'' + \alpha u_n' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F \quad (4.1)$$

se reduce esencialmente a la del modelo sobreamortiguado (4.2):

$$\alpha u_n' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F \quad (4.2)$$

cuando los efectos inerciales son suficientemente pequeños. Caso contrario, estaremos próximos a la dinámica sin fricción, descrita por:

$$\epsilon u_n'' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F \quad (4.3)$$

El estudio la dinámica de frentes en (4.3) resulta complejo debido a una serie de diferencias fundamentales con los modelos amortiguados:

- En el caso sobreamortiguado se dispone de numerosos resultados de existencia de soluciones de tipo frente viajero  $u_n(t) = u(n - ct)$  para no linealidades biestables  $g(s)$  bastante generales. Para el problema conservativo (4.3) se ha probado la

existencia de ondas viajeras (solitones, trenes de onda periódicos...) para distintos términos fuente correspondientes típicamente a potenciales supercuadráticos o convexos [33], [41], [27]. Sin embargo, el único resultado de existencia de un frente viajero para una no linealidad biestable parece ser un ejemplo explícito construido por [30]. Estos frentes toman la forma  $u_n(t) = \tanh(\mu(n - st))$  y son solución de:

$$u_n'' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - g(u_n) \quad (4.4)$$

con

$$g(u) = 2(s^2\mu^2 - c)u - 2s^2\mu^2u^3 + \frac{2cu}{\cosh(\mu)^2 - u^2 \sinh(\mu)^2} \quad (4.5)$$

No se conocen demostraciones de existencia para fuentes biestables generales. Es más, simulaciones numéricas como las llevadas a cabo por Kruskal y Peyrad [67] parecen sugerir la no existencia de frentes viajeros para no linealidades de tipo seno debido a la generación de trenes de onda periódicos en las colas que proporcionarían un mecanismo para llevar energía al infinito y frenar el avance del frente. Sin embargo, el análisis de modelos con potenciales cuadráticos a trozos llevado a cabo por Atkinson y Cabrera en [5] sugiere la existencia de varias ramas de ondas viajeras por encima de una velocidad y una fuerza críticas. En el capítulo anterior hemos visto que los modelos amortiguados poseen soluciones de tipo frente viajero con regiones oscilatorias si el parámetro  $F$  supera un valor crítico. Estas oscilaciones decaen exponencialmente a medida que nos alejamos de la región de transición entre constantes, si bien aumentan de magnitud al incrementar el coeficiente del término de inercia. Se trata de dilucidar si en el límite  $\epsilon \rightarrow 0$  estas familias de frentes viajeros se mantienen.

- Una segunda diferencia notable proviene de fenómenos de coexistencia y propagación. Tanto en el caso sobreamortiguado como en el caso amortiguado considerado en el Capítulo anterior, la coexistencia de frentes propagándose en direcciones opuestas está excluida. Sin embargo, de existir frentes viajeros  $u(n - ct)$  con velocidad  $c$  solución de (4.3), está claro que  $u(n + ct)$  son soluciones de la

misma ecuación propagándose con velocidad  $-c$ . En el ejemplo explícito construido por Flach et al en [30] (por ejemplo para parámetros  $\mu = 1, c = 1, s = 0.5$ ), coexisten frentes propagándose en sentidos opuestos para el mismo valor de  $F$ . Es más, en este ejemplo particular se tiene  $F = 0$  y los frentes viajeros coexisten con soluciones estacionarias discretas. La coexistencia de frentes viajeros y anclados para el modelo sobreamortiguado es imposible debido al principio del máximo [22]. El estudio que hemos realizado en el capítulo anterior muestra que pueden consistir frentes viajeros y estacionarios para ciertos valores de  $F$  a medida que  $\epsilon$  crece. Tanto en este caso como en el caso conservativo (4.3) se tiene otro parámetro de control además del campo externo  $F$ : la energía cinética. Esto da pie a la presencia de distintos comportamientos para el mismo  $F$ . Según los datos iniciales estén próximos a una configuración estacionaria estable o a una configuración viajera estable, observaremos un comportamiento u otro.

- Una tercera diferencia se manifiesta a nivel de la simulación numérica de frentes. Tanto en (4.1) como en el sistema sobreamortiguado (4.2) se generan con facilidad soluciones de tipo frente, estacionarias o viajeras a partir de datos escalonados. La resolución numérica se lleva a cabo mediante métodos Runge-Kutta estándar de paso variable, sin problemas de estabilidad o patologías numéricas. El sistema (4.3) tiene estructura hamiltoniana, conserva la energía y sus soluciones suelen presentar fenómenos oscilatorios más o menos complejos. La discretización numérica en tiempo puede llevar aparejadas patologías como caos numérico o efectos dispersivos totalmente espúreos [2, 3]. Por otra parte, las simulaciones numéricas precisan la introducción de fronteras artificiales para reducir el problema a dimensión finita. Una elección inadecuada del truncamiento puede producir reflexiones espúreas.

El capítulo está organizado como sigue. Las dos primeras secciones se ocupan fundamentalmente de la posible coexistencia de frentes estacionarios y viajeros para  $F = 0$ . En la sección 4.2 estudiamos las modulaciones de las colas constantes en el caso de la no linealidad de tipo seno. El objetivo de esta sección es intentar identificar qué rasgos de la no linealidad seno influyen en el diferente comportamiento observa-

do en las simulaciones numéricas de la dinámica de frentes en el modelo de Frenkel-Kontorova conservativo y en el ejemplo (4.5) construido en [30]. Las conclusiones de esta sección apuntan hacia la ausencia de términos cuadráticos en la linealización del seno en torno a  $0$  y  $2\pi$ . En la sección 4.3 obtenemos algunas condiciones necesarias para la existencia de frentes viajeros en problemas conservativos. Estas conclusiones indican que la existencia de frentes viajeros para no linealidades  $g$  impares y con  $F = 0$  no es un fenómeno genérico sino más bien accidental. En las secciones siguientes nos ocupamos principalmente de la construcción de frentes viajeros por encima de umbrales críticos para  $F$ . En las secciones 4.3 a 4.5 construimos soluciones explícitas de tipo frente y tren de ondas para diversas no linealidades en un intento de aclarar cuándo y por qué aparecen y desaparecen las familias de frentes estacionarios y viajeros. Utilizamos dos técnicas complementarias: análisis de Fourier y métodos inversos.

## 4.2 Análisis de las modulaciones en el modelo de Frenkel-Kontorova conservativo

Es bien sabido que la ecuación de Sine Gordon  $u_{tt} - u_{xx} = -\sin(u)$  posee soluciones tipo frente viajero de la forma  $u(x-ct)$ , donde  $u$  es una solución de  $(c^2-1)u_{zz} = -\sin(u)$  que crece de  $0$  a  $2\pi$ , para cualquier  $|c| < 1$ . La resolución numérica de

$$\begin{aligned} u_n'' &= u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - A \sin(u_n) \\ u_n(0) &= u(n), \quad u_n'(0) = -cu'(n) \end{aligned} \quad (4.6)$$

eligiendo como datos iniciales kinks continuos de diferentes velocidades muestra la disminución de la velocidad de los perfiles viajeros y la generación de un tren de ondas periódico en la cola del kink, de efectos presumiblemente dispersivos. Al resolver numéricamente el modelo (4.5) propuesto en [30] usando como datos iniciales sus soluciones de tipo frente explícitas, se observa un frente viajero, véase la Figura 4.1. Se aprecian oscilaciones de muy pequeña magnitud en las colas pero el frente no parece frenarse. Las simulaciones numéricas en ambos casos las hemos llevado a cabo con distintos esquemas numéricos: métodos Runge Kutta Fehlberg 45 de paso variable,

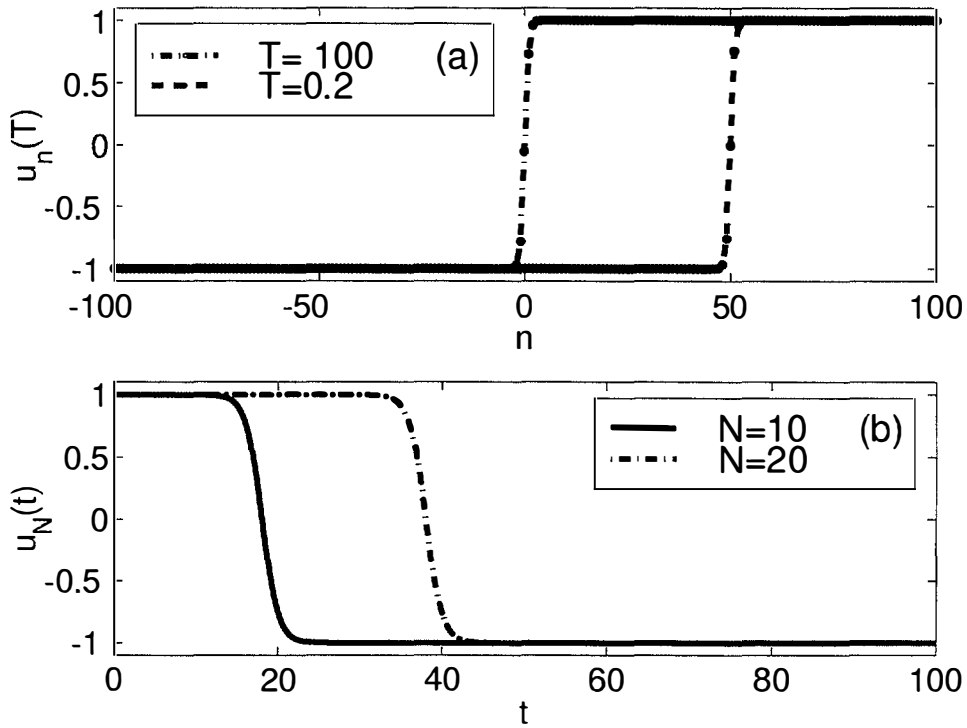


Figura 4.1: (a) Propagación sin distorsión. (b) Perfil del frente.

el algoritmo Verlet con paso constante (un método Runge Kutta Nystrom simpléctico de orden dos) e incluso métodos simplécticos de paso constante y orden 4. Todos ellos han proporcionado los mismos resultados, con lo cual no parece posible atribuir el diferente comportamiento observado a la discretización numérica empleada.

Vamos a estudiar la generación de oscilaciones en torno a los ceros estables. Linealizamos en torno a  $c$  tal que  $g(c) = \sin(c) = 0$ ,  $g'(c) = \cos(c) > 0$ :

$$v_n'' = v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1} - Ag'(c)v_n$$

Buscando soluciones en forma de ondas planas  $v_n = ae^{i(\omega t - kn)}$  y obtenemos la relación de dispersión:

$$\omega(k) = \pm \sqrt{4 \sin^2(k/2) + Ag'(c)} \quad (4.7)$$

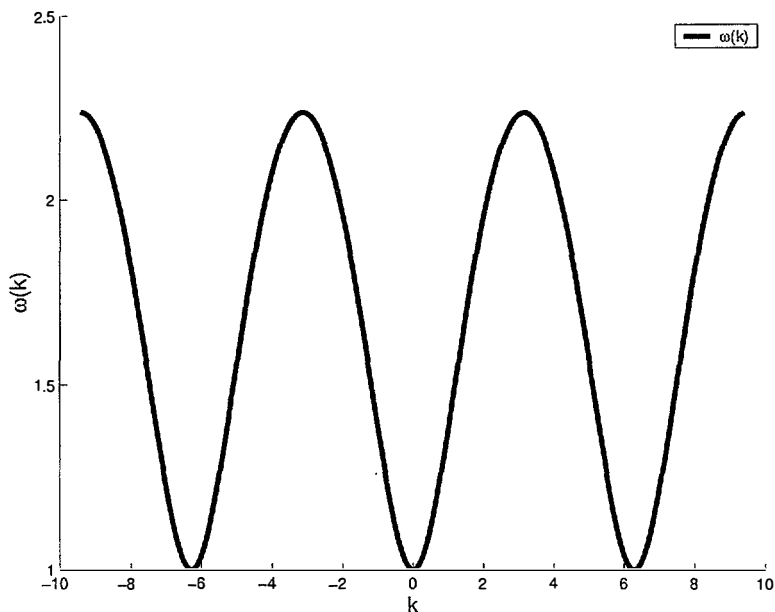


Figura 4.2: Ley de dispersión (4.7) cuando  $c = 0$  y  $g(s) = \sin(s)$ .

Observamos que la discretización en espacio conduce a una ley de dispersión periódica, de periodo  $2\pi$ .  $\omega'(k)$  se anula en  $k = n\pi$  y  $\omega''(k)$  en  $\pi/2 + n\pi$ . Se alternan intervalos de convexidad y concavidad de forma periódica. Para  $k \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ ,  $\omega'' > 0$  y se tienen ondas estables [79], mientras que si  $k \in [\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}]$  son inestables.

Vamos a incluir efectos débilmente no lineales en este análisis de estabilidad. Introducimos nuevas variables:

$$\begin{aligned} u_n(t) &= U(\theta, X, T) \\ X = \epsilon n, \quad T = \epsilon t, \quad \theta &= \frac{\Theta(X, T)}{\epsilon} \end{aligned} \quad (4.8)$$

de modo que

$$\begin{aligned} u_{n\pm 1} &= U\left(\frac{\Theta(X \pm \epsilon, T)}{\epsilon}, X \pm \epsilon, T\right) \sim U\left(\theta \pm k + \frac{\epsilon}{2}k_X, X \pm \epsilon, T\right) \\ &\sim U(\theta \pm k, X, T) + \epsilon\left(\frac{k_X}{2}U_\theta(\theta \pm k, X, T) \pm U_X(\theta \pm k, X, T)\right) \end{aligned}$$

Desarrollando  $U$  en potencias de  $\epsilon$  resulta  $U = U^0 + \epsilon U^1 + O(\epsilon^2)$  y la aproximación

anterior se transforma en:

$$u_{n\pm 1} = U^0(\theta \pm k, X, T) + \epsilon(U^1(\theta \pm k, X, T) + \frac{k_X}{2}U_\theta^0(\theta \pm k, X, T) \pm U_X^0(\theta \pm k, X, T)) + O(\epsilon^2)$$

Las derivadas de  $u_n$  se reescriben como:

$$\begin{aligned} u'_n &= \Theta_T U_\theta + \epsilon U_T = -\omega U_\theta + \epsilon U_T \\ u''_n &= \omega^2 U_{\theta,\theta} + \epsilon(\Theta_{T,T} U_\theta + 2\Theta_T U_{\theta T}) + O(\epsilon^2) \\ &= \omega^2 U_{\theta,\theta} + \epsilon(\omega_T U_\theta + 2\omega U_{\theta T}) + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

Insertando estos desarrollos en la ecuación (4.6) obtenemos:

$$\begin{aligned} \omega^2 U_{\theta,\theta}^0 - U^0(\theta + k, X, T) - U^0(\theta - k, X, T) + 2U^0(\theta, X, T) + Ag(U^0) &= 0 \quad (4.9) \\ \omega^2 U_{\theta,\theta}^1 - U^1(\theta + k, X, T) - U^1(\theta - k, X, T) + 2U^1(\theta, X, T) + Ag'(U^0)U^1 &= \\ \omega_T U_\theta^0 + 2\omega U_{\theta,T}^0 + \frac{k_X}{2}(U_\theta^0(\theta + k, X, T) + U_\theta^0(\theta - k, X, T)) + & \\ U_X^0(\theta + k, X, T) - U_X^0(\theta - k, X, T) & \quad (4.10) \end{aligned}$$

La ecuación (4.9) proporciona una corrección no lineal a la relación de dispersión. Una vez calculado  $U^0$ , la alternativa de Fredholm para  $U^1$  implica que:

$$\frac{\partial}{\partial T} \left( \omega \int_{-\pi}^{\pi} \frac{U_\theta^2}{2\pi} \right) + \frac{k_X}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{U_\theta^0}{2\pi} (U_X^0(\theta + k, X, T) - U_X^0(\theta - k, X, T)) = 0 \quad (4.11)$$

y de esta relación obtendremos la amplitud.

Para determinar la relación de dispersión buscamos soluciones aproximadas de (4.9) como superposición de ondas. Para una no linealidad  $g(u) = \sin(u)$  su desarrollo de Taylor cerca de cero es  $g(u) = \lambda u + \mu u^3$ , así que podemos aproximar (4.9) por:

$$\omega^2 u_{\theta,\theta} - u(\theta + k) + 2u(\theta) - u(\theta - k) + \lambda u + \mu u^3 = 0 \quad (4.12)$$

Buscamos una solución aproximada de la forma  $u = \sum_{j=1}^{\infty} a_j \cos(j\theta)$ . Insertando este desarrollo en (4.12), obtenemos para los primeros términos  $a_2 = 0$  y

$$\begin{aligned} (\lambda - \omega^2 + 4 \sin(\frac{k}{2})^2) a_1 + \frac{3\mu}{4} (a_1^3 + a_1^2 a_3 + 2a_1 a_3^2) &= 0 \\ (\lambda - 9\omega^2 + 4 \sin(\frac{3k}{2})^2) a_1 + \frac{\mu}{4} (a_1^3 + 6a_1^2 a_3 + 3a_3^3) &= 0 \end{aligned}$$

Cuando  $a_3 \ll a_1 \ll 1$ , se obtiene la relación de dispersión:

$$\omega^2 = \lambda + 4 \sin\left(\frac{k}{2}\right)^2 + \frac{3\mu}{2} a_1^2 \omega_0(k) + a^2 \omega_1(k) \quad (4.13)$$

y la relación entre  $a_1, a_3$ :

$$a_3 = \frac{\mu a_1^3 / 16}{2\lambda + 9 \sin\left(\frac{k}{2}\right)^2 - \sin\left(\frac{3k}{2}\right)^2} \quad (4.14)$$

En el límite  $k \rightarrow 0$ , recuperamos las relaciones obtenidas por Whitham [79]. Hemos obtenido para  $U^0$  la expresión aproximada:

$$U^0 = a \cos(\theta) + \frac{\mu}{16} \frac{a^3 \cos(3\theta)}{2\lambda + 9 \sin\left(\frac{k}{2}\right)^2 - \sin\left(\frac{3k}{2}\right)^2} + O(a^3) \quad (4.15)$$

La amplitud  $a$  se calcula a partir de (4.10). Despreciando los términos de orden  $a^2$ , obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{\omega a^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial X} \left( \frac{a^2}{2} \sin(k) \right) = 0 \quad (4.16)$$

Utilizando la relación de dispersión (4.13) y la condición de consistencia (garantiza la existencia de una fase)  $k_t + \omega_X = 0$  nos quedan las ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{a^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial X} \left( \omega'_0(k) \frac{a^2}{2} \right) &= 0 \\ \omega'_0(k) &= \frac{\sin(k)}{\sqrt{\lambda + 4 \sin\left(\frac{k}{2}\right)^2}} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Siguiendo a Whitham [79], las soluciones aproximadas  $U^0$  construidas con las relaciones (4.15), (4.13), (4.17) son estables si  $\omega''_0(k) > 0$  e inestables si  $\omega''_0(k) < 0$ . En nuestro caso, son estables para  $k$  pequeño. La derivada  $\frac{\partial \omega}{\partial k}$  nos proporciona la velocidad de grupo, es decir nos dice a que velocidad se mueven las ondas de número de onda  $k$ . A partir de aquí se puede estudiar la dispersión de la energía.



El análisis que acabamos de realizar, nos conduce a una diferencia elemental entre la no linealidad  $g(u) = \sin(u)$  y la no linealidad  $g(u)$  (4.5) utilizada por Flach et al [30] para construir frentes viajeros explícitos: Los ceros estables de la no linealidad (4.5) están muy próximos a dos singularidades y los términos cuadráticos en el desarrollo de Taylor cerca de los ceros, no son nulos como en el caso del seno. La aproximación utilizada al calcular  $U^0$  no puede ser  $g(u) = \lambda u + \mu u^3$  como en (4.12) si no que ha de ser de la forma  $g(u) = \lambda u + \mu u^2$ . Ahora bien, al buscar soluciones de la forma  $u = \sum a_j \cos(j\theta)$  para

$$\omega^2 u_{\theta,\theta} - u(\theta + k) + 2u(\theta) - u(\theta - k) + \lambda u + \mu u^2 = 0$$

forzosamente ha de aparecer un término constante  $a_0$  y esto no tiene sentido pues queremos que  $u$  oscile en torno a cero y no a una constante dada.

En conclusión, las no linealidades con términos cuadráticos no permiten el tipo de análisis débilmente no lineal que hemos aplicado a los trenes de onda periodicos en el caso del seno. En el caso particular de (4.5), se da además la circunstancia de que sólo se puede linealizar muy cerca de los ceros pues las derivadas segundas son muy grandes debido a la cercanía de la singularidad. Por tanto, la estabilidad lineal de las ondas sólo se aplica a ondas de amplitud muy muy pequeña. La combinación de estas dos circunstancias explica las diferencias observadas al simular numéricamente frentes viajeros en ambos casos.

### 4.3 Condiciones necesarias para la existencia de frentes de onda

Las soluciones de tipo frente viajero  $u_n(t) = v(n - ct)$  de (4.1) corresponden a velocidades  $c$  y perfiles regulares  $v$  que son solución de:

$$c^2 \epsilon v_{zz}(z) - c \alpha v_z(z) = v(z + 1) - 2v(z) + v(z - 1) - Ag(v(z)) + F \quad (4.18)$$

Suponiendo que  $v(z) \rightarrow U_1(F/A)$ ,  $v_z(z) \rightarrow 0$  si  $z \rightarrow -\infty$  y  $v(z) \rightarrow U_3(F/A)$ ,  $v_z(z) \rightarrow 0$  si  $z \rightarrow \infty$  obtenemos algunas identidades integrales que proporcionan condiciones necesarias para la existencia de  $c$  y  $v$ .

En primer lugar, multiplicamos (4.18) por  $v_z$  e integramos entre  $-\infty$  y  $\infty$ . Tras integrar por partes y usar las condiciones en el infinito, obtenemos:

$$-c\alpha \int_{-\infty}^{\infty} v_z^2 dz = G(U_3(F/A)) - G(U_1(F/A)) \quad (4.19)$$

siendo  $G$  un potencial para  $-Ag + F$ :  $G' = -Ag + F$ . En el caso en que  $G(U_3(F/A)) = G(U_1(F/A))$  se tiene necesariamente  $\alpha = 0$  ó  $c = 0$ . Deducimos que:

- Para  $\epsilon \neq 0$ , sólo pueden existir frentes viajeros  $\mathcal{C}^1$  si  $\alpha = 0$ . Es decir, en presencia de amortiguación no existen frentes viajeros para  $g$  y  $F$  tales que  $G(U_3(F/A)) = G(U_1(F/A))$ . Tal es el caso si  $F = 0$  y  $g$  es impar en torno a  $U_2(0)$ .
- Sólo pueden existir frentes estacionarios regulares (continuos) cuando  $G(U_3(F/A)) = G(U_1(F/A))$ . Si  $g$  es impar, no hay frentes estacionarios regulares para  $F \neq 0$ : resulta necesario que  $F = 0$ .

Si integramos (4.18) sobre  $(-\infty, \infty)$  obtenemos:

$$-c\alpha(U_3(F/A)) - U_1(F/A) = \int_{-\infty}^{\infty} (-Ag(v(z)) + F) dz \quad (4.20)$$

Esta identidad implica que en ausencia de disipación, es decir, si  $\alpha = 0$ , sólo pueden existir frentes viajeros con perfiles  $v$  tales la integral del segundo miembro se anule. Cuando  $F = 0$  y  $g$  es impar, esto ocurre para perfiles impares respecto a  $U_2(0)$ . En general, parece poco probable que se puedan encontrar perfiles que anulen la integral en otras condiciones.

Reinterpretando las observaciones que acabamos de hacer en el contexto de este capítulo, conjeturamos que para problemas conservativos con no linealidades tipo  $\sin(u)$  o  $u(u^2 - 1)$  no van a existir soluciones de tipo frente que tiendan a dos ceros estables en  $\pm\infty$  cuando  $F \neq 0$ , ni siquiera permitiendo oscilar a los perfiles. No obtenemos ninguna indicación sobre qué puede ocurrir para  $F = 0$  aparte de las conclusiones que se deducen del análisis de las modulaciones llevado a cabo en la sección anterior. Sí observamos que un hipotético frente para  $F = 0$  no puede obtenerse como límite de frentes para sistemas amortiguados con  $\alpha \rightarrow 0$ , pues no existen tales frentes. La existencia de frentes en problemas conservativos parece un fenómeno aislado, que no se continuaría para  $F \neq 0$  ni  $\alpha \neq 0$ . En la figura Fig. 4.3 mostramos la desaparición de los frentes viajeros para  $F > F_c(A)$  y  $g(u) = u(u^2 - 1)$  a medida que  $\alpha \rightarrow 0$ , con  $\epsilon = 1$  fijo.

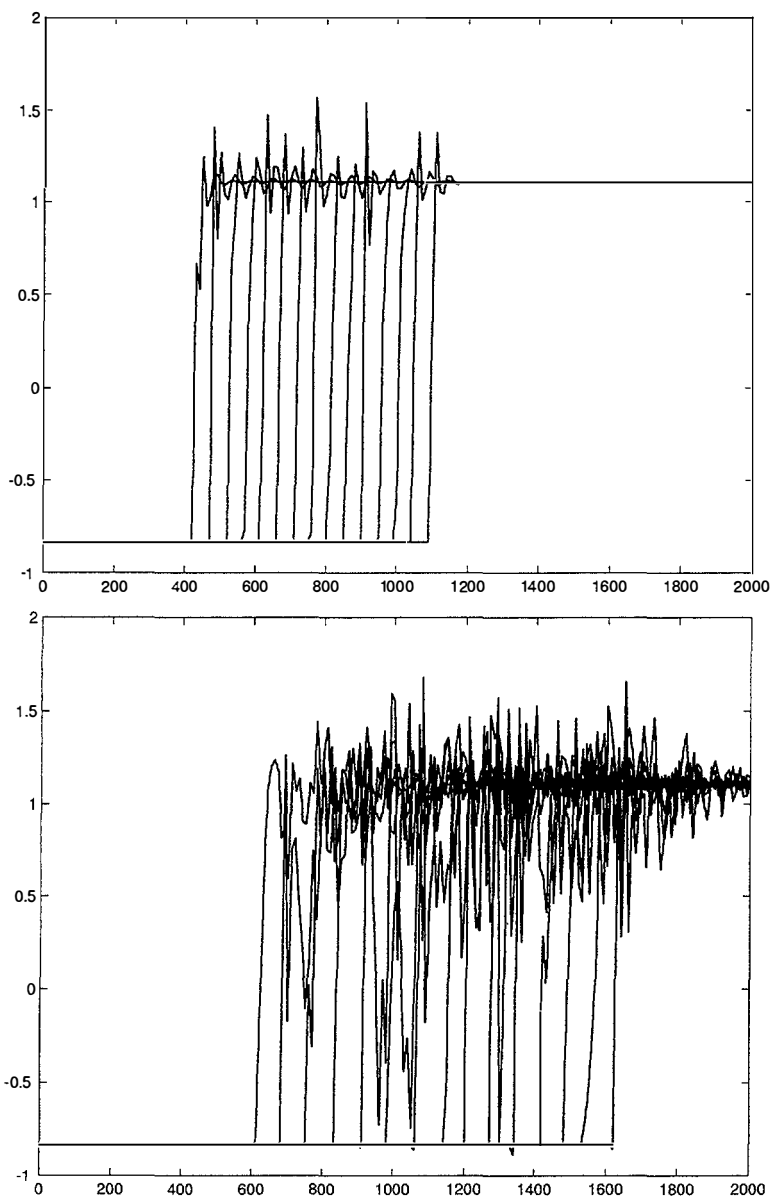


Figura 4.3: (a)  $\alpha = 0.1$  (b)  $\alpha = 0.01$ . La escala temporal que hemos usado no es suficientemente fina para apreciar la forma precisa de las oscilaciones de la parte superior, la hemos elegido para estudiar si la velocidad se mantiene constante o disminuye con el tiempo. A medida que  $\alpha$  decrece la amplitud y frecuencia de las oscilaciones de la cola superior aumenta hasta el punto de que es difícil dilucidar si los perfiles se repiten u oscilan de forma variable. Sin embargo, parecen avanzar todos ellos a la misma velocidad.

## 4.4 Construcción de soluciones explícitas

Consideramos en esta sección el problema de construir soluciones explícitas de los modelos (4.1), (4.2) y (4.3).

### 4.4.1 Soluciones estacionarias

Las soluciones estacionarias de los tres modelos son comunes. En principio, las soluciones estacionarias son sucesiones  $u_n$  pero puede ocurrir que correspondan a un perfil regular  $u(x)$  que sea solución del problema estacionario:

$$\begin{aligned} u(x+1) - 2u(x) + u(x-1) &= Ag(u_n) - F \\ u(-\infty) &= u_1(F/A), \quad u(\infty) = U_3(F/A) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Mantemos la notación del capítulo 2 de modo que  $U_1(F/A)$ ,  $U_3(F/A)$  son los dos ceros estables del término no lineal. No es sencillo dar una caracterización de cuándo (4.21) posee soluciones diferenciables, o al menos continuas pues la ecuación no involucra derivadas de la incógnita. En [22] se estableció una condición necesaria para la existencia de soluciones continuas: la integral del término fuente entre los dos ceros estables ha de ser nula. Si  $g$  es impar respecto a  $U_2(0)$ , esta condición se cumple únicamente cuando  $F = 0$  y, por tanto, sólo pueden existir soluciones estacionarias regulares si  $F = 0$ .

Hobart [36] propuso un criterio para determinar si dada una no linealidad cúbica impar  $g$  existen soluciones estacionarias regulares de (4.21) con  $F = 0$ . En este caso,  $U_2(0) = 0$  y  $U_1(0) = -U_3(0)$ . Para cualquier  $x \in (U_1(0), U_3(0))$ , podemos calcular numéricamente un único valor  $y(x)$  tal que la sucesión  $u_n$  definida por  $u_0 = x$ ,  $u_1 = y(x)$  y  $u_n = 2u_{n-1} - u_{n-2} + g(u_{n-1})$ ,  $n > 1$  tiende a  $U_3(0)$  cuando  $n \rightarrow \infty$ . Hobart conjeturó que si la función  $y(x)$  satisface:

$$y^{-1}(x) = -y(-x), \quad y(x) - y(-x) = 2x + g(x), \quad (4.22)$$

para  $x \in (U_1(0), U_3(0))$ , entonces existen soluciones regulares de (4.21) para  $g$  con  $F = 0$ . Hobart conjeturó que para tales no linealidades  $g$  el intervalo de anclaje se reducía

a un punto  $F = 0$  y que para todo  $F \neq 0$  existían soluciones de tipo frente viajero. En [17] se prueba esta afirmación para la dinámica sobreamortiguada (4.2).

Es sencillo construir ejemplos de no linealidades  $g(x)$  que verifican (4.22). Basta elegir un perfil impar y creciente  $u(x)$  tal que  $u(x) \rightarrow \pm a$  cuando  $x \rightarrow \pm\infty$  para algún  $a > 0$ . Definimos  $g(u(x)) = u(x + 1) - 2u(x) + u(x - 1)$  de modo que  $g(z) = u(u^{-1}(z) + 1) - 2z + u(u^{-1}(z) - 1)$  y  $y(z) = u(u^{-1}(z) + 1)$ . Eligiendo  $u(x) = \tanh(x)$ , obtenemos una fórmula explícita para  $g$ :  $g(z) = -2\gamma z(1 - z^2)/(1 - \gamma z^2)$  con  $\gamma = \tanh^2(1)$ . Nótese que esta estrategia funciona únicamente con perfiles monótonos crecientes.

Acabamos de ver que existen ejemplos de no linealidades para las que (4.21) posee soluciones regulares. Si embargo, el caso genérico es que las soluciones de (4.21) sean constantes a trozos. Esto se corresponde con el hecho de que las soluciones estacionarias de tipo frente de (4.1), (4.2) y (4.3) son genéricamente discretas y con la existencia genérica de intervalos de anclaje del parámetro de control  $F$ .

### 4.4.2 Soluciones de tipo onda viajera

Una estrategia parecida a la descrita en la sección anterior permite construir frentes explícitos en diversos sistemas disipativos y conservativos, como el ejemplo 4.5 mencionado en la introducción. Los perfiles de onda viajera obtenidos de esta forma son crecientes.

Consideremos un perfil regular, impar y creciente  $u(x)$  tal que  $u(x) \rightarrow \pm a$  cuando  $x \rightarrow \pm\infty$  para algún  $a > 0$ . Sabemos que

$$\begin{aligned} u(x + 1) - 2u(x) + u(x - 1) &= g_1(u(x)), \\ g_1(z) &= u(u^{-1}(z) + 1) - 2z + u(u^{-1}(z) - 1) \end{aligned}$$

donde  $g_1(z)$  es una función impar con ceros  $\pm a, 0$ ,  $g_1(z) > 0$  en  $(-a, 0)$ ,  $g_1(z) < 0$  en  $(0, a)$ . Al calcular  $u_{xx}$  se obtiene una función de estructura similar:

$$u_{xx} = f(x) = g_2(u(x)), \quad g_2(z) = f(u^{-1}(z))$$

Por tanto,

$$\epsilon c^2 u_{xx} - (u(x + 1) - 2u(x) + u(x - 1)) = \epsilon c^2 g_2(u(x)) - g_1(u(x)) = -g(u(x))$$

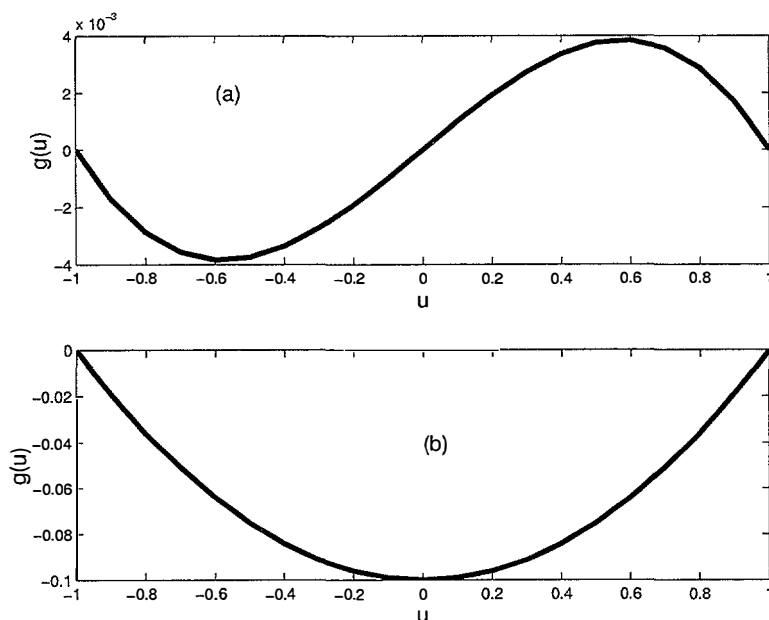


Figura 4.4: Término fuente  $g(u)$  dado por (4.24): (a)  $\alpha = 0, \epsilon = 1, c = 0.1$  (b)  $\alpha = 1, \epsilon = 0, c = 0.1$ . Nótese que al incluir un  $\alpha \neq 0$  se pierde la forma cúbica por tanto éste resultado sólo vale para el problema estacionario o el de evolución conservativo.

Si  $c$  es suficientemente pequeño  $g$  es una no linealidad 'cúbica'. Por ejemplo, en el caso  $u(x) = \tanh(x)$

$$g(u) = 2\epsilon c^2 u(1 - u^2) - 2\gamma u(1 - u^2)/(1 - \gamma u^2), \quad \gamma = \tanh^2(1) \quad (4.23)$$

Añadiendo fricción tenemos

$$\begin{aligned} \epsilon c^2 u_{xx} - \alpha c u_x - (u(x+1) - 2u(x) + u(x-1)) &= -g(u) \\ &= \epsilon c^2 u(1 - u^2) - \alpha c(1 - u^2) - 2\gamma u(1 - u^2)/(1 - \gamma u^2) \end{aligned} \quad (4.24)$$

En la figura 4.4 dibujamos la fuente  $g$  así obtenida para diversos valores de  $\alpha, \epsilon$  y  $c$ . Nótese que para  $\alpha \neq 0$  se pierde la simetría de  $g$ , e incluso el carácter cúbico, en concordancia con las observaciones de la sección 4.3 (4.18).

Con la técnica descrita en esta sección, podemos generar multitud de términos fuente  $g$  impares para los cuales  $u_n'' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - g(u_n)$  admite soluciones de tipo frente viajero. Si elegimos como perfil de partida el que define los kinks del

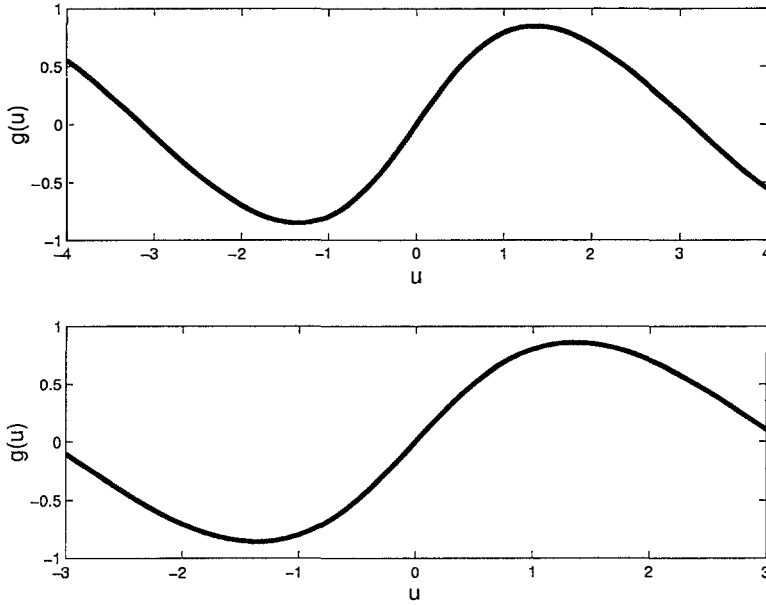


Figura 4.5: *Término fuente  $g(u)$  dado por (4.25): (a)  $A = 1, \epsilon = 1, c = 0.1$  (b)  $\alpha = 1, \epsilon = 0, c = 0.1$*

modelo de sine Gordon continuo en espacio  $u(x) = 4 \arctan(e^{\sqrt{A}x})$ , obtenemos modelos discretos para los cuales nos proporcionan soluciones de tipo frente viajero exactas:

$$\begin{aligned} \epsilon c^2 u_{xx} - (u(x+1) - 2u(x) + u(x-1)) &= -g(u) \\ &= \epsilon c^2 A \sin(u) + 2u - 4 \arctan(e^{\sqrt{A}} \tan(u/4)) - 4 \arctan(e^{-\sqrt{A}} \tan(u/4)) \end{aligned} \quad (4.25)$$

En la figura 4.5 dibujamos la fuente  $g$  así obtenida para diversos valores de  $A, \epsilon$  y  $c$ .

### 4.4.3 Trenes de onda periódicos viajeros

Buscamos soluciones de (4.3) de la forma  $u_n(t) = u(n - ct)$  con un perfil  $u(z)$  periódico de periodo 1:  $u(z+1) = u(z)$ . Obtenemos para el perfil la ecuación:

$$c^2 u_{zz} = -Ag(u) + F \quad (4.26)$$

Estudiemos en qué condiciones admite (4.26) soluciones de periodo 1. Consideramos dos funciones  $g$  modelo:  $g_1(u) = \sin(u)$  y  $g_2(u) = u(u^2 - 1)$ . La existencia de soluciones periódicas para (4.26) se deduce de la gráfica de los potenciales correspondi-

entes,  $V_1(u) = 1 - \cos(u)$  y  $V_2(u) = u^4/4 - u^2/2$ , usando la identidad de conservación de la energía:

$$\frac{1}{2}c^2u_z^2 + AV(u) - Fu = E_0 \quad (4.27)$$

Las trayectorias ocupan la región  $AV(u) - Fu \geq 0$ . Consideremos en primer lugar el caso  $F = 0$ . La figura 4.6 muestra las gráficas de  $V_1(u)$  y  $V_2(u)$ . La figura 4.7 muestra los planos de fases correspondientes a (4.26) para  $g_1$  y  $g_2$ .

Para  $g_1$  tenemos soluciones periódicas que oscilan en torno a 0 o  $2\pi$  con amplitudes que llegan como máximo a  $(-\pi, \pi)$  o  $(3\pi/2, 5\pi/2)$ , respectivamente. El periodo de la oscilación se puede ajustar con el parámetro  $c$ : a cada solución periódica de  $v_{zz} = -Ag_1(v)$  le corresponde un parámetro  $c$  de modo que  $u(z) = v(cz)$  es una solución con periodo 1 de  $c^2u_{zz} = -Ag_1(u)$ .

Para  $g_2$  tenemos soluciones periódicas que oscilan en torno a  $-1$  con amplitud que varía de 0 a 1, soluciones que oscilan en torno a 1 con amplitud que varía de 0 a 1 y soluciones periódicas que oscilan en torno a 0 con amplitud que varía en  $(2, \infty)$ . Como en el caso anterior, a cada solución periódica de  $v_{zz} = -Ag_2(v)$  le corresponde un parámetro  $c$  de modo que  $u(z) = v(cz)$  es una solución con periodo 1 de  $c^2u_{zz} = -Ag_2(u)$ .

Consideremos ahora  $F > 0$  (el caso  $F < 0$  se deduce de este por simetría). Para  $F$  suficientemente pequeño todavía tenemos soluciones periódicas en el caso  $g_1$ . En el caso  $g_2$  siempre hay soluciones periódicas. Las figuras 4.8 y 4.9 muestran las gráficas de los potenciales y los planos de fases correspondientes para  $F$  pequeño. Como antes, el parámetro  $c$  permite asociar un tren de ondas viajero de periodo 1 y velocidad  $c$  a cada perfil periódico solución de  $v_{zz} = -Ag(u) - Fu$ .

Observamos una diferencia importante entre los dos casos estudiados. En el caso de una no linealidad periódica como el seno, sólo hemos encontrado trenes viajeros periódicos que oscilan con una cierta amplitud en torno a uno de los dos ceros estables. Se plantea así la posibilidad de que una configuración inicial de tipo frente evolucione hacia una configuración que pasa de oscilar en torno a un cero estable para oscilar en torno al otro. En el caso de una no linealidad 'confinante' como  $u(u^2 - 1)$ , existen además trenes de onda viajeros periódicos cuyas oscilaciones abarcan los dos ceros estables. En este caso puede ocurrir que un dato inicial con estructura de frente y con



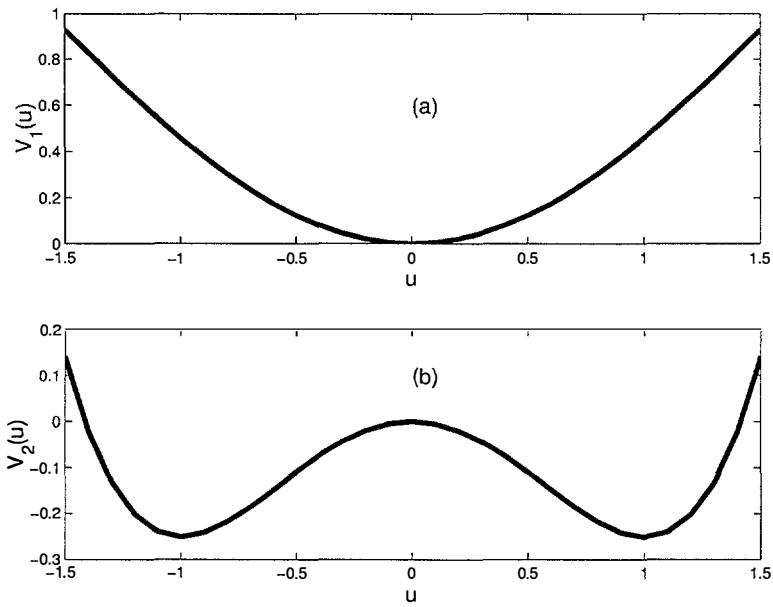


Figura 4.6: Potenciales: (a)  $V_1(u) = 1 - \cos(u)$ , (b)  $V_2(u) = u^4/4 - u^2/2$

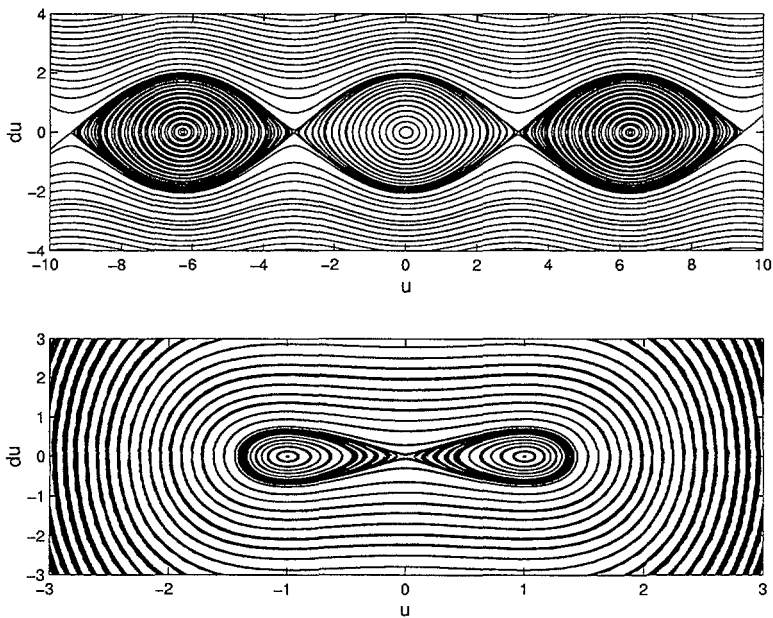


Figura 4.7: Planos de fases para (4.26) con  $F = 0$ : (a)  $g_1(u) = \sin(u)$ , (b)  $g_2(u) = u(u^2 - 1)$

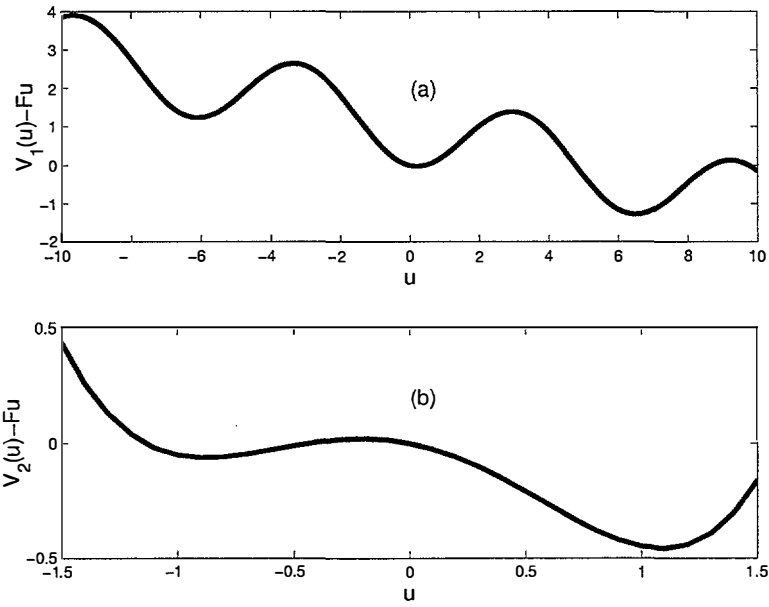


Figura 4.8: Potenciales para  $F = 0.2$ : (a)  $V_1(u) - Fu = 1 - \cos(u) - 0.2u$ , (b)  $V_2(u) - Fu = u^4/4 - u^2/2 - 0.2u$

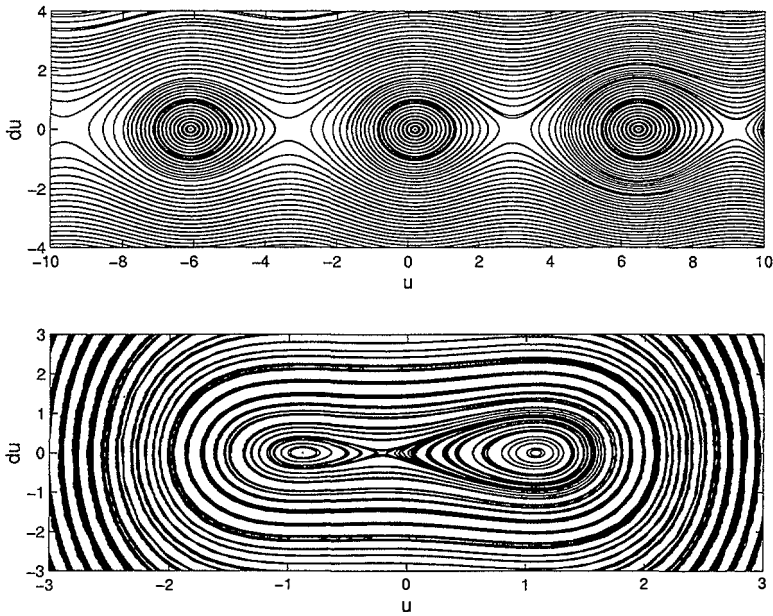


Figura 4.9: Planos de fases para (4.26) con  $F = 0.2$ : (a)  $g_1(u) = \sin(u)$ , (b)  $g_2(u) = u(u^2 - 1)$

suficiente energía cinética evolucione a un tren de ondas viajero.

## 4.5 Fuentes no lineales definidas a trozos

En la sección 4.4 hemos construido algunos frentes crecientes y trenes de onda periódicos. Los resultados numéricos descritos en el Capítulo 3 indican que los modelos amortiguados (4.1) poseen soluciones de tipo frente viajero con perfiles oscilatorios. Kruskal y Peyrad [67] intentaron obtener numéricamente frentes viajeros para el modelo de Frenkel-Kontorova conservativo y observaron la generación de oscilaciones en las ‘colas’ en torno a las constantes 0 y  $2\pi$ . Kruskal y Peyrad conjeturaron que las oscilaciones proporcionaban un mecanismo dispersivo que frenaba los frentes. En vista de los resultados numéricos que hemos descrito en el Capítulo 3, no se puede concluir que las oscilaciones en las colas sean incompatibles con la propagación. Para aclarar esta cuestión es importante explorar la existencia de frentes con perfiles oscilatorios. En esta sección intentaremos obtener fuentes no lineales definidas a trozos para las que (4.3) y (4.1) admitan soluciones explícitas de tipo frente, monótono u oscilatorio.

Consideremos los modelos (4.1),(4.2) y (4.3). Supongamos para fijar ideas que  $g$  es impar, con ceros  $-1, 0, 1$ . Si existe una solución de tipo onda viajera  $u_n(t) = v(n - ct)$  con un perfil  $v(z)$  que crece de  $-1$  en  $-\infty$  a  $1$  en  $\infty$ . Su transformada de Fourier está dada por:

$$\hat{u}(k, t) = e^{-ikct} \hat{v}(k) \quad (4.28)$$

y se puede recuperar  $u(x, t)$  como

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{v}(k) e^{i(-kct+kx)} dk \quad (4.29)$$

La identidad (4.29) nos dice que una solución de tipo onda viajera es una superposición de ondas planas con una relación de dispersión lineal  $\omega(k) = kc$  y velocidad de grupo  $\frac{d\omega}{dk} = c$ . El perfil  $v(z)$  es solución de la ecuación diferencial en diferencias

$$c^2 \epsilon v_{zz} - c \alpha v_z = v(z+1) - 2v(z) + v(z-1) - Ag(v(z)) + F \quad (4.30)$$

$$v(-1) = U_1(F/A), \quad v(1) = U_3(F/A)$$

Tomando transformadas de Fourier obtenemos la ecuación:

$$(c^2\epsilon k^2 + ic\alpha - 4\sin(k/2)^2)\hat{v}(k) = \mathcal{F}(-Ag(v) + F) \quad (4.31)$$

donde  $\mathcal{F}(Ag(v) - F)$  denota la transformada de Fourier del término fuente.

Para comprender el significado de la relación (4.31) conviene considerar el caso particular en que  $g$  es lineal a trozos. Suponemos a partir de ahora que  $g$  está definida como sigue:

$$g(u) = \begin{cases} u + 1, & u < 0 \\ u - 1, & u \geq 0 \end{cases} \quad (4.32)$$

y que  $F = 0$ . Nótese que hemos elegido  $g$  discontinua. Consideramos el modelo:

$$\begin{aligned} \epsilon u_n'' + \alpha u_n' &= u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) \\ g(u_n) &= \begin{cases} u_n + 1, & u_n < 0 \\ u_n - 1, & u_n \geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Buscamos soluciones de la forma  $u(x, t) = v(x - ct)$ . El perfil es invariante por traslaciones. Lo fijamos imponiendo que  $v(0) = 0$ . Imponemos además que  $v(z) > 0$  para  $z > 0$  y  $v(z) < 0$  para  $z < 0$ . La transformada de Fourier del perfil satisface:

$$\hat{v}(k) = \frac{2A}{ik(4\sin^2(k/2) + A - c^2\epsilon k^2 - ic\alpha k)} \quad (4.34)$$

Esta construcción del perfil de la onda viajera es consistente si al invertir

$$v(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{v}(k)e^{-ikz} dk \quad (4.35)$$

resulta que  $v(z) \rightarrow \pm 1$  cuando  $z \rightarrow \pm\infty$ ,  $v(z) > 0$  para  $z > 0$  y  $v(z) < 0$  para  $z < 0$ . La regularidad del perfil depende de la integrabilidad de  $k^n \hat{v}(k)$ . Las propiedades del perfil que resulta al invertir la transformada de Fourier están controladas por los ceros del denominador en (4.34). La presencia del término sinusoidal complica este estudio. Comenzamos por utilizar esta estrategia para estudiar los frentes en el límite continuo de (4.33), de modo que el término sinusoidal en (4.34) es reemplazado por  $k^2$ .

### 4.5.1 El límite continuo para un término fuente lineal a trozos

En esta sección investigamos la existencia de soluciones de tipo onda viajera de los límites continuos:

$$\epsilon u_{tt} + \alpha u_t = u_{xx} - Ag(u) \quad (4.36)$$

$$g(u) = \begin{cases} u + 1 & u < 0 \\ u - 1 & u > 0 \end{cases} \quad (4.37)$$

con  $\epsilon > 0$  y  $\alpha > 0$ . Obsérvese que la no linealidad es impar. Cuando  $\epsilon = 0$ , es bien conocido que existen frentes estacionarios  $u(x)$ ,  $u_x > 0$ , que unen los ceros  $-1$  y  $1$ . Cuando  $\alpha = 0$ , es bien conocido que existen frentes viajeros  $u(x - ct)$ ,  $u_x > 0$ , para  $|c| < 1$ . Estos dos resultados se extienden a no linealidades 'cúbicas'  $g(u)$  más generales, también impares. En el caso sobreamortiguado, se sigue de los trabajos de Aronson y Weinberger [4]. En el caso conservativo, basta estudiar el plano de fases de  $(c^2 - 1)u_{zz} + Ag(u) = 0$ .

Al elegir una no linealidad lineal a trozos, se puede llevar a cabo un estudio completo de la existencia de frentes viajeros en función de los parámetros  $\epsilon$ ,  $\alpha$  y  $c$ . A ello vamos a dedicar esta sección.

Una solución de la forma  $u(x - ct)$  corresponde a un perfil  $v(z)$  tal que:

$$(\epsilon c^2 - 1)v_{zz} - \alpha c v_z = -Av - A \begin{cases} 1 & v \leq 0 \\ -1 & v > 0 \end{cases} \quad (4.38)$$

Se pueden estudiar las soluciones de esta ecuación de dos formas: usando las soluciones de la parte homogénea de la ecuación diferencial ordinaria o bien tomado transformadas de Fourier. Los dos enfoques proporcionan información complementaria. Suponiendo que  $v(z) > 0$  para  $z > 0$  y  $v(z) < 0$  para  $z < 0$ , la transformada de Fourier  $\hat{v}(k)$  del perfil satisface la ecuación:

$$(-(\epsilon c^2 - 1)k^2 - i\alpha ck + A)\hat{v} = \frac{2A}{ik} \quad (4.39)$$

y viene dada por

$$\hat{v}(k) = \frac{2A}{ik(-(\epsilon c^2 - 1)k^2 - i\alpha ck + A)} \quad (4.40)$$

El perfil  $v(z)$  se puede determinar calculando la transformada de Fourier inversa mediante un desarrollo en fracciones simples. Hecho esto, hemos de asegurarnos de que satisface la condición  $v(z) > 0$  para  $z > 0$  y  $v(z) < 0$  para  $z < 0$  que hemos impuesto al transformar la ecuación. Las fracciones simples que hemos de invertir difieren según el tipo de ceros del denominador y los ceros varían según los parámetros  $\alpha$ ,  $\epsilon$  y  $c$ : pueden ser reales, imaginarios puros o complejos con parte real e imaginaria no nulas. Obtenemos así una casuística variada que describimos a continuación.

**Caso conservativo:**  $\alpha = 0$

En este caso, al variar  $\epsilon c^2$  pasamos de tener polos imaginarios puros conjugados a polos reales opuestos en signo.

Si  $\epsilon c^2 < 1$ , se tiene la descomposición:

$$\hat{v}(k) = \frac{2A}{ik} \frac{1}{A + k^2(1 - \epsilon c^2)} = \frac{2}{ik} + \frac{-2(1 - \epsilon c^2)k}{i(A + k^2(1 - \epsilon c^2))} \quad (4.41)$$

Al invertir obtenemos:

$$v(z) = \begin{cases} 1 - e^{-rz} & z > 0 \\ -1 + e^{rz} & z < 0 \end{cases} \quad (4.42)$$

con  $r = \sqrt{A/(1 - \epsilon c^2)}$ . Observamos que el perfil satisface  $v(z) > 0$  para  $z > 0$  y  $v(z) < 0$  para  $z < 0$  y que es diferenciable. No existe  $u_{zz}(0)$  en el sentido clásico, pero sí como distribución y se satisface la ecuación (4.38) en el sentido de las distribuciones. La derivada segunda  $v_{zz}$  es una función con una discontinuidad de salto en  $z = 0$ . No cabía esperar más regularidad debido al hecho de que  $g(v)$  es discontinua en  $v = 0$  en este caso.

Si  $\epsilon c^2 > 1$ , se tiene la descomposición:

$$\hat{v}(k) = \frac{2A}{ik} \frac{1}{A + k^2(1 - \epsilon c^2)} = \frac{2}{ik} + \frac{-1}{i(z + \sqrt{A/(\epsilon c^2 - 1)})} + \frac{-1}{i(z - \sqrt{A/(\epsilon c^2 - 1)})} \quad (4.43)$$

Al invertir obtenemos:

$$v(z) = \begin{cases} 1 - \cos(rz) & z > 0 \\ -1 + \cos(rz) & z < 0 \end{cases} \quad (4.44)$$

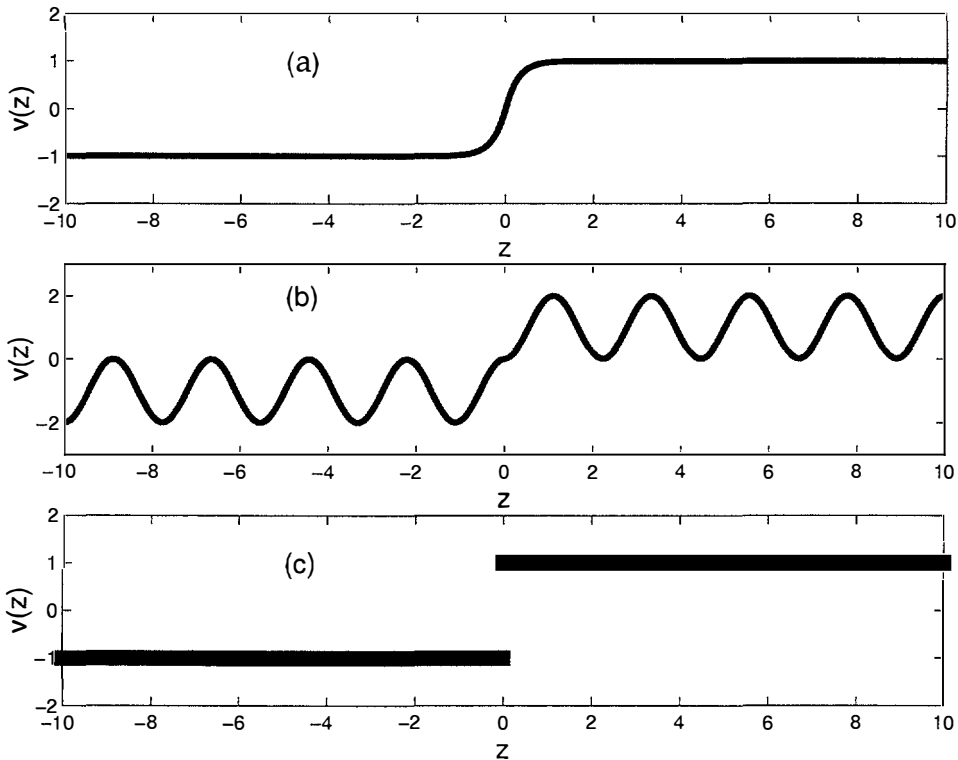


Figura 4.10: Perfiles para  $\alpha = 0$ ,  $A = 10$ ,  $\epsilon = 1$ : (a) Perfil monótono (4.42) con  $c = 0.5$ , (b) Perfil oscilatorio (4.45) con  $c = 1.5$ , (c) Perfil escalonado para  $c = 1$ : la función signo

con  $r = \sqrt{A/(\epsilon c^2 - 1)}$ . Observamos que el perfil satisface  $v(z) > 0$  para  $z > 0$  y  $v(z) < 0$  para  $z < 0$  y que es diferenciable. No existe  $v_{zz}(0)$  en el sentido clásico, pero sí como distribución y se satisface la ecuación (4.38) en el sentido de las distribuciones. La derivada segunda  $v_{zz}$  es una función con una discontinuidad de salto en  $z = 0$ .

Cuando  $\epsilon c^2 = 1$ , se obtiene un perfil de tipo escalón: la función signo. En la figura 4.10 dibujamos los tres tipos de perfiles que se obtienen. Nótese que existen para todo valor de  $c$ .

#### Caso sobreamortiguado: $\epsilon = 0$

En el apartado anterior hemos aprendido que los perfiles se pueden calcular sin necesidad de recurrir a transformadas de Fourier, sin más que acoplar convenientemente



soluciones particulares en  $x = 0$ . La ecuación diferencial

$$-v_{zz} - \alpha cv_z + Au = 0 \quad (4.45)$$

tiene solución general

$$Be^{r+z} + De^{r-z} \quad r_{\pm} = \frac{-\alpha c \pm \sqrt{(\alpha c)^2 + 4A}}{2} \quad (4.46)$$

Se trata de buscar soluciones de (4.38) con la estructura:

$$v(z) = \begin{cases} 1 - Be^{r-z} & z > 0 \\ -1 + De^{r+z} & z < 0 \end{cases} \quad (4.47)$$

con  $B, D > 0$ . La condición  $v(z) > 0$  para  $z > 0$  y  $v(z) < 0$  para  $z < 0$  implica que  $B, D \leq 1$ . El perfil es continuo en  $z = 0$  si  $B + D = 2$ , luego  $B = D = 1$  y  $v(0) = 0$ . La derivada primera  $v_z$  es continua en  $z = 0$  si  $r_+ = -r_-$  y ésto sólo ocurre cuando  $c = 0$ . Por otra parte,

$$v_{zz}(0^+) + \alpha cv_z(0^+) + A = 0 = v_{zz}(0^-) + \alpha cv_z(0^-) - A$$

con lo que se satisface la ecuación globalmente. Concluimos que sólo se pueden construir perfiles diferenciables cuando  $c = 0$ . Al analizar la expresión de la transformada de Fourier de los perfiles,  $\hat{v}(k) = \frac{2A}{ik(k^2 - i\alpha ck + A)}$ , vemos que si  $c = 0$  hay dos polos imaginarios puros conjugados. Si  $c \neq 0$ , tenemos dos polos imaginarios puros, que ya no son conjugados el uno del otro.

### Caso general

La solución general de

$$(\epsilon c^2 - 1)v_{zz} - \alpha cv_z + Av = 0 \quad (4.48)$$

viene dada por

$$\begin{aligned} Be^{r+z} + De^{r-z} & \quad \epsilon c^2 - 1 < 0 \quad \text{ó} \quad \alpha^2 > 4\epsilon \quad \text{ó} \quad \alpha^2 < 4\epsilon, \quad c^2 < \frac{4A}{4\epsilon - \alpha^2} \\ Be^{az} \cos(bz) + De^{az} \sin(bz) & \quad \epsilon c^2 - 1 < 0, \quad \alpha^2 < 4\epsilon, \quad c^2 > \frac{4A}{4\epsilon - \alpha^2} \end{aligned}$$



En los casos en que  $a > 0$  ó  $r_+$  y  $r_-$  tienen el mismo signo no se puede lograr que las colas de los perfiles estén acotadas en  $\pm\infty$  y por tanto esos rangos quedan excluidos. Para  $\epsilon c^2 - 1 > 0$  y  $(\alpha c)^2 > 4(\epsilon c^2 - 1)A$  no se pueden construir frentes. Lo mismo ocurre si  $\epsilon c^2 - 1 > 0$ ,  $(\alpha c)^2 < 4(\epsilon c^2 - 1)A$ .

Consideremos el rango en que las dos soluciones fundamentales son exponenciales con  $r_+$  y  $r_-$  de distinto signo:  $\epsilon c^2 - 1 < 0$  y  $(\alpha c)^2 > 4(\epsilon c^2 - 1)A$ . Sólo se pueden construir perfiles

$$v(z) \begin{cases} 1 - Be^{r_-z} > 0 & z > 0 \\ -1 + De^{r_+z} < 0 & z < 0 \end{cases} \quad (4.49)$$

diferenciables con esta estructura cuando  $r_+ = -r_-$  y esto fuerza  $\alpha = 0$  ó  $c = 0$ , casos estudiados anteriormente.

Si estudiamos los polos de (4.40), excluido el 0, observamos que sólo podemos construir frentes cuando son imaginarios puros y conjugados o cuando son reales y opuestos en signo.

### Inclusión de un campo externo

Consideramos ahora el modelo (4.36) con un campo externo constante  $F$ :

$$\epsilon u_{tt} + \alpha u_t = u_{xx} - Ag(u) \quad (4.50)$$

$$g(u) = \begin{cases} u + 1 + F & u < 0 \\ u - 1 + F & u > 0 \end{cases} \quad (4.51)$$

con  $\epsilon > 0$  y  $\alpha > 0$ . La no linealidad pierde su simetría y los ceros estables pasan a ser  $-1 - F$  y  $1 - F$ . Una solución de la forma  $u(x - ct)$  corresponde a un perfil  $v(z)$  tal que:

$$(\epsilon c^2 - 1)v_{zz} - \alpha c v_z = -Av - A \begin{cases} 1 + F & v \leq 0 \\ -1 + F & v > 0 \end{cases} \quad (4.52)$$

Consideremos el rango en que las dos soluciones fundamentales son exponenciales con  $r_+$  y  $r_-$  de distinto signo:  $\epsilon c^2 - 1 < 0$  y  $(\alpha c)^2 > 4(\epsilon c^2 - 1)A$ . Sólo se pueden construir

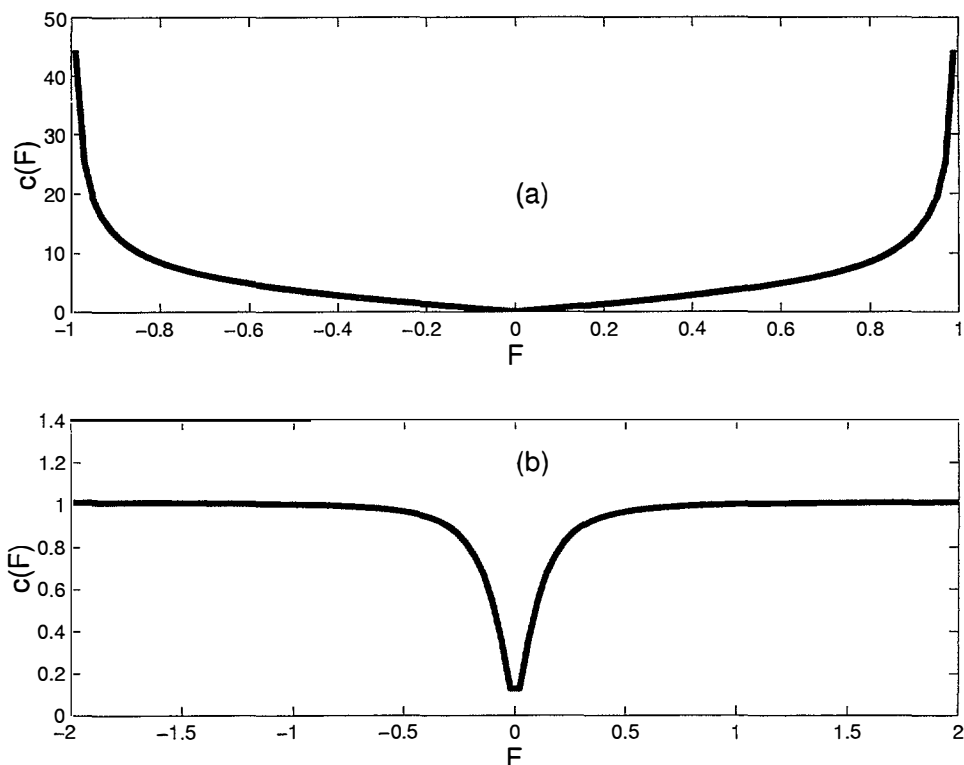


Figura 4.11: Curvas  $c(A, \epsilon, \alpha, F)$  para  $A = 10$ , (a)  $\epsilon = 0$ ,  $\alpha = 1$ , (b)  $\epsilon = 1$ ,  $\alpha = 1$ . Para el caso  $\epsilon = 1$ ,  $\alpha = 0$  el único valor posible es  $F = 0$

perfiles

$$v(z) = \begin{cases} (1 - F)(1 - Be^{r_- z}) > 0 & z > 0 \\ (-1 - F)(1 - De^{r_+ z}) < 0 & z < 0 \end{cases} \quad (4.53)$$

diferenciables con esta estructura cuando  $(1 + F)r_+ = -(1 - F)r_-$  y  $B = D = 1$ . Las raíces  $r_+$  y  $r_-$  dependen de los parámetros  $A$ ,  $\epsilon$ ,  $\alpha$  y  $c$ . La ecuación  $(1 + F)r_+ = -(1 - F)r_-$  determina curvas  $c(A, \epsilon, \alpha, F)$  para las cuales se pueden construir perfiles de frente viajero. De esa forma se pueden generar varias familias de frentes. En la figura 4.11 se pueden observar algunas de estas curvas:

El otro rango de interés corresponde a  $\alpha = 0$ , cuando las soluciones fundamentales

son senos y cosenos. En este caso, tendremos perfiles

$$v(z) = \begin{cases} (1 - F)(1 - \cos(rz)) > 0 & z > 0 \\ (-1 - F)(1 - \cos(rz)) < 0 & z < 0 \end{cases} \quad (4.54)$$

diferenciables si  $1 - F = -1 - F$ , lo cual es imposible. Los frentes oscilatorios se hacen inestables en cuanto se añade un campo externo, en ausencia de fricción.

#### 4.5.2 El problema discreto: términos fuente lineales a trozos y métodos de variable compleja

Consideramos el modelo:

$$u_n'' = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - Ag(u_n) + F$$

$$g(u_n) = \begin{cases} u_n + 1, & u_n < 0 \\ u_n - 1, & u_n \geq 0 \end{cases} \quad (4.55)$$

Buscamos soluciones de la forma  $u_n(t) = u(n - ct)$ . El perfil es invariante por traslaciones. Lo fijamos imponiendo que  $u(0) = 0$ . Imponemos además que  $u(z) > 0$  para  $z > 0$  y  $u(z) < 0$  para  $z < 0$ . Para calcular la solución es más cómodo trasladarla. Sea  $w_n = u_n + 1$ :

$$w_n'' = w_{n+1} - 2w_n + w_{n-1} - Aw_n + f(w_n) + F$$

$$f(w_n) = \begin{cases} 0, & w_n < 1 \\ 2A, & w_n \geq 1 \end{cases} \quad (4.56)$$

Si  $w_n(t) = w(n - ct)$ ,  $z = n - ct$ , tenemos que  $w(z)$  ha de satisfacer la ecuación:

$$c^2 w''(z) - (w(z+1) - 2w(z) + w(z-1)) + Aw(z) = 2AS(-z) + F$$

$$S(z) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ 1, & z > 0 \end{cases} \quad (4.57)$$

y la condición  $w(0) = 1$ . Si existe una solución viajera para  $F$  con velocidad  $c$ , existe otra con velocidad  $-c$ . Suponemos que  $c > 0$  y de ahí la aparición de  $S(-z)$ . El perfil

$w(z)$  se calcula por superposición de soluciones particulares. A un segundo miembro  $F$  corresponde una solución particular  $F/A$ . La solución correspondiente a  $2AS(-z)$  se calcula utilizando la expresión como integral de contorno de la función escalón:

$$S(-z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{e^{ikz}}{k} dk \quad (4.58)$$

La curva  $C$  pasa por encima del polo  $k = 0$  en el plano complejo, como la que se dibuja en la figura 4.12. Si  $z > 0$  el contorno se cierra por el semiplano superior con un semicículo que se hace tender a infinito. Si  $z < 0$  el contorno se cierra por el semiplano inferior. Buscamos una solución particular como superposición de ondas  $e^{ikz}$ :

$$u(z) = \int_C h(k) e^{ikz} dk \quad (4.59)$$

Insertando la expresión (4.59) en la ecuación, obtenemos

$$h(k) = \frac{2A}{2\pi i} \frac{1}{k(A + 4 \sin(k/2)^2 - k^2 c^2)} \quad (4.60)$$

La solución  $w(z)$  buscada viene dada por:

$$w(z) = \frac{F}{A} + \frac{A}{\pi i} \int_C \frac{e^{ikz}}{k(A + 4 \sin(k/2)^2 - k^2 c^2)} dk \quad (4.61)$$

Denotamos  $d(k) = A + 4 \sin(k/2)^2 - k^2 c^2$ . Distintas elecciones del contorno de integración dan lugar a distintas soluciones. En nuestro caso particular hemos de modificar  $C$  por motivos físicos, con el fin de seleccionar una solución que satisfaga condiciones de radiación adecuada en los polos reales. Ha de estar próximo al eje real, de modo que la integral no diverja para  $x$  grande. La función  $d(k)$  tiene dos tipos de ceros. En primer lugar un número finito de ceros reales, que representan los números de onda de la radiación acústica, emitida por el defecto. En segundo lugar, un número infinito de ceros complejos, que se corresponden con modos localizados exponencialmente amortiguados y describen la estructura de la cadena en torno al defecto. El contorno de integración [5] se elige de modo que todos los modos que radian con velocidad de grupo  $v_g$  mayor que  $c$  aparecen únicamente por delante del defecto y todos aquellos con velocidad  $v_g < c$  aparecen únicamente detrás. Los modos  $k$  que radian son las soluciones de  $\omega(k) = ck$ , es decir, los ceros de  $d(k) = \omega(k)^2 - c^2 k^2$ . La velocidad de

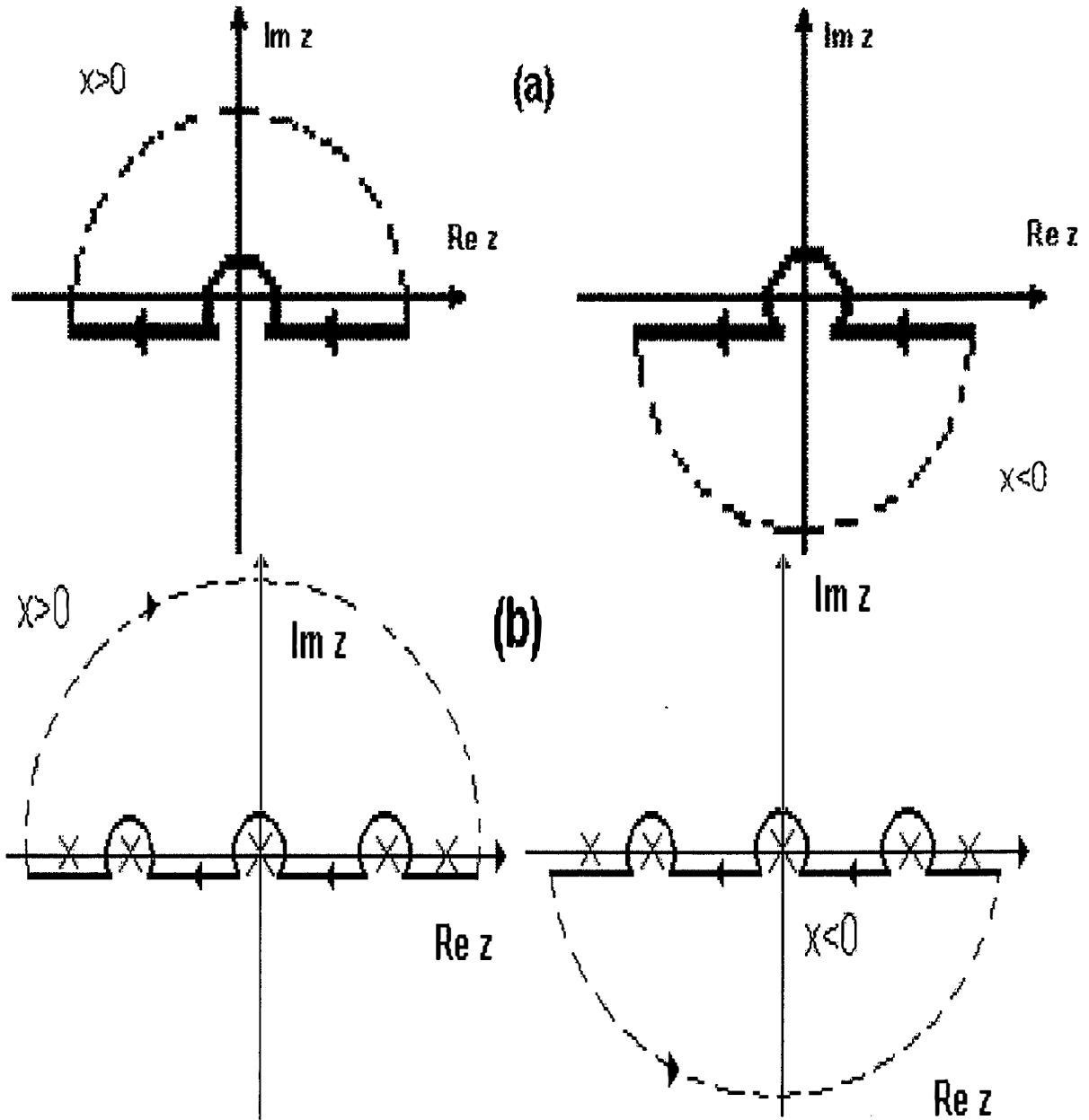


Figura 4.12: (a) Contorno sencillo para la expresión integral de la función escalón 4.58 (b) Contorno de integración final usado en la representación integral de los perfiles.

grupo correspondiente viene dada por  $v_g(k) = \frac{d\omega}{dk} = c + \frac{1}{2kc} \frac{d'(k)}{dk}$ . Por tanto, el contorno de integración ha de pasar por debajo (encima) de un cero de  $d(k)$  si  $k d'(k)$  es positivo (resp. negativo). Dibujamos de forma esquemática los contornos de integración en la figura 4.12 (b). Fijado el contorno, se calcula la integral por el método de los residuos. Para ciertos valores críticos de la velocidad  $c$ , se observan modos radiativos con  $k$  tal que  $v_g(k) = c$ . En este caso, la amplitud de estos modos diverge y la solución explota, dejando de ser válida.

Al imponer en la fórmula (4.61) la condición  $w(0) = 1$ , obtenemos una relación entre la velocidad  $c$  y el campo externo  $F$ . La elección del contorno de integración garantiza que  $c > 0$ , como habíamos supuesto. Para que el perfil resultante sea aceptable, es preciso además que  $w(z) > w$  para  $z > 0$  y  $w(z) < 1$  para  $z < 0$ . El valor de  $w(0)$  se puede calcular por el método de los residuos. Basta observar que  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{kd(k)} = 0$ . De aquí deducimos que la suma de los residuos en los polos complejos de  $kd(k)$  con  $Im(k) > 0$  vale  $-1/2$  de la suma de los residuos en los polos reales. Podemos calcular  $w(0)$  usando los contornos para  $z > 0$  ó  $z < 0$ . Usando por ejemplo el considerado para  $z > 0$  se obtiene que  $w(0)$  es igual a la suma de los residuos en los polos complejos con  $Im(k) > 0$  más los residuos en los polos reales no nulos con  $kd'(k) > 0$ , cambiados de signo pues el contorno se recorre en el sentido de las agujas del reloj y multiplicados por  $2A$ . Por tanto,

$$1 = w(0) = \frac{F}{A} + \frac{2A}{2} Res(0) + \frac{2A}{2} \sum_{kd'(k) < 0} \frac{1}{kd'(k)} - \frac{2A}{2} \sum_{kd'(k) > 0} \frac{1}{kd'(k)} \quad (4.62)$$

El residuo en cero vale  $1/A$ . Por otra parte, si  $k \neq 0$  es un polo,  $-k$  también y  $kd'(k), -kd'(-k)$  tienen ambos el mismo signo. Por tanto, se obtiene:

$$\frac{F}{A} = 2A \sum_{d(k)=0, k>0} \frac{1}{k|d'(k)|} \quad (4.63)$$

Al dibujar  $F(c)$  se observa un valor mínimo  $F_{cd}$  correspondiente a una velocidad mínima  $c_{cd} > 0$  por debajo de la cual no pueden propagarse las ondas viajeras. Para  $F$  suficientemente grande, diversas familias de ondas viajeras con distinta velocidad pueden coexistir para el mismo valor de  $F$ . De entre ellas, es preciso seleccionar las que tienen sentido físico imponiendo la condición  $v(z) > 0$  si  $z > 0$  y  $v(z) < 0$  si  $z < 0$ , lo que excluye velocidades demasiado elevadas.

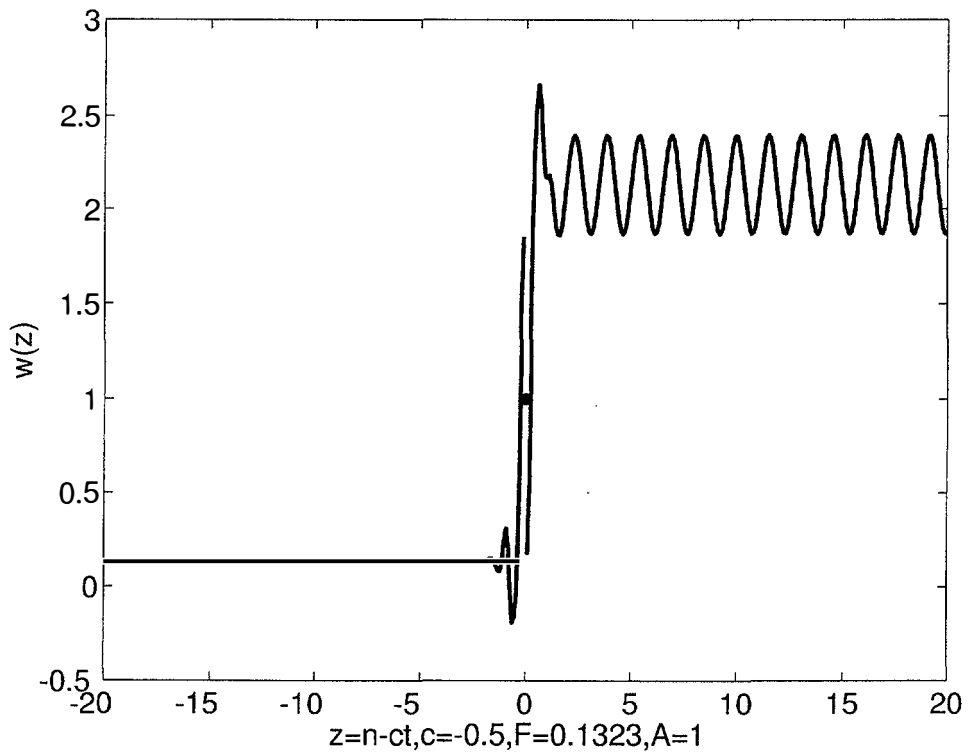


Figura 4.13: Perfil de la onda viajera calculado con un número pequeño de polos imaginarios. Las dos colas están ya definidas. Para determinar la configuración de la zona de transición sería preciso sumar la serie de residuos.

En la figura 4.13 dibujamos uno de los perfiles obtenidos.

### 4.5.3 El problema discreto: el método inverso aplicado a perfiles definidos a trozos

Debido a la presencia del operador en diferencias en (4.30), no podemos construir perfiles a base de pegar con regularidad dos funciones en un punto. Sería preciso asegurar su coincidencia en un intervalo. Vamos a optar por aplicar un método inverso para determinar las no linealidades a partir de perfiles dados. Investigaremos los dos tipos de perfiles sugeridos por el estudio de los límites continuos, uno monótono y otro oscilatorio.

#### Perfiles monótonos

Consideremos perfiles de la forma:

$$v(z) = \begin{cases} \gamma(1 - e^{-r_1 z}) & z > 0, r_1 > 0, \gamma > 0 \\ -\beta(1 - e^{r_2 z}) & z < 0, r_2 > 0, \beta > 0 \end{cases} \quad (4.64)$$

Este perfil es continuo y diferenciable si  $\gamma r_1 = \beta r_2$ .

Vamos a expresar el operador en diferencias  $v(z+1) - 2v(z) + v(z-1)$  como función de  $v(z)$ . Se distinguen cuatro regiones de valores de  $z$ :

$$\begin{aligned} v(z+1) - 2v(z) + v(z-1) &= g_0(v) = \\ 2(\gamma - v)(1 - \cosh r_1) & z > 1 \\ \gamma - \beta - 2v - \gamma(1 - v/\gamma)e^{-r_1} + \beta(1 - v/\gamma)^{-r_2/r_1}e^{-r_2} & 0 < z < 1 \\ \gamma - \beta - 2v + \beta(1 + v/\beta)e^{-r_2} - \gamma(1 + v/\beta)^{-r_1/r_2}e^{-r_1} & -1 < z < 0 \\ 2(\beta + v)(-1 + \cosh r_2) & z < -1 \end{aligned} \quad (4.65)$$



El término fuente  $g_0(v)$  queda definido como:

$$\begin{aligned}
 g_0(v) = & \\
 & 2(\gamma - v)(1 - \cosh r_1) && \gamma(1 - e^{-r_1}) \leq v < 1 \\
 & \gamma - \beta - 2v - \gamma(1 - \frac{v}{\gamma})e^{-r_1} + \beta(1 - \frac{v}{\gamma})^{\frac{-r_2}{r_1}} e^{-r_2} && 0 \leq v \leq \gamma(1 - e^{-r_1}) \\
 & \gamma - \beta - 2v + \beta(1 + \frac{v}{\beta})e^{-r_2} - \gamma(1 + \frac{v}{\beta})^{\frac{-r_1}{r_2}} e^{-r_1} && \beta(-1 + e^{-r_2}) \leq v \leq 0 \\
 & 2(\beta + v)(-1 + \cosh r_2) && -1 \leq v \leq \beta(-1 + e^{-r_2})
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

La ecuación  $v(z + 1) - 2v(z) + v(z - 1) = g_0(v)$  posee soluciones de tipo frente diferenciables si  $\gamma r_1 = \beta r_2$ . Por otra parte, dado  $c \neq 0$  y definiendo  $g_c(v)$  como:

$$g_c(v) = g_0(v) - c\alpha \begin{cases} \gamma r_1(1 - \frac{v}{\gamma}) & v \geq 0 \\ \beta r_2(1 + \frac{v}{\beta}) & v \leq 0 \end{cases} \tag{4.67}$$

vemos que el perfil  $v(z)$  es una solución diferenciable de

$$-c\alpha v_z(z) = v(z + 1) - 2v(z) + v(z - 1) - g_c(v(z)) \tag{4.68}$$

que crece monótonamente de  $-\beta$  a  $\gamma$  si  $\gamma r_1 = \beta r_2$ , para todo  $c$ .

Si definimos  $f_c(v)$  como:

$$f_c(v) = g_c(v) - c^2\epsilon \begin{cases} -\gamma r_1^2(1 - \frac{v}{\gamma}) & v \geq 0 \\ \beta r_2^2(1 + \frac{v}{\beta}) & v \leq 0 \end{cases} \tag{4.69}$$

vemos que el perfil  $v(z)$  es una solución diferenciable (con derivada segunda discontinua) de

$$c^2\epsilon v_{zz}(z) - c\alpha v_z(z) = v(z + 1) - 2v(z) + v(z - 1) - f_c(v(z)) \tag{4.70}$$

que crece monótonamente de  $-\beta$  a  $\gamma$  si  $\gamma r_1 = \beta r_2$ , para todo  $c$ .

La figura 4.14 muestra los términos fuente asociados al perfil  $v(z)$  para distintos valores de  $c, \epsilon$  y  $\alpha$ .

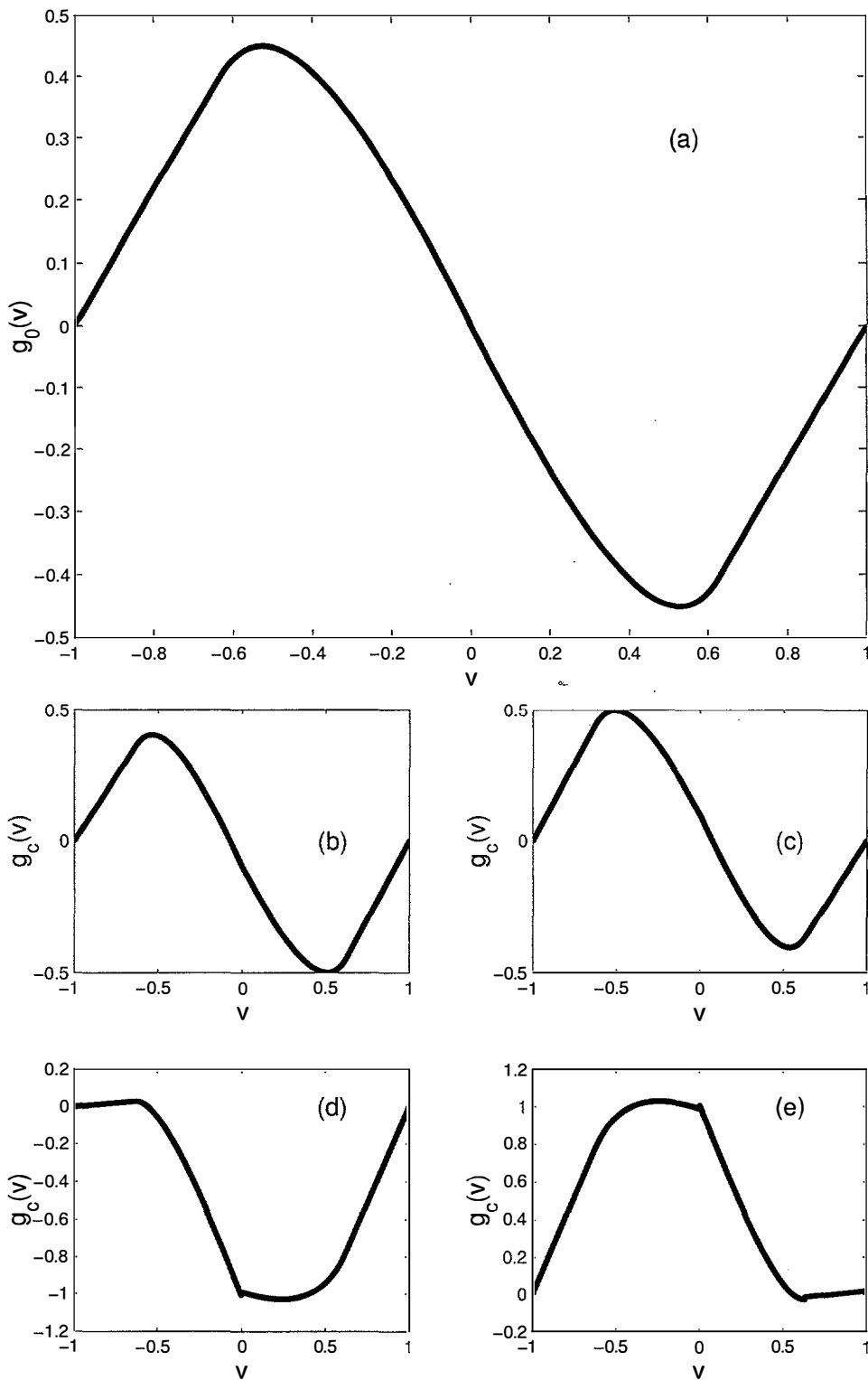


Figura 4.14: Términos fuente para  $\gamma = \beta = 1$  y  $r_1 = r_2 = 1$  (a)  $g_0(v)$  (4.66), (b)  $g_c(v)$  (4.67) con  $c = 0.01$ ,  $\alpha = 1$ , (c)  $g_c(v)$  (4.67) con  $c = -0.01$ ,  $\alpha = 1$ , (d)  $f_c(v)$  (4.69) con  $c = 0.1$ ,  $\alpha = 1$ ,  $\epsilon = 1$ , (e)  $f_c(v)$  (4.69) con  $c = -0.1$ ,  $\alpha = 1$ ,  $\epsilon = 1$ .

### Perfiles oscilatorios

Concluimos con un comentario sobre los perfiles oscilatorios con estructura:

$$v(z) = \begin{cases} 1 - e^{-az} \cos(bz) & z > 0, a > 0, b > 0 \\ -1 + e^{az} \cos(bz) & z < 0, \end{cases} \quad (4.71)$$

Elegimos  $b = \frac{1}{2n\pi}$ ,  $n \in \mathbb{N}$ . Estos perfiles son continuos y diferenciables, con derivada primera continua. Cuando  $a = b$  su derivada segunda es continua.

Sólo es posible expresar el operador en diferencias  $v(z+1) - 2v(z) + v(z-1)$  como función de  $v(z)$  cuando  $a = 0$  pues  $e^{-az} \cos(bz) = v(z)$  no se puede invertir en  $0 < z < 1$  si  $a \neq 0$ . Esta elección nos conduce a  $g_0(v) = 0$ .

## 4.6 Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado cadenas de osciladores sujetos a un potencial y a una fuerza externa  $F$  donde los efectos inerciales son significativos. El estudio de esta dinámica sin fricción es más complejo que las anteriores ya que no nos sirven los mismos métodos ya utilizados. Construimos soluciones explícitas tanto de tipo frente estacionario como viajero mediante dos técnicas: un método inverso y transformada de Fourier en el caso de frentes lineales a trozos. Se observa la posible coexistencia de fórmulas de ondas viajeras moviéndose a diferentes velocidades por encima de un valor crítico del parámetro  $F$ . Este valor crítico puede hacerse cero por alguna no linealidad y en general es menor que el valor de  $F$  para el cual dejan de existir soluciones estacionarias.





# Capítulo 5

## Un modelo discreto vectorial: fotoexcitación en superredes semiconductoras

### 5.1 Introducción

En este capítulo derivó un modelo para la dinámica de superredes semiconductoras no dopadas, débilmente acopladas y fotoexcitadas, estudiadas experimentalmente por Ohtani y colaboradores [37, 38]. El transporte de carga tiene lugar mediante efecto túnel resonante entre subbandas electrónicas situadas tanto en los pozos como en las barreras de potencial, mientras que los huecos son pesados y no dan lugar a corriente por efecto túnel. Las ecuaciones del modelo se adimensionalizan con los parámetros de los experimentos de Ohtani y colaboradores [37, 38] (ver Figura 5.1) y se simplifican adecuadamente, llegando a un modelo final simplificado. Una vez derivado este modelo, se calculan sus soluciones estacionarias, tanto uniformes como no uniformes. Estas últimas se buscan en la clase de soluciones cuyo perfil del campo eléctrico es una función creciente de  $i$ , por corresponder a soluciones con dos dominios del campo eléctrico como las observadas experimentalmente. Queda abierto el problema de estudiar la dinámica del modelo y encontrar soluciones estables que describan su comportamiento para tiempos grandes.

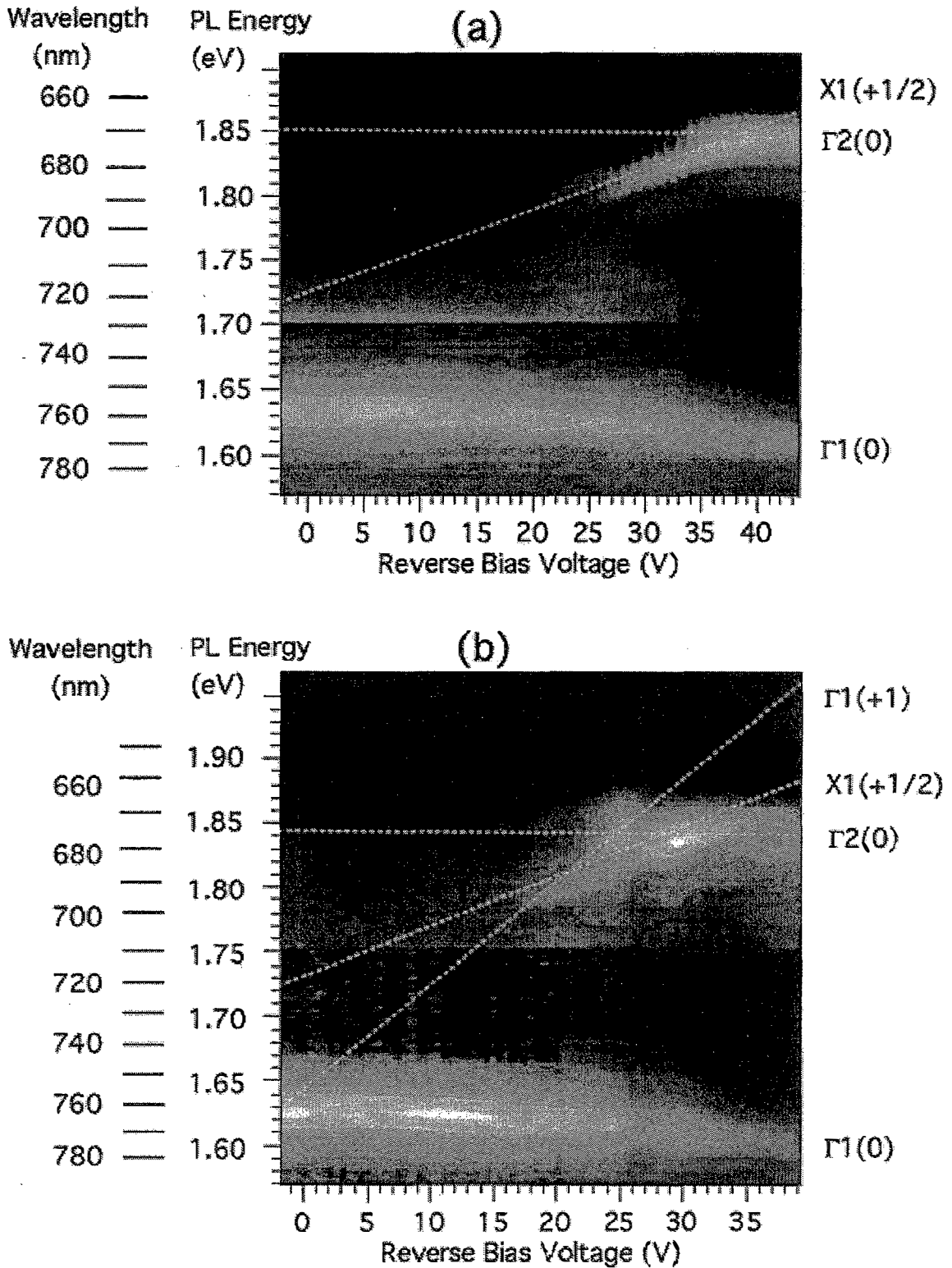


Figura 5.1: Intensidad de la fotoluminiscencia de las muestras A (a) y B (b) como función del voltage. En las imágenes el brillo representa la intensidad de la intensidad de la fotoluminiscencia

Variable	densidad electrónica 2D en el estado
$\tilde{N}_{1_i}(\tilde{t})$	$\Gamma_1$ en el pozo $i$
$\tilde{N}_{2_i}(\tilde{t})$	$\Gamma_2$ en el pozo $i$
$\tilde{X}_{1_i}(\tilde{t})$	$X_1$ en la barrera $i$
$\tilde{X}_{2_i}(\tilde{t})$	$X_2$ en la barrera $i$
$\tilde{P}(\tilde{t})$	banda de valencia debajo del periodo $i$
Variable	
$\tilde{E}_i(\tilde{t})$	Campo eléctrico en el periodo $i$
$\tilde{J}(\tilde{t})$	Densidad de corriente

Tabla 5.1: *Variables con dimensiones*

## 5.2 Ecuaciones

Consideraremos los pozos cuánticos (QW) y las barreras como entidades caracterizadas por sus valores medios de densidad electrónica en dos dimensiones en sus estados de energía 1 y 2. También tendremos en cuenta la densidad de huecos en la banda de valencia debajo del pozo, el campo eléctrico del periodo y la densidad de corriente. Resumimos estas variables en la siguiente Tabla 5.1. También vamos a utilizar dos parámetros:  $\tilde{\gamma}$  la intensidad del laser y  $\tilde{V}$  la diferencia de voltaje aplicado a la superred. Utilizando estas variables, parámetros y constantes calculadas anteriormente, y de forma similar al modelo propuesto por Luis L. Bonilla en [7] y [8] proponemos las siguientes ecuaciones de transporte para describir la estática y la dinámica de la superred. Para explicar dichas ecuaciones vamos a representar en las Figuras de 5.2 a 5.5 las resonancias que ocurren al aplicar distintos voltajes, en las que hemos señalado con un número cada una de las transiciones. No consideramos resonancias de los huecos, ni las de los estados negativos, ni los estados  $\Gamma_3$  ni  $X_3$  en adelante, y solo hemos tenido en cuenta las relaciones a primeros vecinos.

$$\frac{d\tilde{X}_{1_i}}{d\tilde{t}} = \frac{1}{\tilde{d}}[\tilde{C}_2(\tilde{E}_{i-1})\tilde{N}_{1_{i-1}} - \tilde{C}_6(\tilde{E}_i)\tilde{X}_{1_i}] + \tilde{K}\tilde{X}_{2_i} - \tilde{r}_1\tilde{X}_{1_i}\tilde{P}_i \quad (5.1)$$

Esta ecuación representa la variación de la densidad electrónica en el nivel  $X_1$  en la

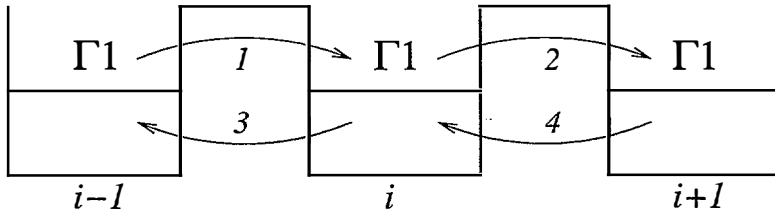


Figura 5.2: Resonancias a 1.5 V

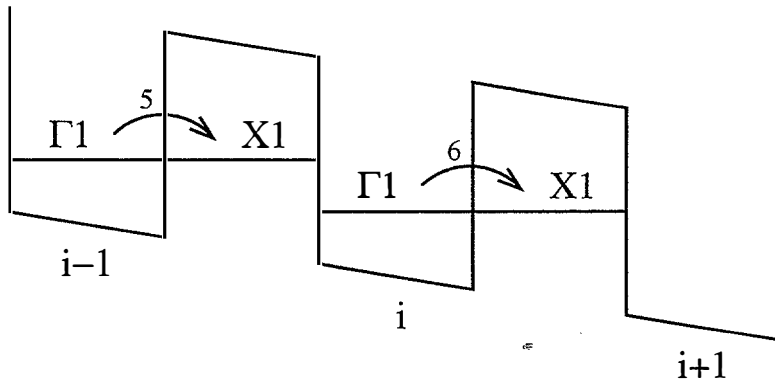


Figura 5.3: Resonancias a 17 V

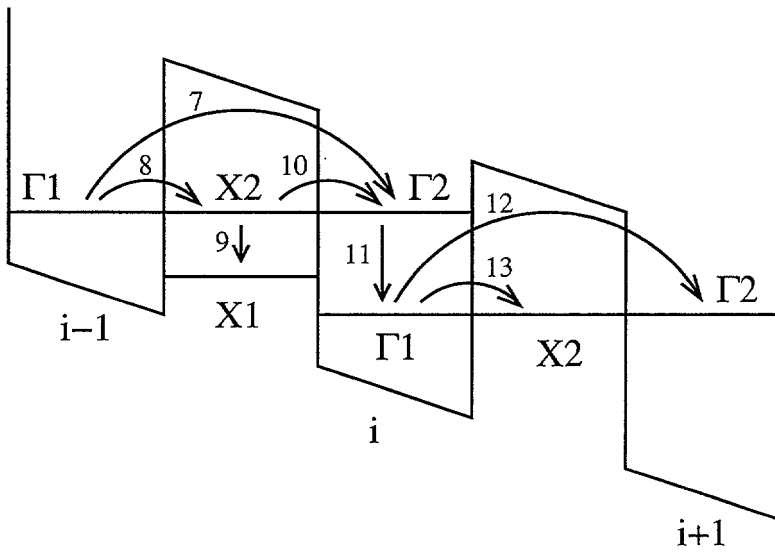


Figura 5.4: Resonancias a 25 V



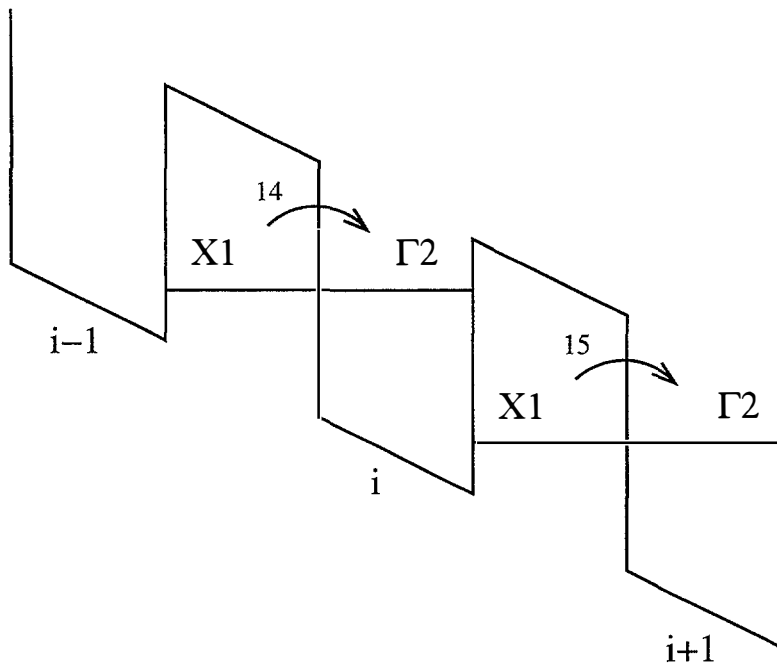


Figura 5.5: Resonancias a 38 V

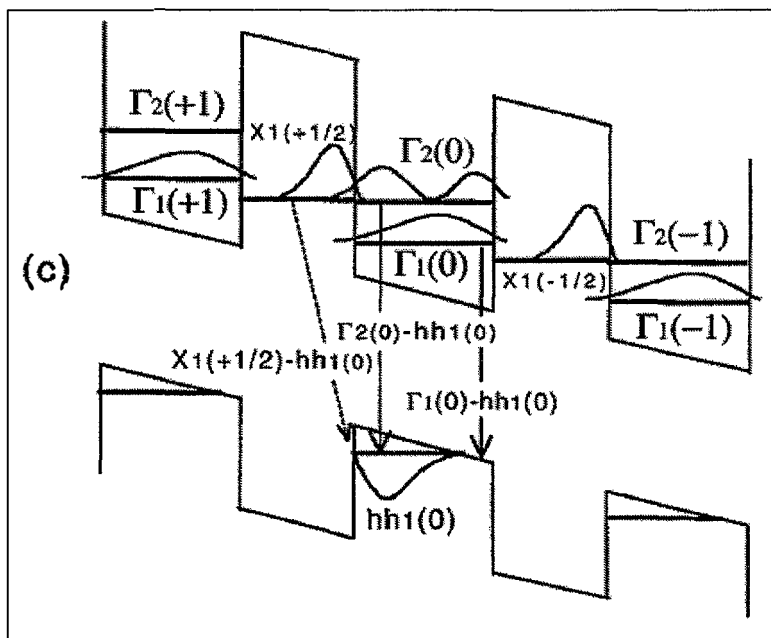


Figura 5.6: Recombinaciones

barrera  $i$ -ésima, es una ecuación de balance en la que calculamos la diferencia entre el número de electrones que llegan al nivel y cuántos lo abandonan. Los que llegan vienen de la resonancia  $\Gamma_1 - X_1$  del pozo  $i - 1$  Figura 5.3 (5) y del nivel  $X_2$  por relajación Figura 5.4 (9) y se van por la resonancia  $X_1 - \Gamma_2$  al pozo  $i$  Figura 5.5 (14) y por recombinación con el hh1 Figura 5.6 (16).

De forma similar proponemos las siguientes ecuaciones de balance para el resto de las densidades:

$$\frac{d\tilde{X}2_i}{d\tilde{t}} = \frac{1}{\tilde{d}}[\tilde{C}_5(\tilde{E}_{i-1})\tilde{N}1_{i-1} - \tilde{C}_3(\tilde{E}_i)\tilde{X}2_i] - \tilde{K}\tilde{X}2_i \quad (5.2)$$

La variación de la densidad electrónica en el estado  $X_2$  viene de la diferencia de los que llegan por la resonancia  $\Gamma_1 - X_2$  Figura 5.4 (8) y los que lo dejan por la resonancia  $X_2 - \Gamma_2$  Figura 5.4 (10) y por relajación a  $X_1$  Figura 5.4 (9).

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{N}1_i}{d\tilde{t}} = \frac{1}{\tilde{d}}[\tilde{C}_1(\tilde{E}_{i-1})\tilde{N}1_{i-1} + \tilde{C}_1^b(\tilde{E}_i)\tilde{N}1_{i+1} - \tilde{C}_1(\tilde{E}_i)\tilde{N}1_i - \tilde{C}_1^b(\tilde{E}_{i-1})\tilde{N}1_i \\ - \tilde{C}_2(\tilde{E}_i)\tilde{N}1_i - \tilde{C}_4(\tilde{E}_i)\tilde{N}2_{i+1} - \tilde{C}_5(\tilde{E}_i)\tilde{N}1_i] + \tilde{\gamma} + \tilde{K}\tilde{N}2_i - \tilde{r}_2\tilde{N}1_i\tilde{P}_i \end{aligned} \quad (5.3)$$

La variación de la densidad electrónica en el estado  $\Gamma_1$  viene de la diferencia de los que llegan por el tunneling  $\Gamma_1 - \Gamma_1$  Figura 5.2 (1) y back tunneling  $\Gamma_1 - \Gamma_1$  5.2 (4), los que se crean por fotoexcitación del laser  $\tilde{\gamma}$  y los que vienen del estado  $\Gamma_2$  por relajación Figura 5.4 (11), y los que se van, por tunneling  $\Gamma_1 - \Gamma_1$  Figura 5.2 (2) y back tunneling  $\Gamma_1 - \Gamma_1$  Figura 5.2 (3) así como de las resonancias  $\Gamma_1 - X_1$  Figura 5.3 (5),  $\Gamma_1 - \Gamma_2$  Figura 5.4 (7),  $\Gamma_1 - X_2$  Figura 5.4 (8) y la recombinación con el hh1 Figura 5.6 (18).

$$\frac{d\tilde{N}2_i}{d\tilde{t}} = \frac{1}{\tilde{d}}[\tilde{C}_3(\tilde{E}_i)\tilde{X}2_i + \tilde{C}_4(\tilde{E}_{i-1})\tilde{N}1_{i-1} + \tilde{C}_6(\tilde{E}_i)\tilde{X}1_i] - \tilde{K}\tilde{N}2_i - \tilde{r}_3\tilde{N}2_i\tilde{P}_i \quad (5.4)$$

La variación de densidad electrónica en el estado  $\Gamma_2$  viene de la diferencia de los que vienen por las resonancias  $X_2 - \Gamma_2$  Figura 5.4 (10),  $\Gamma_1 - \Gamma_2$  Figura 5.4 (7) y  $X_1 - \Gamma_2$  Figura 5.5 (14) y los que se van por relajación al nivel  $\Gamma_1$  Figura 5.4 (11) y los que se recombinan con el hh1 Figura 5.6 (17)

Para estudiar la densidad de huecos no distinguiremos niveles en la banda de valencia y consideraremos que los huecos no saltan entre barreras y pozos. De esta manera tenemos que la ecuación de balance para los huecos en la banda de valencia vendrá dada por la expresión

$$\frac{d\tilde{P}_i}{d\tilde{t}} = \tilde{\gamma} - (\tilde{r}_1\tilde{X}1_i + \tilde{r}_2\tilde{N}1_i + \tilde{r}_3\tilde{N}2_i)\tilde{P}_i \quad (5.5)$$

donde el número de huecos aumentará mediante la fotoexcitación del laser y disminuirá a medida que se vayan recombinando con los electrones de los estados  $X_1$ ,  $\Gamma_2$  y  $\Gamma_1$  respectivamente Figura 5.6 (16, 17 y 18).

También consideraremos la ecuación discreta de Poisson relacionando el campo de pozos adyacentes y la carga eléctrica

$$\tilde{E}_i - \tilde{E}_{i-1} = \frac{q}{\epsilon}(\tilde{N}1_i + \tilde{N}2_i + \tilde{X}1_i + \tilde{X}2_i - \tilde{P}_i) \quad (5.6)$$

Esta ecuación la vamos a derivar con respecto al tiempo y nos queda la ecuación

$$\frac{d\tilde{E}_i}{d\tilde{t}} - \frac{d\tilde{E}_{i-1}}{d\tilde{t}} = \frac{q}{\epsilon} \left( \frac{d\tilde{N}1_i}{d\tilde{t}} + \frac{d\tilde{N}2_i}{d\tilde{t}} + \frac{d\tilde{X}1_i}{d\tilde{t}} + \frac{d\tilde{X}2_i}{d\tilde{t}} - \frac{d\tilde{P}_i}{d\tilde{t}} \right)$$

Si ahora en esta ecuación sustituimos cada una de las derivadas de las densidades electrónicas por cada uno de sus valores según las ecuaciones anteriores, reordenando las variables podemos poner todo lo que depende del pozo  $i$  en un lado y lo que depende del pozo  $i - 1$  a otro, de manera que encontramos una expresión para densidad de corriente  $\tilde{J}$  independiente del pozo en el que estemos.

$$\tilde{J}(\tilde{t}) = \epsilon \frac{d\tilde{E}_i}{d\tilde{t}} + \frac{q}{d} \left[ \tilde{v}(\tilde{E}_i)\tilde{N}1_i - \tilde{C}_1^b(\tilde{E}_i)(\tilde{N}1_{i+1} - \tilde{N}1_i) \right] \quad (5.7)$$

donde

$$\tilde{v}(\tilde{E}_i) = \tilde{C}_1(\tilde{E}_i) - \tilde{C}_1^b(\tilde{E}_i) + \tilde{C}_2(\tilde{E}_i) + \tilde{C}_4(\tilde{E}_i) + \tilde{C}_5(\tilde{E}_i)$$

con  $i = 1 \cdots N$  siendo  $N = 100$  el número de pozos. Añadiremos la ecuación de voltaje constante  $\tilde{V}$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{E}_i = \frac{\tilde{V}}{Nd} \quad (5.8)$$

De manera que tenemos  $6N+4$  incógnitas  $\tilde{J}, \tilde{E}_0, \tilde{N}_{10}, \tilde{N}_{100}, \tilde{E}_i, \tilde{N}_{1i}, \tilde{N}_{2i}, \tilde{X}_{1i}, \tilde{X}_{2i}, \tilde{P}_i$ , con  $i = 1, \dots, N$ , con  $6N+1$  ecuaciones 5.1 a 5.8. Como condiciones iniciales impon-dremos  $E_0 = E_1$  de manera similar a [8]. El resto veremos más adelante.

## 5.2.1 Adimensionalización

Para seguir estudiando el sistema realizaremos una adimensionalización en la misma línea que [7], [8] y [54]. Donde las variables y las constantes son las definidas anteri-ormente. Las variables con dimensiones serán las que llevan tilde y las variables sin dimensiones las que no la lleven. Esto es:

$$X_{1i} = \frac{\tilde{X}_{1i}}{\tilde{n}_0}, \quad X_{2i} = \frac{\tilde{X}_{2i}}{\tilde{n}_0}, \quad N_{1i} = \frac{\tilde{N}_{1i}}{\tilde{n}_0}, \quad N_{2i} = \frac{\tilde{N}_{2i}}{\tilde{n}_0}, \quad P_i = \frac{\tilde{P}_i}{\tilde{n}_0}$$

$$E_i = \frac{\tilde{E}_i}{\tilde{E}_M}, \quad J = \frac{\tilde{J}d}{q\tilde{n}_0\tilde{v}_M}, \quad t = \tilde{r}\tilde{n}_0\tilde{t}$$

$$C_j = \frac{\tilde{C}_j}{\tilde{v}_M}, \quad v = \frac{\tilde{v}}{\tilde{v}_M}, \quad r_k = \frac{\tilde{r}_k}{\tilde{r}}, \quad K = \frac{\tilde{K}}{\tilde{r}\tilde{n}_0},$$

$$\alpha = \frac{\tilde{d}\tilde{r}\tilde{n}_0}{\tilde{v}_M}, \quad \gamma = \frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{r}\tilde{n}_0^2}, \quad V = \frac{\tilde{V}}{\tilde{d}\tilde{E}_M N}$$

Donde  $\tilde{r} = \tilde{r}_1$ . De manera que  $r_1 = 1$ ,  $r_2 = 10^3$ ,  $r_3 = 10^2$ ,  $K = 10^6$ ,  $\alpha = 0.01325$  y  $\frac{1}{\alpha} = 75.4882$ .

Sustituyendo en las ecuaciones anteriores estas variables sin dimensiones encon-tramos el sistema adimensional siguiente:

$$\frac{dX_{1i}}{dt} = \frac{1}{\alpha}(C_2(E_{i-1})N_{1i-1} - C_6(E_i)X_{1i}) + KX_{2i} - r_1X_{1i}P_i \quad (5.9)$$

$$\frac{dX_{2i}}{dt} = \frac{1}{\alpha}(C_5(E_{i-1})N_{1i-1} - C_3(E_i)X_{2i}) - KX_{2i} \quad (5.10)$$

$$\frac{dN_{1i}}{dt} = \frac{1}{\alpha}[C_1(E_{i-1})N_{1i-1} + C_1^b(E_i)N_{1i+1} - C_1(E_i)N_{1i} - C_1^b(E_{i-1})N_{1i} -$$

$$-C_2(E_i)N1_i - C_4(E_i)N2_{i+1} - C_5(E_i)N1_i] + \gamma + KN2_i - r_2N1_iP_i \quad (5.11)$$

$$\frac{dN2_i}{dt} = \frac{1}{\alpha}(C_3(E_i)X2_i + C_4(E_{i-1})N1_{i-1} + C_6(E_i)X1_i) - KN2_i - r_3N2_iP_i \quad (5.12)$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \gamma - (r_1X1_i + r_2N1_i + r_3N2_i)P_i \quad (5.13)$$

$$E_i - E_{i-1} = N1_i + N2_i + X1_i + X2_i - P_i \quad (5.14)$$

$$J(t) = \alpha \frac{dE_i}{dt} + v(E_i)N1_i - C_1^b(E_i)(N1_{i+1} - N1_i) \quad (5.15)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i = V \quad (5.16)$$

La función velocidad  $v$  adimensional es la función definida en la Figura 5.7 que toma en  $E = 1$  el valor  $v(1) = 1$ , y tiene un segundo máximo en 1.444.

## 5.2.2 Valores numéricos típicos de variables y parámetros

Para calcular el campo crítico en el que se producen estas resonancias a partir de los resultados experimentales considero:

$$\Gamma_1(0) = 90 \text{ meV}, \quad X_1\left(\frac{1}{2}\right) = 180 \text{ meV},$$

$$\Gamma_2(0) = 320 \text{ meV} \quad X_2\left(\frac{1}{2}\right) = 220 \text{ meV}$$

y la relación sabiendo que

$$\Delta\text{energia}_{\Gamma-X} = q\tilde{E}\frac{\tilde{d}}{2}$$

tenemos

A 17 V

$$\Gamma_1(1) - X_1\left(\frac{1}{2}\right) \Rightarrow \tilde{E}_{c_2} = \frac{2(180 - 90)}{qd} = \frac{180 \text{ meV}}{q\tilde{d}}$$

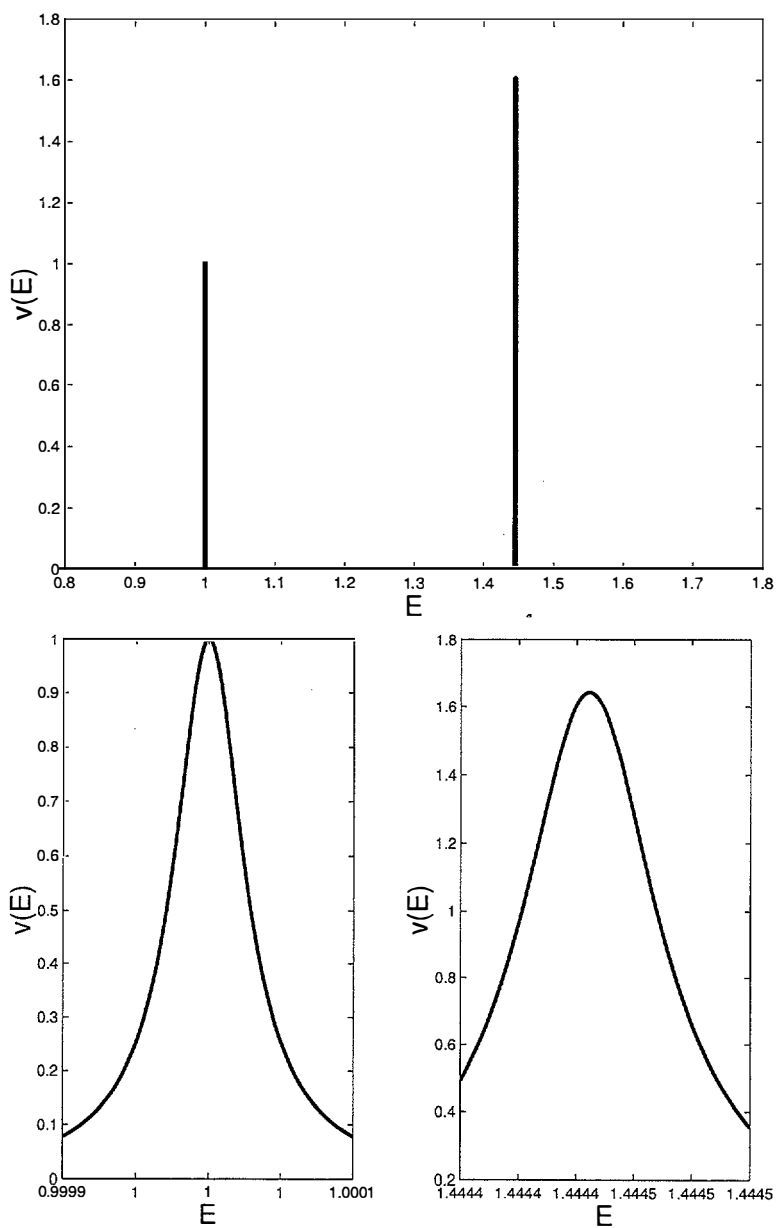


Figura 5.7: Función velocidad adimensional, zoom entorno de los dos máximos

Variable	Resonancia	Campo
$\tilde{E}_{c_1}$	$\Gamma_1 - \Gamma_1$	1363.6364 V/cm
$\tilde{E}_{c_2}$	$\Gamma_1 - X_1$	163636.3636 V/cm
$\tilde{E}_{c_3}$	$\Gamma_2 - X_2$	181818.1818 V/cm
$\tilde{E}_{c_4}$	$\Gamma_1 - \Gamma_2$	209090.9091 V/cm
$\tilde{E}_{c_5}$	$\Gamma_1 - X_2$	236363.6364 V/cm
$\tilde{E}_{c_6}$	$X_1 - \Gamma_2$	254545.4545 V/cm

Tabla 5.2: Campos criticos

A 17 V

$$\Gamma_1(1) - X_1\left(\frac{1}{2}\right) \Rightarrow \tilde{E}_{c_2} = \frac{2(180 - 90)}{q\tilde{d}} = \frac{180 \text{ meV}}{q\tilde{d}}$$

A 25 V

$$\Gamma_2(0) - X_2\left(\frac{1}{2}\right) \Rightarrow \tilde{E}_{c_3} = \frac{2(320 - 220)}{q\tilde{d}} = \frac{200 \text{ meV}}{q\tilde{d}}$$

$$\Gamma_1(1) - \Gamma_2(0) \Rightarrow \tilde{E}_{c_4} = \frac{320 - 90}{q\tilde{d}} = \frac{230 \text{ meV}}{q\tilde{d}}$$

$$X_2\left(\frac{1}{2}\right) - \Gamma_1(1) \Rightarrow \tilde{E}_{c_5} = \frac{2(220 - 90)}{q\tilde{d}} = \frac{260 \text{ meV}}{q\tilde{d}}$$

A 38 V

$$\Gamma_2(0) - X_1\left(\frac{1}{2}\right) \Rightarrow \tilde{E}_{c_6} = \frac{2(320 - 180)}{q\tilde{d}} = \frac{280 \text{ meV}}{q\tilde{d}}$$

Donde dejamos el valor de  $\tilde{E}_{c_1} = 1.5 \text{ meV}$  para el campo existente en la superred antes de aplicar ningún voltaje.

Teniendo en cuenta que  $q = 1.6021 \cdot 10^{-19} \text{ C}$  es la carga del electrón y  $\tilde{d} = 11 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$  la longitud del periodo de la superred tenemos los siguientes valores de campos críticos

Los campos críticos anteriores junto con los tiempos de tunneling nos van a servir para modelizar estas resonancias. Para ello utilizaremos funciones lorentzianas. En nuestro caso, siguiendo las referencias [75] y [54] tendrán la siguiente forma:



Variable	Resonancia	Tiempo estimado
$\tilde{\tau}_1$	$\Gamma_1 - \Gamma_1$	$10^{-9}$ s
$\tilde{\tau}_2$	$\Gamma_1 - X_1$	$10^{-11}$ s
$\tilde{\tau}_3$	$\Gamma_2 - X_2$	$2 \cdot 10^{-11}$ s
$\tilde{\tau}_4$	$\Gamma_1 - \Gamma_2$	$4.1 \cdot 10^{-10}$ s
$\tilde{\tau}_5$	$\Gamma_1 - X_2$	$10^{-11}$ s
$\tilde{\tau}_6$	$X_1 - \Gamma_2$	$2 \cdot 10^{-11}$

Tabla 5.3: *Tiempos de Resonancia*

$$\tilde{C}_j(\tilde{E}) = \frac{2\hbar\Omega_j^2}{q} \frac{a_j}{a_j^2 + (\tilde{E} - \tilde{E}_{c_j}^2)} \quad (5.17)$$

Siendo  $a_j = \frac{\hbar}{2\tilde{\tau}_j d q}$ ,  $\tilde{\tau}_j$  los tiempos de las resonancias,  $E_{c_j}$  el valor de campo eléctrico donde se alcanzan el máximo de la resonancia  $j$  y  $\Omega_j$  el hamiltoniano para la resonancia  $j$ .

En concreto  $\tilde{\tau}_1$  hemos puesto el que es conocido habitualmente,  $\tilde{\tau}_2$  y  $\tilde{\tau}_5$  los hemos sacado a partir de [25],  $\tilde{\tau}_4$  fue calculado por el profesor N. Ohtani para su experimento a partir del artículo de [77],  $\tilde{\tau}_3$  es un parámetro actualmente desconocido que determinamos, al igual que  $\tilde{\tau}_6$ , a sugerencia del profesor N.Ohtani. Los tiempos de resonancia aparecen en la Tabla 5.3

Con estos valores ya podemos calcular el valor de los hamiltonianos quedando los valores  $\Omega_2 = 0.1373755862 \cdot 10^{10}$  1/s y  $\Omega_5 = 0.1760797686 \cdot 10^{10}$  1/s. Como nos vamos a centrar en el segundo máximo elegiremos  $\tilde{v}_M = \tilde{v}_{M_2} = 83.03702742$  cm/s

Los tiempos de relajación nos definirán la tasa de relajación que vendrá dada por  $\tilde{K} = \frac{1}{\tilde{\tau}}$ . Estos tiempos son los que aparecen en la Tabla 5.4

Por cálculos y sugerencias del profesor N. Ohtani tenemos  $\tilde{t}_r$  de acuerdo con el artículo [70],  $\tilde{t}_x$  es actualmente desconocido y ha sido estimado de acuerdo con [56]. De igual forma, tomamos estos tiempos de recombinación que nos dan la tasa de recombinación mediante la fórmula  $\tilde{r}_j = \frac{1}{\tilde{n}_0 \tilde{\tau}_{r_j}}$ . Estos aparecen en la Tabla 5.5



Variable	Estados	Tiempo
$\tilde{t}_\Gamma$	$\Gamma_2 - \Gamma_1$	$10^{-12}$ s
$\tilde{t}_X$	$X_2 - X_1$	$10^{-12}$ s

Tabla 5.4: *Tiempos de Relajación*

Variable	Estados	Tiempo
$\tilde{r}_{r_1}$	$X_1 - hh1$	$10^{-6}$ s
$\tilde{r}_{r_2}$	$\Gamma_1 - hh1$	$10^{-9}$ s
$\tilde{r}_{r_3}$	$\Gamma_2 - hh1$	$10^{-8}$ s

Tabla 5.5: *Tiempos de Recombinación*

### 5.3 Soluciones estacionarias del sistema

Empezaremos reduciendo el sistema, estudiándolo en un intervalo de campo  $[\tilde{E}_0, \tilde{E}_f]$ , correspondiente al segundo y tercer máximos de la curva velocidad, para reducir las ecuaciones. Los valores de  $\tilde{E}_0 = 140000$  V/cm y  $\tilde{E}_f = 240000$  V/cm que corresponde al intervalo adimensional  $[0.8, 1.65]$  aproximadamente. En dicho intervalo parece razonable despreciar los valores de las funciones  $C_1$ ,  $C_1^b$ ,  $C_3$ ,  $C_4$  y  $C_6$  quedando las ecuaciones de la siguiente forma:

$$\frac{dX1_i}{dt} = \frac{1}{\alpha} C_2(E_{i-1}) N1_{i-1} + KX2_i - r_1 X1_i P_i \quad (5.18)$$

$$\frac{dX2_i}{dt} = \frac{1}{\alpha} C_5(E_{i-1}) N1_{i-1} - KX2_i \quad (5.19)$$

$$\frac{dN1_i}{dt} = -\frac{1}{\alpha} v(E_i) N1_i + \gamma + KN2_i - r_2 N1_i P_i \quad (5.20)$$

$$\frac{dN2_i}{dt} = -KN2_i - r_3 N2_i P_i \quad (5.21)$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \gamma - (r_1 X1_i + r_2 N1_i + r_3 N2_i) P_i \quad (5.22)$$

$$E_i - E_{i-1} = N1_i + N2_i + X1_i + X2_i - P_i \quad (5.23)$$

$$J(t) = \alpha \frac{dE_i}{dt} + v(E_i)N1_i \quad (5.24)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i = V \quad (5.25)$$

quedando ahora la  $v$  reducida a

$$v(E_i) = C_2(E_i) + C_5(E_i)$$

de manera que se sigue cumpliendo que  $v(1) = 1$  y que alcanza un segundo máximo en  $E = 1.4445$ . Recordando que los valores de las constantes son:  $r_1 = 1$ ,  $r_2 = 10^3$ ,  $r_3 = 10^2$ ,  $K = 10^6$ ,  $\alpha = 0.01325$  y  $\frac{1}{\alpha} = 75.4882$ . Podemos deducir de (5.21) que para  $t \rightarrow \infty$ ,  $N2_i \rightarrow 0$ . Así que la eliminamos de nuestro sistema. De igual forma para  $t \rightarrow \infty$  tenemos de (5.19) que

$$10^6 X2_i \approx \frac{1}{\alpha} C_5(E_{i-1}) N1_{i-1}$$

De (5.23) despejamos

$$X1_i = E_i - E_{i-1} - N1_i + P_i$$

De manera que tendremos como incógnitas  $N1_i$ ,  $P_i$ ,  $E_i$  y  $J$  y como ecuaciones la (5.25) y:

$$\frac{dN1_i}{dt} = -\frac{1}{\alpha} v(E_i) N1_i + \gamma - r_2 N1_i P_i$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \gamma - [E_i - E_{i-1} + P_i + (r_2 - 1) N1_i] P_i$$

$$\frac{dE_i}{dt} = \frac{1}{\alpha} [J(t) - v(E_i) N1_i]$$

y tomaremos como condición inicial  $E_0 = E_1$

### 5.3.1 Modelo final

Si además reescalamos las variables  $n = r_2 N_1 = 10^3 N_1$  y  $j = 10^3 J$ , y consideramos la nueva constante  $a = \frac{10^{-3}}{\alpha} = 0.0755$ , aproximamos  $1000 = r_2 \approx r_2 - 1 = 999$  y renombramos las variables  $X_1 = x$ ,  $P = p$ ,  $E = e$  y  $\gamma = g$  tendremos el finalmente el sistema:

$$10^{-3} \frac{dn_i}{dt} = -av(e_i)n_i + g - n_i p_i \quad (5.26)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = g - (e_i - e_{i-1} + p_i + n_i)p_i \quad (5.27)$$

$$\frac{de_i}{dt} = a[j(t) - v(e_i)n_i] \quad (5.28)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i = V \quad (5.29)$$

$$e_0 = e_1 \quad (5.30)$$

Recordamos que en este sistema todas las variables y parámetros son dimensionales,  $n_i$  es la densidad de electrones,  $p_i$  la densidad de huecos,  $e_i$  el campo eléctrico en el pozo  $i$ ,  $V$  el voltaje,  $g$  el laser,  $J$  la densidad de corriente,  $v$  la velocidad dada en la Figura 5.7. Y donde la ecuación (5.30) me da la condición inicial, las ecuaciones (5.26) y (5.27) son las ecuaciones de balance para las densidades de electrones y huecos, (5.28) la ecuación de Ampère para la densidad de corriente y (5.29) la ecuación de voltaje constante.

Iniciamos el análisis del modelo estudiando las soluciones estacionarias.

$$0 = -av(e_i)n_i + g - n_i p_i \quad (5.31)$$

$$0 = g - (e_i - e_{i-1} + p_i + n_i)p_i \quad (5.32)$$

$$0 = a[j - v(e_i)n_i] \quad (5.33)$$

Además de (5.29) y (5.30).

### 5.3.2 Soluciones estacionarias uniformes

Empezamos estudiando las soluciones estacionarias que no dependan del pozo en el que estemos, esto es:  $e_i \equiv e$ ,  $n_i \equiv n$ ,  $p_i \equiv p$ , de manera que de la (5.29) tenemos  $e = V$ , de (5.33)  $j = v(e)n$ , de la ecuación (5.32) Obtenemos  $p$  en función de  $n$

$$p = \frac{\sqrt{n^2 + 4g} - n}{2}$$

quedando sólo tener que resolver la ecuación

$$av(e)n + n \frac{\sqrt{n^2 + 4g} - n}{2} = g$$

Esto es,

$$n^2 - n\sqrt{n^2 + 4g} - 2av(e)n + 2g = 0 \quad (5.34)$$

Resolvemos esta ecuación (5.34) numéricamente y representamos en la Figura 5.8 la corriente con respecto al voltaje  $V \in [0.8, 1.65]$  según distintos valores de laser aplicado dado por el valor de  $g$ . Observamos que a medida que va aumentando el valor de  $g$  aumenta la corriente pasando de una soluciones más suaves a soluciones con derivadas más grandes.

### 5.3.3 Soluciones estacionarias no uniformes

Volvemos ahora con la ecuaciones (5.29) a (5.33) y observamos que las soluciones estacionarias han de cumplir que:

$$n_i = \frac{j}{v(e_i)} \quad p_i = \frac{(g - aj)v(e_i)}{j} \quad \frac{g}{p_i} = e_i - e_{i-1} + p_i + n_i$$

De manera que:

$$e_{i-1} = e_i + \frac{j}{v(e_i)} + \frac{(g - aj)v(e_i)}{j} - \frac{gj}{(g - aj)v(e_i)}$$

Consideramos la función

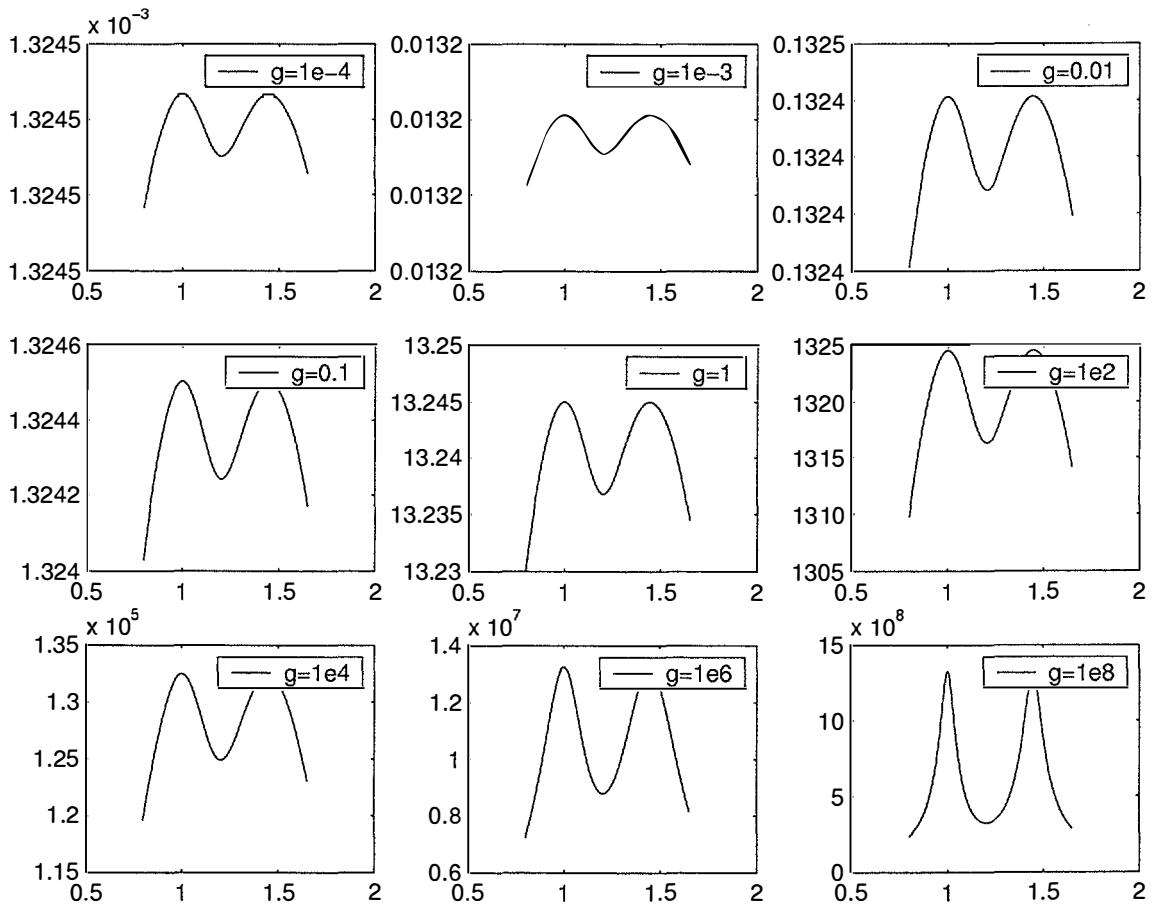


Figura 5.8: J-V. Soluciones Estacionarias Uniformes para diferentes valores de  $g$

$$f(e; g, j) = e + \frac{j}{v(e)} + \frac{(g - aj)v(e)}{j} - \frac{gj}{(g - aj)v(e)} \quad (5.35)$$

entonces los puntos fijos de esta función serán soluciones estacionarias del sistema que cumplen (5.30). Por los experimentos y por el comportamiento de materiales similares a este estamos interesados en estudiar las soluciones estacionarias que tengan dos o más dominios. Vamos a estudiar según los distintos valores de  $g$  y  $j$  cuántas puntos fijos tendrá la función  $f$  en el intervalo que estudiamos.

$$f(e; g, j) = e; \quad \Rightarrow \quad \frac{j}{v(e)} + \frac{(g - aj)v(e)}{j} = \frac{gj}{(g - aj)v(e)}$$

$$\frac{j^2 + (g - aj)v^2(e)}{jv(e)} = \frac{gj}{(g - aj)v(e)} \quad \Rightarrow \quad j^2(g - aj) + (g - aj)^2v^2(e) = gj^2$$

$$(g - aj)^2v^2(e) = aj^3 \quad \Rightarrow \quad v(e) = \frac{\sqrt{aj^{3/2}}}{g - aj}$$

Los valores de  $e$  en los que se verifique esta ecuación serán los puntos fijos de  $f$ . Como conocemos  $v$  (ver la Figura 5.7), sabemos que en el intervalo  $[0.8, 1.65]$  alcanza dos máximos en  $e_{M_1} = 1$  donde  $v(e_{M_1}) = 1$  y  $e_{M_2} = 1.4444$  donde  $v(e_{M_2}) = 1.6424$  y un mínimo en  $e_m = 1.2038$  donde  $v_m = v(e_m) = 4.4e^{-8}$ . Como  $v(0.8552299) = v_m = v(1.625904)$  tenemos que en el intervalo  $(0.8552299, 1.625904)$  si  $v_m \leq \frac{\sqrt{aj^{3/2}}}{g - aj} \leq 1$  o lo que es lo mismo,  $1.62e^{-7} < \frac{j^{3/2} + 0.27j}{g} < 3.64$  tendremos 4 puntos fijos y podremos construir soluciones con dos dominios. Para el resto de valores o no tendremos solución, o tendremos solamente un punto fijo en cuyo caso sólo serán posibles las soluciones estacionarias uniformes. En la Figura 5.9 hemos construido un perfil para  $g = 500$  y  $j = 0.01$

Hemos estudiado la estabilidad lineal de las soluciones uniformes de forma numérica y no hemos llegado a ninguna conclusión ya que obteníamos autovalores positivos y negativos para todas las soluciones.

También hemos integrado el sistema con condición inicial un escalón con la primera y la tercera de las soluciones uniformes (y con la segunda y la cuarta) y no se nos ha movido. Es posible que para este par de valores de los parámetros estemos en una *zona*

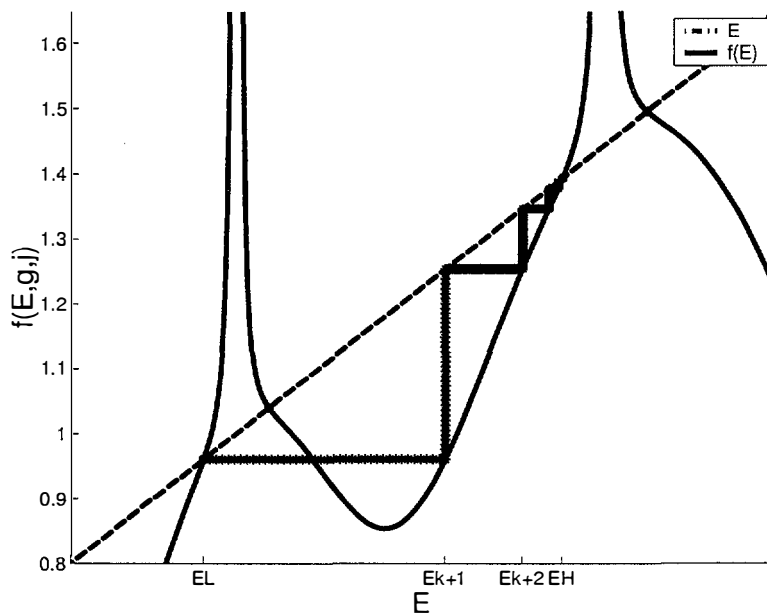


Figura 5.9: Perfil para una solución con dos dominios con  $g = 500$  y  $j = 0.01$

de anclaje (al ser dos dimensiones de parámetro posiblemente no hablemos de intervalo de anclaje si no de algún área de anclaje). Pero esto será un estudio que hagamos más adelante.

## 5.4 Conclusiones

En este capítulo hemos propuesto un modelo discreto vectorial para el transporte de electrones en superredes semiconductoras. Hemos dado su versión adimensional y reducida. Hemos calculado las soluciones estacionarias uniformes y no uniformes. Por otra parte, Necesitamos otras herramientas para estudiar la dinámica de este sistema, en particular las que estamos desarrollando en el grupo para abordar la dinámica de los sistema discretos en espacio. Mas adelante buscaremos soluciones de tipo frente o pulso para este sistema.





# Capítulo 6

## Conclusiones

En esta memoria hemos estudiado soluciones de tipo frente viajero en modelos unidimensionales espacialmente discretos con fuentes no lineales de tipo biestable. En el Capítulo 2 hemos estudiado el efecto del desorden en la transición anclaje-propagación en modelos sobreamortiguados. Dicho efecto consiste en que se suaviza el exponente crítico de la velocidad pasando de  $1/2$  a  $3/2$ , además de reducir el intervalo de anclaje. En el Capítulo 3 estudiamos modelos de osciladores amortiguados sujetos a una fuerza externa  $F$ . Los resultados numéricos muestran que a medida que decrece la intensidad de la fricción nos vamos alejando del caso sobramortiguado y se generan frentes con perfiles oscilatorios. La magnitud de las oscilaciones en la región de transición entre las constantes hasta llegar a valores donde es difícil distinguir si las estructuras observadas son ondas viajeras. También se ha observado, a diferencia del caso sobreamortiguado, la coexistencia de frentes estacionarios y viajeros para el mismo valor de la fuerza externa. Este fenómeno de coexistencia tiene una interpretación física en términos de tensiones de Peierls estáticas y dinámicas. En el Capítulo 4 hemos estudiado modelos conservativos. El estudio de la dinámica sin fricción es más complejo que los anteriores y es preciso recurrir a nuevas estrategias. Hemos construido soluciones utilizando un método inverso y métodos de variable compleja. Se observa la posible coexistencia de familias de ondas viajeras moviéndose a diferentes velocidades por encima de un valor crítico del parámetro  $F$ . Este valor crítico puede hacerse cero por alguna no linealidad y en general es menor que el valor de  $F$  para el cual dejan de existir soluciones

estacionarias. Por último, en el Capítulo 5 proponemos un modelo discreto vectorial para el transporte de electrones en superredes semiconductoras, damos su versión adimensional y una reducida. Hemos calculado soluciones estacionarias uniformes y no uniformes.

Son fruto de este trabajo los artículos:

*“Effects of disorder on the wave front depinning in spatially discrete systems”*, A. Carpio, L.L. Bonilla, and A. Luzón, , *Physical Review E*, 65, 035207, 1-4, 2002.

*“Stability of wavefronts in discrete damped chains”*, A. Carpio, A. Luzón, enviado a *Math. Meth. Mod. Appl. Sci.*

Actualmente estamos trabajando en la extensión de los resultados del Capítulo 4 sobre existencia de familias de ondas viajeras con perfiles de tipo frente no monótono a fuentes biestables más generales que las lineales a trozos. También estamos trabajando en la construcción de soluciones con estructura de pulso viajero para el modelo propuesto en el capítulo 5.

Posibles trabajos futuros pueden consistir en ver si las características estudiadas en el Capítulo 2 son robustas y se mantienen bajo efectos fuertes de desorden. Una indicación interesante la proporciona el hecho de que el exponente crítico  $3/2$  se obtiene independientemente de la fuerza del ruido en modelos de campo medio de ondas de densidad de carga [28, 29].

# Bibliografía

- [1] M.J. Ablowitz, B.M. Herbst, "On homoclinic structure and numerically induced chaos for the nonlinear Schrodinger equation", SIAM J. Appl. Math., 50, 339-351, 1990.
- [2] M.J. Ablowitz, B.M. Herbst, C.M. Schober, "Discretizations, integrable systems and computation", J. Phys. A: Math. gen., 34, 10671-10693, 2001.
- [3] M.J. Ablowitz, Z.H. Musslimani, G. Biondini, "Methods for discrete solitons in nonlinear lattices", Phys. Rev. E, 65, 026602-026605, 2002.
- [4] D.G. Aronson, H.F. Weinberger, "Nonlinear diffusion in population genetics, combustion and nerve pulse propagation in PDE and related topics", Lect. N. Math. 446, 5-49, Springer, Berlin 1975.
- [5] W. Atkinson, N. Cabrera, "Motion of a Frenkel-Kontorova dislocation in a one-dimensional crystal", Phys. Rev., 138, 3A, 763-766, 1965.
- [6] R. Bellman and Cooke, "Differential-difference equations", Academic Press, New York, 1963.
- [7] L.L. Bonilla "Dynamics of Electric Field Domains in Supelattices", NonLinear Dynamics and Pattern Formation in Semiconductors, Editado por F. J. Niedernostheide, Cap.1, Springer, Berlin, 1995.
- [8] L.L. Bonilla, J. Galán, J.A. Cuesta, F.C. Martinez, and J.M. Molera, "Dynamics of electric-field domains and oscillations of the photocurrent in a simple superlattice model", Physical Review B, 50, 8644-8657, 1994.

- [9] L.L. Bonilla, G. Platero and D. Sanchez , “*Microscopic derivation of transport coefficients and boundary conditions in discrete drift-diffusion models of weakly coupled superlattices*” , Physical Review B, 62, 2786-2796, 2000.
- [10] L.L. Bonilla, “*Small-signal analysis of spontaneous current instabilities in extrinsic semiconductors with trapping: Application to ultrapure p-type germanium*”, Physical Review B, 45, 11642-11654 , 1992.
- [11] L.L. Bonilla and S. W. Teitsworth, “*Theory of periodic and solitary space charge waves in extrinsic semiconductors*”, Physica D, 50, 545-559 , 1991.
- [12] O.M. Braun and Yu.S. Kivshar, “*Nonlinear dynamics of the Frenkel-Kontorova model*”, Phys. Rep., 306, 1-108, 1998.
- [13] A.E. Bugrim, A.M. Zhabotinsky and I.R. Epstein, “*Calcium waves in a model with random spatially discrete distribution of Ca<sup>2+</sup> release sites*”, Biophys. J., 73, 2897-2906, 1997.
- [14] G.C. Canavos, “*Probabilidad y Estadística. Aplicaciones y Métodos*”, McGrawHill. 1988.
- [15] A. Carpio and L.L. Bonilla, “*Wave Front Depinning Transition in Discrete One-Dimensional Reaction-Diffusion Systems*”, Physical Review Letters, 86, 6034-6037, 2001.
- [16] A. Carpio and L.L. Bonilla, “*Edge dislocations in crystal structures cosidered as traveling waves of discrete models* ”, Preprint.
- [17] A. Carpio, L.L. Bonilla, “*Wave front depinning transitions in discrete reaction-difussion systems*”, SIAM J. Appl. Math., Aceptado.
- [18] A. Carpio, L.L. Bonilla, and G. Dell’Acqua, “*Motion of wavefronts in semiconductor superlattices*”, Physical Review E, 64, 036204, 1-9, 2001.
- [19] A. Carpio, L.L. Bonilla, and A. Luzón, “*Effects of disorder on the wave front depinning in spatially discrete systems*”, Physical Review E, 65, 035207, 1-4, 2002.

- [20] A. Carpio, L.L. Bonilla, A. Wacker and E. Schöll, “*Wavefronts may move upstream in doped semiconductor superlattices*”, *Physical Review E*, 61, 4866-4876, 2000.
- [21] A. Carpio, A. Luzón, “*Stability of wavefronts in discrete damped chains*”, enviado a *Math. Meth. Mod. Appl. Sci.*
- [22] A. Carpio, S.J. Chapman, S. Hastings y J.B. McLeod, “*Wave solutions for a discrete reaction-diffusion equation*”. *Eur. J. Appl. Math.*, 11, 399-412, 2000.
- [23] P.M. Chaikin and T. C. Lubensky, “*Principles of Condensed Matter Physics*”, Cambridge University Press, Cambridge, Chap. 10, 1995.
- [24] G. Fáth, “*Propagation failure of traveling waves in a discrete bistable medium*”, *Physica D*, 116, 176-190, 1998.
- [25] J. Feldmann, J. Nunnenkamp, G. Peter and E. Göbel, J. Kuhl and K. Ploog, P. Dawson and C. T. Foxon, “*Experimental study of the  $\Gamma - X$  transfer in type-II (Al,Ga)As/AlAs superlattices and multiple-quantum-well structures*”, *Physical Review B*, 42, 5809-5821, 1990.
- [26] W. Feller, “*An introduction to Probability Theory and Its Applications*”, Second Edition, John Wiley and Sons, New York, 1966.
- [27] A.M. Filip, S. Venakides, “*Existence and modulation of traveling waves in particle chains*”, *Comm. Pure Appl. Maths.*, LII, 0693-0735, 1999.
- [28] D.S. Fisher, “*Threshold Behavior of Charge-Density Waves Pinned by Impurities*”, *Phys. Rev. Lett.*, 50, 1486-1489, 1983.
- [29] D.S. Fisher, “*Sliding charge-density waves as a dynamic critical phenomenon*”, *Phys. Rev. B*, 31, 1396-1427, 1985.
- [30] S. Flach, Y. Zolotaryuk, K. Kladko, “*Moving lattice kinks and pulses: an inverse method*”, *Phys. Rev. E*, 59(5), 6105-6115, 1999.
- [31] J. Frenkel and T. Kontorova, “*On the theory of plastic deformation and twinning*”, *J. Phys. USSR*, 13, 1-10, 1938.

- [32] J. E. Freund, I. Miller, M. Miller, *"Estadística matemática con aplicaciones"* Sexta Edición. Prentice Hall. 2000.
- [33] G. Friesecke, J.A.D. Wattis, *"Existence theorem for solitary waves on lattices"*, *Comm. Math. Phys.*, 161, 391-418, 1994.
- [34] G. Grüner, *"The dynamics of charge-density waves"* *Rev. Mod. Phys.*, 60, 1129-1181, 1988;
- [35] S.P. Hastings, X. Chen, *"Pulse waves for a semi-discrete Morris-Lecar type model"*, *J. Math. Biol.*, 38, 1-20, 1999.
- [36] R. Hobart, *"Peierls-barrier minima"*, *J. Appl. Phys.*, 36, 1948-1952, 1965.
- [37] M. Hosoda, H. Mimura, N. Ohtani, K. Tominaga, K. Fujita, T. Watanabe and H. Inomata, *"Observation of  $\Gamma - X$  resonances in type-I GaAs/AlAs semiconductor superlattices: Anomaly in photoluminescence"*, *Physical Review B*, 55, 13689-13696, 1997.
- [38] M. Hosoda, K. Tominaga, N. Ohtani, H. Mimura, M. Nakayama, *"Influence of  $\Gamma - X$  resonance on ground state electron occupation in type-I GaAs/AlAs superlattice"*, *Applied Physics Letters*, 70, 1581-1583, 1997.
- [39] M. Hosoda, N. Ohtani, H. Mimura, K. Tominaga, P. Davis and T. Watanabe, G. Tanaka and K. Fujiwara, *"Evidence for  $\Gamma - X$  transport in type-I GaAs/AlAs semiconductor superlattice"*, *Physical Review Letters*, 75, 4500-4503, 1995.
- [40] V.L. Indenbom, *"Mobility of dislocations in the Frenkel-Kontorova model"*, *Soviet Phys. Crystallogr.*, 3, 193-201, 1959.
- [41] G. Ioos, K. Kirchgassner, *"Traveling waves in a chain of coupled nonlinear oscillators"*, *Comm. Maths. Phys.*, 211, 439-464, 2000.
- [42] J. P. Keener, *"Propagation and its failure in coupled systems of discrete excitable cells"*, *SIAM J. Appl. Math.*, 47, 556-572, 1987.
- [43] J.P. Keener and J. Sneyd, *"Mathematical Physiology"*, Springer, N.Y., Chap. 9, 1998.

- [44] J.R. King, S.J. Chapman, "Asymptotics beyond all orders and Stokes lines in nonlinear differential-difference equations", *Eur. J. Appl. Maths.*, 12, 433-463, 2001.
- [45] K. Kladko, I. Mitkov and A. R. Bishop, "Universal scaling of wave propagation failure in arrays of coupled nonlinear cells", *Physics Review Letters*, 84, 4505-4508, 2000.
- [46] K. Kuroyanagi, N. Ohtani, N. Egami, K. Tominaga, M. Ando and M. Nakayama, "Photoluminescence from barrier-X state in GaAs-AlAs strained superlattices under applied bias voltage", *Physica Status Solidi B*, 204, 187-190, 1997.
- [47] M. Löcher, G.A. Johnson and E.R. Hunt, "Spatiotemporal Stochastic Resonance in a System of Coupled Diode Resonators", *Physics Review Letters*, 77, 4698-4701, 1996.
- [48] J. Mallet-Paret, "The Fredholm alternative for functional differential equations of mixed type", *J. Dyn. Diff. Eqs.*, 11(1) 1-48, 1999.
- [49] J. Mallet-Paret, "The global structure of traveling waves in spatially discrete dynamical systems", *J. Dyn. Diff. Eqs.*, 11(1), 49-127, 1999.
- [50] H. Mimura, M. Hosoda, N. Ohtani, K. Tominaga, K. Fujita and T. Watanabe, H.T. Grahn and K. Fujiwara, "Electric-field domain formation in type-II superlattices", *Physical Review B*, 54, 2323-2326, 1996.
- [51] J.B. McLeod, "Comunicación privada".
- [52] A.A. Middleton, "Asymptotic uniqueness of the sliding state for charge-density waves", *Phys. Rev. Lett.*, 68, 670-673, 1992.
- [53] P.D. Miller, O. Bang, "Macroscopic dynamics in quadratic nonlinear lattices", *Phys. Rev. E*, 57(5), 6038-6049, 1998.
- [54] M.A. Moscoso, "Estructuras espacio-temporales en superredes semiconductoras dopadas", Tesis doctoral, 1997.
- [55] F.R.N. Nabarro, "Theory of Crystal Dislocations", Oxford University Press, Oxford, 1967.

- [56] M. Nakayama, I. Tanaka, I. Kimura and H. Nishimura, "*Photoluminescence Properties of GaAs/AlAs Short-Period Superlattices*", Japanese Journal of Applied Physics, 29(1), 41-47, 1990.
- [57] N. Ohtani, N. Egami, H.T. Grahn and K. H. Ploog and L.L. Bonilla, "*Transition between static and dynamic electric-field domain formation in weakly coupled GaAs/AlAs superlattices*", Physical Review B, 58, 7528-7531, 1998.
- [58] N. Ohtani, M. Hosoda, H. T. Grahn, "*Photocurrent in a direct-gap GaAs-AlAs*", Applied Physics Letters, 70, 375-377, 1997.
- [59] N. Ohtani, N. Egami, H.T. Grahn and K. H. Ploog, "*Carrier density dependence of transitions between chaotic and periodic photocurrent oscillations in undoped GaAs/AlAs superlattices*", Physica B, 248, 878-881, 1998.
- [60] N. Ohtani, N. Egami, H.T. Grahn and K. H. Ploog, "*Phase diagram of static and dynamic electric field domain formation in semiconductor superlattices*", Physica B, 272, 205-208, 1999.
- [61] N. Ohtani, N. Egami, H.T. Grahn and K. H. Ploog, "*Phase diagram of static and dynamic electric field domain formation in weakly coupled GaAs/AlAs superlattices*", Physical Review B, 61, 5097-5100, 1999.
- [62] N. Ohtani, N. Egami, K. Fujiwara and H.T. Grahn, "*Photocurrent self-Oscillations in undoped GaAs/AlAs superlattices modulated by an external AC voltage*", Solid-State Electronics, 42, 1509-1513, 1998.
- [63] N. Ohtani, N. Egami, K. Kuroyanagi, M. Ando, M. Hosoda, H.T. Grahn and K. H. Ploog, "*Current self-oscillations in undoped, photoexcited GaAs/AlAs type-I superlattices*", Physica Status Solidi B, 204, 489-492, 1997.
- [64] N. Ohtani, M. Hosoda, H. Mimura, K. Tominaga and T. Watanabe, K. Fujiwara, H.T. Grahn, "*Current self-oscillation originating from resonant tunneling through X states in GaAs/AlAs type-II superlattices*", 23rd International Conference on the Physics of semiconductor. World Scientific. Singapore, 3, 1675-1678, 1996.



- [65] N. Ohtani, M. Hosoda, H. Mimura, K. Tominaga and T. Watanabe, "*Stark ladder Photoluminescence of X states in GaAs/AlAs type-I superlattices*", Jpn. J. Appl. Phys., 36, 1884-1887, 1997.
- [66] N. Ohtani, C. Domoto, N. Egami, H. Mimura, M. Ando, M. Nakayama and M. Hosoda, "*Electric-field-induced combination of Wannier Stark localization and type-I-type-II crossover in marginal type-I GaAs/AlAs superlattice*", Physical Review B, 61, 7505-7510, 2000.
- [67] M. Peyrad, M.D. Kruskal, "*Kink dynamics in the highly discrete sine Gordon system*", Physica D, 14, 88-102, 1984.
- [68] O. Pla, F. Guinea, E. Louis, S. V. Ghaisas and L.M. Sander, "*Straight cracks in dynamic brittle fracture*", Phys. Rev. E, 61, 11472-11486, 2000.
- [69] F. Prengel, A. Wacker and E. Schöll, "*Simple model for multistability and domain formation in semiconductor superlattices*", Physical Review B, 50, 1705-1712, 1994.
- [70] H. Rüker, E. Molinari and P. Lugli "*Microscopic calculation of electron-phonon interaction in quantum wells*", Physical Review B, 45, 6747-6756, 1992.
- [71] J. Sanz Serna, M.P. Calvo, "*Numerical hamiltonian problems*", Chapman & Hall, London, 1994.
- [72] L.I. Slepyan, "*Dynamics of a crack in a lattice*", Sov. Phys. Dokl., 26, 538-540, 1981.
- [73] J.M. Speight, "*Topological discrete kinks*", Nonlinearity, 12, 1373-1387, 1999.
- [74] J.M. Speight, R.S. Ward, "*Kink dynamics in a novel discrete sine-Gordon system*", Nonlinearity, 7, 475-484, 1994.
- [75] B.Q. Sun, J.N. Wang, D.S. Jiang, J.Q. Wu, Y. Q. Wang, W.K. Ge, "*Self-sustained oscillations caused by magnetic field in a weakly-coupled GaAs/AlAs superlattice*", Physica B, 279, 220-223, 2000.
- [76] P. Szuromi, D. Clery, "*Control and use of defects in materials*", Science, 281, 939, 1998.

- [77] S.Tarucha and K. Ploog, "*Sequential resonant tunneling characteristics of GaAs/AlAs multiple-quantum-well structures*", Physical Review B, 38, 4198-4204 , 1988.
- [78] A. Wacker, "*Theory and Transport Properties of Semiconductor Nanostructures*", Ed. E. Schöll, Chapman and Hall, New York, Chap. 10, 1998.
- [79] G.B. Whitham, "*Linear and nonlinear waves*", Pure and Applied Mathematics, Wiley & Sons Inc., 1974.
- [80] H.C. Yee, P.K. Sweby, D.F. Griffiths, "*Dynamical approach study of spurious steady state numerical solutions of nonlinear differential equations: The dynamics of time discretization and its implications for algorithm development in computational fluid dynamics*", J. Comp. Phys., 97, 249-310, 1991.
- [81] H.S.J. van der Zant, T.P. Orlando, S. Watanabe and S.H. Strogatz, "*Kink Propagation in a Highly Discrete System: Observation of Phase Locking to Linear Waves*", Phys. Rev. Lett., 74, 174-177, 1995.
- [82] B. Zinner, "*Existence of traveling wavefront solutions for the discrete Nagumo equation*". J. Diff. Eqs., 96, 1-27, 1992.