



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE FÍSICA

“DINÁMICA DE ORDENAMIENTO
EN PATRONES DE FRANJAS OBLICUAS”

TESIS
*QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS
(FÍSICA)
PRESENTA:
JUAN RUBÉN GÓMEZ SOLANO*

DIRECTOR DE TESIS: DR. DENIS PIERRE BOYER
MIEMBRO DE COMITÉ: DR. JOSÉ LUIS MATEOS TRIGOS
MIEMBRO DE COMITÉ: DR. ROLANDO CASTILLO CABALLERO.



posgrado en ciencias físicas
u n a m

MÉXICO, D.F.

ABRIL DE 2007.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Índice general

1. Introducción	3
2. Aspectos generales	7
2.1. Introducción	7
2.2. Convección de Rayleigh-Bénard	9
2.3. Modelos de formación de patrones	12
2.3.1. El modelo de Swift-Hohenberg	12
2.3.2. Ecuación de Ginzburg-Landau compleja	16
2.3.3. Modelos potenciales y no potenciales	17
2.4. Defectos topológicos	19
3. Patrones anisotrópicos en cristales líquidos nemáticos	22
3.1. Introducción	22
3.2. Propiedades generales de los nemáticos	23
3.3. Formación de patrones anisotrópicos en electroconvección de nemáticos con alineación plana	24
4. Modelos de ordenamiento de fases de franjas oblicuas anisotrópicas	32
4.1. <i>Coarsening</i> en sistemas con simetrías rotas	32
4.2. Ecuaciones modelo	35
4.2.1. Análisis lineal	37
4.2.2. Análisis débilmente no lineal	38
4.3. Solución numérica	44
5. Resultados de <i>coarsening</i>	50
5.1. Selección del número de onda	52
5.2. Evolución temporal de las longitudes de correlación	54
5.3. Evolución temporal de las densidades de defectos	60
5.4. Escalamiento dinámico	68
5.5. Discusión	81
5.5.1. Reducción al modelo A bajo la influencia de un campo externo	81
5.5.2. Dinámica no relajacional de defectos lejos del umbral	89
5.5.3. Comparación con experimentos previos en electroconvección	90

6. Efectos no adiabáticos sobre interfaces en patrones de franjas oblicuas	94
6.1. Introducción	94
6.2. Solución numérica para el perfil de una interfaz plana	96
6.3. Correcciones no adiabáticas	98
6.4. Resultados numéricos	104
7. Conclusiones	107
A. Métodos numéricos de solución	110

Capítulo 1

Introducción

El *coarsening* (maduración o embastecimiento) es un proceso que ocurre cuando un sistema es llevado rápidamente por un punto de bifurcación o transición a un estado de menor simetría y se forman dominios correspondientes a las fases de simetría rota. El tamaño promedio de los dominios crece en el tiempo debido a la dinámica de los defectos topológicos presentes (interfaces, dislocaciones, etc.). Puede ser un proceso transitorio de un estado inicial de equilibrio a un estado final asintótico también de equilibrio, como ocurre en transiciones ferromagnéticas, separación de fases fluidas y descomposición espinodal de aleaciones binarias, por citar los más conocidos [1]. En estos ejemplos, el sistema puede ser caracterizado por un parámetro de orden local que es uniforme cuando el sistema está ordenado. Mientras el sistema se ordena, a tiempos suficientemente grandes existe una única longitud característica, $L(t)$, relacionada con el tamaño promedio de los dominios, que crece en el tiempo obedeciendo una ley de potencias $L(t) \sim t^n$ (con correcciones logarítmicas en algunos casos especiales). El *coarsening* obedece en muchos casos una relación de escalamiento dinámico [1, 2]. Esto significa que la estructura de dominios, medida mediante funciones de correlación espaciales, es independiente del tiempo después de escalar las coordenadas espaciales por $L(t)$. Se han establecido esquemas de crecimiento de dominios relativamente simples en estos casos, obtenidos a partir de la dinámica de defectos topológicos y de la hipótesis de escalamiento dinámico [2, 3, 4, 5]. Por ejemplo, se tiene que $n = 1/3$ para sistemas caracterizados por un parámetro de orden local conservado [6], mientras que $n = 1/2$ en el caso no conservado [7].

El estudio de la dinámica de ordenamiento en sistemas formando patrones periódicos (fases moduladas) resulta más complejo que el de fases uniformes. Los patrones periódicos se observan en una gran variedad de sistemas espacialmente extendidos debido a mecanismos de inestabilidad que rompen la simetría inicial del sistema [8]. Pueden aparecer como estados asintóticos de equilibrio termodinámico, como es el caso de franjas en copolímeros de dibloque y dominios magnéticos en películas delgadas [9, 10]. Asimismo, pueden aparecer en forma de estructuras disipativas en sistemas fuera de equilibrio, como respuesta a un forzamiento externo. Algunos ejemplos de este último caso son los patrones de franjas en la convección térmica de fluidos, capas de líquidos sometidas a vibraciones verticales (experimento de Faraday) y electroconvección de cristales líquidos nemáticos [8, 11, 12, 13, 14]. La presencia de modulaciones espaciales localmente periódicas, así como de diversos defectos

topológicos, puntuales o entendidos, produce una dinámica de ordenamiento más compleja que en sistemas con parámetro de orden local uniforme. La existencia de diferentes escalas de longitud características, la hipótesis de escalamiento dinámico y los mecanismos físicos que controlan el *coarsening* aún son puntos debatibles y polémicos para sistemas espacialmente modulados. En general, no existen esquemas de clasificación simples como en el caso de sistemas caracterizados por un parámetro de orden local uniforme. En el caso de formación de franjas en sistemas isotrópicos bidimensionales, se han logrado algunos avances significativos mediante estudios experimentales y numéricos. Contrariamente al caso de las fases uniformes, se observa que en general las leyes de crecimiento dependen de la profundidad del *quench* (la distancia al punto de bifurcación), de la presencia de ruido térmico y del método empleado para extraer la longitud característica en el *coarsening*. Se han observado leyes de crecimiento de la forma $L(t) \sim t^{1/z}$, con z variando en el intervalo (2, 5) en simulaciones numéricas basadas en modelos de Swift-Hohenberg [15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22], mientras que el valor $z = 4$ ha sido obtenido experimentalmente en copolímeros de dibloque [23, 24] y capas granulares con vibración vertical [25].

Por otro lado, hay un interés creciente en el estudio de la dinámica de ordenamiento de sistemas de franjas anisotrópicas debido a la realización reciente de experimentos de *coarsening* en electroconvección de nemáticos [26, 27, 28]. Este sistema consiste en una capa delgada de nemático dopada con impurezas iónicas, confinada entre dos placas paralelas de vidrio. Las placas están tratadas adecuadamente para alinear el campo director del nemático en equilibrio (la dirección media de sus moléculas) en una dirección fija (\hat{x}). El nemático es llevado fuera de equilibrio mediante la aplicación de un campo eléctrico perpendicular al plano de las placas. Cuando el valor de la amplitud del campo eléctrico está por arriba de un valor umbral, a una frecuencia fija, el estado uniforme se vuelve inestable y aparecen rollos de convección. Dos tipos de patrones anisotrópicos se forman como bifurcación primaria dependiendo de la frecuencia: rollos normales (orientados perpendicularmente a \hat{x}) y rollos oblicuos (zig-zag) [29]. La dinámica de ordenamiento de estos últimos es el objetivo de estudio en el presente trabajo de tesis. El vector de onda de los rollos oblicuos forma únicamente dos ángulos posibles (θ o $-\theta$) con \hat{x} . Dicha restricción geométrica conduce a la formación de dos tipos de defectos topológicos: dislocaciones y fronteras de chevrons horizontales. Asimismo, evita la formación de disclinaciones, que aparecen en sistemas isotrópicos. A diferencia de los sistemas de franjas isotrópicas, la dinámica de defectos es altamente anisotrópica. Se ha observado (numérica y experimentalmente) un régimen en el cual las fronteras de chevrons permanecen bloqueadas e inmóviles mientras que el *coarsening* es controlado por el movimiento y la aniquilación prácticamente horizontal de dislocaciones [27, 30]. La dinámica anisotrópica de defectos conduce a leyes de crecimiento de dominios diferentes en las direcciones \hat{x} y \hat{y} [27]. Además, de manera similar a los sistemas de franjas isotrópicas, algunos resultados numéricos basados en un modelo anisotrópico de Swift-Hohenberg revelan que la dinámica de ordenamiento se vuelve lenta debido a efectos denominados “no adiabáticos” a medida que se incrementa la profundidad del *quench* [30].

La electroconvección en nemáticos es un fenómeno de gran complejidad y los modelos empleados para su estudio son básicamente fenomenológicos [31, 32, 33, 34]. Los trabajos numéricos realizados hasta ahora están basados en modelos de Swift-Hohenberg con estruc-

tura potencial. Lo anterior significa que las ecuaciones derivan de un funcional de energía libre, que determina la dinámica asintótica del sistema por un principio de minimización. Sin embargo, la dinámica de sistemas fuera de equilibrio queda en principio mejor descrita por ecuaciones no potenciales (que no derivan de ningún funcional), sobre todo lejos del umbral de bifurcación [13, 35]. Los modelos no potenciales pueden dar lugar a una dinámica de formación de patrones muy diferente a su versión potencial. Por ejemplo, en sistemas de franjas isotrópicas se ha observado que al incorporar términos no potenciales a la ecuación clásica de Swift-Hohenberg, la dinámica de ordenamiento cambia lejos del umbral de bifurcación. A diferencia del caso potencial, en donde el *coarsening* es controlado por el movimiento de fronteras de grano [19, 20], en un caso no potencial está controlado por el movimiento de dislocaciones aisladas [17]. Los efectos no potenciales afectan dramáticamente la selección del número de onda del patrón periódico y las leyes de crecimiento de las longitudes de correlación. Además, algunas simulaciones numéricas de las ecuaciones de Boussinesq para la convección de Rayleigh-Bénard sugieren que es necesario extraer varias escalas de longitud, definidas de distintas maneras, para describir correctamente el *coarsening* de sistemas no potenciales [36, 37]. Motivados por estos resultados y considerando que la electroconvección es un proceso forzado fuera de equilibrio, en la presente tesis se proponen modelos reducidos no potenciales de formación de patrones de franjas oblicuas, que capturan las propiedades generales de estabilidad y simetría observadas experimentalmente. Para caracterizar el *coarsening*, se estudia la evolución temporal de las densidades de defectos y longitudes de correlación asociadas a las dos direcciones *preferidas* en el sistema (\hat{x} y \hat{y}). Se investigan los siguientes aspectos en la dinámica de ordenamiento:

- la existencia de diferentes escalas características en el *coarsening* asociadas a las direcciones preferidas en el sistema,
- el papel de la anisotropía intrínseca del sistema en las leyes de crecimiento,
- la verificación de la hipótesis de escalamiento dinámico en el *coarsening*,
- la influencia de efectos *no potenciales* y efectos *no adiabáticos* en la dinámica de ordenamiento lejos del umbral de bifurcación,
- la existencia de transiciones entre diferentes regímenes de *coarsening* al variar el parámetro de control principal y
- la deducción de modelos dinámicos reducidos que describan adecuadamente el crecimiento del *orden orientacional* en el sistema cerca del umbral de bifurcación.

La tesis está organizada de la siguiente manera. En el capítulo 2 se presentan algunos aspectos generales sobre la formación de patrones en sistemas espacialmente extendidos. Se describen la convección de Rayleigh-Bénard, algunos de los modelos matemáticos de formación de patrones más conocidos y la importancia de los defectos topológicos en la dinámica de los patrones. El capítulo 3 está dedicado a la descripción de la formación de patrones anisotrópicos en electroconvección de nemáticos, sus mecanismos de inestabilidad y las diferentes bifurcaciones observadas experimentalmente. En el capítulo 4 se presentan

los modelos propuestos en este trabajo para el estudio del *coarsening* en patrones de franjas oblicuas anisotrópicas. Se realizan análisis lineal de estabilidad y análisis débilmente no lineal para obtener ecuaciones que permitan describir la dinámica de interfaces. Asimismo, se describen los métodos numéricos empleados para obtener soluciones numéricas. En el capítulo 5 se presentan y discuten los resultados numéricos de los modelos propuestos en el capítulo 4. Se estudia la dinámica de ordenamiento para diferentes valores de la profundidad del *quench* y se presenta una comparación con resultados experimentales disponibles. El capítulo 6 presenta un estudio analítico de los efectos no adiabáticos, que se manifiestan como potenciales periódicos que se oponen al movimiento de interfaces y que dan origen a la anisotropía en la dinámica de defectos lejos del umbral de bifurcación. Finalmente, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones.

Capítulo 2

Aspectos generales

2.1. Introducción

En la naturaleza existen sistemas que presentan modulaciones o heterogeneidades espaciales con simetrías bien definidas, denominadas *patrones*. Por ejemplo, podemos observar patrones de franjas en pieles de animales, en las dunas de arena y en la convección térmica de fluidos. Patrones con simetrías similares pueden formarse en sistemas microscópicamente diferentes, tanto en procesos naturales como en experimentos de laboratorio (figuras 2.1(a)-2.1(h)). Este hecho refleja que los procesos de formación de patrones son robustos y obedecen principios generales de simetría [8, 12]. Algunos de los patrones más comunes son: franjas, cuadrados, hexágonos, espirales, estructuras dendríticas, blancos, estructuras cuasicristalinas, etc. Pueden emerger en la convección de fluidos, reacciones químicas oscilantes, procesos de reacción-difusión, crecimiento de cristales, formaciones geológicas, medios granulares, electroconvección de cristales líquidos nemáticos, óptica no lineal, crecimiento de colonias de bacterias, etc. [8, 11, 12, 13, 14]. Según el caso, estos patrones pueden ser estacionarios o bien presentar una dinámica más o menos compleja.

En un sistema fuera de equilibrio sujeto a forzamientos externos, la formación de patrones es la consecuencia de alguna inestabilidad que rompe la simetría de un estado uniforme estacionario inicial. Usualmente esto sucede cuando se excede un valor crítico del forzamiento externo. Las medidas accesibles y controlables de los forzamientos externos son denominados *parámetros de control*. Las amplitudes de las perturbaciones (modos) inestables crecen exponencialmente a tiempos cortos, mientras que la dinámica asintótica es controlada por efectos no lineales. El crecimiento de los modos linealmente inestables es saturado por interacciones no lineales, que conducen a la formación de estructuras disipativas con cierto grado de organización espaciotemporal. Estas estructuras pueden ser ordenadas o parcialmente ordenadas. Cuando al variar algún parámetro de control el sistema sufre un cambio abrupto de estado acompañado de un rompimiento de simetría, se habla de una *bifurcación* [38]. Las bifurcaciones son un concepto crucial en la teoría de sistemas no lineales y en particular, en la formación de patrones. Se manifiestan como cambios abruptos en el comportamiento dinámico del sistema, en forma similar a una transición de fase de equilibrio. Desde el punto de vista matemático, una bifurcación corresponde a un cambio en la

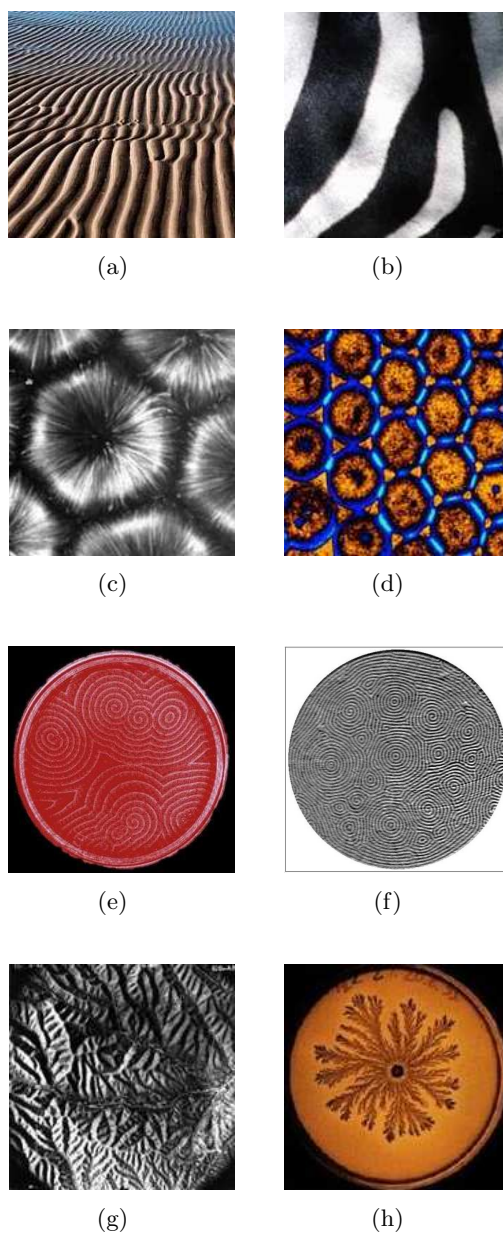


Figura 2.1: Patrones de diferente simetría en diversos sistemas fuera de equilibrio. Franjas: a) dunas de arena, b) piel de una cebra; hexágonos: c) convección térmica de silicón; d) reacción de sulfito-oxígeno-azul metileno en un gel de poliacrilamida; espirales: e) reacción de Belousov-Zhabotinsky, f) caos de defectos espirales en la convección térmica de un fluido; dendritas: g) canales geológicos y h) colonia de bacterias *Paenibacillus dendritiformis*.

topología de las trayectorias en el espacio fase del sistema, ocurriendo a un valor crítico de algún parámetro de control [14, 38]. Cuando se incrementa aún más el valor del parámetro de control de un sistema, ocurren otras bifurcaciones (denominadas *bifurcaciones secundarias*) en las que hay más rompimientos de simetría y en donde se forman estructuras con un nivel de complejidad cada vez mayor.

En este capítulo se presentan algunos aspectos fenomenológicos importantes en el estudio de la dinámica de formación de estructuras espaciotemporales en sistemas fuera de equilibrio *espacialmente extendidos*. Esto último significa que se trata con sistemas básicamente bidimensionales, con dos de sus dimensiones mucho más grandes que la tercera. Los aspectos que se presentan en las siguientes secciones son: la descripción de la convección de Rayleigh-Bénard (sección 2.2), algunos de los modelos matemáticos de formación de patrones más conocidos (sección 2.3) y la importancia de los defectos topológicos en los patrones (sección 2.4).

2.2. Convección de Rayleigh-Bénard

La convección de Rayleigh-Bénard es un paradigma en el estudio de la formación de patrones [39, 40]. Este fenómeno se presenta cuando una capa horizontal de fluido espacialmente extendida es calentada en su parte inferior a una temperatura T_1 mientras que la superior es mantenida a una temperatura T_2 más baja (figura 2.2). El fluido se encuentra fuera del equilibrio y existe un flujo de calor de la parte caliente a la fría. Cuando la diferencia de temperatura entre las capas es pequeña, el flujo de calor se establece mediante conducción térmica. Este régimen es conocido como uniforme porque el campo de velocidad del fluido es nulo y el campo de temperatura dentro del fluido tiene la misma simetría que en las fronteras: sólo depende de la coordenada vertical z . Sin embargo, se puede llegar a un régimen convectivo si el sistema es alejado más del equilibrio termodinámico aumentando la diferencia de temperatura $\Delta T = T_1 - T_2$.

Existen tres factores cuyo balance determina la estabilidad del estado conductivo del fluido: la fuerza de flotación, la viscosidad y la difusión del calor (figura 2.2). El primero tiende a desestabilizar al sistema y poner en movimiento al fluido debido a la fuerza de gravedad. Debido a la diferencia de temperatura entre las capas inferior y superior existe un gradiente de temperatura a lo largo de la dirección vertical y por consiguiente la densidad aumenta en la dirección positiva de z . Entonces, cuando un elemento de fluido es desplazado una pequeña distancia hacia arriba (abajo) de su posición original, experimenta una fuerza de flotación dirigida hacia arriba (abajo) al encontrarse en un entorno más frío (caliente). Por otro lado la viscosidad y la difusión del calor son factores que tienden a estabilizar el estado conductivo uniforme, pues la primera se opone al movimiento del fluido mientras que la segunda tiende a homogeneizar la temperatura del elemento de fluido desplazado con la de sus alrededores, atenuando la fuerza de flotación. Considerando los tiempos característicos de los procesos de flotación (τ_B), disipación por viscosidad (τ_ν) y disipación por difusión de calor (τ_κ) se puede establecer una condición cualitativa para la convección

$$\left(\frac{\tau_\nu}{\tau_B}\right) \left(\frac{\tau_\kappa}{\tau_B}\right) > 1. \quad (2.1)$$

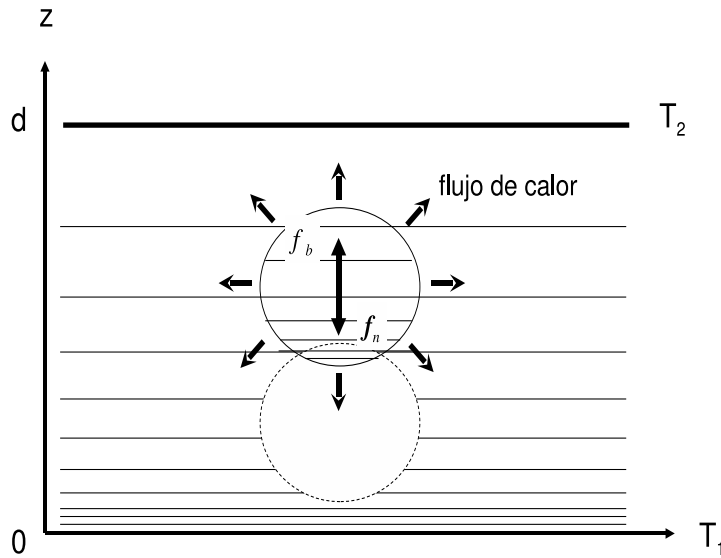


Figura 2.2: Esquema del mecanismo de inestabilidad en la convección de Rayleigh-Bénard, en donde f_b representa la fuerza de flotación y f_n la fuerza de viscosidad sobre un elemento de fluido desplazado de su posición de equilibrio.

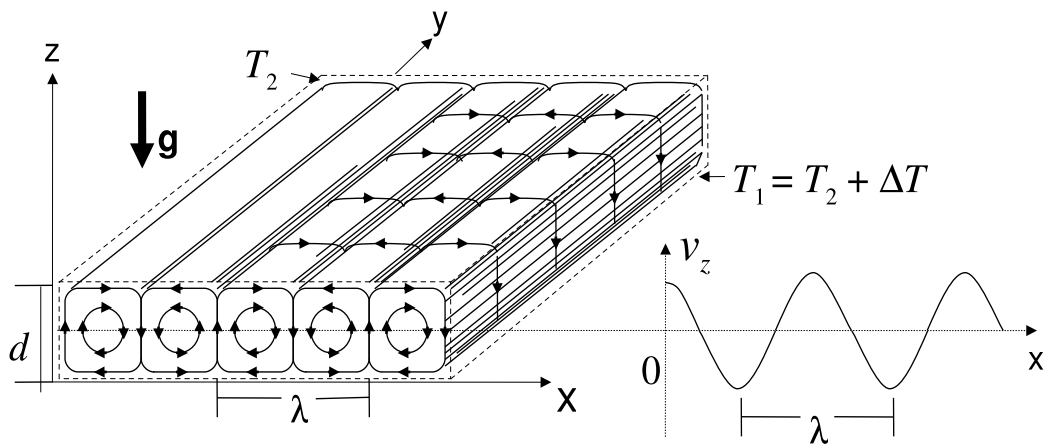


Figura 2.3: Esquema de la estructura de rollos paralelos que emergen en la convección de Rayleigh-Bénard. La componente vertical (v_z) del campo de velocidad del fluido medida en el plano medio del sistema ($z = d/2$) presenta modulaciones periódicas con una longitud de onda característica $\lambda \sim O(d)$.

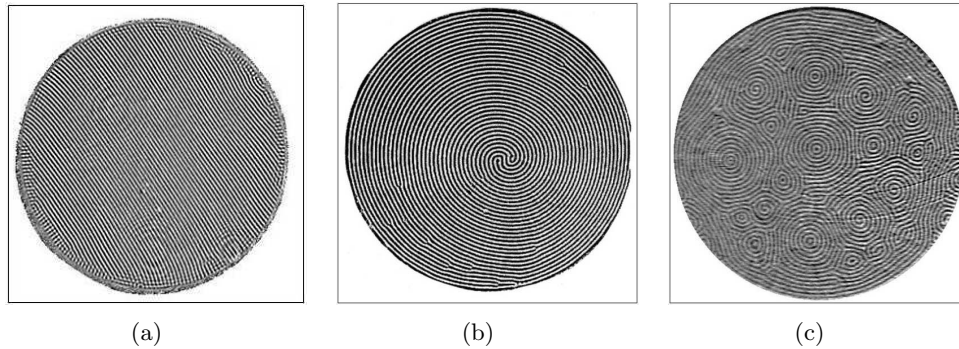


Figura 2.4: Patrones en la convección de Rayleigh-Bénard: a) rollos paralelos ($0 < \epsilon \ll 1$); b) espirales ($\epsilon \simeq 0.5$); c) caos de defectos espirales ($\epsilon \simeq 1$) [14].

τ_B es el tiempo característico que tarda un elemento de volumen en subir una distancia d , en ausencia de disipación. La convección se presenta cuando el tiempo característico que tarda un elemento de fluido en subir o bajar a través de toda la capa es menor que los tiempos característicos de los dos factores estabilizantes. A partir de la condición (2.1) se puede definir un parámetro de control adimensional que indica que tan alejado se encuentra el sistema del estado conductivo. Este parámetro es el número de Rayleigh R , dado por el lado izquierdo de la desigualdad (2.1). R se puede escribir en términos de la diferencia de temperatura ΔT y de los coeficientes fenomenológicos del fluido: el coeficiente de expansión térmica α , la viscosidad cinemática ν y la difusividad de calor κ , así como de la aceleración de la gravedad g y el espesor de la capa de fluido d

$$R = \frac{g\alpha\Delta T d^3}{\nu\kappa}. \quad (2.2)$$

Ahora, suponiendo que existe un valor crítico del número de Rayleigh R_c a partir del cual se establece un régimen convectivo ($R > R_c$) se puede definir un número de Rayleigh reducido

$$\epsilon = \frac{R}{R_c} - 1. \quad (2.3)$$

Para $\epsilon \leq 0$, por definición el fluido se encuentra en un estado conductivo. Si $0 < \epsilon$ se observa experimentalmente que se rompe la homogeneidad de este estado y se establece un régimen convectivo. Se dice entonces que la bifurcación es *supercrítica* debido a que la inestabilidad ocurre para $R > R_c$. Cuando $0 < \epsilon \ll 1$ el movimiento ascendente y descendente del fluido puede dar lugar a la formación de estructuras ordenadas en el sistema. La configuración ordenada más sencilla es en patrones de rollos convectivos paralelos con una longitud de onda característica $\lambda \sim O(d)$ (figuras 2.3 y 2.4(a)). A medida que se incrementa ϵ pueden ocurrir bifurcaciones secundarias a patrones de rollos con orientaciones arbitrarias o espirales (como el que se muestra en la figura 2.4(b)), o estados de caos espaciotemporal en forma de patrones de espirales y blancos (franjas concéntricas) con una dinámica relativamente compleja (figura 2.4(c)). Para valores muy grandes de ϵ el fluido presenta turbulencia.

2.3. Modelos de formación de patrones

Los sistemas espacialmente extendidos poseen un número $N \rightarrow \infty$ de grados de libertad, por lo que generalmente pueden ser descritos en el límite continuo por ecuaciones diferenciales parciales no lineales. Por ejemplo, las ecuaciones de Navier-Stokes, de continuidad, de difusión de calor y de expansión térmica son las ecuaciones constitutivas en el problema de la convección de Rayleigh-Bénard. Las soluciones para los campos de velocidad, presión y temperatura en el fluido, describen de una forma determinista la evolución del sistema dadas las condiciones iniciales y las condiciones de frontera. Sin embargo, un estudio basado en las ecuaciones constitutivas de un problema a veces puede resultar muy difícil (incluso imposible) de realizar tanto analítica como numéricamente. Una forma de superar esta dificultad es mediante el empleo de *modelos reducidos*, en los que se hace una descripción del problema desde la perspectiva de los sistemas dinámicos, empleando un número más pequeño de variables dinámicas (*parámetros de orden*) y conservando las simetrías del problema inicial. Estos modelos son de la forma

$$\partial_t \mathbf{u} = f(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}, \dots; \mu), \quad (2.4)$$

en donde $\mathbf{u}(\vec{r}, t)$ denota al parámetro de orden local, que puede ser escalar, vectorial, tensorial, etc., dependiendo del sistema bajo estudio; f es un operador que consta de una parte lineal y una parte no lineal; μ representa al conjunto de parámetros de control (constantes en las ecuaciones). Se puede demostrar formalmente que cerca de un punto de bifurcación, la descripción de cualquier sistema dinámico con un número infinito de grados de libertad puede reducirse a un número finito de variables dinámicas, resultado conocido como *teorema de la variedad central* [11, 41]. De esta manera, los modelos reducidos de la forma (2.4) pueden proporcionar una descripción muy buena de la dinámica de sistemas fuera de equilibrio cerca de un punto de bifurcación, cuando se eligen parámetros de orden adecuados y se incorporan correctamente en f las simetrías del problema.

2.3.1. El modelo de Swift-Hohenberg

El modelo reducido más sencillo para describir la formación de patrones bidimensionales de franjas isotrópicas (con cualquier orientación sobre el plano $x - y$), como ocurre en la convección de Rayleigh-Bénard de un fluido de Boussinesq¹ cerca del umbral de bifurcación ($0 < \epsilon \ll 1$), es la llamada ecuación de Swift-Hohenberg [42]

$$\partial_t \psi = \epsilon \psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} (\Delta + k_0^2)^2 \psi - \psi^3. \quad (2.5)$$

El campo escalar $\psi(\vec{r}, t)$ es el parámetro de orden local del sistema; k_0 es el número de onda característico del problema; ξ_0 es llamada longitud de coherencia y es de orden $\xi_0 \sim 1/k_0$; ϵ es el parámetro de control principal.

¹En un fluido de Boussinesq solamente la densidad depende linealmente de la temperatura. El resto de los parámetros del fluido (viscosidad, conductividad térmica, etc.) son a primer orden independientes de la temperatura.

En el caso de la convección de Rayleigh-Bénard, $\psi(\vec{r}, t)$ representa la componente vertical $v_z(\vec{r}, t)$ del campo de velocidad del fluido medido en el plano medio (ver figura 2.3). ϵ está dado por la Ec. (2.3). El número de onda k_0 es de orden $k_0 \sim 1/d$, en donde d es el espesor de la capa de fluido. La parte lineal de (2.5) puede ser derivada de manera aproximada a partir de las ecuaciones de Boussinesq, que describen la convección de Rayleigh-Bénard cerca del punto de bifurcación. La parte no lineal ($-\psi^3$) se propone en base a argumentos de simetría en el sistema. Esencialmente, el término no lineal cúbico impide que las soluciones diverjan asintóticamente en el tiempo (una situación no física) y preserva la simetría de paridad (si ψ es solución de (2.5), $-\psi$ también lo es).

La parte lineal del lado derecho de la ecuación (2.5) es tal que de los modos ($\psi \sim \psi_0 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$) con número de onda k cercano a k_0 (para $\epsilon > 0$) crecen. La ecuación (2.5) captura la transición en la cual un estado espacialmente uniforme y estacionario (solución trivial $\psi(\vec{r}, t) = 0$) se vuelve inestable cuando se cruza el punto $\epsilon = 0$. Analicemos la forma en que los modos linealmente inestables pueden generar estructuras periódicas estables, como los rollos formados en la convección de Rayleigh-Bénard.

Análisis lineal

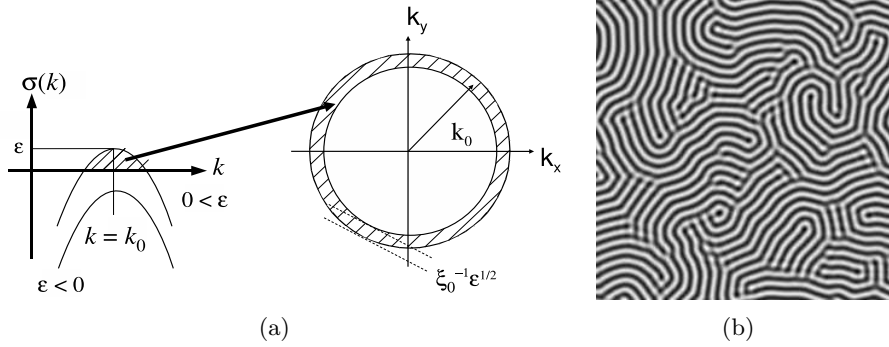


Figura 2.5: a) Forma de la relación de dispersión $\sigma(k)$ dada por la ecuación (2.7) para dos valores del parámetro ϵ . La parte sombreada del espacio de Fourier indica los modos inestables en la ecuación de Swift-Hohenberg para $0 < \epsilon$, que tienen un número de onda $k = \|\vec{k}\|$ cercano a k_0 . La evolución no lineal de estos modos puede generar patrones de franjas estables con degeneración orientacional, como los mostrados en una solución numérica de (2.5) con $\epsilon = 0.1$ (figura (b)).

Supongamos que se perturba el estado conductivo $\psi = 0$ con perturbaciones pequeñas ($|\delta\psi| \ll 1$) y espacialmente periódicas (sinusoidales)

$$\delta\psi = \delta\psi_0 \exp(\sigma t + i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (2.6)$$

con $\delta\psi_0$ una constante. Sustituyendo (2.6) en (2.5) y despreciando el término $-\psi^3$ se obtiene una relación entre σ y k (relación de dispersión)

$$\sigma = \epsilon - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} (k^2 - k_0^2)^2. \quad (2.7)$$

Una perturbación alrededor del estado conductivo $\psi = 0$ tiende a cero a medida que $t \rightarrow \infty$ si su número de onda k es tal que $\sigma < 0$. Los modos con número de onda k tal que $\sigma > 0$ son inestables y crecen exponencialmente en el tiempo. Si $\epsilon < 0$ la relación de dispersión (2.7) implica que $\sigma < 0$ para todo k : no existen modos inestables y por consiguiente la solución trivial $\psi = 0$ es estable. Si $0 < \epsilon \ll 1$, existe una pequeña ventana de números de onda cercanos a k_0 para los cuales $\sigma > 0$, como se muestra en la figura 2.5(a). El ancho de esta ventana es aproximadamente $\sqrt{\epsilon}/\xi_0 \ll k_0$. Los modos más inestables son aquellos con número de onda $k = k_0$. Esto es, en el espacio de Fourier los modos linealmente inestables están localizados en un anillo de radio k_0 y anchura proporcional a $\sqrt{\epsilon}$ para $0 < \epsilon$. Por lo tanto, la ecuación de Swift-Hohenberg (2.5) tiene un punto de bifurcación en $\epsilon = 0$ asociado al crecimiento de ciertos modos que destruyen el estado conductivo. Sin términos no lineales en la ecuación (2.5), estos modos divergirían en $t \rightarrow \infty$. El término no lineal ($-\psi^3$) satura el crecimiento de los modos inestables. Dado que los modos inestables tienen número de onda $k \simeq k_0$, es de esperar que para $0 < \epsilon$ el sistema evolucione hacia nuevos estados localmente periódicos y con número de onda cercano a k_0 . El análisis de la siguiente subsección muestra que para $\epsilon > 0$ existen nuevas soluciones estables que corresponden a un patrón de franjas localmente paralelas. En el caso general, dada la invarianza de la ecuación (2.5) ante rotaciones sobre el plano $x - y$, las franjas resultantes tienen degeneración orientacional. El patrón mostrado en la figura 2.5(b) y generado a partir de una condición inicial aleatoria para ψ (ver sección 4.3 para más detalles) muestra que se forman naturalmente configuraciones *policristalinas* sin orden de largo alcance y de evolución temporal lenta.

Se pueden hacer generalizaciones de la ecuación de Swift-Hohenberg (2.5) de tal forma que se rompan otras simetrías y se obtengan patrones más complejos que franjas. Un ejemplo es cuando se considera una dependencia lineal de la viscosidad del fluido con la temperatura y una dependencia no lineal de la densidad con la temperatura (efectos *no Boussinesq*). Un modelo reducido que no conserve la simetría vertical $\psi \rightarrow -\psi$ se puede obtener mediante la adición de un término no lineal cuadrático, incorporando los efectos no Boussinesq

$$\partial_t \psi = \epsilon \psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} (\Delta + k_0^2)^2 \psi + g_2 \psi^2 - \psi^3. \quad (2.8)$$

La ecuación (2.8) admite soluciones hexagonales estables para un intervalo $[\epsilon_0, \epsilon_p]$ (con $\epsilon_0 < 0$) del parámetro de control, análogas a las observadas experimentalmente en la figura 2.1(c). En este modelo la bifurcación al estado convectivo es *subcrítica*, pues ocurre para un valor crítico $\epsilon_0 < 0$.

La ecuación de Swift-Hohenberg tiene cierto carácter genérico en la formación de patrones isotrópicos. Además de describir cuantitativamente la formación de rollos en la convección de Rayleigh-Bénard, en otros contextos modela procesos tales como la segregación de copolímeros de dibloque [18, 43], la formación de patrones en sistemas de reacción-difusión [11] y la formación de patrones de vegetación en ecosistemas con recursos limitados [44].

Análisis débilmente no lineal

Hemos descrito cualitativamente la formación de estructuras periódicas estables a partir de la ecuación (2.5) para $0 < \epsilon$. Estas estructuras surgen de la saturación de los modos linealmente inestables y poseen una periodicidad espacial muy cercana a k_0 . Para poder describir cuantitativamente estos patrones así como posibles heterogeneidades alrededor del patrón *perfecto* (debidas por ejemplo a defectos topológicos), se puede emplear el llamado *formalismo de ecuaciones de amplitud*. Se trata de reducir aún más la complejidad del problema suponiendo que la evolución temporal del sistema está completamente dominada por los modos inestables. Estos modos crecen lentamente, mientras que los modos estables no influyen en la dinámica del sistema puesto que decaen muy rápidamente hacia cero. Según la figura 2.5(a) esta situación se presenta cuando $0 < \epsilon \ll 1$. Se buscan soluciones de la ecuación (2.5) en la forma de una superposición de N ondas sinusoidales de amplitud A_n (dependiente de la posición y del tiempo en general) y de vector de onda \vec{k}_n

$$\psi = \sum_{n=1}^N A_n e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} + c.c., \quad (2.9)$$

en donde $|\vec{k}_n| = k_0$ y el símbolo *c.c.* representa al complejo conjugado. $N = 1$ corresponde a franjas (rollos bidimensionales), $N = 2$ cuadrados, $N = 3$ hexágonos, etc. Los A_n son funciones (denominadas *amplitudes* o *envolventes*) que describen las variaciones espaciotemporales de las heterogeneidades de un patrón perfecto (que corresponde a $A_n = \text{constante}$). En el caso particular de patrones de franjas en la ecuación (2.5), la solución que se propone es

$$\psi = A(X, Y, T) e^{ik_0 x} + \bar{A}(X, Y, T) e^{-ik_0 x}. \quad (2.10)$$

En el ansatz (2.10), A es la amplitud (compleja en el caso más general) de una onda estacionaria de vector de onda paralelo al eje \hat{x} de periodo $2\pi/k_0$. La barra indica el complejo conjugado, dado que ψ es real. A continuación se hace un análisis de multiescalas, que consiste en suponer que las escalas de variación de las amplitudes (variables X, Y y T) y las del término oscilante (variable $\vec{r} = (x, y)$) en (2.10) son muy diferentes. Esto significa que la escala de variación espacial de las amplitudes es mucho más grande que $2\pi/k_0$. Para estimar el orden de magnitud de las variables lentas (X, Y, T), se pueden suponer perturbaciones pequeñas en la periodicidad del patrón de franjas con vector de onda $k_0 \hat{x}$

$$\vec{k} = (k_0 + \delta k_x) \hat{x} + \delta k_y \hat{y}, \quad (2.11)$$

y sustituyendo en la tasa lineal de crecimiento (2.7) se obtiene, suponiendo que los términos son todos del mismo orden,

$$\sigma \sim \epsilon \sim k_x^2 \sim k_y^4,$$

de donde, asociando a las perturbaciones k_x y k_y con las variaciones espaciales de las amplitudes ($k_x A \rightarrow \partial_x A$, $k_y A \rightarrow \partial_y A$), se obtiene

$$\partial_t A \sim \epsilon A \sim \partial_x^2 A \sim \partial_y^4 A \sim A^3. \quad (2.12)$$

Por consiguiente, (X, Y, T) pueden ser definidas como

$$\begin{aligned} T &= \epsilon t, \\ X &= \epsilon^{1/2}x, \\ Y &= \epsilon^{1/4}y. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Se verifica que la evolución temporal de las heterogeneidades es lenta y que las variables espaciales (x, y) y (X, Y) son muy diferentes si $0 < \epsilon \ll 1$. Entonces, cerca del umbral de bifurcación las variables (x, y) pueden considerarse independientes de las variables (X, Y) . Esto permite desacoplar la dinámica de las amplitudes para $0 < \epsilon \ll 1$ de las oscilaciones espaciales rápidas del patrón periódico. A partir de (2.12) es fácil notar que $A \sim O(\sqrt{\epsilon})$. Por lo tanto, suponemos que el parámetro de orden local ψ se puede desarrollar como serie de potencias en $\epsilon^{1/2}$

$$\psi = \epsilon^{1/2}\psi_{1/2} + \epsilon\psi_1 + \epsilon^{3/2}\psi_{3/2} + \dots, \quad (2.14)$$

con $\psi_{1/2}, \psi_1, \psi_{3/2}, \dots$ funciones de orden $O(1)$. Se sustituye el ansatz (2.14) en la ecuación (2.5). Empleando el escalamiento (2.13), se desglosa la ecuación de Swift-Hohenberg (2.5) en ecuaciones a diferentes órdenes en $\epsilon^{1/2}$. Luego se imponen condiciones de solubilidad a las ecuaciones diferenciales ordinarias inhomogéneas resultantes (teorema de Fredholm) [8]. Esto conduce directamente a la ecuación de amplitud obtenida a orden $O(\epsilon^{3/2})$, en términos de las variables físicas (x, y, t) ²

$$\partial_t A = \epsilon A + \xi_0^2 \left(\partial_x - \frac{i}{2k_0} \partial_y^2 \right)^2 A - 3|A|^2 A, \quad (2.15)$$

llamada ecuación de Newell-Whitehead-Segel [45, 46]. La evolución temporal de los defectos así como cualquier deformación de las franjas paralelas puede ser descrita mediante esta ecuación de amplitud (2.15). Esta ecuación es válida únicamente cerca del punto de bifurcación ($0 < \epsilon \ll 1$). Cuando ϵ no es despreciable comparado con 1, se deben incluir términos de órdenes mayores $O(\epsilon^2)$ en su deducción.

2.3.2. Ecuación de Ginzburg-Landau compleja

Es importante mencionar que la ecuación (2.15) es un caso particular de una clase de ecuaciones diferenciales parciales muy comunes en la física, denominadas ecuaciones de Ginzburg-Landau. Una de esas ecuaciones, de forma similar a (2.15), es la llamada ecuación de Ginzburg-Landau compleja [47, 48], que en su versión isotrópica tiene la forma

$$\partial_t A = \epsilon A + (1 + i\alpha)\Delta A - (1 + i\beta)|A|^2 A, \quad (2.16)$$

en donde A es un parámetro de orden complejo y α y β son parámetros reales. La ecuación (2.16) describe una gran variedad de fenómenos, tales como la propagación de ondas no lineales en medios excitables, transiciones de fase de segundo orden, superconductividad,

²Para más detalles en la deducción general de ecuaciones de amplitud, se puede observar la deducción de las ecuaciones de amplitud para un patrón de franjas oblicuas anisotrópicas desarrollada en el capítulo 4, sección 4.2, subsección 4.2.2.

superfluidez, condensación de Bose-Einstein y formación de patrones de colonias de bacterias [49], por mencionar algunos. Por ejemplo, cuando $\alpha = \beta = 0$ describe la dinámica de vórtices en superconductores de tipo II y en superfluidos [49]. Asimismo, ecuaciones similares a (2.16) describen la dinámica de patrones anisotrópicos de franjas en electroconvección de nemáticos [8, 32]. Para $\alpha, \beta \neq 0$, describe la dinámica de patrones no estacionarios, tales como ondas viajeras, espirales (como los observados en la reacción de Belousov-Zhabotinsky de la figura 2.1(e)), propagación de pulsos en medios excitables y estados de caos espacio-temporal (como los estados caóticos en la convección térmica de fluidos de la figura 2.4(c)) [8, 14, 49]. La ecuación (2.16) es invariante ante la transformación de norma $A \rightarrow Ae^{i\phi}$ (con $\phi = const.$), debido a la invariancia ante un cambio de origen temporal o espacial en sistemas autónomos.

2.3.3. Modelos potenciales y no potenciales

Una característica interesante de las ecuaciones (2.5) y (2.15) es que pueden escribirse en forma *potencial* (o gradiente) haciendo uso del concepto de derivada funcional o de Fréchet

$$\partial_t u = -\frac{\delta F}{\delta \bar{u}}, \quad (2.17)$$

siendo u el parámetro de orden local (complejo en el caso más general, siendo \bar{u} su complejo conjugado) y F el funcional de Lyapunov

$$F[u] = \int_{\Omega} f(u, \bar{u}, \nabla u, \nabla \bar{u}, \dots) d\vec{r}. \quad (2.18)$$

Aquí f representa una densidad de energía libre por unidad de área y Ω es la región del espacio ocupada por el sistema. En el caso de la ecuación de Swift-Hohenberg (2.5) $u = \psi$ es real y el funcional de Lyapunov del cual deriva es

$$F[\psi] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(-\epsilon \psi^2 + \frac{1}{2} \psi^4 + \frac{\xi_0^2}{8k_0^2} \psi (\Delta + k_0^2)^2 \psi \right) d\vec{r}, \quad (2.19)$$

mientras que para la ecuación de amplitud NWS (2.15), $u = A$ y el potencial de Lyapunov del cual deriva es

$$F[A] = \int_{\Omega} \left(-\epsilon |A|^2 + \frac{3}{2} |A|^4 + \xi_0^2 |\partial_x A - \frac{i}{2k_0} \partial_y^2 A|^2 \right) d\vec{r}. \quad (2.20)$$

En este último caso A y \bar{A} son consideradas como funciones independientes. Se puede demostrar que cualquier sistema dinámico descrito por una ecuación de la forma (2.17) presenta una dinámica disipativa, esto es, el valor del funcional de Lyapunov decrece en el tiempo

$$\frac{dF}{dt} \leq 0. \quad (2.21)$$

Lo anterior significa que un sistema potencial evoluciona hacia estados correspondientes a algún mínimo del funcional F . Por lo tanto, al funcional de Lyapunov también se le denomina funcional de energía libre, en analogía al funcional de energía libre de los sistemas

en equilibrio termodinámico. Hay que enfatizar que a priori las ecuaciones con estructura potencial sólo son relevantes para la descripción de una dinámica relativamente simple de sistemas no muy lejanos del equilibrio termodinámico. Para considerar fenómenos tales como pulsaciones periódicas y dinámicas caóticas, típicos de muchos sistemas fuera del equilibrio, las ecuaciones modelo no deben restringirse a una forma potencial [14]. Cuando una ecuación dinámica no puede escribirse en la forma (2.17), se dice que es *no potencial*. Para un modelo no potencial no existe a priori ningún funcional que determine su comportamiento dinámico asintótico y no se pueden aplicar principios de minimización.

Los modelos no potenciales resultan a priori más adecuados para describir la dinámica de un sistema que forma patrones fuera de equilibrio. Además, cada fenómeno físico en particular puede presentar características que no son capturadas por los modelos potenciales y por consiguiente, su dinámica debe ser no potencial. Por ejemplo, en el caso de la convección de Rayleigh-Bénard cerca del umbral de bifurcación, la ecuación de Swift-Hohenberg (2.5) incorpora adecuadamente las simetrías del problema y presenta una relación de dispersión cualitativamente correcta, por lo que reproduce la bifurcación de un estado homogéneo a un estado espacialmente modulado de franjas. Sin embargo, no resulta ser del todo exacta para describir la dinámica de rollos en la convección de Rayleigh-Bénard por la siguiente razón: el término no lineal ($-\psi^3$) no se puede derivar rigurosamente a partir de las ecuaciones del fluido ni siquiera cerca del umbral de bifurcación. El desarrollo de las ecuaciones de Boussinesq cerca del umbral es en realidad una suma cúbica de modos de Fourier para la cual no existe una expresión local en el espacio real. Algunos modelos toman en cuenta esta propiedad incluyendo de manera fenomenológica términos cúbicos no potenciales, que involucran gradientes del parámetro de orden local [50]. Por ejemplo

$$\partial_t \psi = (\epsilon - (\nabla^2 + 1)^2) \psi - a \psi^3 - b \psi (\nabla \psi)^2 + c \psi^2 \nabla^2 \psi, \quad (2.22)$$

o

$$\partial_t \psi = (\epsilon - (\nabla^2 + 1)^2) \psi + d \nabla^2 \psi (\nabla \psi)^2 + (3 - d) (\partial_i \psi) (\partial_j \psi) \partial_i \partial_j \psi. \quad (2.23)$$

La ecuación (2.22) es no potencial cuando $b \neq -c$, mientras que (2.23) es no potencial cuando $d \neq 1$. En particular, la ecuación (2.23) con $d = 3$ es no potencial y reproduce adecuadamente la estabilidad de la fase de franjas en la convección de Rayleigh-Bénard cerca del umbral de bifurcación cuando se varían el número de onda y el parámetro de control ϵ [50]. Asimismo se pueden incorporar en el modelo original de Swift-Hohenberg (2.5) efectos tales como el flujo medio de variación lenta con respecto las coordenadas horizontales (x, y) y promediado a lo largo de la coordenada vertical (z). El flujo medio produce una vorticidad vertical. Un modelo que incorpora adecuadamente estas características es [17]

$$\begin{aligned} \partial_t \psi + \vec{U} \cdot \nabla \psi &= \epsilon \psi - (\nabla^2 + 1)^2 \psi + 3 \nabla^2 \psi (\nabla \psi)^2 \\ \nabla \times \vec{U} &= \Omega \hat{z} \\ \tau_v \Omega - \sigma (\nabla^2 - c^2) \Omega &= g_m \hat{z} \cdot \nabla (\nabla^2 \psi) \times \nabla \psi, \end{aligned} \quad (2.24)$$

en donde $\vec{U}(x, y, t)$ es una velocidad de advección horizontal sin divergencia, la cual se puede escribir en términos de la vorticidad vertical Ω , g_m es un parámetro que acopla el flujo medio con el patrón de franjas y τ_v , σ y c son parámetros que caracterizan al fluido.

El modelo (2.24) es no potencial y da lugar a patrones de franjas muy diferentes (macroscópicamente) a los del modelo potencial de Swift-Hohenberg (2.5). Por otra parte, el mecanismo de selección del vector de onda del patrón de franjas es completamente distinto para cada modelo. En el modelo potencial (2.5) el número de onda predominante $|\vec{k}|$ en el patrón de franjas es aquel que minimiza el funcional de Lyapunov (2.19), es decir, $|\vec{k}| = k_0$. En el modelo no potencial (2.24) la evolución temporal del número de onda predominante es más complicada y los resultados numéricos indican que tiende a un valor $|\vec{k}| < k_0$ que corresponde al número de onda para el cual las dislocaciones aisladas son estacionarias [17].

2.4. Defectos topológicos

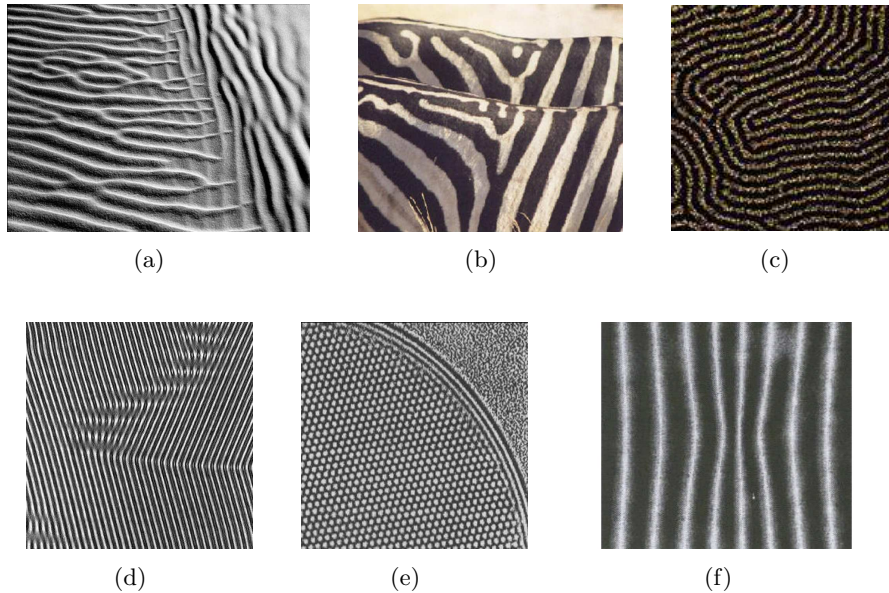


Figura 2.6: Defectos topológicos en patrones de diversos sistemas: a) frontera de grano y dislocaciones en las dunas de arena; b) disclinaciones y dislocaciones en las pieles de cebras; c) disclinaciones y dislocaciones en la segregación de copolímeros de dibloque; d) dislocaciones y fronteras de grano en los rollos convectivos de un cristal líquido nemático; e) frontera entre una fase hexagonal y una de blancos en la termoconvección de un fluido. La perturbación en la periodicidad espacial del patrón en (f) no es un defecto topológico.

Un aspecto interesante de los patrones que forman estructuras periódicas es que raramente son *perfectos*. Las condiciones iniciales, las condiciones de frontera o la degeneración de modos con la misma simetría pueden generar imperfecciones en el orden traslacional o rotacional de un patrón ideal. Algunas de estas imperfecciones, o *defectos* pueden ser removidas con un simple cambio de coordenadas locales, como el defecto en el patrón de franjas periódico que se muestra en la figura 2.6(f). Sin embargo, existe otro tipo de defectos que no pueden eliminarse con un cambio de coordenadas locales, por lo que son llamados *singularidades topológicas* o *defectos topológicos*, como los mostrados en las figuras 2.6(a)-2.6(e).

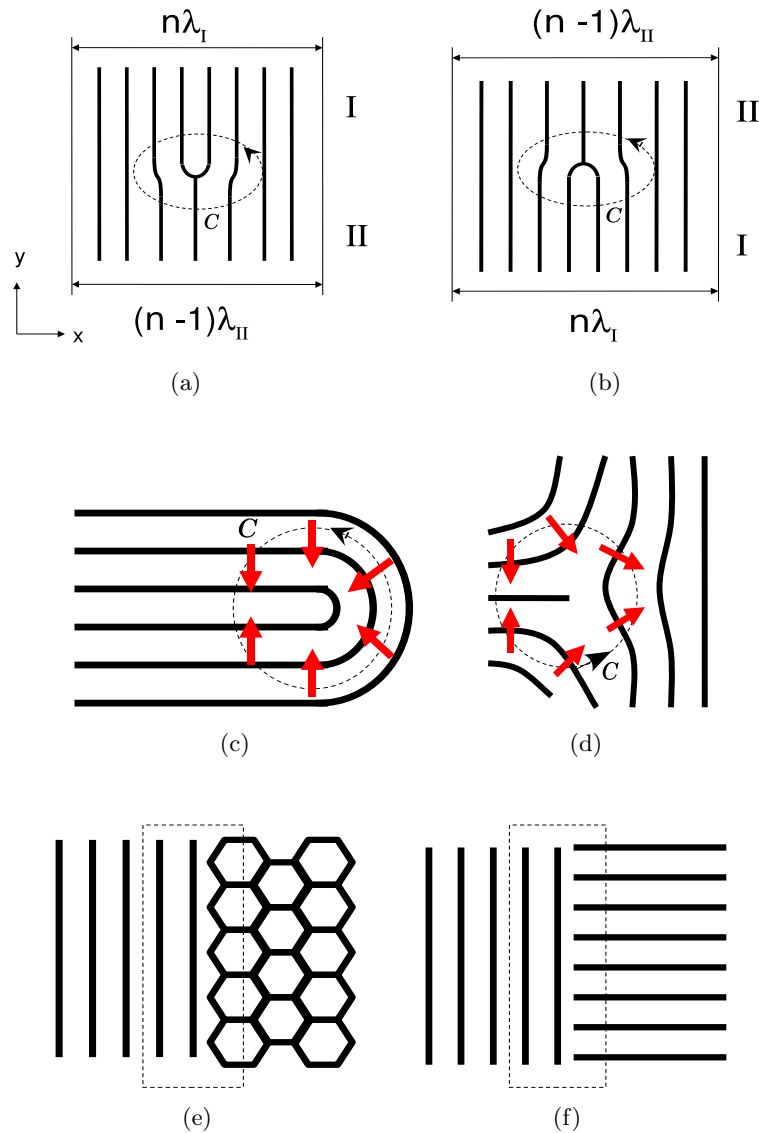


Figura 2.7: Esquemas de diversos defectos topológicos en patrones periódicos: a)-b) Dislocaciones de carga topológica a) $n = +1$ y b) $n = -1$; las regiones II poseen una franja menos que las regiones I, por lo que $\lambda_I < \lambda_{II}$. c)-d) Disclinaciones de carga topológica c) $n = +1/2$ y d) $n = -1/2$; la rotación del vector de onda local $\vec{k} = \nabla\phi$ al recorrer la trayectoria C se muestra en rojo. e)-f) Fronteras de grano entre e) fase de franjas y fase hexagonal y f) fases de franjas de diferente orientación.

Una situación idéntica se presenta en las fases ordenadas (cristalinas o cristal-líquidas) de la materia condensada [51]. En general los defectos topológicos no son estáticos, y controlan en gran medida la estructura y dinámica asintótica de los sistemas con simetrías rotas. La dinámica de los defectos topológicos es más lenta que la de otros modos de deformación de un patrón perfecto.

Una forma de caracterizar a un defecto topológico es mediante el concepto de *carga topológica* [51]. La carga topológica de un defecto se define a partir de la circulación del gradiente de la fase $\phi(\vec{r}, t)$ del parámetro de orden local $\psi(\vec{r}, t)$, a lo largo de una trayectoria cerrada arbitraria C que encierre al defecto

$$\oint_C \nabla\phi \cdot d\vec{l} = \pm 2\pi n. \quad (2.25)$$

El número n en (2.25) recibe el nombre de carga topológica, la cual puede ser entera o fraccional. La carga topológica es una cantidad aditiva: la carga topológica total de un conjunto de defectos topológicos dentro de una trayectoria cerrada C es igual a la suma de las cargas topológicas de cada uno de los defectos [12, 51]. En fases periódicas de sistemas espacialmente extendidos con parámetro de orden local escalar, existen básicamente tres tipos de defectos topológicos: dislocaciones, disclinaciones y fronteras de grano.

Las dislocaciones resultan de la intersección de dos estructuras con vectores de onda localmente diferentes. En el caso de franjas, aparecen en donde una franja adicional termina (ver las figuras 2.6(a) y 2.6(d)). La carga topológica de las dislocaciones es siempre entera puesto que al calcular la circulación (2.25) alrededor de una dislocación hay una diferencia de fase de $\pm 2\pi$. Por ejemplo, la carga topológica de la dislocación de la Fig. 2.7(a) es $n = +1$, mientras que la de la Fig. 2.7(b) es $n = -1$. La presencia de dislocaciones rompe el orden traslacional del sistema, como ocurre en los sólidos cristalinos. Las dislocaciones pueden aniquilarse en pares de carga topológica opuesta (como las de las Figs. 2.7(a) y 2.7(b)), conservando la carga topológica total del sistema [51].

Las disclinaciones están asociadas a un rompimiento en el orden orientacional de un patrón, como se puede observar en las figuras 2.6(b) y 2.6(c). Las disclinaciones tienen carga topológica semientera, pues al recorrer una trayectoria cerrada C alrededor de una disclinación, el vector de onda local $\vec{k} = \nabla\phi$ cambia su orientación en un ángulo igual a $\pm\pi$, como se muestra en las Figs. 2.7(c) ($n = +1/2$) y 2.7(d) ($n = -1/2$). Una dislocación puede ser nucleada a partir de dos disclinaciones de la misma carga topológica [51]. Las dislocaciones y disclinaciones son defectos topológicos puntuales (con dimensión topológica $d = 0$).

Una frontera de grano es un defecto topológico extendido (de dimensión $d \geq 1$) que separa dos regiones (*dominios*) de diferente simetría, como las fronteras que se muestran en las figuras 2.6(e) y 2.7(e), separando un dominio con simetría hexagonal de uno con franjas. Asimismo, pueden separar regiones con la misma simetría, pero de diferente orientación relativa (ver figuras 2.6(d) y 2.7(f)). Las fronteras de grano están asociadas al rompimiento del orden traslacional y orientacional de un patrón perfecto.

Capítulo 3

Patrones anisotrópicos en cristales líquidos nemáticos

3.1. Introducción

En este capítulo se presenta una breve revisión de algunos aspectos experimentales, relevantes para el presente trabajo, relativos a la formación de patrones anisotrópicos en cristales líquidos nemáticos. Se trata de sistemas fluidos en donde las moléculas tienen formas alargadas y a baja temperatura presentan un orden orientacional medio (caracterizado por un campo director), lo cual induce una anisotropía intrínseca en sus propiedades (conductividad térmica, conductividad eléctrica, etc.).

La importancia del estudio de la formación de patrones en cristales líquidos nemáticos radica en que presentan mecanismos de inestabilidad diferentes a los que se encuentran en sistemas de fluidos isotrópicos (tales como en la convección de Rayleigh-Bénard y en la convección de Rayleigh-Marangoni). Estas nuevas inestabilidades, bajo condiciones experimentales adecuadas, pueden dar lugar a la formación de patrones estacionarios y no estacionarios en los que hay una ruptura en la invariancia orientacional del sistema. Variando parámetros de control adecuados (diferencias de temperatura, amplitudes y frecuencias de campos eléctricos oscilantes, etc.) se presenta una serie de bifurcaciones en las cuales se pueden observar patrones de diversas simetrías, tales como rollos convectivos normales, rollos convectivos oblicuos, estructuras bimodales y estados de caos espaciotemporal, entre otros. La anisotropía intrínseca de los nemáticos puede influir significativamente en la formación de patrones, pudiendo presentar una dinámica muy diferente a la de patrones con simetrías similares en sistemas isotrópicos. Esto hace de los nemáticos un sistema particularmente fructífero en el estudio de nuevos mecanismos de formación, selección, estabilidad y dinámica de ordenamiento de patrones.

Este capítulo está organizado de la siguiente manera. En la sección 3.2 se presentan algunas propiedades físicas generales de los cristales líquidos nemáticos que permiten comprender los mecanismos de inestabilidad que pueden generar patrones. En la sección 3.3 se describe un mecanismo de inestabilidad responsable de la formación de rollos de convección inducidos por campos eléctricos ac (*electroconvección*), conocido como mecanismo de Carr-

Helfrich. Asimismo se describe la serie de bifurcaciones que ocurren experimentalmente en la electroconvección con alineación plana.

3.2. Propiedades generales de los nemáticos

Los cristales líquidos son compuestos intrínsecamente anisotrópicos formados por moléculas elongadas u oblatas, las cuales inducen un gran orden estructural debido a que presentan una moiedad rígida, denominada *mesógeno*. También poseen una o varias partes flexibles que inducen propiedades típicas de un fluido. Los mesógenos están formados por anillos aromáticos y alifáticos que se enlazan formando estructuras elongadas (*mesógenos calamíticos*) o anillos aromáticos formando centros con forma de disco (*mesógenos discóticos*) [52, 53].

Los cristales líquidos presentan varias fases intermedias (mesofases) de acuerdo al orden orientacional y posicional de sus moléculas constituyentes. Cuando un cristal líquido presenta transiciones entre mesofases debido a un cambio de temperatura, se dice que es *termotrópico*. Cuando estas transiciones ocurren debido a un cambio de concentración se denominan *liotrópicos*. Las principales mesofases que se presentan son la *esmética*, la *quiral* o *colestérica* y la *nemática*. La fase esmética presenta un orden orientacional y posicional de largo alcance debido a una agrupación de los mesógenos en capas. Por otro lado, la fase nemática también posee un orden orientacional de largo alcance en sus moléculas pero su orden posicional es de corto alcance. Esto es, sus moléculas se encuentran distribuidas sin correlaciones a distancias mayores que unos cuantos diámetros moleculares, en forma similar a las de un líquido simple, pero apuntando en una dirección media bien definida [53]. Esta última propiedad es de gran relevancia en la dinámica de formación de patrones pues da lugar a mecanismos de inestabilidad (inestabilidades nematohidrodinámicas) que no se observan en sistemas isotrópicos.

En el equilibrio termodinámico los cristales líquidos nemáticos están caracterizados por un campo director, $\vec{n}(\vec{r})$, espacialmente uniforme. Este director corresponde a la dirección media del eje de las moléculas del nemático [53]. Bajo forzamientos externos se producen distorsiones espaciales del campo director y el sistema se encuentra fuera de equilibrio. Los nemáticos presentan propiedades elásticas y en consecuencia, las distorsiones en $\vec{n}(\vec{r})$ inducen una torca *elástica* que tiende a reducirlas localmente. Esto representa un mecanismo estabilizante cuando el sistema se somete a forzamientos externos.

Debido al carácter anisotrópico de los nemáticos, muchas de sus propiedades quedan descritas por tensores. Sin embargo esta descripción tensorial puede simplificarse tomando en cuenta las diferentes simetrías del sistema. Presentan simetría de inversión (si son no quirales) y en primera aproximación simetría cilíndrica alrededor de su director \vec{n} . Asimismo los nemáticos son invariantes ante la transformación $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$. Estas simetrías implican que algunas propiedades, tales como la susceptibilidad eléctrica ($\tilde{\epsilon}$), la conductividad eléctrica ($\tilde{\sigma}$), la susceptibilidad magnética ($\tilde{\chi}$) y la conductividad térmica ($\tilde{\kappa}$), sólo poseen dos componentes diferentes: una paralela a la dirección de \vec{n} y la otra perpendicular. Esto es, el campo director en equilibrio establece dos orientaciones bien definidas en el sistema: una dirección paralela a \vec{n} (\parallel) y otra perpendicular (\perp). A partir de estas orientaciones *favore-*

cidas se puede definir un sistema de coordenadas adecuado para describir las propiedades físicas del sistema.

Al aplicar a un nemático campos externos \vec{E} (eléctrico) y \vec{H} (magnético), se inducen un desplazamiento eléctrico, una densidad de corriente y una magnetización de la forma [35]

$$\vec{D} = \epsilon_{\perp} \vec{E} + \epsilon_a (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n}, \quad (3.1)$$

$$\vec{j} = \sigma_{\perp} \vec{E} + \sigma_a (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n}, \quad (3.2)$$

$$\vec{M} = \chi_{\perp} \vec{H} + \chi_a (\vec{n} \cdot \vec{H}) \vec{n}, \quad (3.3)$$

respectivamente, en donde $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$, $\sigma_a = \sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp}$ y $\chi_a = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$ son medidas de la anisotropía de la susceptibilidad eléctrica, la conductividad eléctrica y la susceptibilidad magnética del nemático. Los valores de estas diferencias son generalmente dependientes de la temperatura y pueden cambiar de signo. El signo de las constantes de anisotropía ϵ_a y χ_a determina el comportamiento del nemático bajo la influencia de un campo electromagnético. Cuando $\epsilon_a > 0$ o $\chi_a > 0$, el director \vec{n} tiende a alinearse con el campo, mientras que cuando $\epsilon_a < 0$ o $\chi_a < 0$, el director tiende a una orientación perpendicular al campo. Asimismo, al aplicar un gradiente de temperatura ∇T a un nemático, se induce un flujo de calor que obedece una ley análoga a (3.1), (3.2) y (3.3)

$$\vec{J}_Q = -\kappa_{\parallel} \nabla T - \kappa_a (\vec{n} \cdot \nabla T) \vec{n}, \quad (3.4)$$

en donde $\kappa_a = \kappa_{\parallel} - \kappa_{\perp}$ es una medida de la anisotropía en la conductividad térmica del nemático [35].

3.3. Formación de patrones anisotrópicos en electroconvección de nemáticos con alineación plana

La electroconvección en cristales líquidos se ha convertido en un paradigma en el estudio de la formación de patrones anisotrópicos. Son sistemas espacialmente extendidos, en donde el espesor $d \simeq 20 \mu\text{m}$ es mucho menor que la dimensión lateral $L \simeq 1 \text{ cm}$ [8]. Definiendo la razón de aspecto como

$$\Gamma = L/d, \quad (3.5)$$

se tiene que para la electroconvección de nemáticos la razón de aspecto es típicamente $\Gamma \simeq 500$. Asimismo presentan un gran número de parámetros de control accesibles, que no se encuentran en la convección térmica de fluidos isotrópicos. Dadas sus propiedades eléctricas y magnéticas anisotrópicas, los nemáticos presentan acoplamientos electrohidrodinámicos que generan inestabilidades particulares. El mecanismo de inestabilidad más conocido es el llamado *mecanismo de Carr-Helfrich* [54, 55, 56]. Este mecanismo explica la formación de una gran variedad de estructuras convectivas periódicas al aplicar una diferencia de potencial oscilante a una capa espacialmente extendida de nemático.

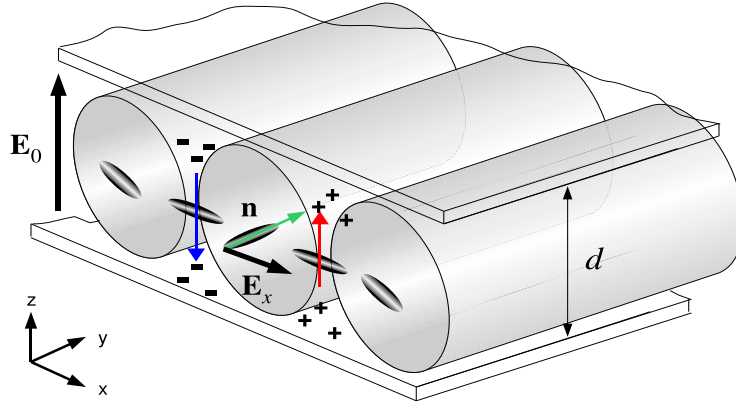


Figura 3.1: Esquema del mecanismo de Carr-Helfrich. Fluctuaciones pequeñas en la curvatura del director inducen una componente lateral \vec{E}_x del campo eléctrico, que produce un flujo hidrodinámico debido al acoplamiento entre el campo de velocidad $\vec{v}(\vec{r})$, el campo director $\vec{n}(\vec{r})$ y la densidad de carga $\rho(\vec{r})$ del nemático.

Mecanismo de Carr-Helfrich [35]

Consideremos una capa delgada de un cristal líquido nemático confinado entre dos placas de vidrio paralelas (figura 3.1). Supongamos que las placas están tratadas de manera adecuada para alinear al campo director del nemático en equilibrio en una dirección fija ($\vec{n}(\vec{r}) = \hat{x}$), paralela al plano de las placas. A esta configuración se le denomina *alineación plana*. Ahora, supongamos que se aplica una diferencia de potencial de amplitud V_0 entre las placas. Esto induce un campo eléctrico de amplitud $E_0 = V_0/d$ en la dirección perpendicular a las placas (\hat{z}). El nemático es previamente dopado con impurezas iónicas, de tal forma que posee cargas libres y es conductor eléctrico. En el caso de nemáticos con anisotropía en la conductividad eléctrica $0 < \sigma_a$, la densidad de carga eléctrica local $\rho(\vec{r})$ se acopla con el campo director y se concentra en regiones de mayor curvatura ($\partial_x n_z$). Esto produce una componente del campo eléctrico \vec{E}_x en la dirección \hat{x} , la cual induce una modulación o estratificación de la distribución lateral de carga, como se muestra esquemáticamente en la Fig. 3.1. El campo eléctrico resultante \vec{E} produce un flujo hidrodinámico debido a la fuerza electrostática $\rho(\vec{r})\vec{E}$ que actúa sobre el fluido en cada posición \vec{r} . El gradiente del flujo hidrodinámico produce una torca viscosa en el director, lo cual tiende a amplificar sus fluctuaciones iniciales. Este efecto desestabilizante es contrarrestado por efectos estabilizantes debidos a las constantes elásticas y a la viscosidad del fluido. Para una diferencia de potencial suficientemente pequeña el nemático se encuentra en un estado espacialmente uniforme caracterizado por un campo director $\vec{n}(\vec{r}) = \hat{x}$ y campo de velocidad nulo $\vec{v}(\vec{r}) = \vec{0}$. Sin embargo, cuando V_0 excede un valor crítico V_c , el estado uniforme se vuelve inestable y aparece un flujo hidrodinámico convectivo. Cuando la diferencia de potencial aplicada entre las placas oscila con una frecuencia $\omega \neq 0$, se eliminan los efectos de acumulación de carga en las placas y el flujo convectivo es persistente en el tiempo. Entonces es posible la formación de estructuras periódicas estables en forma de rollos orientados perpendicularmente a \hat{x} , con longitud de onda de orden del espesor de la capa de nemático $\lambda \sim d$ (figura

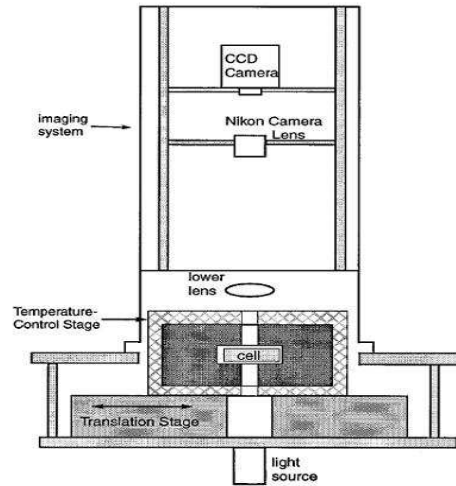


Figura 3.2: Esquema de un arreglo experimental empleado en la electroconvección de cristales líquidos nemáticos. El aparato consiste básicamente en un dispositivo de control de temperatura y un sistema de visualización de imágenes [60].

3.4(a)). El punto de bifurcación del estado homogéneo al estado convectivo espacialmente modulado depende de la amplitud del campo eléctrico oscilante y de su frecuencia, así como de las constantes anisotrópicas del material. Los parámetros de control principales son V_0 y ω , y variándolos adecuadamente se obtiene toda una serie de bifurcaciones a patrones anisotrópicos de diferentes simetrías con orientaciones bien definidas con respecto a \hat{x} .

Cabe mencionar que, dada la gran complejidad del problema, la teoría de formación de patrones en la electroconvección de nemáticos está mucho menos desarrollada y comprendida que para la convección de Rayleigh-Bénard. Las teorías no lineales disponibles son esencialmente fenomenológicas [29, 31, 33, 34, 56, 57, 58, 59].

Arreglo experimental

En la figura 3.2 se muestra el esquema de un arreglo experimental típico empleado en la electroconvección de nemáticos. El aparato consiste en un dispositivo de control de temperatura, dentro del cual se coloca una celda de vidrio que contiene la muestra del nemático. A esta celda se le aplica una diferencia de potencial oscilante a una temperatura prácticamente constante. El otro dispositivo importante en el aparato es un sistema de imagen (*shadowgraph*) para la visualización de los patrones electroconvectivos. Este sistema emplea las variaciones espaciales en el índice de refracción de los cristales líquidos para poder obtener imágenes a partir de luz dispersada y transmitida a través de la capa de

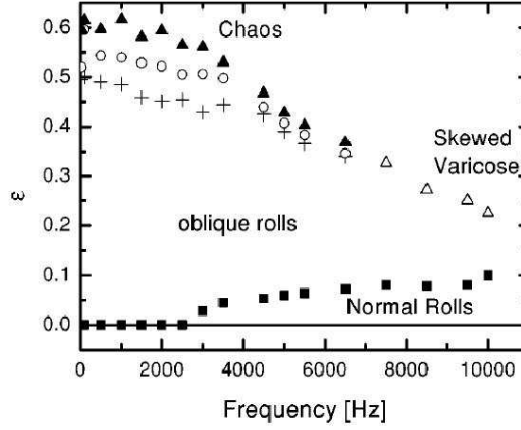


Figura 3.3: Diagrama de bifurcaciones típico para la electroconvección del cristal líquido nemático N4. Los símbolos representan los puntos experimentales de bifurcación entre los diferentes patrones observados [61].

nemático.

Bifurcaciones

En la figura 3.3 se muestra el diagrama de bifurcación experimental típico en la electroconvección de un nemático [61]. ϵ es un parámetro de control adimensional definido como

$$\epsilon = \left(\frac{V_0}{V_c} \right)^2 - 1,$$

de modo que $\epsilon = 0$ corresponde a la bifurcación primaria del estado homogéneo al estado convectivo. Para obtener dicho diagrama, a un valor fijo de la frecuencia ω se varía cuasiestáticamente ϵ en pasos de orden $\Delta\epsilon \sim O(10^{-3})$. Esto se hace para diferentes frecuencias ω y a una temperatura fija del nemático para mantener sus parámetros de anisotropía a valores prácticamente constantes. Cuando se incrementa ϵ , aparecen bifurcaciones secundarias a patrones de diferente simetría, que en la figura 3.3 son representadas por símbolos. En este diagrama experimental es posible observar una característica que tienen en común la mayoría de los nemáticos sometidos a una diferencia de potencial oscilante: existe una frecuencia de corte, ω_c (*frecuencia de Lifshitz*), que divide al diagrama de bifurcaciones en dos regiones [8, 29, 32]. Para frecuencias $\omega < \omega_c$, la bifurcación primaria es del estado uniforme a un estado de rollos oblicuos que forman un ángulo diferente de cero con respecto al eje \hat{x} , como los que se muestran en las figuras 3.4(b), 3.5(b), 3.5(c) y 3.5(d). Los rollos con orientación $0 < \theta < \pi/2$ son llamados estados *zig* (figura 3.5(b)) mientras que los rollos con orientación $-\pi/2 < \theta < 0$ son llamados estados *zag* (figura 3.5(c)). Para $\omega_c < \omega$, la bifurcación primaria es del estado uniforme al estado de rollos normales (ver figura 3.4(a)).

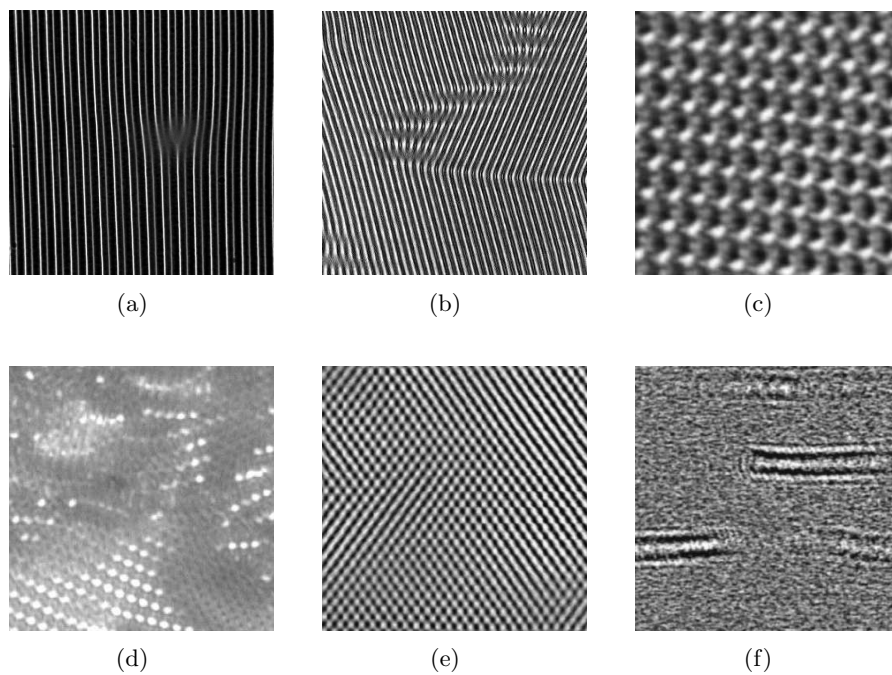


Figura 3.4: Patrones observados en la electroconvección de nemáticos con alineación plana: a) rollos normales [29]; b) rollos oblicuos (zig-zag); c) estructuras bimodales [60]; d) estado caótico espaciotemporal que aparece como bifurcación secundaria [61]; e) estado caótico espaciotemporal que aparece como bifurcación primaria [60]; y f) gusanos (estructuras localizadas viajeras) [64]. La orientación del campo director del nemático en equilibrio corresponde al eje horizontal en estas figuras.

Al punto ($\epsilon = 0, \omega = \omega_c$) sobre el diagrama de bifurcación se le denomina *punto de Lifshitz* y en el diagrama de la figura 3.3 corresponde a ($\epsilon = 0, \omega_c \simeq 2200$ Hz).

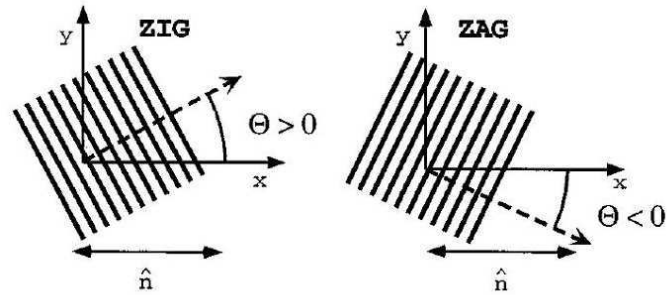
Es importante mencionar que la mayoría de las estructuras periódicas observadas experimentalmente resultan de la interacción no lineal de una cantidad muy pequeña de modos linealmente inestables (con razón lineal de crecimiento positiva) cuya orientación queda bien definida con respecto a la orientación del director en equilibrio (\hat{x}). Esto difiere notablemente de la formación de patrones periódicos isotrópicos, en los que existe degeneración en la orientación: cualquier modo con vector de onda \vec{k} tal que $|k - k_c|/k_c < \sqrt{\epsilon}$ (con $k = \|\vec{k}\|$) es linealmente inestable y las estructuras resultantes después de la saturación no lineal pueden tener a priori cualquier orientación sobre el plano del sistema.

Incrementando el valor de ϵ se observan bifurcaciones secundarias a patrones de diferentes simetrías. Para $\omega_c < \omega$ también se observan rollos oblicuos, pero en este caso aparecen como una bifurcación secundaria a partir del estado de rollos normales mediante una inestabilidad de zig-zag¹. Los dos estados de rollos zig y zag son degenerados y cuando se varía rápidamente ϵ a través del punto de bifurcación correspondiente aparecen en diferentes regiones del sistema, formando dominios de diferente orientación. Estos dominios están separados por fronteras (interfaces) bien definidas [26, 27, 60], como puede observarse en las figuras 3.4(b) y 3.5(d). Los dominios de rollos oblicuos presentan propiedades espaciotemporales muy interesantes. La dinámica de defectos conduce a un crecimiento del tamaño promedio de los dominios y a un ordenamiento global del sistema en el tiempo. Vale la pena mencionar que en estos patrones las estructuras periódicas son estacionarias, y el ordenamiento del sistema se debe principalmente a la dinámica de los defectos topológicos. La dinámica de ordenamiento de fases moduladas oblicuas en electroconvección con alineación plana ha sido estudiada experimentalmente en los últimos años [26, 27, 28]. Este problema representa la principal motivación para el estudio numérico y teórico desarrollado en la presente tesis.

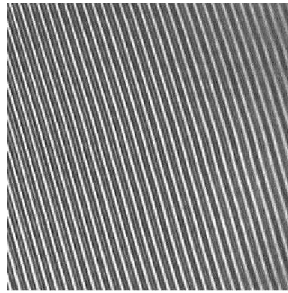
Incrementando aún más el valor de ϵ el estado de rollos oblicuos se vuelve inestable y se observan bifurcaciones secundarias a estructuras más complejas, tales como estructuras bimodales y patrones de caos espaciotemporal. Las estructuras bimodales (figura 3.4(c)) se forman a partir de los rollos oblicuos mediante una inestabilidad conocida como bifurcación de rollos oblicuos de segundo tipo o *bimodal-varicose* [58, 60, 62]. Esta inestabilidad consiste en la aparición de un nuevo modo marginalmente inestable con vector de onda \vec{k}_{bv} , formando un ángulo $\theta_{bv} \simeq \pi/2$ con respecto a alguno de los modos oblicuos. El otro modo oblicuo es suprimido y por lo tanto las estructuras periódicas resultantes tienen simetría cuasirectangular. Aumentando más el valor de ϵ se observan otras bifurcaciones secundarias, en las cuales el patrón emergente presenta una dinámica espaciotemporal caótica (figura 3.4(d)). Para conductividades σ_{\perp} muy bajas (del orden $\sim 10^{-8} \text{ohm}^{-1} \text{m}^{-1}$) se observan bifurcaciones primarias del estado uniforme a estados caóticos temporales (figura 3.4(e)) y a estructuras localizadas viajeras (*gusanos*, como los mostrados en la figura 3.4(f)) [60, 63, 64]. La cinética de los gusanos es anisotrópica, pues se mueven básicamente en la dirección \hat{x} .

Para valores suficientemente grandes de ϵ el sistema presenta turbulencia [61, 65]. La

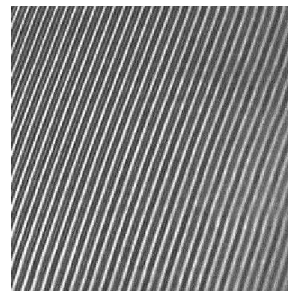
¹Una inestabilidad de zig-zag consiste en la aparición de perturbaciones inestables transversales en un patrón de franjas paralelas. Esta inestabilidad genera estructuras oblicuas (zig-zag) con respecto a la orientación inicial de las franjas. Para más detalles consultar [11, 14, 38, 35]



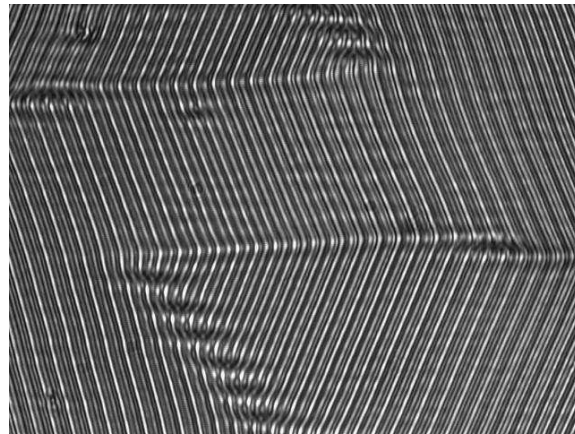
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 3.5: a) Esquema de los dos modos oblicuos zig y zag, cuya orientación es simétrica con respecto a \hat{x} . La saturación no lineal de cada uno de los modos oblicuos puede dar lugar a la formación de patrones estacionarios periódicos de franjas con diferente orientación: b) rollos zig y c) rollos zag experimentales [60]. d) Cuando ϵ es variado rápidamente a través de un punto de bifurcación a un estado de rollos zig-zag, se pueden formar dominios de ambas orientaciones [26, 27].

sucesión de patrones al variar ϵ es reversible.

Capítulo 4

Modelos de ordenamiento de fases de franjas oblicuas anisotrópicas

4.1. *Coarsening* en sistemas con simetrías rotas

El *coarsening* es un proceso que ocurre cuando un sistema es llevado rápidamente por un punto de transición o bifurcación de un estado uniforme (homogéneo) a un estado de menor simetría y se forman dominios de fases de simetría rota que crecen en el tiempo. El crecimiento de dominios se debe a que las diferentes fases de simetría rota compiten mediante la creación, interacción, movimiento y aniquilación de defectos topológicos. Los procesos típicos en los que se presenta *coarsening* son la separación de fases en mezclas de fluidos, las transiciones de orden-desorden en sistemas ferromagnéticos y la descomposición espinodal de aleaciones binarias [1, 2], por citar algunos.

El *coarsening* puede ser un proceso transitorio entre dos estados de equilibrio termodinámico, en el que los dominios resultantes del rompimiento de simetría presentan fases localmente uniformes y tienden asintóticamente a un estado final de equilibrio. El tiempo de relajación más largo diverge con el tamaño del sistema, por lo que éste trata de alcanzar un equilibrio global incrementando sus escalas de longitud y en consecuencia aumentando el tamaño de los dominios en el tiempo. [1, 2] La dinámica de ordenamiento de estos sistemas depende básicamente del tipo de parámetro de orden local que describe al sistema (conservado o no conservado, escalar o vectorial). Una propiedad interesante que ha sido observada es que el crecimiento de dominios en sistemas de simetría rota con fases uniformes obedece una relación de *escalamiento dinámico*. La estructura de dominios (medida por funciones de correlación espaciales, por ejemplo) es estadísticamente independiente del tiempo (después de un posible transitorio) a condición de realizar a cada tiempo un cambio de escala espacial adecuado ¹. Además, una sola longitud característica, $L(t)$, es suficiente para describir el sistema. En base a esto se han establecido esquemas bien definidos para

¹La hipótesis de escalamiento dinámico no ha sido probada rigurosamente, salvo en algunos modelos muy simples, como el modelo unidimensional de Glauber [66, 67] y el modelo n -vectorial con $n \rightarrow \infty$ [68]. Sin embargo, hay evidencias numéricas y experimentales que motivan su validez en los procesos de *coarsening* de sistemas con fases uniformes [2].

las leyes de crecimiento de dominios y se han identificado muy bien los mecanismos físicos que permiten el ordenamiento en sistemas con fases de simetría rota uniformes y dinámica *potencial* [2, 3, 69]. Por ejemplo, en el caso de sistemas espacialmente extendidos en dos dimensiones con parámetro de orden local escalar no conservado, el mecanismo que permite el ordenamiento de fases del sistema es el movimiento de interfaces, que tienden a minimizar la tensión superficial de los dominios mediante una reducción de la curvatura local de las interfaces. La ley de crecimiento de dominios es en este caso $L(t) \sim t^{1/2}$ [7]. Por otro lado, cuando el parámetro de orden es conservado, el mecanismo físico de ordenamiento es la difusión del parámetro de orden de interfaces de alta a baja curvatura, con ley de crecimiento de dominios $L(t) \sim t^{1/3}$ [6].

El problema de crecimiento de dominios en sistemas que no tienden a un estado final de equilibrio termodinámico resulta más complejo que el de *coarsening* en fases de equilibrio. Como ha sido expuesto en los capítulos anteriores, la dinámica de estos sistemas puede ser no potencial al no existir un funcional de Lyapunov que determine la evolución temporal asintótica. El crecimiento de dominios en sistemas no potenciales ha sido estudiado en algunos casos particulares, tales como en los patrones de polarización en una cavidad óptica que contiene un medio kerr no lineal iluminado con luz linealmente polarizada [70, 71] y la propagación de frentes no potenciales en patrones de convección [72]. Es de especial interés el estudio de la dinámica de ordenamiento de sistemas caracterizados por un parámetro de orden local espacialmente modulado. Los sistemas espacialmente extendidos que forman patrones periódicos presentan una mayor complejidad dinámica debido a la presencia e interacción de diferentes tipos de defectos topológicos. Algunos estudios experimentales sobre la dinámica de ordenamiento de patrones de franjas en copolímeros de dibloque [23, 24] y electroconvección de cristales líquidos nemáticos [26, 27, 28] han sido realizados en los últimos años. Asimismo se han hecho estudios numéricos basados en la ecuación de Swift-Hohenberg potencial [15, 16, 19, 20, 21, 22, 73], no potencial [17] y en las ecuaciones de Boussinesq para la convección de Rayleigh-Benárd cerca del umbral de bifurcación [36, 37]. En algunos casos ha sido posible identificar el mecanismo dominante que ordena al sistema en el *coarsening*. Por ejemplo, en copolímeros de dibloque se forman patrones de franjas isotrópicas que se ordenan debido principalmente a la aniquilación de cuadrupolos de disclinaciones [24]. Sin embargo, a diferencia del *coarsening* de sistemas con fases uniformes, las leyes de crecimiento de dominios en patrones periódicos dependen fuertemente de varios factores, tales como la intensidad del *quench* (es decir, el valor parámetro de control ϵ), la presencia de ruido térmico y la forma de extraer las longitudes características del sistema. La hipótesis de escalamiento dinámico, aparentemente válida para sistemas con fases uniformes, sigue siendo polémica para fases moduladas, pudiendo haber en el *coarsening* varias escalas características y varios mecanismos de crecimiento, según el sistema en estudio. En consecuencia, la aparente universalidad observada en los procesos de *coarsening* en sistemas con fases de simetría rota uniformes de equilibrio no existe para sistemas con fases espacialmente moduladas. Uno de los mecanismos responsables es la presencia de efectos no adiabáticos creados por el mismo patrón periódico, que inducen potenciales periódicos efectivos de bloqueo (*pinning*) sobre los defectos topológicos del sistema y cuya intensidad depende de la profundidad del *quench*. Se ha verificado que estos efectos pueden tener consecuencias dramáticas en los procesos de *coarsening*, frenando la dinámica de los defectos

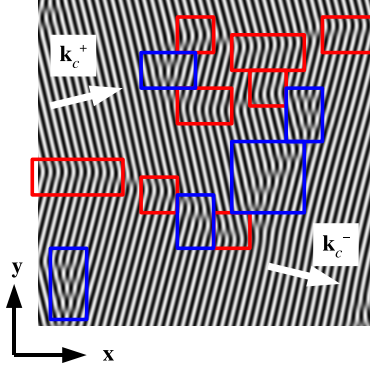


Figura 4.1: Dominios de franjas oblicuas anisotrópicas, cuyo vector de onda sólo puede tener dos orientaciones posibles (\vec{k}_c^+ y \vec{k}_c^-) con respecto a \hat{x} (ver sección 4.3 para detalles en la solución numérica). Los dos tipos de defectos topológicos predominantes son los arreglos de dislocaciones (encerrados en azul) y fronteras horizontales de chevrones (encerradas en rojo).

topológicos, llevando el patrón a configuraciones congeladas y desordenadas [19, 20].

En este capítulo se presentan algunos modelos reducidos que describen la dinámica de un patrón de franjas oblicuas anisotrópicas después de llevar rápidamente un sistema bidimensional por un punto de bifurcación de un estado uniforme a un estado espacialmente modulado. El estado final corresponde a un patrón de franjas cuyo vector de onda sólo puede tener dos orientaciones posibles (simétricas) con respecto a una dirección preferida (\hat{x}). A tiempos iniciales se forman dominios correspondientes a las dos *fases* espacialmente moduladas, separados por dos tipos de defectos topológicos: arreglos lineales de dislocaciones verticales o inclinados con respecto a la dirección vertical y fronteras horizontales en las cuales la fase de las franjas es continua pero su vector de onda cambia de una orientación a otra (*chevrones*, por su forma en “V”), como se muestra en la Fig. 4.1. Contrariamente a las fases lamelares isotrópicas, la anisotropía del patrón impide la formación de disclinaciones. Por lo tanto la configuración del sistema difiere notablemente de los patrones de franjas isotrópicas modelados por la ecuación de Swift-Hohenberg (2.5), en los cuales las disclinaciones juegan un papel importante en la dinámica de ordenamiento. Los patrones modelados numéricamente en el este trabajo de tesis son morfológicamente similares a los patrones de rollos zig-zag experimentales observados la electroconvección de cristales líquidos nemáticos con alineación plana [26, 27, 29, 61] y en la termoconvección de una capa de nemáticos con alineación plana [74, 75, 76]. Algunos resultados sobre la dinámica de defectos topológicos y crecimiento de dominios han sido obtenidos recientemente [26, 27, 28]. La principal motivación para el presente trabajo es estudiar en detalle algunos aspectos en la dinámica de ordenamiento en estos sistemas anisotrópicos.

Los principales aspectos investigados en esta tesis acerca del *coarsening* de un patrón de franjas oblicuas anisotrópicas son los siguientes: la existencia de diferentes escalas de longitud asociadas a la anisotropía intrínseca del sistema, la existencia de escalamiento dinámico y el papel que juegan los términos no potenciales en la dinámica de ordena-

miento. Hasta donde sabemos, este último aspecto nunca ha sido investigado. Dado que los dominios de franjas oblicuas están muy bien delimitados por los dos tipos de defectos mencionados anteriormente, su identificación y su caracterización mediante dos escalas de longitud (paralela y perpendicular a la dirección \hat{x}) resultan relativamente fáciles de realizar. En la sección 4.2 se presentan las ecuaciones propuestas para modelar la formación de franjas oblicuas anisotrópicas. Los métodos empleados para obtener soluciones numéricas e identificar dominios y defectos topológicos son presentados en la sección 4.3. Los resultados son presentados y discutidos en el capítulo siguiente.

4.2. Ecuaciones modelo

Basados en argumentos de simetría y estabilidad, Pesch y Kramer [31] propusieron un modelo bidimensional no lineal fenomenológico que describe la transición de rollos normales a oblicuos en la electroconvección de cristales líquidos nemáticos con alineación plana

$$\tau_0 \partial_t \psi = r\psi - \zeta^4 (\Delta + k_0^2)^2 \psi - \frac{c}{k_0^4} \partial_y^4 \psi + \frac{2\eta}{k_0^4} \partial_x^2 \partial_y^2 \psi - \psi^3. \quad (4.1)$$

El modelo (4.1) es una extensión de la ecuación de Swift-Hohenberg (2.5) que incorpora términos anisotrópicos que rompen la invariancia orientacional del sistema. Los ejes x y y representan las direcciones paralela y perpendicular al campo director del nemático en equilibrio, seleccionado apropiadamente por las placas de vidrio que lo confinan; τ_0 representa el tiempo de relajación del director; $\psi(\vec{r}, t)$ es un parámetro de orden local escalar (adimensional) que puede ser interpretado como un desplazamiento elástico lateral *pequeño* del nemático; los parámetros adimensionales c y η modelan constantes elásticas anisotrópicas; r representa el parámetro de control (adimensional) principal del sistema, relacionado con la amplitud del forzamiento externo y con las constantes elásticas restauradoras del nemático; k_0 es el número de onda del patrón base y ζ es una longitud de coherencia. Para $c = \eta = 0$ la ecuación (4.1) se reduce a la conocida ecuación bidimensional de Swift-Hohenberg isotrópica (2.5). La ecuación (4.1) tiene una estructura potencial

$$\tau_0 \partial_t \psi = -\frac{\delta F}{\delta \psi}, \quad (4.2)$$

con $\delta/\delta\psi$ una derivada funcional y F un funcional de Lyapunov, dado por

$$F[\psi] = \frac{1}{2k_0^4} \int d\vec{r} \left[k_0^4 \left(-r\psi^2 + \frac{\psi^4}{2} \right) + [(k_0^2 + \Delta)\psi]^2 - 2\eta(\partial_x \partial_y \psi)^2 + c(\partial_y^2 \psi)^2 \right] \quad (4.3)$$

El modelo potencial (4.1) ha sido empleado por Boyer [30] para estudiar el *coarsening* de franjas oblicuas anisotrópicas, encontrando algunas similitudes en la dinámica de rollos electroconvectivos oblicuos experimentales [27]. Otros modelo bidimensionales de formación de patrones de franjas anisotrópicas son:

a) La versión anisotrópica de la ecuación de Proctor-Sivashinsky [11]

$$\partial_t \psi = -\frac{\delta F}{\delta \psi} = -\mu \nabla^2 \psi + (\Delta + 1)^2 \psi - 2\eta \partial_x^2 \partial_y^2 \psi - \tau \partial_y^4 \psi + \nabla(\nabla\psi(\nabla\psi)^2), \quad (4.4)$$

que deriva del funcional de Lyapunov

$$F[\psi] = \int d\vec{r} \left(-\left(1 + \frac{\mu}{2}\right)(\nabla\psi)^2 + \frac{\psi^2}{2} + \frac{(\nabla^2\psi)^2}{2} + \frac{(\nabla\psi)^4}{4} + \eta(\partial_x^2\psi)(\partial_y^2\psi) + \frac{\tau}{2}(\partial_y^2\psi)^2 \right). \quad (4.5)$$

La ecuación (4.4), al igual que (4.1), modela la formación de patrones de franjas oblicuas en la electroconvección de nemáticos.

b) La ecuación anisotrópica de Swift-Hohenberg

$$\partial_t w = -\frac{\delta F}{\delta \bar{w}} = \epsilon w - (\Delta + k_0^2)^2 \psi - |w|^2 w + \gamma \bar{w}, \quad (4.6)$$

que deriva del funcional

$$F[w, \bar{w}] = \int d\vec{r} \left(-\epsilon |w|^2 - \frac{\gamma}{2}(w^2 + \bar{w}^2) + \frac{1}{2}|w|^4 + |(\Delta + k_0^2)w|^2 \right), \quad (4.7)$$

empleada en [77] para modelar la formación de estructuras lamelares magnéticas en películas de granate. El término $\gamma \bar{w}$ está asociado a las propiedades anisotrópicas de la película.

c) La ecuación anisotrópica de Swift-Hohenberg, empleada recientemente para estudiar la cinética de dislocaciones en patrones de franjas normales [78]

$$\partial_t \psi = -\frac{\delta F}{\delta \psi} = \epsilon \psi - (\Delta + 1)^2 \psi - \psi^3 + \gamma \partial_y^2 \psi, \quad (4.8)$$

en donde el término anisotrópico corresponde, por ejemplo, a un campo magnético externo aplicado sobre el sistema. El funcional de Lyapunov del cual deriva la ecuación (4.8) es

$$F[\psi] = \frac{1}{2} \int d\vec{r} \left(-\epsilon \psi^2 + [(\Delta + 1)\psi]^2 + \frac{\psi^4}{2} + \gamma (\partial_y \psi)^2 \right). \quad (4.9)$$

Sin embargo, dada la estructura potencial de los modelos (4.1), (4.4) (4.6) y (4.8), la dinámica de los patrones que exhiben es relajacional y siempre tienden a minimizar sus funcionales de Lyapunov (4.3), (4.5), (4.7) y (4.9), respectivamente, lo cual generalmente no ocurre cuando un sistema se encuentra lejos del equilibrio termodinámico. Una generalización del modelo (4.1), que proponemos en este trabajo, es

$$\tau_0 \partial_t \psi = r\psi - \zeta^4 (\Delta + k_0^2)^2 \psi - \frac{c}{k_0^4} \partial_y^4 \psi + \frac{2\eta}{k_0^4} \partial_x^2 \partial_y^2 \psi + NL[\psi], \quad (4.10)$$

en donde $NL[\psi]$ es un término no lineal cúbico, no necesariamente potencial, que satura el crecimiento de los modos linealmente inestables. Anteriormente no se habían estudiado modelos anisotrópicos de Swift-Hohenberg con términos no potenciales, a pesar de que son a priori más relevantes para describir situaciones experimentales. Con el objetivo de encontrar posibles diferencias entre dinámicas de ordenamiento potenciales y no potenciales

de dominios de franjas oblicuas, en este trabajo se estudian tres modelos correspondientes a la ecuación de Swift-Hohenberg anisotrópica (4.10), con los siguientes términos no lineales

$$NL[\psi] = -\psi^3 \quad \text{modelo potencial,} \quad (4.11)$$

$$NL[\psi] = -\psi^3 - \frac{c_1}{k_0^2} \psi (\nabla \psi)^2 + \frac{c_2}{k_0^2} \psi^2 (\nabla^2 \psi) \quad \text{modelo no potencial 1,} \quad (4.12)$$

$$NL[\psi] = \frac{c_3}{k_0^4} \nabla^2 \psi (\nabla \psi)^2 + \frac{3-c_3}{k_0^4} (\partial_i \psi) (\partial_j \psi) \partial_i \partial_j \psi, \quad \text{modelo no potencial 2,} \quad (4.13)$$

$i, j = x, y$

en donde c_1 , c_2 y c_3 son constantes tales que $c_1 \neq -c_2$ y $c_3 \neq 1$ (para $c_1 = -c_2$ y $c_3 = 1$ ambos modelos son potenciales). Los términos no potenciales 1 y 2 han sido propuestos y empleados por Greenside y Cross [50], y Cross y Meiron [17] para investigar algunos aspectos sobre la dinámica no relajacional en el modelo de Swift-Hohenberg. En el presente trabajo se seleccionan, por simplicidad, $\zeta = 1/k_0$, $\tau_0 = 1$ (o equivalentemente, el tiempo se escala por τ_0), $c_1 = c_2 = 1$ y $c_3 = 3$. Dado que los modelos no potenciales (4.12) y (4.13) incorporan las mismas simetrías que el modelo potencial (4.1), también reproducen la transición de rollos normales a oblicuos. Sin embargo, las dinámicas de los patrones que presentan es a priori diferente, pues no derivan de ningún funcional de Lyapunov que determine su evolución temporal. Es de esperar que estos dos modelos no potenciales hagan una mejor descripción de los experimentos de electroconvección de nemáticos que el modelo potencial (4.11), sobre todo lejos del punto de bifurcación.

4.2.1. Análisis lineal

Analicemos el mecanismo mediante el cual un modelo anisotrópico de la forma (4.10) reproduce la formación de franjas oblicuas formando un ángulo con solamente dos orientaciones posibles, $\pm|\theta|$, con respecto al eje x . Primero encontremos el umbral de inestabilidad en el que ocurre una bifurcación del estado uniforme $\psi(\vec{r}, t) = 0$ a uno espacialmente modulado. Suponiendo perturbaciones periódicas $\delta\psi(\vec{r}, t) = \delta\psi_0(t) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$, $\vec{k} = p\hat{x} + q\hat{y}$, alrededor del estado uniforme y linealizando la ecuación resultante para $\delta\psi_0(t)$, se encuentra que inicialmente las perturbaciones periódicas crecen como

$$\delta\psi(\vec{r}, t) \sim \exp(\sigma t + i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (4.14)$$

en donde la razón lineal de crecimiento σ está dada por

$$\sigma(r, p, q) = r - \frac{1}{k_0^4} ((k_0^2 - p^2 - q^2)^2 + cq^4 - 2\eta p^2 q^2). \quad (4.15)$$

El umbral de inestabilidad se encuentra maximizando $\sigma(r, p, q)$ con respecto a p y q y buscando el valor crítico del parámetro de control $r = r_c$ para el cual existe a lo menos un

vector de onda $\vec{k}_c = p_c \hat{x} + q_c \hat{y}$ tal que $\sigma(r_c, p_c, q_c) = 0$ (superficie neutral). Se encuentra que dos modos con vector de onda finito $\vec{k} = p\hat{x} + q\hat{y}$, se vuelven marginalmente inestables cuando el parámetro de control r aumenta y cruza dos valores umbrales $r_c^{(n)}$ y $r_c^{(o)}$

$$\text{franja normales: } r_c^{(n)} = 0, \{p_c^2 = k_0^2, q_c^2 = 0\}, \quad (4.16)$$

$$\text{franja oblicuas: } r_c^{(o)} = \frac{-\eta^2}{c+2\eta-\eta^2} < 0, \{p_c^2 = \frac{c+\eta}{c+2\eta-\eta^2} k_0^2, \\ q_c^2 = \frac{\eta}{c+2\eta-\eta^2} k_0^2\}, \quad (4.17)$$

en donde $c > 0$. Los modos correspondientes a franjas normales tienen vector de onda en la dirección \hat{x} , mientras los modos de franjas oblicuas forman un ángulo $\theta = \pm \arctan(q_c/p_c) = \pm \arctan(\sqrt{\eta/(c+\eta)})$ con respecto a \hat{x} . De acuerdo a la expresión (4.17), las franjas oblicuas sólo pueden ser observadas si $\eta > 0$. El crecimiento exponencial de los modos linealmente inestables es saturado por el término cúbico no lineal $NL[\psi]$, lo que da lugar a la formación de estructuras periódicas. Por consiguiente, cuando se varía η de un valor negativo a uno positivo, la ecuación reproduce la transición de modos normales a oblicuos.

La superposición de modos oblicuos puede dar lugar a diversas estructuras periódicas: franjas oblicuas, estructuras bimodales y franjas onduladas. Todas estas estructuras han sido observadas experimentalmente en cristales líquidos nemáticos, en la forma de rollos de convección [61]. Los patrones que son de interés aquí son las franjas oblicuas, las cuales predominan eligiendo un valor del parámetro de control $0 < r$ (para $r_c^{(o)} \leq r \leq 0$ sólo se observan franjas onduladas) [30].

4.2.2. Análisis débilmente no lineal

Análisis general

Se puede hacer un análisis débilmente no lineal de la ecuación (4.10) (con términos no lineales (4.11), (4.12) y (4.13)) alrededor del punto de bifurcación $r_c^{(o)}$, basado en el formalismo de ecuaciones de amplitud [8, 31]. Este análisis es útil para estudiar algunas propiedades de la dinámica de defectos cerca del umbral [8, 35, 79]. Para ello, se puede definir la profundidad del *quench* como

$$\epsilon = r - r_c, \quad (4.18)$$

en donde se ha denotado, por simplicidad, $r_c = r_c^{(o)}$. Este parámetro mide que tan alejado se encuentra el sistema del punto de bifurcación. Eligiendo $|r_c| < \epsilon \ll 1$, de modo que $r > 0$, se puede hacer una expansión del parámetro de orden local ψ en órdenes de ϵ

$$\psi = \epsilon^{1/2} \psi_0 + \epsilon \psi_1 + \epsilon^{3/2} \psi_2 + \dots \quad (4.19)$$

Buscamos soluciones de las ecuaciones (4.10), de la forma

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_j A_j(\vec{r}, t) e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}} + c.c., \quad (4.20)$$

en donde *c.c.* denota el complejo conjugado y las amplitudes A_j son funciones (complejas en el caso más general) que toman en cuenta inhomogeneidades o defectos del patrón periódico perfecto con vectores de onda \vec{k}_j , que corresponden a los modos linealmente inestables más *peligrosos* (con mayor razón lineal de crecimiento). Las amplitudes varían lentamente en el espacio y en el tiempo con respecto a las oscilaciones *rápidas* del patrón perfecto. Supondremos que las amplitudes A dependen únicamente de variables *lentas* (X, Y, T) . En este formalismo (X, Y, T) son independientes de las oscilaciones rápidas del patrón (x, y) . Esta suposición es correcta únicamente cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Para estimar el orden de magnitud de las variables lentas (X, Y, T) , consideremos cambios espaciales *pequeños* en la regularidad del patrón [35]

$$\begin{aligned} p &= p_c + \delta p \\ q &= q_c + \delta q. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Sustituyendo (4.21) en la ecuación (4.15), al orden más bajo se obtiene

$$\sigma \sim \epsilon \sim \delta p^2 \sim \delta q^2,$$

y regresando al espacio real, se obtiene la siguiente relación entre las magnitudes relativas de las derivadas parciales de las envolventes

$$\partial_t A \sim \epsilon A \sim \partial_x^2 A \sim \partial_y^2 A,$$

de donde las variables lentas (X, Y, T) obedecen el escalamiento [31]

$$X = \epsilon^{1/2} x, Y = \epsilon^{1/2} y, T = \epsilon t, \quad (4.22)$$

de tal modo que

$$\partial_x \rightarrow \partial_x + \epsilon^{1/2} \partial_X, \quad (4.23)$$

$$\partial_y \rightarrow \partial_y + \epsilon^{1/2} \partial_Y, \quad (4.24)$$

$$\partial_t \rightarrow \partial_t + \epsilon \partial_T. \quad (4.25)$$

El análisis de multiescalas consiste en sustituir (4.19), (4.23), (4.24) y (4.25) en cada una de los modelos anisotrópicos (4.11), (4.12) y (4.13), y encontrar las ecuaciones resultantes a los diferentes órdenes en $\epsilon^{1/2}$. De esta forma se obtienen las siguientes ecuaciones

$$\text{orden } \epsilon^{1/2}: \quad \hat{L}_0 \psi_0 = 0, \quad (4.26)$$

$$\text{orden } \epsilon: \quad \hat{L}_0 \psi_1 + \hat{L}_1 \psi_0 = 0, \quad (4.27)$$

$$\text{orden } \epsilon^{3/2}: \quad \hat{L}_0 \psi_2 + \hat{L}_1 \psi_1 + \hat{N}_2 \psi_0 = \partial_T \psi_0, \quad (4.28)$$

⋮

en donde \hat{L}_0 y \hat{L}_1 son operadores lineales definidos por

$$\hat{L}_0 = r_c - \frac{1}{k_0^4} (\partial_x^2 + \partial_y^2 + k_0^2)^2 - \frac{c}{k_0^4} \partial_y^4 + \frac{2\eta}{k_0^4} \partial_x^2 \partial_y^2, \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_1 = & -\frac{4}{k_0^4}[(k_0^2 + \partial_x^2)\partial_x\partial_X + k_0^2\partial_y\partial_Y + (c+1)\partial_y^3\partial_Y + \\ & +(1-\eta)(\partial_x\partial_Y + \partial_y\partial_X)\partial_x\partial_y], \end{aligned} \quad (4.30)$$

y \hat{N}_2 es el operador definido por

$$\begin{aligned} \hat{N}_2 = & 1 - \frac{2}{k_0^4}[3\partial_x^2\partial_X^2 + 3(1+c)\partial_y^2\partial_Y^2 + k_0^2(\partial_X^2 + \partial_Y^2) + \\ & +(1-\eta)(\partial_x^2\partial_Y^2 + \partial_y^2\partial_X^2 + 4\partial_x\partial_y\partial_X\partial_Y] + NL, \end{aligned} \quad (4.31)$$

siendo NL el operador no lineal dado por

$$NL[\psi] = \begin{cases} -\psi^3, & \text{modelo potencial,} \\ -\psi^3 - \frac{c_1}{k_0^4}\psi(\nabla\psi)^2 + \frac{c_2}{k_0^4}\psi^2(\nabla^2\psi), & \text{modelo no potencial 1,} \\ \frac{c_3}{k_0^4}\nabla^2\psi(\nabla\psi)^2 + \\ + \frac{3-c_3}{k_0^4}(\partial_i\psi)(\partial_j\psi)\partial_i\partial_j\psi, & \\ (i, j = x, y), & \text{modelo no potencial 2.} \end{cases}$$

Las soluciones generales de las ecuaciones (4.26) y (4.27) son

$$\psi_0 = A^+(X, Y, T)e^{i\vec{k}_c^+ \cdot \vec{r}} + A^-(X, Y, T)e^{i\vec{k}_c^- \cdot \vec{r}} + c.c., \quad (4.32)$$

$$\psi_1 = 0 \quad (4.33)$$

en donde A^\pm es la envolvente a orden $\epsilon^{1/2}$ del patrón de franjas oblicuas de ángulos $\pm\theta$, con vector de onda \vec{k}_c^\pm , definido como

$$\vec{k}_c^\pm = |p_c|\hat{x} \pm |q_c|\hat{y}. \quad (4.34)$$

Esto es, los términos rápidamente oscilantes en la expresión (4.32) representan al patrón periódico *perfecto* cuyos vectores de onda sólo pueden tener dos orientaciones posibles (\vec{k}_c^+ y \vec{k}_c^-)², mientras que las funciones A^\pm (en principio complejas), que dependen sólo de las variables lentas (X, Y, T) , representan envolventes del patrón periódico y permiten modulaciones espaciales y defectos. Dadas las soluciones (4.32) y (4.33), la ecuación a orden $\epsilon^{3/2}$ (4.28) se reduce a

$$\hat{L}_0\psi_2 = (\partial_T - \hat{N}_2)\psi_0. \quad (4.35)$$

Invertiendo el operador \hat{L}_0 en la ecuación (4.35) se obtiene la solución ψ_2 en términos de ψ_0 . Sin embargo, debido a que este operador tiene eigenvectores nulos, su invertibilidad requiere imponer una condición de solubilidad. El teorema de Fredholm establece que una condición suficiente es que el lado derecho de (4.35) sea ortogonal a cualquier eigenvector nulo del

²En la electroconvección de nemáticos con alineación plana, los modos con vector de onda \vec{k}_c^+ corresponden a los rollos zig mientras que los modos con vector de onda \vec{k}_c^- corresponden a los rollos zag.

adjunto de \hat{L}_0 . Como \hat{L}_0 es autoadjunto y sus únicos eigenvectores nulos son $\exp(\pm i\vec{k}_c^+ \cdot \vec{r})$ y $\exp(\pm i\vec{k}_c^- \cdot \vec{r})$, la condición de solubilidad requerida es

$$\int_y^{y+l_y} \frac{dy'}{l_y} \int_x^{x+l_x} \frac{dx'}{l_x} (\partial_T \psi_0 - \hat{N}_2 \psi_0) e^{-i\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r}} = 0. \quad (4.36)$$

A continuación se sustituye (4.32) en (4.36). Cualquier término de $(\partial_T - \hat{N}_2)\psi_0$ que no oscile como $\exp(+i\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r})$ contribuye en el integrando de (4.36) en la forma $\exp(in\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r})$ (con n entero) y la integral es trivialmente cero. A este tipo de términos se les denomina *no resonantes*. Existe otro tipo de términos en $(\partial_T - \hat{N}_2)\psi_0$: aquellos que oscilan como $\exp(+i\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r})$ y que al ser multiplicados por $\exp(-i\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r})$ producen términos no oscilantes en el integrando de (4.36). A este tipo de términos se les denomina *resonantes*, y a priori su contribución a la integral (4.36) no es cero. Por consiguiente, para que (4.36) se cumpla, la suma de todos los término resonantes de $(\partial_T - \hat{N}_2)\psi_0$ debe ser igual a cero, lo cual conducen a las siguientes ecuaciones de Ginzburg-Landau acopladas para las dos amplitudes A^+ y A^- de los dos modos de franjas oblicuas ³

$$\begin{aligned} \partial_t A^\pm &= \epsilon A^\pm + \frac{4}{k_0^4} [p_c^2 \partial_x^2 \pm 2(1-\eta)p_c q_c \partial_x \partial_y + (1+c)q_c^2 \partial_y^2] A^\pm \\ &\quad - 3\gamma |A^\pm|^2 A^\pm - 6\gamma |A^\mp|^2 A^\pm, \end{aligned} \quad (4.37)$$

con

$$\gamma = \begin{cases} 1, & \text{modelo potencial,} \\ 1 + \frac{c_1+3c_2}{3} \left(\frac{c+2\eta}{c+2\eta-\eta^2} \right), & \text{modelo no potencial 1,} \\ \left(\frac{c+2\eta}{c+2\eta-\eta^2} \right)^2, & \text{modelo no potencial 2.} \end{cases}$$

La condición de ortogonalidad entre $(\partial_T - \hat{N}_2)\psi_0$ y los otros dos eigenvectores nulos de \hat{L}_0 , $\exp(+i\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r})$, conducen a las mismas ecuaciones (4.37), pero para los complejos conjugados de las amplitudes, \bar{A}^\pm . A pesar de que la ecuación (4.10) es no potencial para los casos (4.12) y (4.13), las ecuaciones (4.37) tienen una estructura potencial en los tres modelos

$$\partial_t A^\pm = -\frac{\delta F_{GL}}{\delta \bar{A}^\pm},$$

con funcional de Lyapunov

$$\begin{aligned} F_{GL} &= \int d\vec{r} \left\{ -\epsilon (|A^+|^2 + |A^-|^2) + \frac{4}{k_0^4} |[p_c \partial_x + (1-\eta)q_c \partial_y] A^+|^2 \right. \\ &\quad + \frac{4}{k_0^4} |[p_c \partial_x - (1-\eta)q_c \partial_y] A^-|^2 + \frac{4\eta}{k_0^2} (|\partial_y A^+|^2 + |\partial_y A^-|^2) \\ &\quad \left. + \frac{3}{2}\gamma (|A^+|^4 + |A^-|^4) + 6\gamma |A^+|^2 |A^-|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

³Ecuaciones de amplitud similares a (4.37) son propuestas como modelos fenomenológicos de formación de rollos oblicuos en electroconvección de nemáticos cerca del umbral [32, 33, 34] y en convección térmica de nemáticos cerca del umbral [80].

Hay que recordar que las ecuaciones de amplitud (4.37) son válidas sólo para $0 < \epsilon \ll 1$. Debido a su estructura potencial, la dinámica de las amplitudes que describen es relajacional, de tal forma que siempre tiende a minimizar al funcional de Lyapunov (4.38)

$$\frac{dF_{GL}}{dt} \leq 0.$$

Para valores de ϵ no despreciables comparados con 1, se deben emplear términos a $O(\epsilon^2)$ o mayores en la deducción de las ecuaciones de amplitud, lo que puede dar lugar a dinámicas no potenciales para A^+ y A^- , dependiendo de la estructura (potencial o no potencial) del modelo del cual derivan. Asimismo, se deben hacer correcciones no adiabáticas (como se muestra en el capítulo 6) para tomar en cuenta el hecho de que para ϵ suficientemente grande las variables rápidas (x, y, t) y lentas (X, Y, T) pueden llegar a ser del mismo orden y deben dejar de considerarse independientes.

Aplicación a la descripción de una interfaz

Las ecuaciones de amplitud (4.37) permiten describir la dinámica de las fronteras (interfaces) entre dominios de franjas de diferente orientación. Asimismo, cuando $A^+ \neq 0$ y $A^- = 0$ (o viceversa) describen la dinámica de un dominio de franjas con una sola orientación [31]. Por ejemplo, para las ecuaciones (4.37), se encuentra que dos de sus posibles soluciones estacionarias y uniformes son

$$A^+ = \sqrt{\frac{\epsilon}{3\gamma}}, \quad A^- = 0, \quad (4.39)$$

$$A^+ = 0, \quad A^- = \sqrt{\frac{\epsilon}{3\gamma}}, \quad (4.40)$$

las cuales representan a un solo dominio de franjas con vector de onda \vec{k}_c^+ o \vec{k}_c^- , respectivamente ⁴. Por consiguiente, para que (4.37) describan una frontera horizontal separando dos dominios con franjas de diferente orientación, se requieren añadir las siguientes condiciones asintóticas

$$\lim_{y \rightarrow \infty} A^+ = \sqrt{\epsilon/(3\gamma)},$$

$$\lim_{y \rightarrow \infty} A^- = 0,$$

$$\lim_{y \rightarrow -\infty} A^+ = 0,$$

$$\lim_{y \rightarrow -\infty} A^- = \sqrt{\epsilon/(3\gamma)},$$

y condiciones asintóticas similares a lo largo de \hat{x} para una frontera vertical. Un perfil típico de las amplitudes que describen una frontera entre dos dominios de franjas de diferente orientación se muestra en la figura 4.2. Estas interfaces planas son estables. Algunos ejemplos numéricos son presentados en el capítulo 6.

⁴Las soluciones $A^+ = A^- = \text{const.}$, correspondientes a un patrón de "rombos", son inestables. Ver [35] para más detalles.

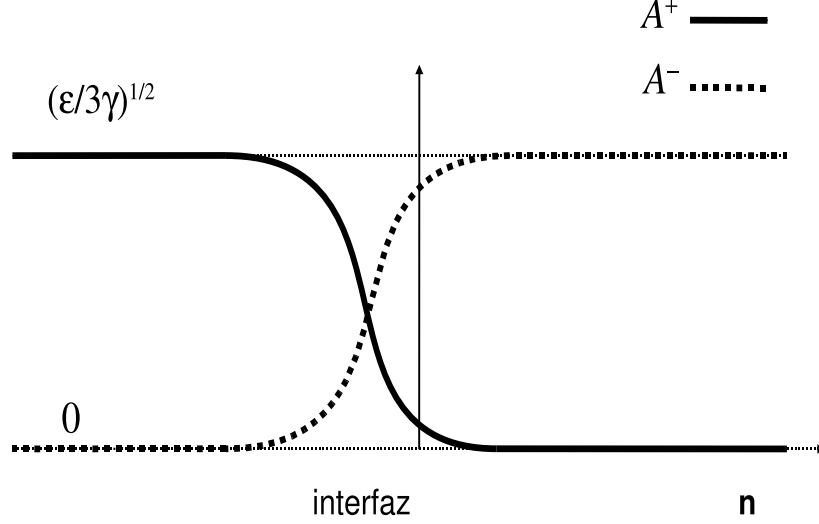


Figura 4.2: Perfiles típicos de las amplitudes que describen la dinámica de dominios de una frontera plana vertical u horizontal, separando dos dominios de franjas oblicuas cerca del umbral de bifurcación ($|r_c| < \epsilon \ll 1$). \hat{n} representa la dirección perpendicular a la interfaz (\hat{x} o \hat{y} , respectivamente).

De las ecuaciones de amplitud obtenidas anteriormente, se pueden inferir algunas propiedades de la dinámica de los dominios de franjas modeladas por una ecuación anisotrópica de la forma (4.10), cerca del umbral de bifurcación. La primera es que, dado que las ecuaciones de amplitud para los tres modelos (4.11), (4.12) y (4.13) tienen la misma forma (4.37), los patrones de franjas que exhiben deben presentar una dinámica de ordenamiento de dominios similar cuando $0 < \epsilon \ll 1$. Otra propiedad es que los dominios tienden a tomar formas anisotrópicas a lo largo de las dos direcciones favorecidas (\hat{x} y \hat{y}). Esta propiedad puede ser inferida de la siguiente manera. Mediante el escalamiento

$$\begin{aligned} x' &= \sqrt{\frac{c + 2\eta - \eta^2}{c + \eta}} x, \\ y' &= \sqrt{\frac{c + 2\eta - \eta^2}{(1 + c)\eta}} y, \end{aligned} \quad (4.41)$$

las ecuaciones de amplitud (4.37) toman la forma

$$\partial_t A^\pm = \epsilon A^\pm + \frac{4}{k_0^2} [\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2 \pm \frac{2(1 - \eta)}{\sqrt{1 + c}} \partial_{x'} \partial_{y'}] A^\pm + t.n.l., \quad (4.42)$$

las cuales son anisotrópicas (para $\eta \neq 1$), pues dependen las direcciones \hat{x} y \hat{y} , pero son invariantes ante el intercambio de coordenadas $x' \leftrightarrow y'$. Por lo tanto, las variaciones espaciales de las amplitudes son favorecidas a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , siendo las

escalas de longitud a lo largo de estas direcciones del mismo orden, dada la invariancia en el intercambio de coordenadas escaladas x' y y' . Por lo tanto, si $(L_{x'}, L_{y'})$ denotan las escalas de longitud características horizontal y vertical de los dominios formados después de un *quench* en las coordenadas (x', y') y (L_x, L_y) las mismas escalas en las coordenadas (x, y) , entonces se debe cumplir

$$1 \simeq \frac{L_{x'}}{L_{y'}} = \sqrt{\frac{(1+c)\eta}{c+\eta}} \left(\frac{L_x}{L_y} \right), \quad (4.43)$$

de donde se espera que las escalas de longitud de los dominios a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} tengan una magnitud relativa

$$\frac{L_x}{L_y} \simeq \sqrt{\frac{c+\eta}{(1+c)\eta}} = \sqrt{1 + \frac{\left(\frac{1}{\eta} - 1\right)c}{c+1}}. \quad (4.44)$$

Para $\eta \neq 1$, los dominios deben de tomar formas elongadas a lo largo de alguna de las direcciones \hat{x} o \hat{y} . En particular, para $0 < \eta < 1$, se espera que los dominios sean más alargados en la dirección \hat{x} . Por ejemplo, para los valores de los parámetros anisotrópicos empleados en las soluciones numéricas del siguiente capítulo ($c = 12$, $\eta = 0.5$), el valor estimado para el cociente entre las longitudes características de los dominios es

$$\frac{L_x}{L_y} \simeq 1.4. \quad (4.45)$$

4.3. Solución numérica

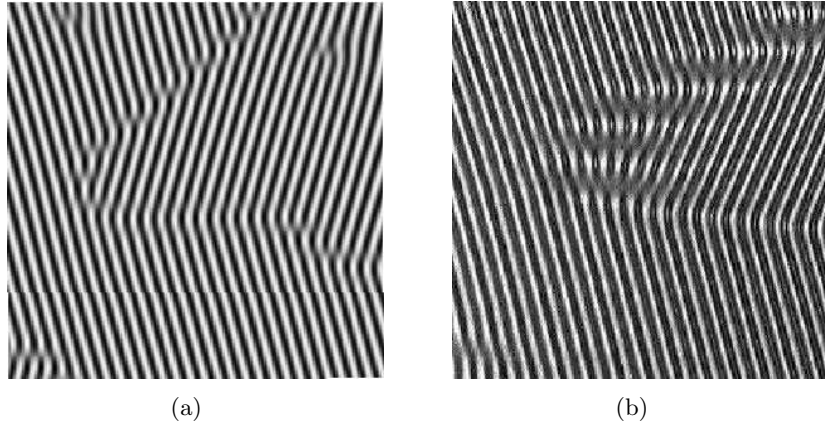


Figura 4.3: a) Solución numérica de la ecuación (4.10) con término no lineal (4.12) (modelo no potencial 1) a $t = 1000$ con $\epsilon = 0.2157$, $c = 12$ y $\eta = 1.0$; b) patrón de rollos oblicuos (zig-zag) en la electroconvección de cristales líquidos nemáticos con alineación plana [81].

La forma de resolver numéricamente las ecuaciones (4.10) en este trabajo, es empleando un método pseudoespectral y un procedimiento de integración temporal, descritos en el

apéndice A. El espacio bidimensional es discretizado en una red cuadrada con 1024×1024 nodos, con una longitud internodo $\Delta x = 1$. Se emplean condiciones de frontera periódicas. El periodo base del patrón es establecido igual a $\lambda = 2\pi/k_0 = 8\Delta x$. La integración temporal es realizada con un paso de tiempo $\Delta t = 1$ o $\Delta t = 0.5$, dependiendo del valor de ϵ definido en (4.18) y del modelo empleado ⁵. Los valores de los parámetros anisotrópicos, empleados en todas las soluciones numéricas de este trabajo, son

$$c = 12,$$

$$\eta = 0.5,$$

lo cual corresponde a los vectores de onda marginales $\vec{k}_c^\pm = p_c \hat{x} \pm q_c \hat{y}$ del patrón de franjas, con componentes

$$p_c = 0.9804k_0,$$

$$q_c = 0.0392k_0,$$

y formando un ángulo

$$\theta = 11.31^\circ$$

con respecto a \hat{x} . El *quench* del estado uniforme al estado de franjas oblicuas es simulado con condiciones iniciales aleatorias para el parámetro de orden local ψ , empleando un campo aleatorio de distribución gaussiana, con media y desviación estándar

$$\begin{aligned} \langle \psi(\vec{r}, 0) \rangle &= 0, \\ \sqrt{\langle \psi(\vec{r}, 0)^2 - \langle \psi(\vec{r}, 0) \rangle^2 \rangle} &= \sqrt{\epsilon}, \end{aligned} \quad (4.46)$$

respectivamente. Una configuración típica del patrón de franjas oblicuas, obtenida mediante la solución numérica del modelo no potencial 2 (4.13) para $\epsilon = 0.2157$, se muestra en la figura 4.3(a). Los dominios de franjas oblicuas presentan dos tipos de fronteras: fronteras verticales o inclinadas formadas por arreglos densos de dislocaciones, y fronteras horizontales en las que la fase del patrón periódico es continua y en donde el vector de onda de las franjas cambia rápidamente de una orientación a otra (*chevrons*, por su forma en “V”). Una configuración de un patrón experimental de rollos oblicuos en electroconvección de nemáticos con alineación plana se muestra en la figura 4.3(b), el cual es morfológicamente muy similar al obtenido numéricamente. Asimismo, se han observado dominios de rollos oblicuos en la convección térmica de nemáticos, en donde la capa de nemático es sometida a una diferencia de temperatura, en forma similar a la convección de Rayleigh-Bénard [74, 75, 76].

Identificación de dominios

Puesto que el interés principal de este trabajo es estudiar la dinámica de ordenamiento de los dominios, conviene hacer un mapeo del parámetro de orden local espacialmente

⁵Para los modelos potencial (4.11) y no potencial 1 (4.12), las soluciones numéricas encontradas son estables e independientes de Δt para $0 < \epsilon < 0.6$ y $\Delta t \leq 1$. Para $0.6 < \epsilon$ se requiere reducir el paso de tiempo a $\Delta t \leq 0.5$. En el caso del modelo no potencial (4.13) se debe emplear un paso de tiempo $\Delta t \leq 0.5$ en el intervalo $0 < \epsilon < 0.4$ y $\Delta t \leq 0.1$ en el intervalo $0.4 < \epsilon$.

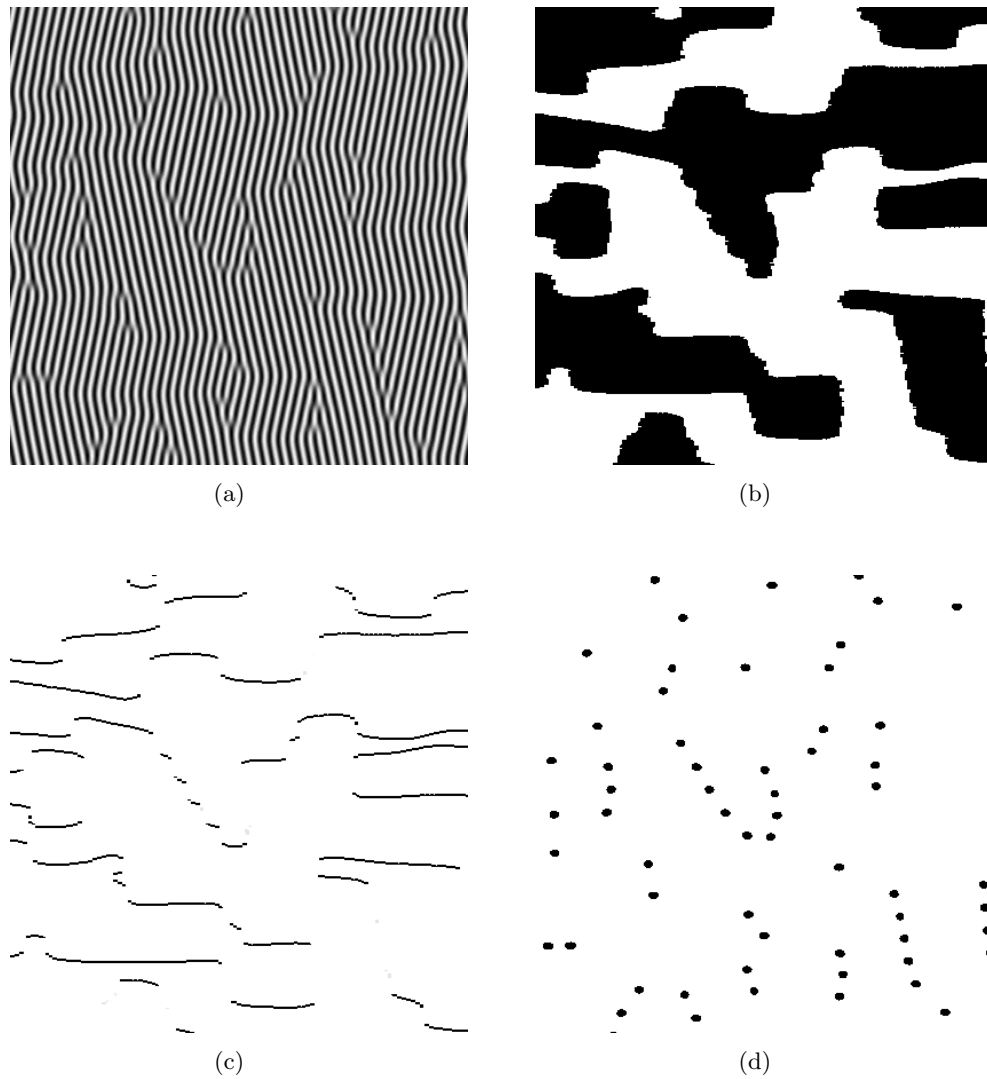


Figura 4.4: Identificación de dominios y defectos en un patrón de franjas oblicuas con $\epsilon = 0.4118$ a $t = 500$ (modelo no potencial 1): a) patrón localmente periódico; b) dominios de franjas de diferente orientación correspondiente a la configuración en (a) (los dominios blancos corresponden a $\psi_d = +1$ mientras que los negros a $\psi_d = -1$); c) fronteras de chevrones del patrón en (a); d) dislocaciones del patrón en (a).

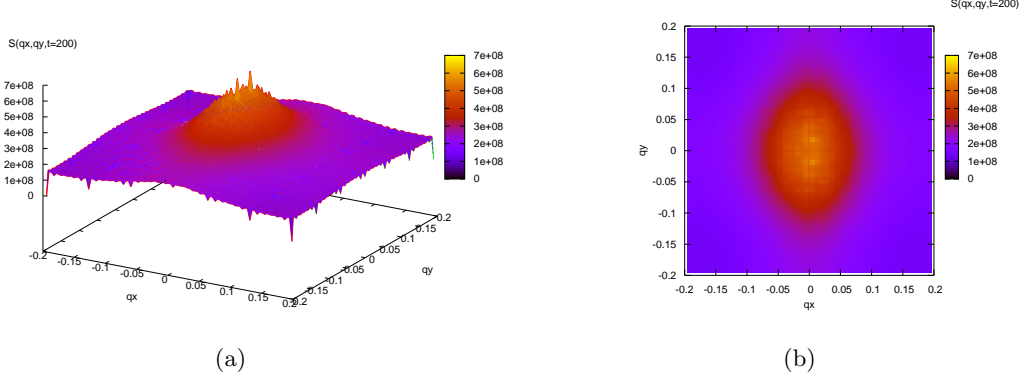


Figura 4.5: a) Gráfica del factor de estructura $S(\vec{q}, t)$ del parámetro de orden orientacional ψ_d para el modelo no potencial 1, con $\epsilon = 0.2157$ y a $t = 200$. b) Gráfica de densidad de la figura (a).

modulado $\psi(\vec{r}, t)$, a un campo escalar uniforme $\psi_d(\vec{r}, t)$ que dependa solamente de la orientación de las franjas en el punto \vec{r} (fig. 4.4(b)). Tomando en cuenta la periodicidad del patrón de franjas, cada una de las dos posibles orientaciones que puede tomar el vector de onda puede ser identificada empleando el gradiente del campo escalar, $\nabla\psi = \partial_x\psi\hat{x} + \partial_y\psi\hat{y}$. El parámetro de orden local en un dominio de franjas con vector de onda formando un ángulo $\pm\theta$ con respecto al eje x (o uno cercano a éste), satisface

$$\begin{aligned} (\partial_x\psi)(\partial_y\psi) &> 0, & \text{ángulo } +\theta, \\ (\partial_x\psi)(\partial_y\psi) &< 0, & \text{ángulo } -\theta, \end{aligned}$$

siendo $\theta = \sqrt{\eta/(c + \eta)}$; $(\partial_x\psi)(\partial_y\psi) \simeq 0$ en una frontera de chevrones. Empleando estas relaciones, es posible construir un parámetro de orden orientacional mediante el siguiente campo escalar

$$\psi_d(\vec{r}, t) = \begin{cases} +1, & \text{si } (\partial_x\psi)(\partial_y\psi) \geq 0, \\ -1, & \text{si } (\partial_x\psi)(\partial_y\psi) < 0. \end{cases}$$

Para caracterizar el tamaño de los dominios a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , se definen dos longitudes de correlación, $L_x(t)$ y $L_y(t)$, de la siguiente manera. Consideremos el factor de estructura del campo escalar $\psi_d(\vec{r}, t)$, definido como

$$S(\vec{q}, t) \equiv \langle \tilde{\psi}_d(\vec{q}, t) \tilde{\psi}_d(-\vec{q}, t) \rangle, \quad (4.47)$$

en donde los brackets indican un promedio sobre un ensamble de condiciones iniciales, y $\tilde{\psi}_d(\vec{q}, t)$ denota la transformada de Fourier bidimensional del campo $\psi_d(\vec{r}, t)$

$$\tilde{\psi}_d(\vec{q}, t) = \int \psi_d(\vec{r}, t) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\vec{r}. \quad (4.48)$$

En las figuras 4.5(a) y 4.5(b) se grafica el factor de estructura del campo orientacional ψ_d para una configuración del patrón periódico a $t = 200$, con $\epsilon = 0.2157$. Se observa que

$S(\vec{q}, t = 200)$ es en promedio más ancho a lo largo en la dirección \hat{y} que en la dirección \hat{x} , lo que indica que para esta configuración los dominios son en promedio más elongados en la dirección \hat{x} que en la dirección \hat{y} . Por consiguiente, dada la posible anisotropía en la estructura de dominios, es razonable definir los factores de estructura (unidimensionales) a lo largo de \hat{x} y \hat{y} , mediante

$$S_x(q_x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\vec{q}, t) dq_y, \quad (4.49)$$

$$S_y(q_y, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\vec{q}, t) dq_x. \quad (4.50)$$

Se puede demostrar que estos factores de estructura unidimensionales son las transformadas de Fourier unidimensionales de las funciones de correlación del campo $\psi_d(\vec{r}, t)$ en las direcciones \hat{x} y \hat{y} , respectivamente. Estas funciones de correlación se definen como

$$C_x(x, t) = \int \langle \psi_d(\vec{r}', t) \psi_d(\vec{r}' + x\hat{x}, t) \rangle d\vec{r}', \quad (4.51)$$

$$C_y(y, t) = \int \langle \psi_d(\vec{r}', t) \psi_d(\vec{r}' + y\hat{y}, t) \rangle d\vec{r}'. \quad (4.52)$$

Se definen las longitudes de correlación a lo largo de \hat{x} y \hat{y} como los inversos de las anchuras de las curvas de los factores de estructura unidimensionales $S_x(q_x, t)$ y $S_y(q_y, t)$, respectivamente [2]

$$L_x(t) = \left(\frac{\int_{-\infty}^{\infty} |q_x| S_x(q_x, t) dq_x}{\int_{-\infty}^{\infty} S_x(q_x, t) dq_x} \right)^{-1}, \quad (4.53)$$

$$L_y(t) = \left(\frac{\int_{-\infty}^{\infty} |q_y| S_y(q_y, t) dq_y}{\int_{-\infty}^{\infty} S_y(q_y, t) dq_y} \right)^{-1}. \quad (4.54)$$

Más adelante discutiremos las formas simples que toman las funciones de correlación (4.51) y (4.52) y los factores de estructura unidimensionales cuando se cumplen leyes de escalamiento dinámico.

Identificación de defectos

Las fronteras de chevrones, que son las fronteras horizontales de dominios en las cuales las franjas cambian de orientación sin cambiar su fase, son identificadas localizando los puntos en los cuales el parámetro de orden orientacional $\psi_d(\vec{r}, t)$, definido anteriormente, cambia de signo a lo largo de la dirección \hat{y} . Esto es, el punto $\vec{r}' = x'\hat{x} + y'\hat{y}$ es identificado como frontera de chevron si

$$\left| \lim_{y \rightarrow y'^+} \psi_d(x', y, t) - \lim_{y \rightarrow y'^-} \psi_d(x', y, t) \right| = 2. \quad (4.55)$$

Numéricamente, la densidad de chevrones, $\rho_{ch}(t)$, es definida como la fracción de nodos del sistema discretizado que satisfacen (4.55). La configuración de las fronteras de chevrones

del patrón de franjas oblicuas de la figura 4.4(a), identificadas por el método descrito anteriormente, se muestra en la figura 4.4(c).

Las dislocaciones son identificadas tomando en cuenta el hecho de que la amplitud de un patrón periódico se anula en el núcleo de una dislocación. Tomando a la cantidad definida por

$$A^2(\vec{r}, t) = \psi^2(\vec{r}, t) + \frac{1}{k_0^2} [\nabla \psi(\vec{r}, t)]^2, \quad (4.56)$$

como una medida del cuadrado de la amplitud del patrón periódico de franjas, las dislocaciones son identificadas numéricamente como los nodos para los que

$$A^2(\vec{r}, t) \leq A_{max}^2, \quad (4.57)$$

con A_{max}^2 una amplitud de corte. A_{max}^2 se define como una fracción del cuadrado del valor de la amplitud más frecuente en el patrón de franjas. Esta última se determina haciendo un histograma de la distribución de amplitudes en todo el sistema mediante (4.56). Una vez localizado el valor más frecuente A_M^2 (que corresponde a las franjas sin defectos), se define

$$A_{max}^2 = p_{max} A_M^2,$$

con p_{max} una constante ($0 < p_{max} < 1$). En las soluciones numéricas realizadas en este trabajo se elige $p_{max} = 0.5$. Posteriormente se aplica un procedimiento de filtrado adecuado a los nodos de la red discretizada que cumplen con (4.57). La densidad de dislocaciones, $\rho_{dis}(t)$, es calculada como la fracción relativa de nodos obtenidos que cumplen con (4.57). Una imagen típica de las dislocaciones del patrón de franjas oblicuas de la figura 4.4(a), se muestra en la figura 4.4(d).

Las densidades de defectos, $\rho_{dis}(t)$ y $\rho_{ch}(t)$, y las longitudes de correlación, $L_x(t)$ y $L_y(t)$, son las cantidades estadísticas empleadas en este trabajo para describir la dinámica de ordenamiento de los dominios de franjas oblicuas, pues su evolución temporal muestra la forma en que el sistema se ordena y los dominios crecen en promedio en el tiempo.

Las densidades de defectos, $\rho_{dis}(t)$ y $\rho_{ch}(t)$, fueron promediadas sobre diez diferentes corridas (i) (condiciones iniciales) para cada valor de la profundidad del *quench* estudiado:

$$\rho_{dis,ch}(t) = \frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} \rho_{dis,ch}^{(i)}(t)$$

La forma de obtener las longitudes de correlación promedio $L_x(t)$ y $L_y(t)$ de los dominios es un poco distinta. Primero se promediaron los factores de estructura bidimensionales $S_x(q_x, t)$ y $S_y(q_y, t)$, calculados a partir de las ecuaciones (4.49) y (4.50), sobre diez condiciones iniciales diferentes (i)

$$S_{x,y}(q_{x,y}, t) = \frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} S_{x,y}^{(i)}(q_{x,y}, t)$$

y las longitudes de correlación fueron extraídas de estos promedios mediante (4.53) y (4.54). Los resultados numéricos obtenidos para la evolución temporal de las densidades de defectos y las longitudes características de los dominios se presentan en el siguiente capítulo.

Capítulo 5

Resultados de *coarsening*

Cerca del umbral de bifurcación ($|r_c| < \epsilon \ll 1$), los tres modelos ((4.11), (4.12) y (4.13)) presentan configuraciones policristalinas similares correspondientes a patrones de franjas oblicuas. Los dominios de franjas oblicuas quedan separados por fronteras de chevrones y fronteras inclinadas y muy curvadas compuestas de arreglos densos de dislocaciones (Fig. 5.1(a)). Las dislocaciones aisladas son muy escasas. Ambos tipos de fronteras son móviles y su traslación y aniquilación tienen como efecto global un incremento en el tiempo del tamaño promedio de los dominios. Esto puede observarse en las figuras 5.2(a)-5.2(f), en donde se muestran algunas configuraciones a diferentes tiempos en el *coarsening* de dominios de franjas oblicuas correspondientes al modelo no potencial 1 (4.12) con una profundidad del *quench* $\epsilon = 0.0392$. Los otros dos modelos (4.11 y 4.12) presentan una dinámica similar. Cerca del umbral de bifurcación la dinámica de fronteras (interfaces) queda descrita correctamente por las ecuaciones de amplitud (4.37).

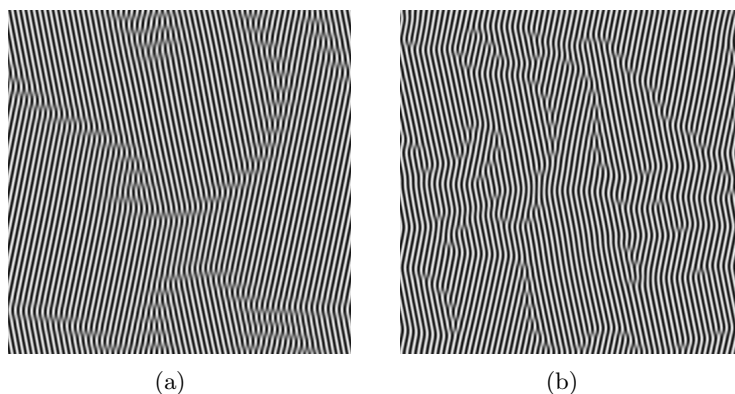


Figura 5.1: Soluciones numéricas obtenidas a partir de una condición inicial aleatoria del modelo no potencial 1 (4.12) a $t = 1000$, para diferentes valores de la profundidad del *quench*: a) cerca del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.0392$) y b) lejos del umbral ($\epsilon = 0.4118$).

A medida que se incrementa la profundidad del *quench* y ϵ deja de ser despreciable comparado con 1 ($0.1 < \epsilon$), correcciones de orden mayor deben ser incluidas en las ecuaciones

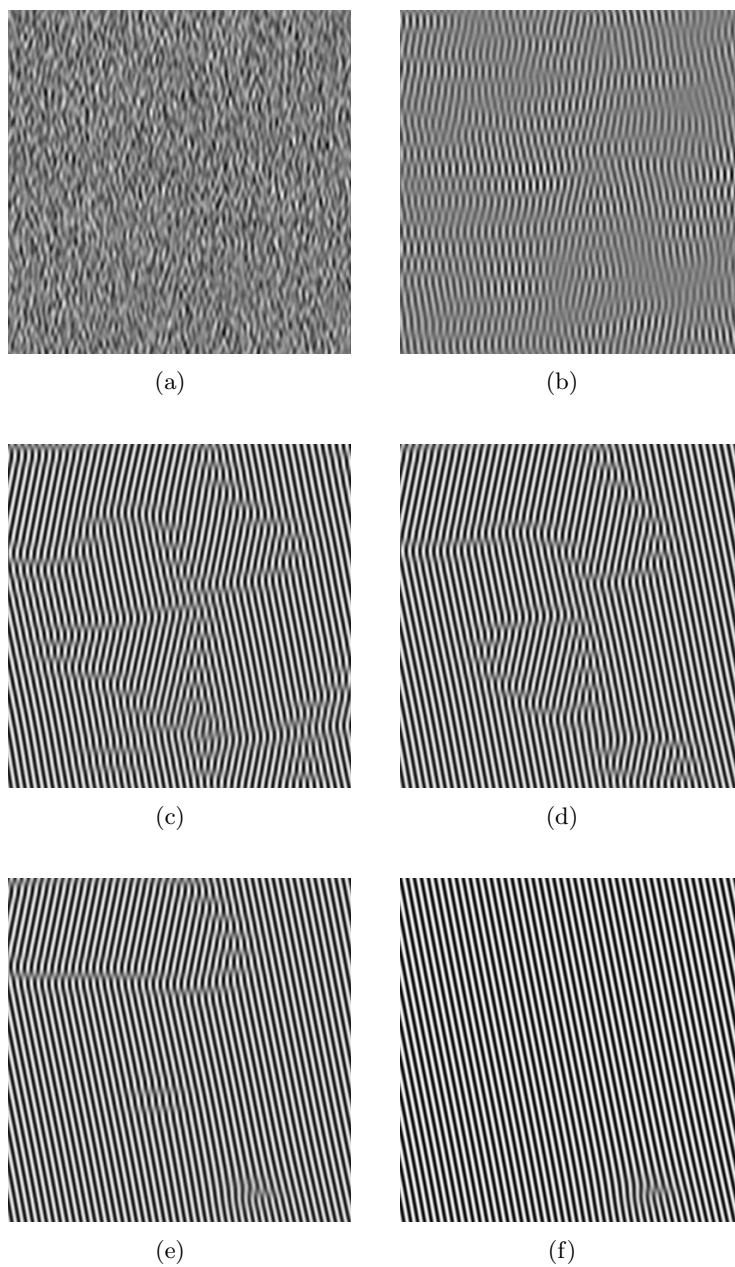


Figura 5.2: Soluciones numéricas del modelo no potencial 1 (4.12) a diferentes tiempos, cerca del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.0392$): a) $t = 0$ (condición inicial aleatoria); b) $t = 100$; c) $t = 250$; d) $t = 500$; e) $t = 1000$; y f) $t = 3000$. Los modelos potencial (4.11) y no potencial 2 (4.13) presenta configuraciones muy similares a éstas. Sólo se muestra una porción de 400×400 nodos de un sistema de 1024×1024 nodos.

de amplitud (4.37). Nos referiremos al *coarsening* con valores de ϵ no despreciables comparados con 1 como *lejos del umbral de bifurcación*. La anisotropía del sistema comienza a tener consecuencias marcadas en el crecimiento de los dominios. A diferencia del *coarsening* cerca del umbral, que sólo depende de propiedades de simetría del sistema, lejos del umbral se observan diferencias entre la dinámica de ordenamiento de los tres modelos. La forma ligeramente curvada de los dominios cerca del umbral de bifurcación cambia a formas alargadas cuasi-rectangulares (a tiempos cortos) con fronteras de chevrones casi paralelas a la dirección \hat{x} y arreglos de dislocaciones orientados cerca de la dirección \hat{y} (figura 5.1(b)). Asimismo, las fronteras de chevrones permanecen prácticamente inmóviles mientras que las dislocaciones son los defectos que se mueven y permiten el ordenamiento del patrón en el tiempo. Configuraciones de dominios de rollos oblicuos muy parecidas han sido observadas experimentalmente en electroconvección de nemáticos con alineación plana [26, 27].

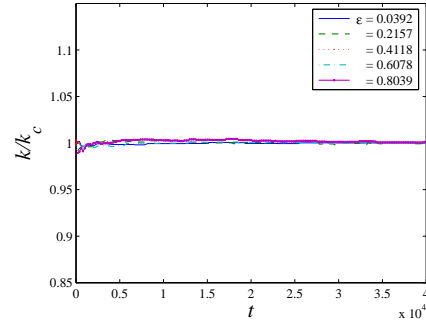
5.1. Selección del número de onda

Antes de investigar las leyes de crecimiento de dominios en el *coarsening*, abordamos el problema de *selección del número de onda* del patrón periódico, puesto que puede jugar un papel importante en la dinámica de defectos subsecuente [17, 36, 37, 61, 85]. El número de onda predominante k del patrón de franjas oblicuas, a un tiempo t dado, es obtenido numéricamente localizando la posición del máximo del factor de estructura del campo escalar ψ : $S(\vec{k}, t) = \langle \tilde{\psi}(\vec{k}, t) \tilde{\psi}(-\vec{k}, t) \rangle$.

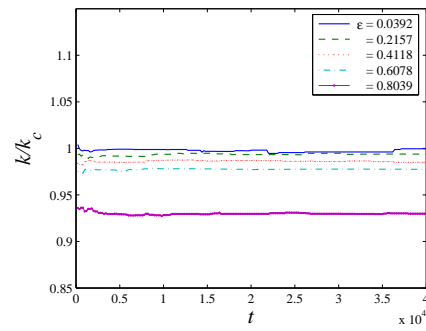
En forma similar al modelo potencial isotrópico de Swift-Hohenberg (2.5) [8, 12], el número de onda seleccionado k en el modelo potencial (4.1) corresponde a aquel que minimiza el funcional de Lyapunov (4.3). Después de un transitorio corto, k tiende a un valor prácticamente constante que es igual al número de onda marginal que maximiza la razón de crecimiento lineal (4.15) (ver Fig. 5.3(a))

$$k_c = \sqrt{p_c^2 + q_c^2} = \sqrt{\frac{c + 2\eta}{c + 2\eta - \eta^2}} k_0. \quad (5.1)$$

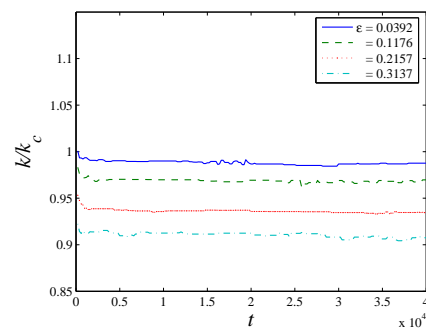
El número de onda seleccionado en el caso de los modelos no potenciales 1 (4.12) y 2 (4.13) también está muy cercano a k_c suficientemente cerca del umbral de bifurcación ($\epsilon \ll 1$), como se muestra en las Figs. 5.3(b) y 5.3(c) para $\epsilon = 0.0392$. Esto sucede puesto que cerca del umbral de bifurcación, los términos no lineales tienen un efecto muy débil en la selección del vector de onda predominante del patrón periódico. Por ejemplo, Tesauro y Cross [82] encontraron que para el modelo isotrópico no potencial de Swift-Hohenberg con un término no lineal parecido al del modelo anisotrópico no potencial 2 (4.13), el número de onda seleccionado difiere de k_c en $O(\epsilon)$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Entonces, para $\epsilon \ll 1$, se espera que, independientemente de la forma (potencial o no potencial) del término no lineal en la ecuación modelo, el vector de onda predominante seleccionado en el patrón sea muy cercano al que maximiza la razón lineal de crecimiento (4.15). La simetría del término no lineal (cúbico en los 3 modelos estudiados) asegura la saturación del crecimiento exponencial de los modos linealmente más inestables, y la estabilidad de las estructuras de franjas periódicas oblicuas emergentes con respecto a otros patrones (estructuras bimodales, franjas onduladas, etc.) para los valores del parámetro de control $0 < r$ estudiados.



(a)



(b)



(c)

Figura 5.3: Evolución temporal del número de onda predominante k del patrón de franjas oblicuas para diferentes profundidades del *quench*, en el modelo potencial (a), no potencial 1 (b) y no potencial 2 (c). El número de onda marginal obtenido del análisis lineal es $k_c = 1.0098k_0$.

Una propiedad que ha sido observada en la dinámica no potencial del modelo isotrópico de Swift-Hohenberg (2.24) es la dependencia del número de onda seleccionado en el patrón periódico de franjas con la intensidad del *quench*: el número de onda seleccionado disminuye al aumentar la profundidad del *quench* [17, 82]. En algunos casos el mecanismo de selección en sistemas no potenciales es el de aquellos modos para los cuales las dislocaciones aisladas permanecen inmóviles [17]. Sin embargo, el mecanismo de selección no es único, como ocurre en patrones periódicos modelados por ecuaciones con estructura potencial. En modelos potenciales el mecanismo de selección del número de onda parece ser en todos los casos el de los modos que maximizan la razón de crecimiento lineal y que generalmente coinciden con los modos que minimizan su funcional de Lyapunov [8, 17]. Para los modelos potencial (4.11) y no potenciales (4.12) y (4.13), se encuentran resultados para la evolución temporal del número de onda seleccionado cualitativamente similares con los de los modelos isotrópicos. En el caso del modelo potencial (4.11), el número de onda seleccionado corresponde a k_c , dado por (5.1), independientemente de la profundidad del *quench* (Fig. 5.3(a)). Para los modelos no potenciales 1 y 2, el número de onda seleccionado disminuye a medida que se incrementa la profundidad del *quench* (figuras 5.3(b) y 5.3(c)). Este efecto en la periodicidad del patrón de franjas es mucho más intenso para el modelo no potencial 2. Para el modelo no potencial 1 (4.12) el número de onda predominante k del patrón de franjas oblicuas se mantiene cercano ($|k - k_c|/k_c < 0.03$) al valor marginal k_c (dado por la Ec. (4.17)) para un intervalo relativamente amplio de la profundidad del *quench* ($\epsilon < 35|r_c|$, con $r_c = -0.0196$). Por consiguiente, la primera diferencia dinámica entre los tres modelos (4.11), (4.12) y (4.13) lejos del umbral de bifurcación es la selección del número de onda predominante en el patrón periódico. Esto puede tener consecuencias muy importantes en la dinámica de defectos y dar lugar a diferencias en el *coarsening* de cada modelo cuando se incrementa ϵ . Algunos resultados experimentales muestran que el número de onda predominante de los rollos oblicuos en electroconvección de nemáticos, disminuye al incrementar la profundidad del *quench* [61], en forma cualitativamente similar a los resultados numéricos de los modelos no potenciales 1 y 2. Lo anterior justifica el empleo de modelos no potenciales con las simetrías adecuadas para describir formación de patrones de franjas oblicuas en situaciones experimentales.

5.2. Evolución temporal de las longitudes de correlación

Las evoluciones temporales de las longitudes de las longitudes de correlación, $L_x(t)$ y $L_y(t)$, son mostradas en las Figs. 5.4-5.5 (modelo potencial), 5.6-5.7 (modelo no potencial 1) y 5.8-5.9 (modelo no potencial 2), para diferentes valores de ϵ .

Cerca del umbral ($\epsilon = 0.0392$), las leyes de crecimiento de $L_x(t)$ and $L_y(t)$ quedan bien ajustadas por las leyes de potencia

$$L_x(t) \sim t^{1/z_x}, \quad L_y(t) \sim t^{1/z_y}, \quad (5.2)$$

en donde $1/z_x = 1/z_y \approx 0.45$ para los tres modelos, como puede observarse en las Figs. 5.4-5.9. A tiempos grandes ($10^4 < t$) se observan desviaciones con respecto a las leyes de potencia (5.2). Estas desviaciones se deben a *efectos de tamaño finito*, que ocurren cuando

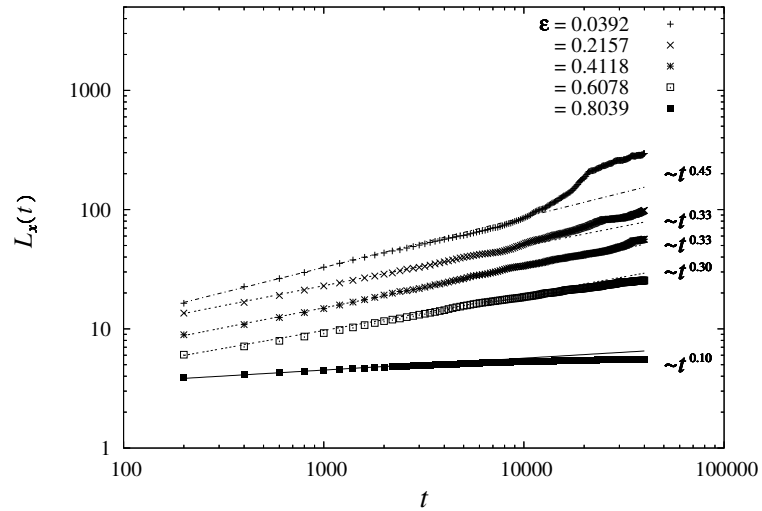


Figura 5.4: Evolución temporal de la longitud de correlación a lo largo de \hat{x} para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo potencial). Las curvas han sido movidas de su posición original en la gráfica para distinguirlas entre sí con mayor claridad.

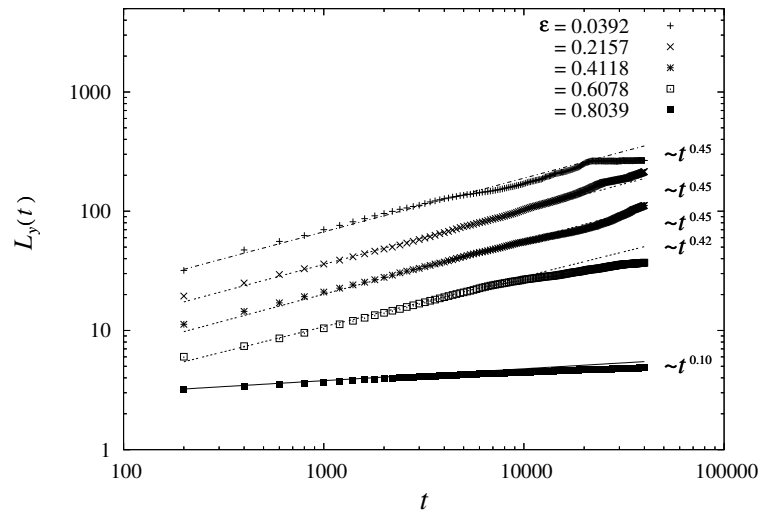


Figura 5.5: Evolución temporal de la longitud de correlación a lo largo de \hat{y} para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo potencial). Las curvas han sido movidas de su posición original en la gráfica para distinguirlas entre sí con mayor claridad.

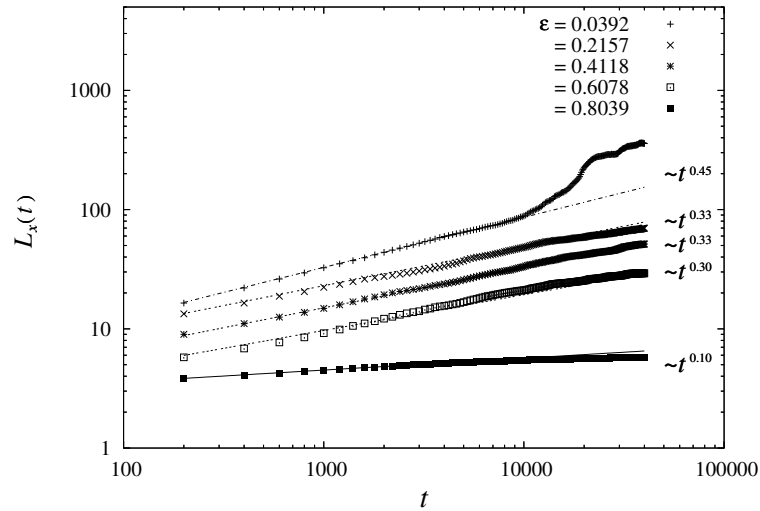


Figura 5.6: Evolución temporal de la longitud de correlación a lo largo de \hat{x} para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo no potencial 1). Las curvas han sido movidas de su posición original en la gráfica para distinguirlas entre sí con mayor claridad.

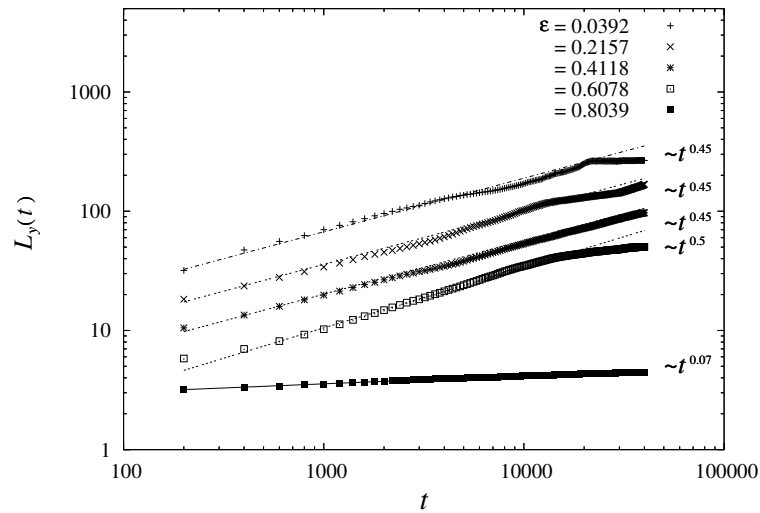


Figura 5.7: Evolución temporal de la longitud de correlación a lo largo de \hat{y} para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo no potencial 1). Las curvas han sido movidas de su posición original en la gráfica para distinguirlas entre sí con mayor claridad.

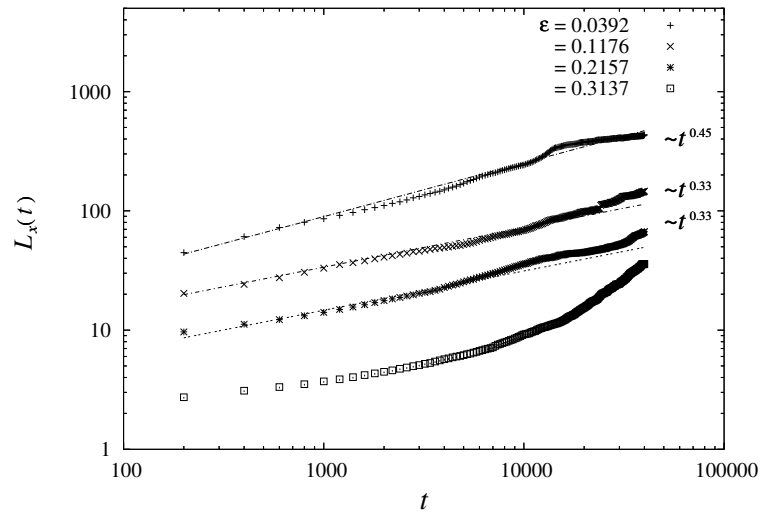


Figura 5.8: Evolución temporal de la longitud de correlación a lo largo de \hat{x} para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo no potencial 2).

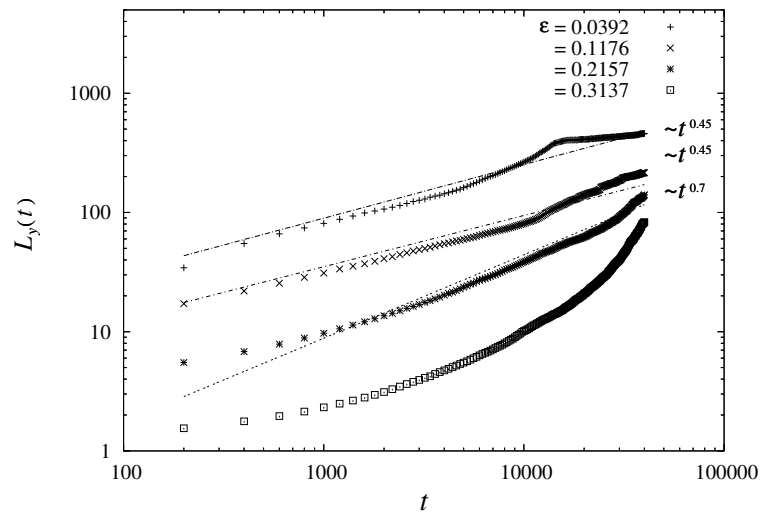


Figura 5.9: Evolución temporal de la longitud de correlación a lo largo de \hat{y} para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo no potencial 2).

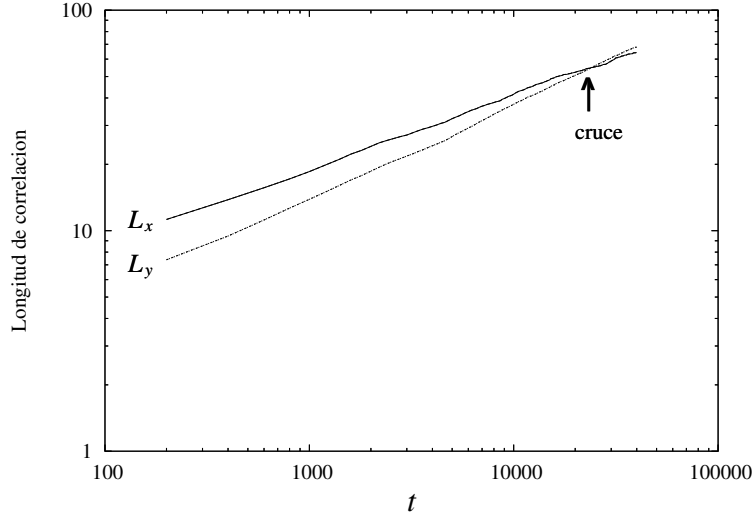


Figura 5.10: Evolución temporal de las longitudes de correlación para $\epsilon = 0.4118$ (modelo no potencial 1). En $t^* \approx 23000$ ambas curvas se intersectan ($L_x = L_y$).

el tamaño de los dominios es comparable con el tamaño total del sistema. Cabe mencionar que los efectos de tamaño finito pueden conducir a evoluciones temporales de las longitudes de correlación que obedecen aparentemente leyes de potencia t^n con exponentes efectivos $n \leq 1/z_x, 1/z_y$, como se muestra en las Figs. 5.4-5.5 para $\epsilon = 0.0392$ y $20000 < t$. Estos resultados son similares a los obtenidos previamente por Boyer [30], en donde se reportan leyes de crecimiento consistentes con un exponente cercano a $1/2$ cerca del umbral de bifurcación a tiempos intermedios. El valor $1/2$ es típico de procesos controlados por la curvatura de las interfaces, como se discutirá más adelante. En la sección 5.5.1 se presentan argumentos analíticos basados en las ecuaciones de amplitud (4.37) que muestran que los tres modelos de formación de patrones de franjas oblicuas anisotrópicas, pueden ser reducidos cerca del umbral a una ecuación de Ginzburg-Landau isotrópica para el parámetro de orden orientacional ψ_d , definido en el capítulo anterior.

Para valores intermedios de ϵ , comprendidos al menos en el intervalo $[0.2157, 0.4118]$ en el caso del modelo potencial y el modelo no potencial 1, las leyes de evolución temporal de las longitudes de correlación quedan bien ajustadas por leyes de potencia de la forma (5.2), pero con dos exponentes distintos: $1/z_x \approx 0.33$ y $1/z_y \approx 0.45$, como se muestra en las Figs. 5.4-5.7 para $\epsilon = 0.2157$ y $\epsilon = 0.4118$. Este comportamiento se observa también para el modelo no potencial 2, pero en un intervalo de valores de ϵ menor. Por ejemplo, para $\epsilon = 0.1176$ se observan las leyes $L_x(t) \sim t^{0.33}$ y $L_y(t) \sim t^{0.45}$ hasta $t \simeq 10^4$, como se muestra en las Figs. 5.8-5.9.

Este régimen de *coarsening*, caracterizado por dos exponentes de crecimiento bien definidos ($1/z_x \approx 0.33$ y $1/z_y \approx 0.45$), indica que L_y crece más rápidamente que L_x . Sin embargo, a tiempos cortos los dominios son en promedio más elongados a lo largo de \hat{x} que de \hat{y} ($L_x > L_y$), por lo que existe un tiempo característico t^* tal que $L_x(t^*) = L_y(t^*)$. Cuando $t > t^*$, los dominios se vuelven más elongados a lo largo de \hat{y} (ver Fig. 5.10). Sin

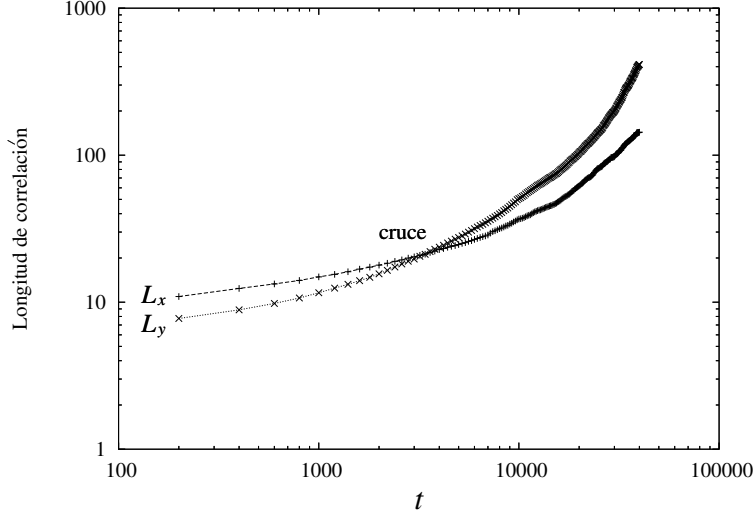


Figura 5.11: Evolución temporal de las longitudes de correlación para $\epsilon = 0.3137$ (modelo no potencial 2). En $t^* \approx 3000$ ambas curvas se intersectan ($L_x = L_y$).

embargo, dadas las limitaciones impuestas por el tamaño finito del sistema y el tiempo de cómputo, sólo se investigó el *coarsening* hasta $t = 40000$.

Para valores suficientemente grandes de ϵ , la evolución temporal de ambas longitudes de correlación, $L_x(t)$ and $L_y(t)$, se vuelve muy lenta en el caso del modelo potencial y no potencial 1, como se muestra en las Figs. 5.4-5.7 para $\epsilon = 0.8039$. Para este valor de ϵ las evoluciones temporales de las longitudes de correlación aún pueden ser ajustadas a leyes de potencia de la forma (5.2), con exponentes efectivos de crecimiento $1/z_x, 1/z_y < 1/10$. Este régimen de *coarsening* está fuertemente influenciado por los llamados *efectos no adiabáticos*, que conducen a un congelamiento de la dinámica de ordenamiento a tiempos intermedios y largos (ver capítulo 6). La transición a esta dinámica lenta de ordenamiento es relativamente abrupta, puesto que para $\epsilon = 0.6078$, las evoluciones temporales de las longitudes de correlación aún quedan bien ajustada por las leyes $L_x(t) \sim t^{0.30}$ y $L_y(t) \sim t^{0.42}$ para el modelo potencial, y $L_x(t) \sim t^{0.30}$ y $L_y(t) \sim t^{0.5}$ para el modelo no potencial 1.

Mientras que la dinámica de ordenamiento del modelo no potencial 1 es similar a la del modelo potencial para un amplio intervalo de valores de ϵ , los términos no lineales del modelo no potencial 2 tienen efectos más dramáticos lejos del umbral de bifurcación. Para $\epsilon = 0.2157$ y $\epsilon = 0.3137$ ambas longitudes de correlación crecen más rápido que leyes de potencia simples a tiempos intermedios y grandes (ver Figs. 5.8-5.9). Solamente a tiempos cortos ($t < 10^3$), su evolución temporal se ajusta adecuadamente a leyes de potencia con $1/z_x \leq 1/3$ y $1/z_y \leq 0.45$. Se observa que $L_y(t)$ crece más rápidamente que $L_x(t)$ y que a tiempos cortos $L_x > L_y$, por lo que existe un tiempo característico t^* para el cual $L_x(t^*) = L_y(t^*)$. No obstante, dado que el crecimiento de L_y es muy rápido, este tiempo característico es relativamente corto: $t^* \approx 3000$ (ver figura 5.11).

Para el valor $\epsilon \approx 20|r_c| \approx 0.384$, el modelo no potencial 2 presenta una bifurcación secundaria de franjas oblicuas a franjas normales. Este punto de bifurcación impide estu-

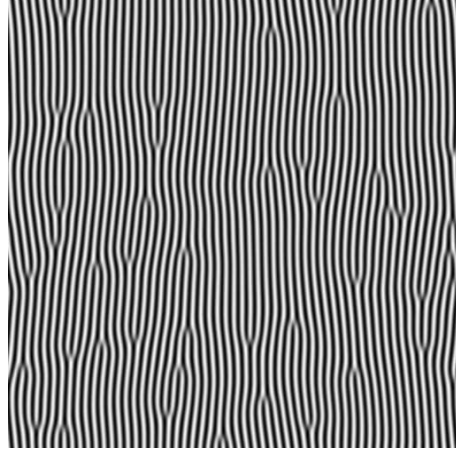


Figura 5.12: Patrón de franjas normales a $t = 1000$ que aparece como una bifurcación secundaria en el modelo no potencial 2 cuando se cruza el valor crítico del parámetro de control principal $r_0 = 19|r_c| \approx 0.3725$. Los únicos defectos topológicos presentes son dislocaciones aisladas.

diar el *coarsening* de franjas oblicuas para valores más grandes de ϵ . Los únicos defectos topológicos presentes en el patrón de franjas normales son las dislocaciones aisladas, puesto que no hay fronteras que separen diferentes fases espacialmente moduladas (ver Fig. 5.12). Un estudio numérico de la dinámica de ordenamiento en patrones de franjas normales anisotrópicas ha sido efectuado recientemente empleando como modelo la ecuación (4.8) [78].

5.3. Evolución temporal de las densidades de defectos

Los resultados mostrados anteriormente para las leyes de crecimiento de las longitudes de correlación a lo largo de \hat{x} y \hat{y} son respaldados por los resultados de las leyes de decaimiento de las densidades de defectos (fronteras de chevrones y dislocaciones) presentados en esta sección. Suponiendo que la hipótesis de escalamiento dinámico (ver siguiente sección) es válida a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , se pueden obtener relaciones entre las leyes de evolución de las longitudes de correlación y de las densidades de defectos mediante un simple argumento geométrico. Las longitudes medias de los dominios a lo largo de \hat{x} y \hat{y} deben ser proporcionales a $L_x(t)$ y $L_y(t)$, respectivamente (Fig. 5.13). Entonces el área típica de los dominios debe ser proporcional a $L_x(t)L_y(t)$, de donde el número de dominios en el sistema (de área total constante S) al tiempo t debe ser

$$N(t) \sim \frac{S}{L_x(t)L_y(t)} \sim \frac{1}{L_x(t)L_y(t)}.$$

Por otro lado, el número de dislocaciones en un dominio, localizadas principalmente en las fronteras verticales, debe ser proporcional a $L_y(t)$, por lo que la densidad de dislocaciones

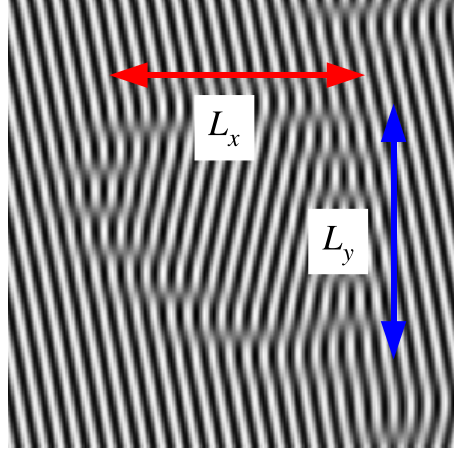


Figura 5.13: Dominio de franjas oblicuas con vector de onda \vec{k}_c^- obtenido de la solución numérica del modelo no potencial 1 (4.12) a $t = 500$, para $\epsilon = 0.0392$. Suponiendo que éste es un dominio típico en el *coarsening*, la hipótesis de escalamiento dinámico a lo largo de \hat{x} y \hat{y} implica que las únicas escalas de longitud relevantes a lo largo de esas direcciones son proporcionales a $L_x(t)$ y $L_y(t)$, respectivamente.

en el sistema al tiempo t debe ser

$$\rho_{dis}(t) \sim N(t)L_y(t) \sim \frac{1}{L_x(t)}. \quad (5.3)$$

De manera similar, la longitud típica de una frontera de chevrones, orientada casi paralela a \hat{x} , debe ser proporcional a $L_x(t)$. Entonces la densidad de chevrones en el sistema al tiempo t debe ser

$$\rho_{ch}(t) \sim N(t)L_x(t) \sim \frac{1}{L_y(t)}. \quad (5.4)$$

Por consiguiente, si en los regímenes de *coarsening* en los que las longitudes de correlación obedecen las leyes (5.2) el sistema presenta escalamiento dinámico, se espera que las densidades de defectos sean consistentes con las leyes

$$\rho_{dis}(t) \sim t^{-1/z_{dis}}, \quad \rho_{ch}(t) \sim t^{-1/z_{ch}}, \quad (5.5)$$

con $z_{dis} \approx z_x$ y $z_{ch} \approx z_y$.

Las evoluciones temporales de las densidades de defectos, ρ_{dis} y ρ_{ch} , son mostradas en las Figs. 5.14-5.15 (modelo potencial), 5.16-5.17 (modelo no potencial 1) y 5.18-5.19 (modelo no potencial 2), para diferentes valores de ϵ . Cerca del umbral de bifurcación, el decaimiento temporal de ρ_{dis} y ρ_{ch} queda bien ajustado por las leyes (5.5), con $z_{dis} = z_{ch} = 0.45$ para los modelos potencial y no potencial 1, mientras que $z_{dis} = z_{ch} = 0.5$ para el modelo no potencial 2, como puede observarse en las Figs. 5.14-5.19 para $\epsilon = 0.0392$. Este resultado muestra que las relaciones (5.3) y (5.4) se satisfacen adecuadamente y además sugiere que la dinámica de ordenamiento es *isotrópica* cerca del umbral. Esto es, el crecimiento de

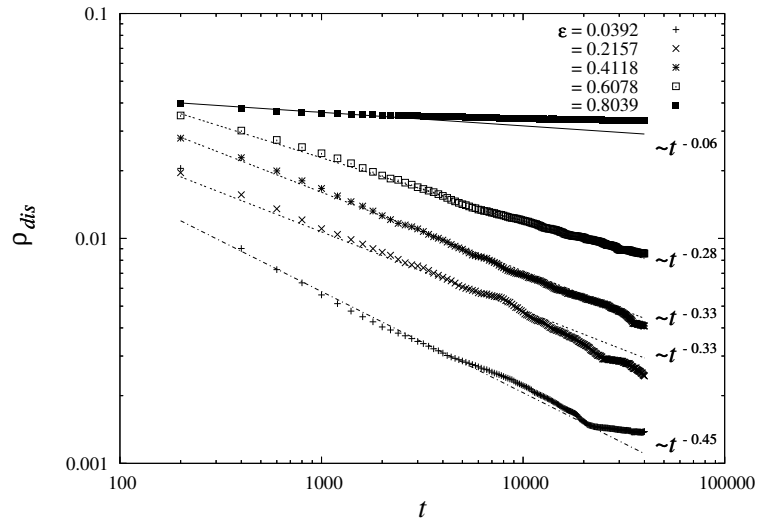


Figura 5.14: Evolución temporal de la densidad de dislocaciones para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo potencial). Las curvas han sido movidas de su posición original en la gráfica para distinguirlas entre sí con mayor claridad.

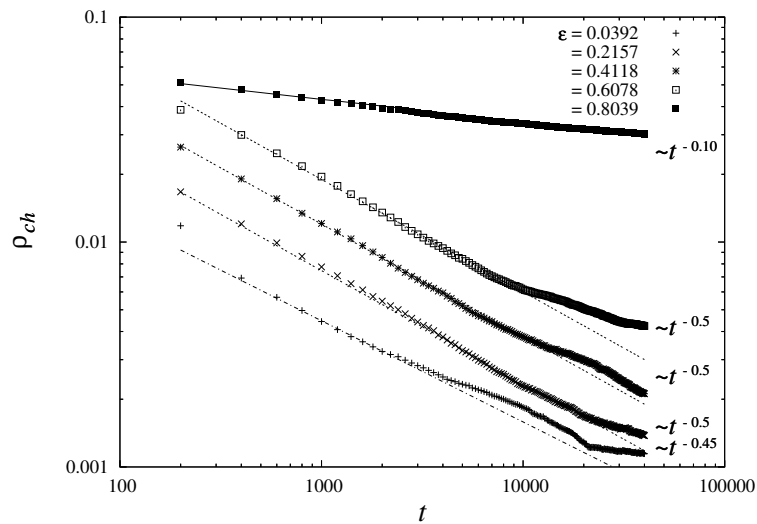


Figura 5.15: Evolución temporal de la densidad de chevrones para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo potencial). Las curvas han sido movidas de su posición original en la gráfica para distinguirlas entre sí con mayor claridad.

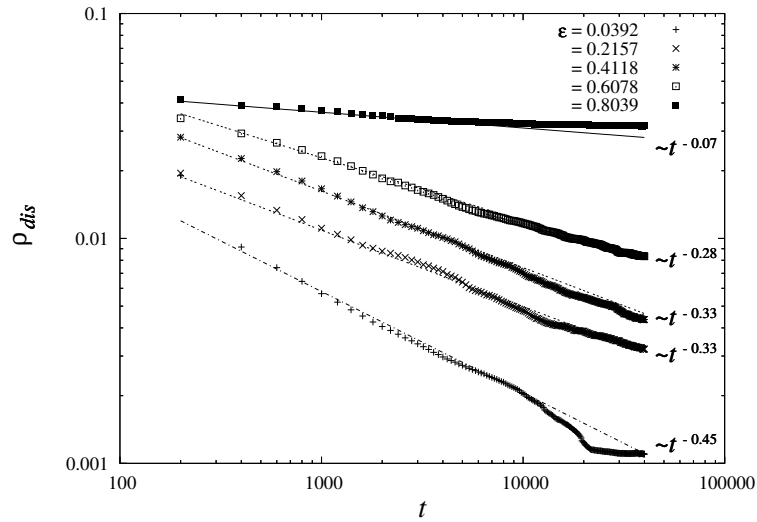


Figura 5.16: Evolución temporal de la densidad de dislocaciones para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo no potencial 1). Las curvas han sido movidas de su posición original en la gráfica para distinguirlas entre sí con mayor claridad.

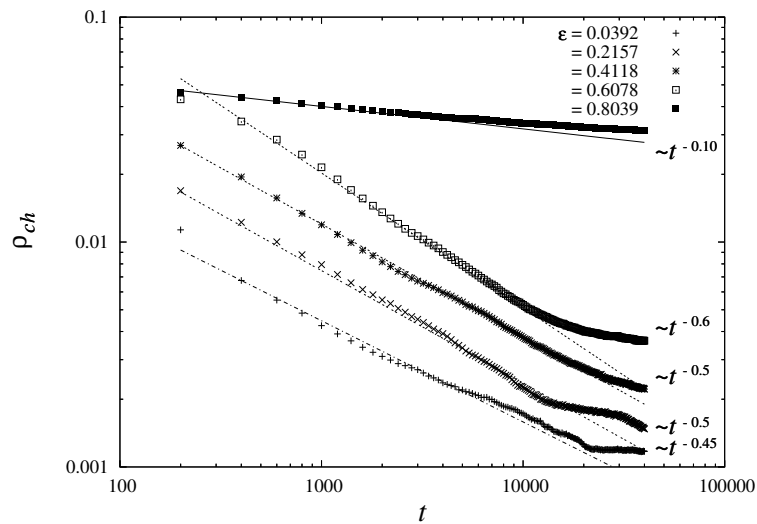


Figura 5.17: Evolución temporal de la densidad de chevrones para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo no potencial 1). Las curvas han sido movidas de su posición original en la gráfica para distinguirlas con mayor claridad.

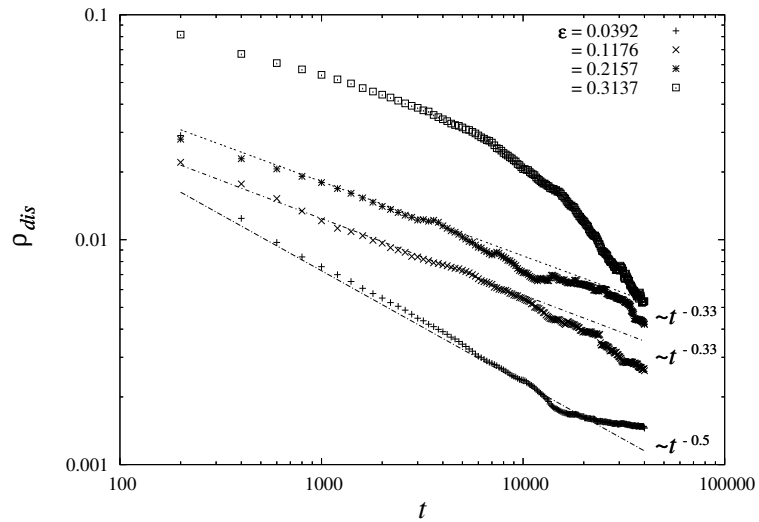


Figura 5.18: Evolución temporal de la densidad de dislocaciones para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo no potencial 2).

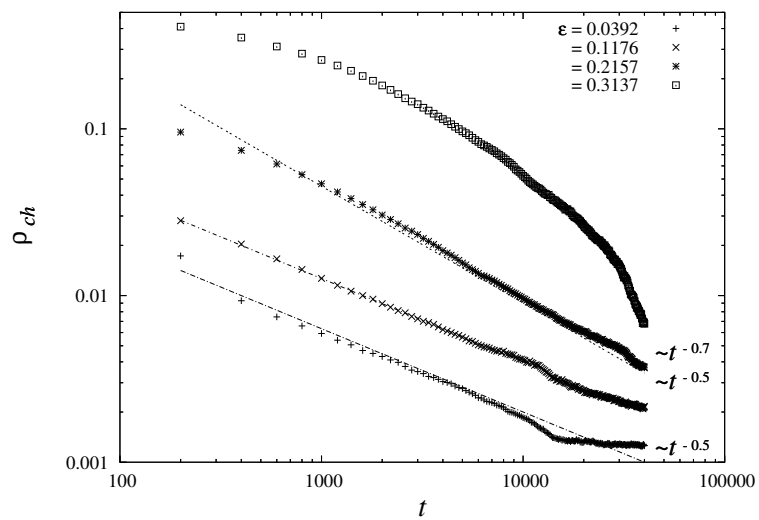


Figura 5.19: Evolución temporal de la densidad de chevrones para diversos valores de la profundidad del *quench* (modelo no potencial 2).

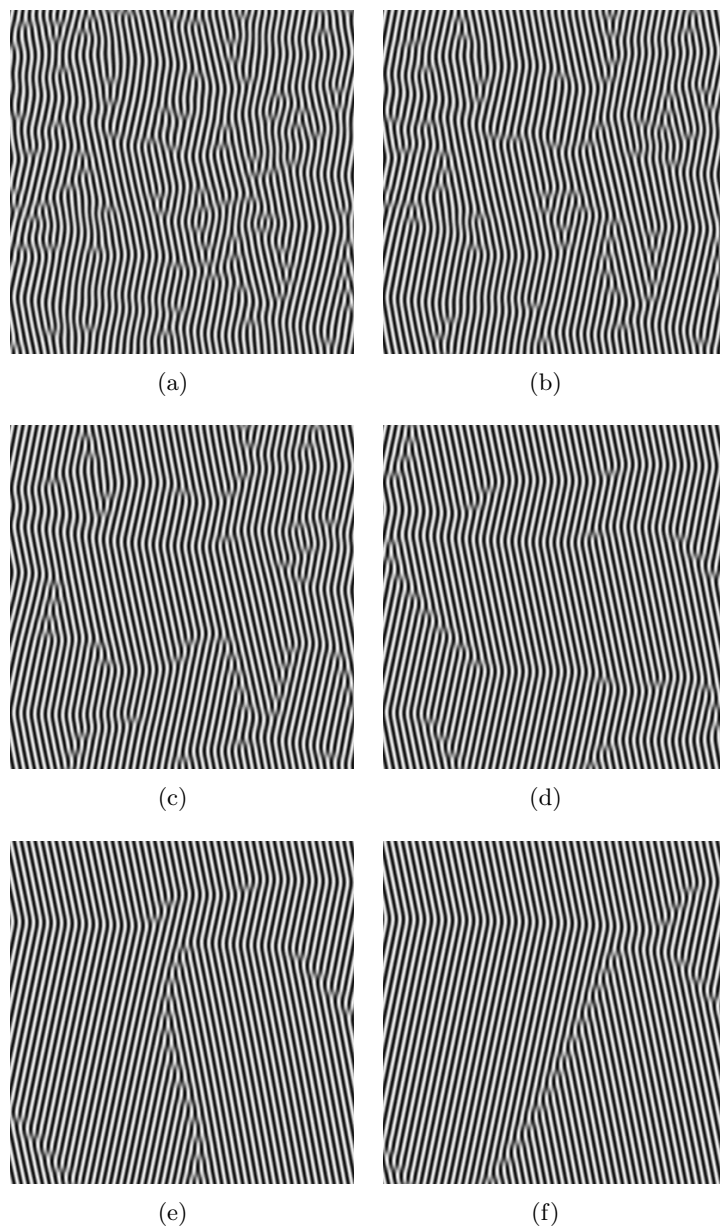


Figura 5.20: Soluciones numéricas del modelo no potencial 1 (4.12) a diferentes tiempos, para $\epsilon = 0.2157$: a) $t = 100$; b) $t = 250$; c) $t = 500$; d) $t = 2000$; e) $t = 8000$; y f) $t = 20000$. El modelo potencial (4.11) presenta configuraciones muy similares a éstas.

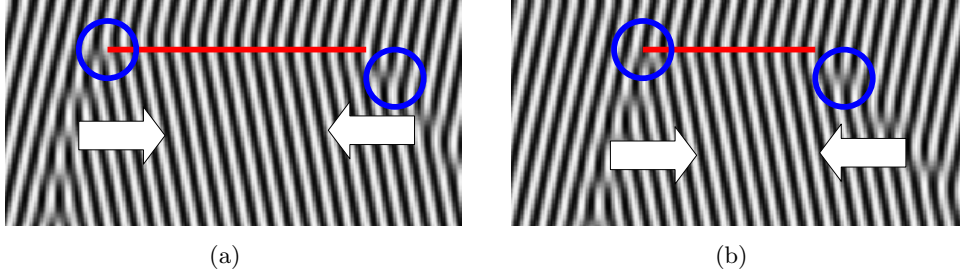


Figura 5.21: Reducción de la longitud de una frontera de chevrons (en rojo) por el movimiento horizontal de dos arreglos inclinados de dislocaciones de carga topológica opuesta para el modelo no potencial 1, con $\epsilon = 0.2157$ a: a) $t = 8000$ y b) $t = 12000$. Las flechas indican la dirección y sentido de movimiento de los arreglos de dislocaciones. La frontera horizontal permanece inmóvil en este proceso y su aniquilación tiene como consecuencia la aniquilación del par de dislocaciones de carga topológica opuesta (encerradas por los círculos azules).

dominios en cualquier dirección queda caracterizado por una única ley de la forma $t^{1/z}$, con $z \approx 2$. Para $10000 < t$ se observan desviaciones de estas leyes debido a efectos de tamaño finito.

Al incrementar el valor de ϵ , la dinámica de defectos se vuelve anisotrópica y el decaimiento de las densidades de cada uno de los dos tipos de defectos (fronteras de chevrons y dislocaciones) obedece leyes diferentes. Las Figs. 5.20(a)-5.20(f) muestran configuraciones del patrón de franjas oblicuas del modelo no potencial 1 a diferentes tiempos en este régimen de *coarsening* (con $\epsilon = 0.2157$). Las fronteras de chevrons son bloqueadas y permanecen prácticamente inmóviles, mientras que el *coarsening* es controlado por el movimiento de dislocaciones, principalmente a lo largo de \hat{x} . La reducción de la longitud de una frontera horizontal ocurre por el movimiento horizontal de arreglos de dislocaciones de carga topológica opuesta localizados en sus extremos, como se muestra en las Figs. 5.21(a) y 5.21(b). Adicionalmente, la aniquilación de una frontera horizontal tiene como consecuencia la aniquilación de un par de dislocaciones de carga topológica opuesta. Este mecanismo de reducción de longitud de interfaces ha sido identificado experimentalmente en electroconvección [27].

Para valores moderados de ϵ , las relaciones (5.3) y (5.4) también se cumplen, a pesar de que la dinámica de defectos es anisotrópica. En las figuras 5.14-5.17 se muestra que en el caso de los modelos potencial y no potencial 1, para $\epsilon = 0.2157$ y $\epsilon = 0.4118$, $\rho_{dis}(t)$ y $\rho_{ch}(t)$ decaen obedeciendo las leyes de potencia (5.5), pero ahora con dos exponentes diferentes: $1/z_{dis} \approx 0.33$ y $1/z_{ch} \approx 0.45$. Estos mismos dos exponentes de decaimiento son observados en la evolución temporal de las densidades de defectos en el caso del modelo no potencial 2 para $\epsilon = 0.1157$ y $t < 10^4$, como se muestra en las Figs. 5.18-5.19.

Para una profundidad del *quench* $\epsilon = 31|r_c| = 0.6078$, las evoluciones temporales de las densidades de defectos cambian ligeramente con respecto a aquellas para $0.2157 \leq \epsilon \leq 0.4118$ en el caso de los modelos potencial y no potencial 1. La evolución temporal de $\rho_{dis}(t)$ se ajusta a la ley de decaimiento $t^{-1/z_{dis}}$, con $1/z_{dis} \approx 0.28$, mientras que la evolución de

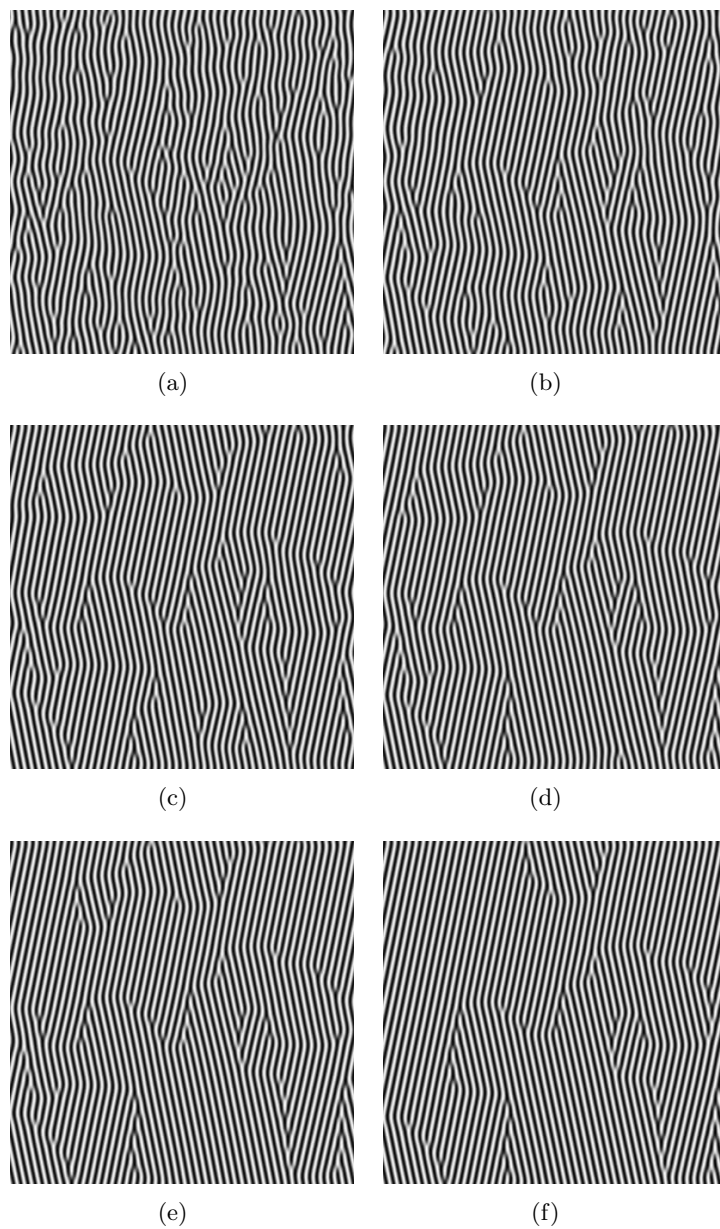


Figura 5.22: Soluciones numéricas del modelo no potencial 1 (4.12) a diferentes tiempos, para $\epsilon = 0.8039$: a) $t = 100$; b) $t = 500$; c) $t = 2000$; d) $t = 5000$; e) $t = 10000$; y f) $t = 20000$. El modelo potencial (4.11) presenta configuraciones muy similares a éstas.

$\rho_{ch}(t)$ se ajusta a la ley $t^{-1/z_{ch}}$, con $1/z_{ch} \approx 0.5$ para el modelo potencial y $1/z_{ch} \approx 0.6$ para el modelo no potencial 1. Para este valor de ϵ comienzan a observarse desviaciones de las relaciones (5.3) y (5.4).

Al igual que con las longitudes de correlación, al incrementar el valor de ϵ por arriba de $\epsilon = 0.6078$ se verifica que ocurre una transición abrupta en la dinámica de ordenamiento para los modelos potencial y no potencial 1. Se observa un nuevo régimen de *coarsening* para el cual la dinámica de defectos topológicos, tanto de fronteras de chevrones como de dislocaciones, es extremadamente lenta, como puede observarse en las configuraciones del patrón periódico a diferentes tiempos para $\epsilon = 0.8039$, en las Figs. 5.22(a)-5.22(f). En este caso las evoluciones temporales de $\rho_{dis}(t)$ y $\rho_{ch}(t)$ se ajustan a tiempos cortos (del orden de $t < 2000$) con leyes de potencia de la forma (5.5), en donde $10 < z_{dis}, z_{ch}$. Para $2000 < t$, se saturan a valores prácticamente constantes, indicando que los defectos son bloqueados y el sistema permanece congelado y altamente desordenado, con una gran cantidad de defectos topológicos que no logran ser aniquilados (ver Fig. 5.22(f)).

En el caso del modelo no potencial 2, la dinámica de defectos topológicos conduce a un comportamiento opuesto al de las leyes de decaimiento de defectos de los otros dos modelos: al incrementar ϵ el decaimiento se acelera, presentando un comportamiento más rápido que el de leyes de potencia simples. Esto puede observarse en las Figs. 5.18 y 5.19 para $\epsilon = 0.2157$ y $\epsilon = 0.3137$. A tiempos cortos ($t < 10^3$) es posible ajustar las evoluciones temporales de ρ_{dis} y ρ_{ch} a las leyes de potencia $t^{-1/z_{dis}}$ y $t^{-1/z_{ch}}$, con $3 \leq z_{dis}$ y $2 \leq z_{ch}$, respectivamente. No obstante, para $10^3 < t$ los efectos no potenciales dominan la dinámica de dislocaciones y el patrón de franjas oblicuas alcanza configuraciones muy ordenadas en las que los defectos topológicos predominantes son fronteras curvadas y verticales de dislocaciones, como se muestra en las Figs. 5.23(a)-5.23(f).

5.4. Escalamiento dinámico

En el caso del *coarsening* de sistemas isotrópicos bidimensionales con parámetro de orden local uniforme, las simulaciones numéricas y los experimentos parecen respaldar la validez de la hipótesis de escalamiento dinámico [2]. Una forma de verificar esta hipótesis es considerar a alguna longitud característica, $L(t)$ (obtenida numérica o experimentalmente¹), como la única escala de longitud relevante en la dinámica de ordenamiento del sistema. Si todas las coordenadas (x, y) se dividen por $L(t)$, la hipótesis de escalamiento dinámico implica que la estructura del sistema es estadísticamente independiente del tiempo. Para sistemas isotrópicos, lo anterior implica que la función de correlación *radial* del sistema debe tener la forma

$$C(r, t) = f\left(\frac{r}{L(t)}\right), \quad (5.6)$$

¹La longitud característica de las fases de simetría rota puede ser extraída de diversas maneras, dependiendo del sistema bajo estudio. Por ejemplo, se puede extraer de la anchura de la curva del factor de estructura del campo escalar correspondiente al parámetro de orden local que describe al sistema, o de la posición del máximo en el factor de estructura [2].

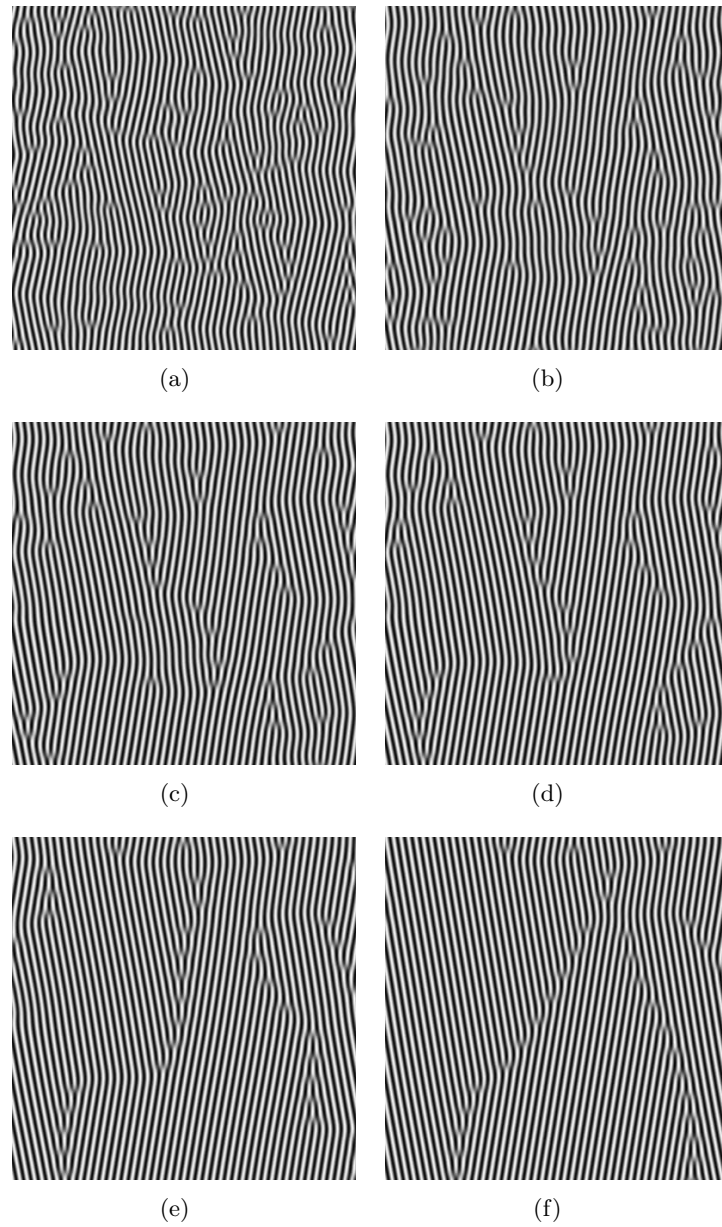


Figura 5.23: Soluciones numéricas del modelo no potencial 2 (4.13) a diferentes tiempos, para $\epsilon = 0.2157$: a) $t = 100$; b) $t = 250$; c) $t = 500$; d) $t = 1000$; e) $t = 2000$; y f) $t = 4000$.

con $r = \|\vec{r}\| = \|x\hat{x} + y\hat{y}\|$, mientras que el factor de estructura (la transformada de Fourier bidimensional de la función de correlación) tiene la forma

$$S(q, t) = L(t)^2 \tilde{f}(qL(t)), \quad (5.7)$$

siendo \tilde{f} la transformada de Fourier 2D de la función f y $q = \|\vec{q}\| = \|q_x\hat{x} + q_y\hat{y}\|$, con \vec{q} el vector conjugado a \vec{r} en el espacio de Fourier. Por consiguiente, para verificar si $L(t)$ es realmente la escala de longitud característica en el *coarsening* y si el sistema presenta escalamiento dinámico, al graficar a $C(r, t)$ como función de $r/L(t)$, se debe obtener una curva única (f) con un perfil independiente del tiempo. Equivalentemente, al graficar a $S(q, t)/L(t)^2$ como función de $qL(t)$ se debe obtener una curva única (\tilde{f}) independiente del tiempo.

En el caso bajo estudio en el presente trabajo, la anisotropía intrínseca del sistema conduce a suponer a priori la existencia de al menos dos escalas de longitud características, siendo las *más naturales* aquellas asociadas con las direcciones favorecidas \hat{x} y \hat{y} . Para verificar la hipótesis de escalamiento dinámico en este caso (en cada una de las direcciones de interés), se debe hacer una pequeña modificación a la prueba mencionada anteriormente para sistemas isotrópicos. Suponiendo que el crecimiento de los dominios se lleva a cabo de manera autosimilar a lo largo de cada una de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , y suponiendo además que las longitudes de correlación $L_x(t)$ y $L_y(t)$ (obtenidas numéricamente mediante las fórmulas (4.53) y (4.54)) son respectivamente las únicas escalas de longitud relevantes en el *coarsening* a lo largo de dichas direcciones, entonces las funciones de correlación unidimensionales (4.51) y (4.52) deben tener la forma

$$C_x(x, t) = f_x \left(\frac{x}{L_x(t)} \right), \quad (5.8)$$

$$C_y(y, t) = f_y \left(\frac{y}{L_y(t)} \right), \quad (5.9)$$

y sus transformadas de Fourier unidimensionales, los factores de estructura unidimensionales (4.49) y (4.50), deben obedecer el siguiente ansatz

$$S_x(q_x, t) = L_x(t) \tilde{f}_x(q_x L_x(t)), \quad (5.10)$$

$$S_y(q_y, t) = L_y(t) \tilde{f}_y(q_y L_y(t)). \quad (5.11)$$

En consecuencia, si hay escalamiento dinámico a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , al graficar a $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ se deben obtener curvas a diferentes tiempos que colapsan todas sobre una única curva con perfil independiente del tiempo. Análogamente, al graficar a $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ se debe obtener una única curva independiente del tiempo (no necesariamente la misma curva que aquella en correspondiente a la dirección \hat{x}). En las figuras 5.24(a) y 5.25(a) se muestran las curvas de los factores de estructura unidimensionales a diferentes tiempos, para un *quench* de $\epsilon = 0.0392$. $S_x(q_x, t)$ y $S_y(q_y, t)$ son calculados a partir de las ecuaciones (4.47), (4.49) y (4.50). En las figuras 5.24(b) y 5.25(b) se observa que cuando $S_x(q_x, t)$ y $S_y(q_y, t)$ son escalados adecuadamente por las longitudes de correlación $L_x(t)$ y $L_y(t)$, respectivamente, obedecen muy bien el

ansatz (5.10) y (5.11) en un intervalo de tiempo de dos órdenes de magnitud. Esto muestra que en efecto, la hipótesis de escalamiento dinámico se cumple a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} . Las únicas escalas de longitud relevantes a lo largo de estas dos direcciones son las longitudes de correlación $L_x(t)$ y $L_y(t)$ (que caracterizan a las longitudes medias horizontal y vertical de los dominios, respectivamente), y el crecimiento unidimensional de dominios a lo largo de dichas direcciones es autosimilar y estadísticamente independiente del tiempo cuando las coordenadas x y y se escalan por $L_x(t)$ y $L_y(t)$, respectivamente.

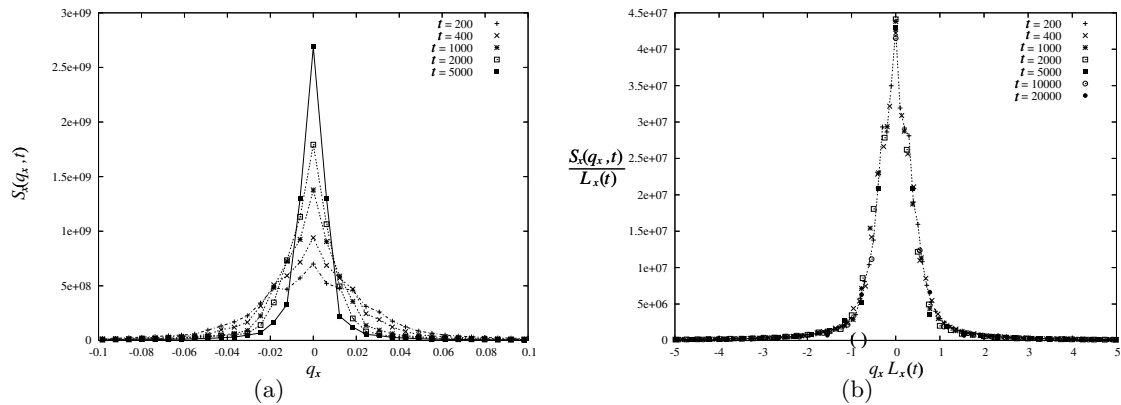


Figura 5.24: a) Curvas del factor de estructura $S_x(q_x, t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 cerca del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.0392$); b) verificación de la hipótesis de escalamiento dinámico a lo largo de \hat{x} para las curvas mostradas en (a).

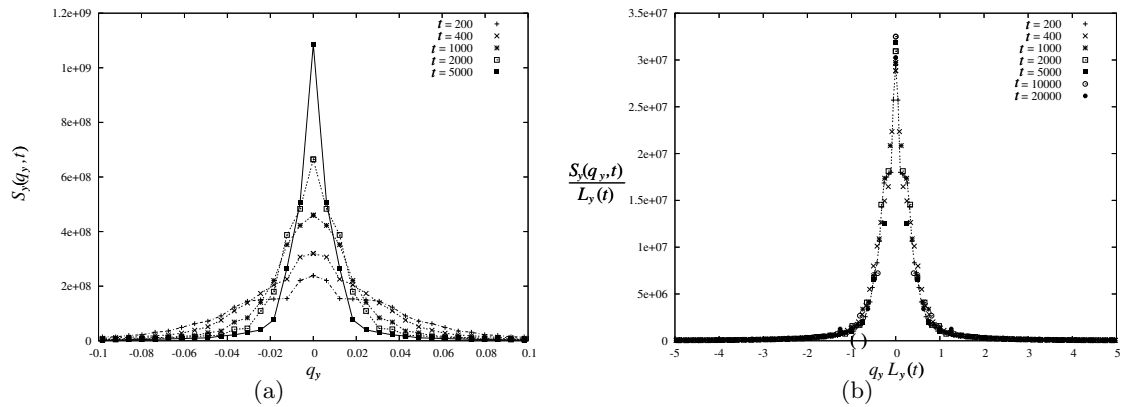


Figura 5.25: Curvas del factor de estructura $S_y(q_y, t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 cerca del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.0392$); b) verificación de la hipótesis de escalamiento dinámico a lo largo de \hat{y} para las curvas mostradas en (a).

Las curvas de los factores de estructura unidimensionales obedecen razonablemente el ansatz (5.10) y (5.11) incluso en el régimen de *coarsening* caracterizado por dos exponentes diferentes con $z_x \approx 3$ y $z_y \approx 2$, como se muestra en las Figs. 5.26(a) y 5.26(b) para $\epsilon =$

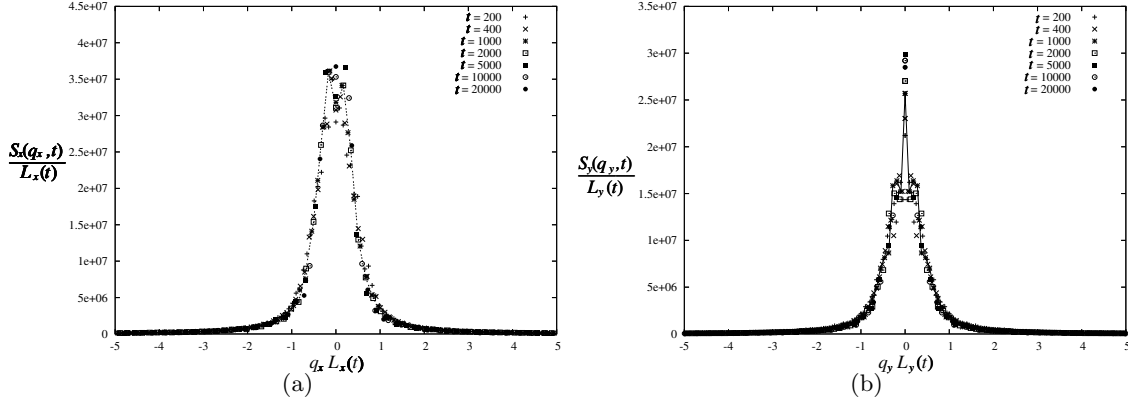


Figura 5.26: a) Gráficas de $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.2157$); b) gráficas de $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.2157$).

0.2157, y en las Figs. 5.28(a) y 5.28(b) para $\epsilon = 0.4118$. No obstante, los picos centrales en estas gráficas, $S_x(q_x = 0, t)/L_x(t)$ y $S_y(q_y = 0, t)/L_y(t)$, crecen ligeramente en el tiempo en vez de permanecer constantes. Entonces, a diferencia del *coarsening* cerca del umbral de bifurcación (y de la mayoría de procesos de *coarsening* en sistemas con fases de simetría rota uniformes), el crecimiento de dominios no es autosimilar, lo que indica que existen varias escalas de longitud en el sistema que posiblemente crecen con leyes diferentes. Sin embargo, el hecho de que aparentemente en las figuras 5.26(a) y 5.26(b) se observen desviaciones del ansatz (5.10) y (5.11) solamente cuando $q_x, q_y \simeq 0$ (para $\epsilon = 0.2157$ y $\epsilon = 0.4118$), sugiere que sigue habiendo escalamiento dinámico localmente en el sistema. Podemos clasificar a las correlaciones en el sistema de la siguiente forma:

1. *Correlaciones a distancias grandes:* $|q_x L_x(t)| \ll 1$ y $|q_y L_y(t)| \ll 1$. Estas correlaciones corresponden a distancias de orden l_x y l_y , en donde l_x y l_y son las longitudes totales del sistema en las direcciones \hat{x} y \hat{y} , respectivamente.
2. *Correlaciones a distancias medias:* $|q_x L_x(t)| \sim 1$ y $|q_y L_y(t)| \sim 1$. Estas correlaciones corresponden a distancias de orden $L_x(t)$ y $L_y(t)$, esto es, de unas cuantas veces los tamaños medios de los dominios en las direcciones \hat{x} y \hat{y} , respectivamente.
3. *Correlaciones a distancias cortas:* $1 \ll |q_x L_x(t)|$ y $1 \ll |q_y L_y(t)|$. Estas correlaciones corresponden a distancias mucho menores al tamaño promedio de los dominios en las direcciones \hat{x} y \hat{y} .

El hecho de que los picos centrales de las gráficas en las figuras antes mencionadas crezcan en el tiempo muestra que las funciones de correlación a distancias grandes a lo largo de \hat{x} y \hat{y} dependen de unas longitudes de correlación que crecen en el tiempo más rápidamente que $L_x(t)$ y $L_y(t)$, respectivamente. Dicho de otra manera, la longitud de correlación depende de la escala considerada.

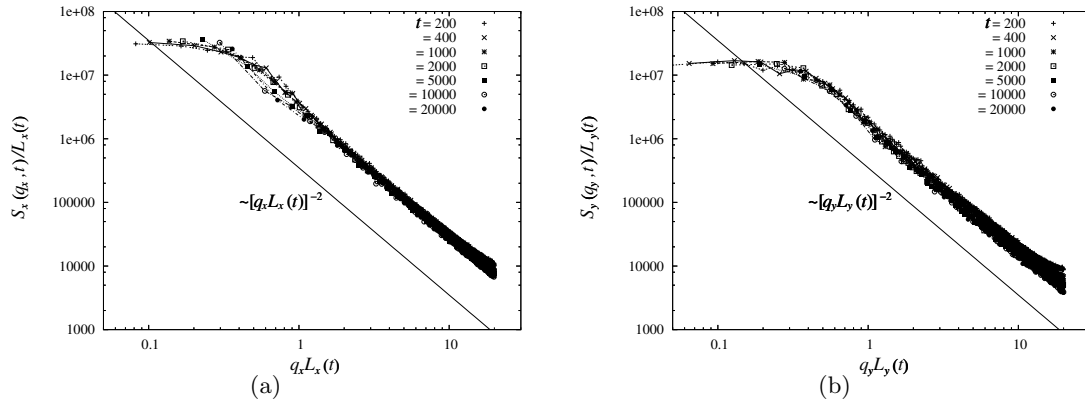


Figura 5.27: a) Cola del factor de estructura unidimensional $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.2157$). La línea continua ($\sim [q_x L_x(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{x} . b) Cola del factor de estructura unidimensional $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.2157$). La línea continua ($\sim [q_y L_y(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{y} .

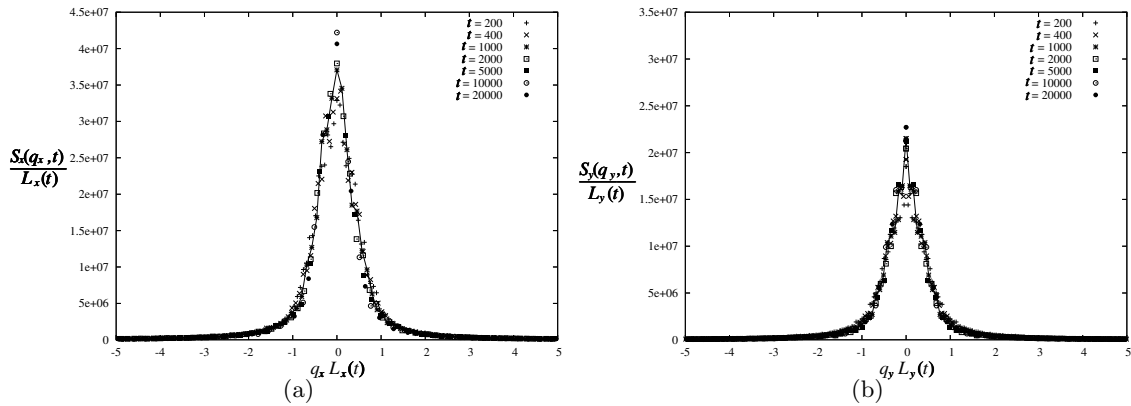


Figura 5.28: a) Gráficas de $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.4118$); b) gráficas de $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.4118$).

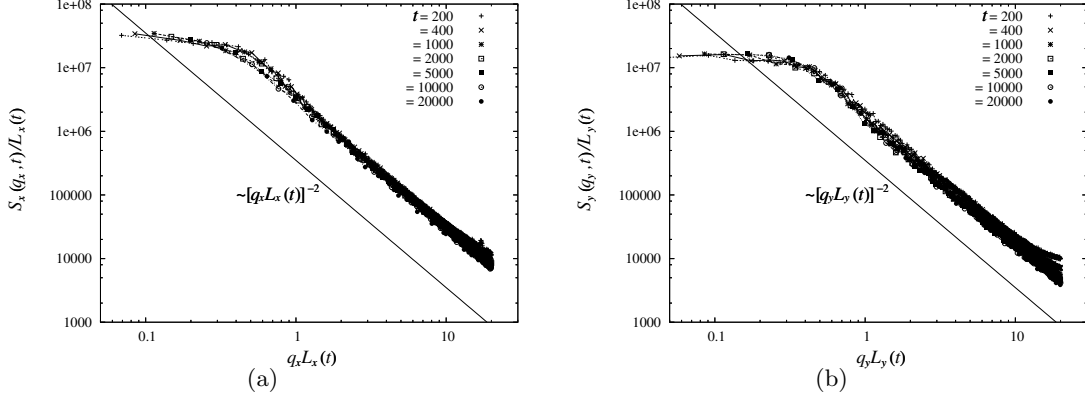


Figura 5.29: a) Cola del factor de estructura unidimensional $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.4118$). La línea continua ($\sim [q_x L_x(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{x} . b) Cola del factor de estructura unidimensional $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.4118$). La línea continua ($\sim [q_y L_y(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{y} .

Para correlaciones a distancias medias, se puede considerar que hay escalamiento dinámico a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , con longitudes de correlación $L_x(t)$ y $L_y(t)$ dadas por las fórmulas (4.53) y (4.54). Esto puede ser observado en las figuras 5.26(a) y 5.26(b) para $\epsilon = 0.2157$, y 5.28(a) y 5.28(b) para $\epsilon = 0.4118$. En estas gráficas, los perfiles de las curvas $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ y $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ son prácticamente independientes del tiempo en los intervalos $0.5 < |q_x L_x(t)|$ y $0.5 < |q_y L_y(t)|$, respectivamente.

Las correlaciones a distancias cortas requieren un poco más de cuidado, dado que las magnitudes de los factores de estructura unidimensionales son mucho menores (en algunos órdenes de magnitud). Vale la pena hacer referencia a un resultado muy general para las correlaciones a distancias cortas en el *coarsening* de sistemas isotrópicos con fases de simetría rota uniformes, conocido como *ley de Porod* [2]. Esta ley establece la forma funcional explícita para la cola del factor de estructura y fue deducida por primera vez en el problema de dispersión por un medio bifásico [83].

Por simplicidad, consideremos el *coarsening* de un sistema d -dimensional descrito por un parámetro de orden escalar $\phi(\vec{r})$ con fases de simetría rota $\phi = +1$ y $\phi = -1$, separadas por interfaces de anchura ξ (la escala más pequeña del problema). Por el momento consideraremos la configuración del sistema a un tiempo fijo, por lo que ignoraremos la dependencia explícita con t . Consideremos dos puntos \vec{x} y $\vec{x} + \vec{r}$, con $\xi \ll r \ll L$, en donde $r = \|\vec{r}\|$ y L es la longitud media de los dominios. El producto $\phi(\vec{x})\phi(\vec{x} + \vec{r})$ es -1 si existe una interfaz entre ambos puntos, y $+1$ si no hay ninguna interfaz. Como $r \ll L$, la probabilidad de que exista más de una interfaz entre ambos puntos puede ser despreciada. La probabilidad de encontrar una interfaz es de orden r/L , por lo que la función de correlación

radial $C(r, t) \equiv \langle \phi(\vec{x})\phi(\vec{x} + \vec{r}) \rangle$ es aproximadamente

$$\begin{aligned} C(r, t) &\simeq (-1) \times O(r/L) + (+1) \times (1 - O(r/L)), \\ &= 1 - O(r/L), \end{aligned} \quad (5.12)$$

La expresión (5.12) implica que, para correlaciones a distancias cortas, $\xi \ll r \ll L$, la cola del factor de estructura $S(q, t) \equiv \langle \tilde{\phi}(\vec{q})\tilde{\phi}(-\vec{q}) \rangle$ tiene la forma de ley de potencia dada por

$$S(q, t) \sim \frac{1}{Lq^{d+1}}. \quad (5.13)$$

Es importante mencionar que en la deducción de la ley de Porod se supone implícitamente la hipótesis de escalamiento dinámico a distancias cortas, al considerar al tamaño medio L de los dominios como la única escala de longitud característica en el sistema.

En el problema del presente trabajo, los argumentos descritos anteriormente para sistemas isotrópicos son aplicables a lo largo de cada una de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , tomando $d = 1$ en la ecuación (5.13). Entonces, suponiendo que el crecimiento de dominios es autosimilar a lo largo de estas direcciones, para correlaciones a distancias cortas las funciones de correlación definidas mediante (4.51) y (4.52) deben ser de la forma

$$C_x(x, t) \simeq 1 - O\left(\frac{x}{\delta_x(t)}\right), \quad (5.14)$$

$$C_y(y, t) \simeq 1 - O\left(\frac{y}{\delta_y(t)}\right), \quad (5.15)$$

lo cual debe implicar que los factores de estructura unidimensionales deben ser de la forma

$$S_x(q_x, t) \sim \frac{1}{\delta_x(t)q_x^2}, \quad (5.16)$$

$$S_y(q_y, t) \sim \frac{1}{\delta_y(t)q_y^2}, \quad (5.17)$$

en donde $\delta_x(t)$ y $\delta_y(t)$ denotan a las únicas escalas de longitud características a lo largo de \hat{x} y \hat{y} , respectivamente. En las figuras 5.27(a) y 5.27(b) se observa que las leyes de Porod (5.16) y (5.17) para las colas de los factores de estructura unidimensionales se cumplen satisfactoriamente con $\delta_x(t) = L_x(t)$ y $\delta_y(t) = L_y(t)$. Asimismo se observa que las curvas obedecen el ansatz de escalamiento (5.10) y (5.11) en una buena aproximación para $\epsilon = 0.2157$ y $\epsilon = 0.4118$. La consistencia entre la verificación de la ley de Porod y del ansatz de escalamiento para los factores de estructura unidimensionales implica que cada una de las funciones de correlación unidimensionales depende, hasta distancias medias, de una sola longitud característica, $L_x \sim t^{1/z_x}$ o $L_y \sim t^{1/z_y}$, respectivamente. Sin embargo, recordemos que los exponentes son diferentes ($z_x \simeq 3$ y $z_y \simeq 2$), una propiedad poco común en problemas de *coarsening*.

La discusión anterior justifica el hecho de que numéricamente las leyes de evolución de las longitudes de correlación y de las densidades de defectos obedezcan razonablemente las

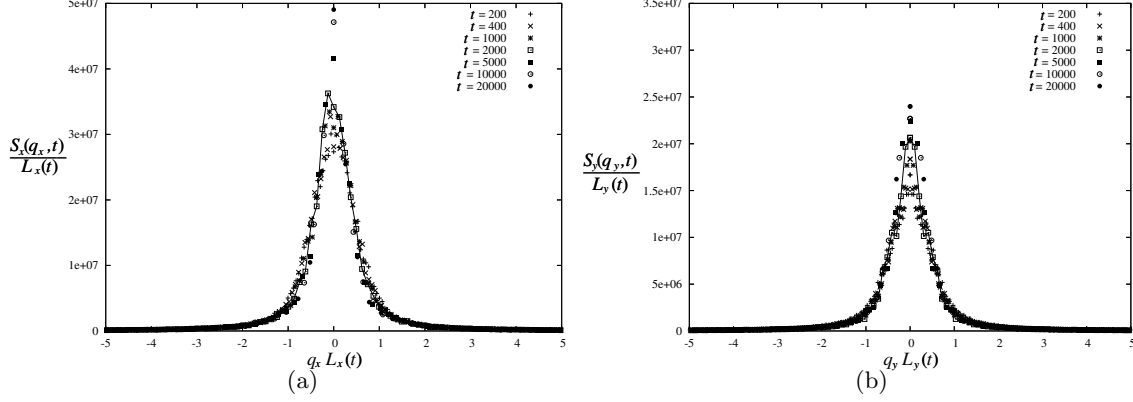


Figura 5.30: a) Gráficas de $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.6078$); b) gráficas de $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.6078$).

relaciones (5.3) y (5.4) para $\epsilon = 0.2157$ y $\epsilon = 0.4118$, que en principio son válidas únicamente cuando hay escalamiento dinámico a lo largo de \hat{x} y \hat{y} . En la dinámica de ordenamiento a lo largo de cada una de estas direcciones existe una única escala de longitud característica para distancias menores al tamaño de total del sistema y mayores a la anchura de las interfaces.

A medida que se incrementa la profundidad del *quench*, tanto las correlaciones a distancias grandes como a distancias medianas dejan de obedecer el *ansatz* (5.10) y (5.11), como puede observarse en las figuras 5.30(a)-5.31(b) para $\epsilon = 0.6078$. Para este valor del *quench*, los picos centrales de las curvas $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ y $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ aumentan en el tiempo más rápidamente que para $\epsilon = 0.2157$ y $\epsilon = 0.4118$. Para un valores de la profundidad del *quench* suficientemente grandes, se observan desviaciones significativas con respecto a la ley de Porod (5.16) y (5.17), sobretodo en la dirección \hat{y} (ver Figs. 5.32(a)-5.33(b) para $\epsilon = 0.8039$).

Lo anterior muestra que en general la dinámica de ordenamiento de fases de franjas oblicuas anisotrópicas lejos del umbral de bifurcación es más compleja que para sistemas con parámetro de orden local uniforme. Para valores de la profundidad del *quench* moderados (al menos en el intervalo $0.2157 \leq \epsilon \leq 0.4118$), hay dos escalas de longitud características diferentes y relevantes en el *coarsening* (las longitudes de correlación $L_x(t)$ y $L_y(t)$) a pesar de que no hay estrictamente escalamiento dinámico. A medida que se incrementa la profundidad del *quench* el *coarsening* se aleja cada vez más de un régimen de escalamiento dinámico y resulta más evidente que se caracteriza por múltiples escalas de longitud. Lo anterior se debe principalmente a la combinación de dos factores que son importantes lejos del umbral: la intensa anisotropía en el movimiento de defectos debido a efectos no adiabáticos producidos por el patrón periódico (ver el capítulo 6), y a una dinámica no potencial de los defectos, que conduce, entre otras cosas, a mecanismos de selección de

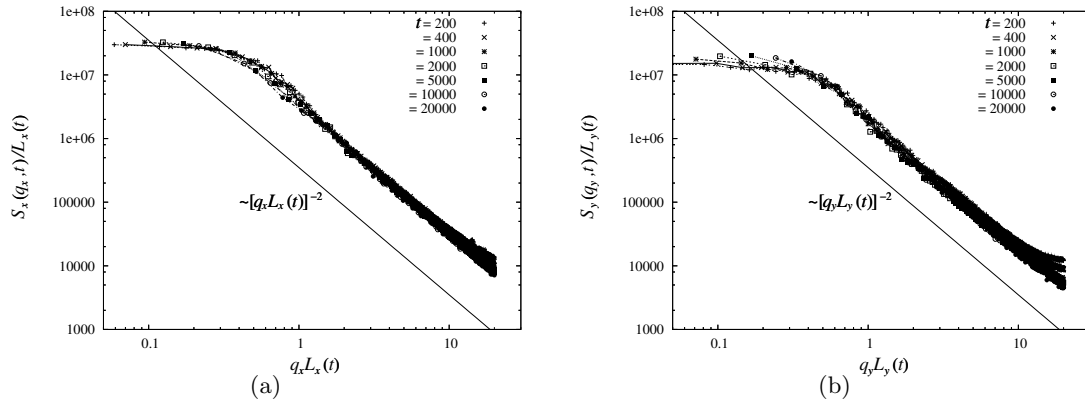


Figura 5.31: a) Cola del factor de estructura unidimensional $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.6078$). La línea continua ($\sim [q_x L_x(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{x} . b) Cola del factor de estructura unidimensional $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.6078$). La línea continua ($\sim [q_y L_y(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{y} .

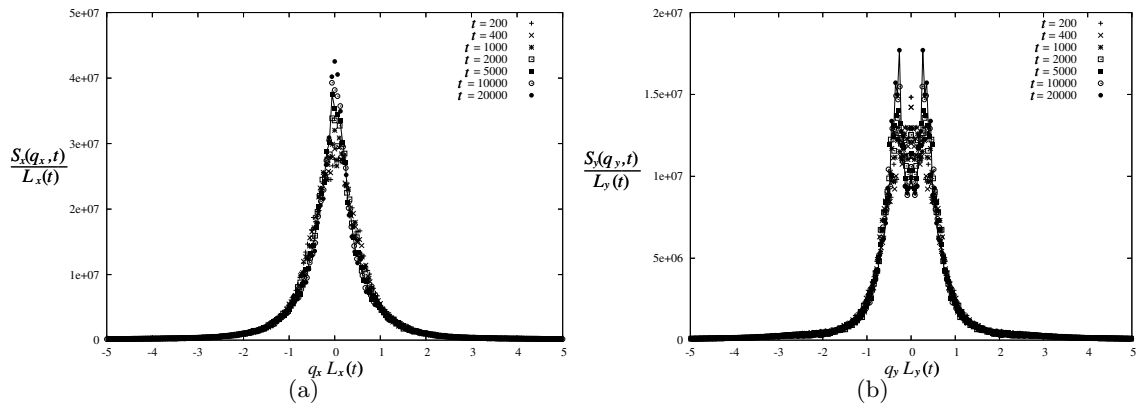


Figura 5.32: a) Gráficas de $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.8039$); b) gráficas de $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.8039$).

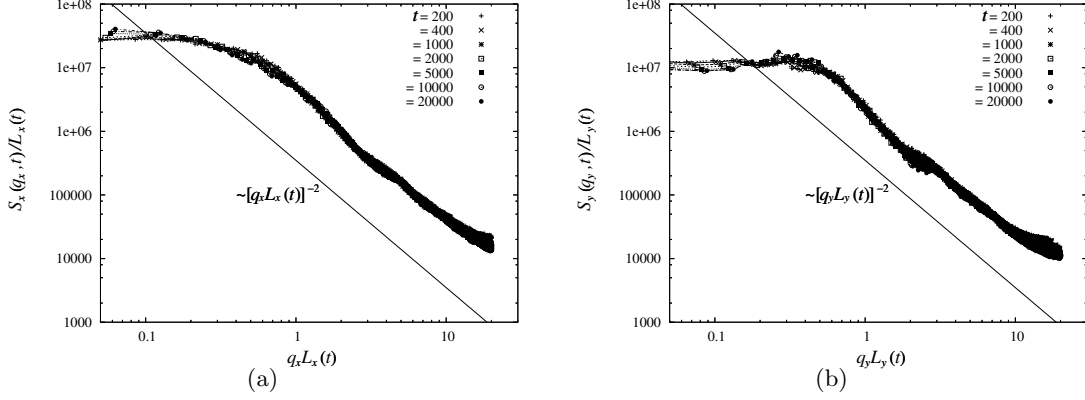


Figura 5.33: a) Cola del factor de estructura unidimensional $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.8039$). La línea continua ($\sim [q_x L_x(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{x} . b) Cola del factor de estructura unidimensional $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 1 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.8039$). La línea continua ($\sim [q_y L_y(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{y} .

número de onda no triviales que pueden afectar dramáticamente el *coarsening* del patrón parcialmente ordenado.

En el caso del modelo no potencial 2, el *coarsening* tampoco presenta escalamiento dinámico isotrópico lejos del umbral. No obstante, para $\epsilon = 0.1176$, las longitudes de correlación $L_x(t) \sim t^{1/3}$ y $L_y(t) \sim t^{0.45}$ representan adecuadamente a las longitudes características del sistema a lo largo de \hat{x} y \hat{y} , respectivamente, hasta distancias de unas cuantas veces el tamaño medio de los dominios. El crecimiento de dominios es autosimilar en buena aproximación a lo largo de dichas direcciones cuando las coordenadas x y y son escalas por $L_x(t)$ y $L_y(t)$, respectivamente. Lo anterior es válido solamente para correlaciones a distancias cortas y medianas, como puede observarse en las figuras 5.34(a)-5.35(b) para $0.5 < |q_x L_x(t)|$ y $0.5 < |q_y L_y(t)|$. Asimismo en las figuras 5.35(a) y 5.35(b) se observa que se cumple aproximadamente la ley de Porod (5.16) y (5.17) para cada una de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , respectivamente. Para correlaciones a distancias grandes, $|q_x L_x(t)| \simeq 0$, existen otras longitudes características, puesto que los picos centrales de las curvas de las figuras no presentan un valor constante en el tiempo.

Cuando se incrementa la profundidad del *quench*, la dinámica de ordenamiento se aleja aún más del régimen de escalamiento dinámico (sobretudo en la dirección \hat{y}). Por ejemplo, para $\epsilon = 0.2157$, valor en que las leyes de evolución en el *coarsening* tienen comportamientos más complejos que leyes de potencia simples, resulta claro que el *ansatz* (5.10) y (5.11) no se cumple tan bien como para $\epsilon = 0.1176$ (ver Figs. 5.36(a)-5.37(b)).

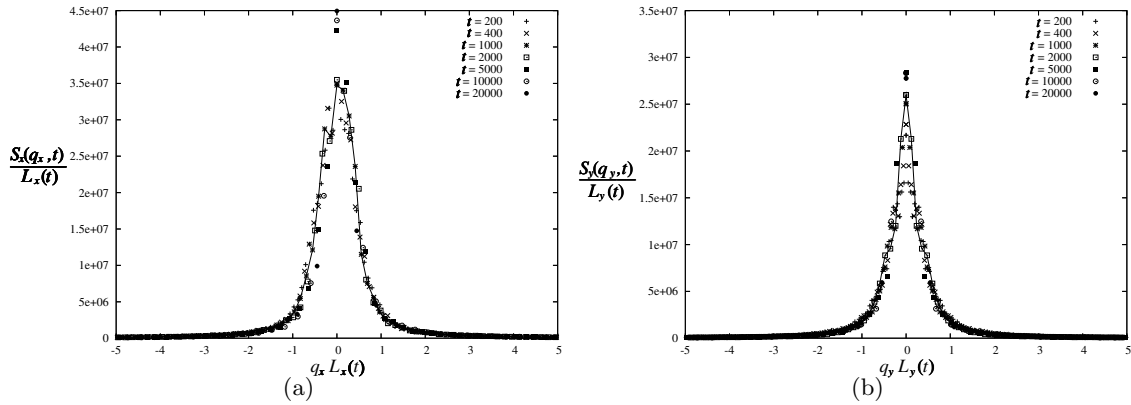


Figura 5.34: a) Gráficas de $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.1176$); b) gráficas de $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.1176$).

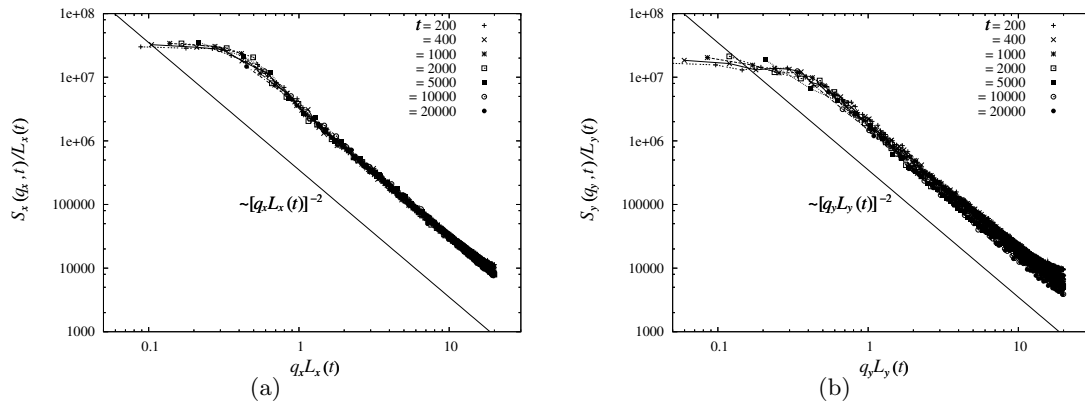


Figura 5.35: a) Cola del factor de estructura unidimensional $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.1176$). La línea continua ($\sim [q_x L_x(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{x} . b) Cola del factor de estructura unidimensional $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.1176$). La línea continua ($\sim [q_y L_y(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{y} .

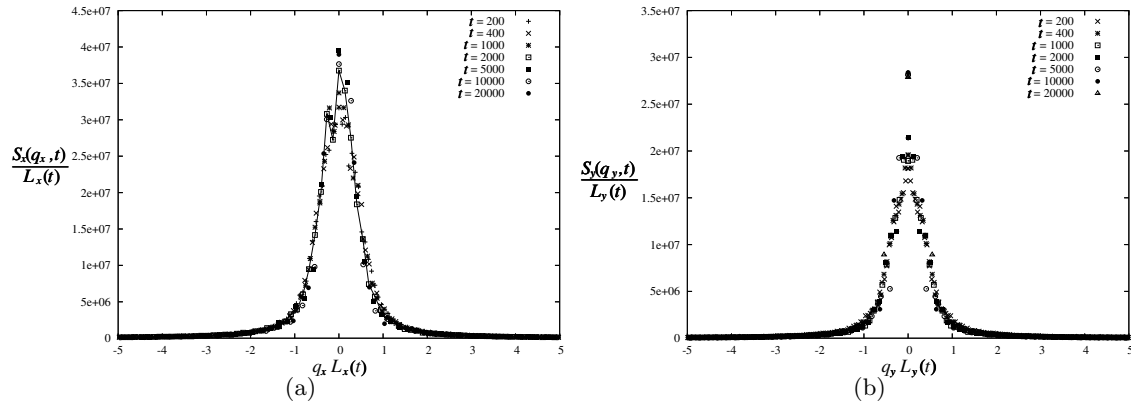


Figura 5.36: a) Gráficas de $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.2157$); b) gráficas de $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.2157$).

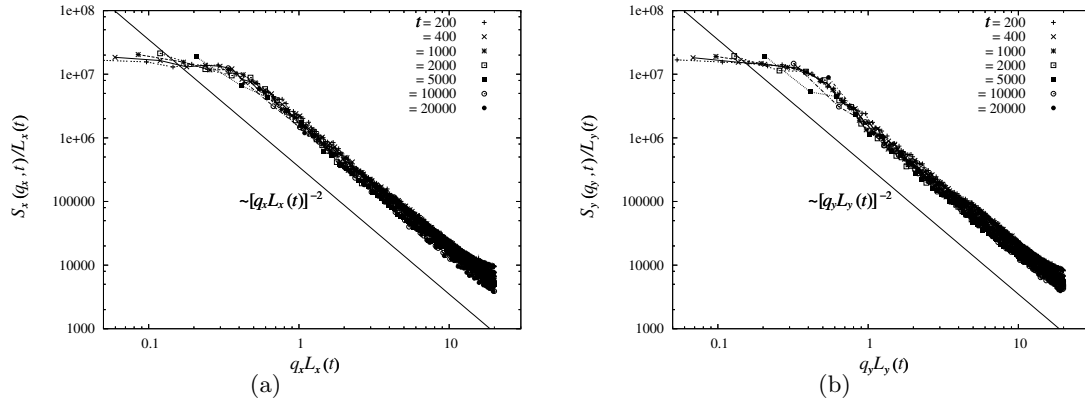


Figura 5.37: a) Cola del factor de estructura unidimensional $S_x(q_x, t)/L_x(t)$ como función de $q_x L_x(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.2157$). La línea continua ($\sim [q_x L_x(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{x} . b) Cola del factor de estructura unidimensional $S_y(q_y, t)/L_y(t)$ como función de $q_y L_y(t)$ a diferentes tiempos para el modelo no potencial 2 lejos del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.2157$). La línea continua ($\sim [q_y L_y(t)]^{-2}$) corresponde a la ley de Porod a lo largo de \hat{y} .

5.5. Discusión

5.5.1. Reducción al modelo A bajo la influencia de un campo externo

Los resultados mostrados anteriormente para los modelos (4.11), (4.12) y (4.13), así como el estudio previo presentado en [30], sugieren que cerca del umbral de bifurcación ($|r_c| < \epsilon \ll 1$), el *coarsening* de fases de franjas oblicuas anisotrópicas es un proceso de ordenamiento *isotrópico*, pues queda caracterizado por un único exponente: $1/z \approx 1/2$. A continuación se demuestra que, después de un cambio de coordenadas adecuado, en este régimen la dinámica del parámetro de orden orientacional ψ_d queda descrita en buena aproximación por una ecuación de Ginzburg-Landau isotrópica, como la que describe el crecimiento de dominios uniformes en sistemas caracterizados por un parámetro de orden no conservado (modelo A, en la terminología de Hohenberg y Halperin [3]). Asimismo se presenta y discute una posible extensión del modelo A que describe la dinámica de ψ_d en el régimen caracterizado por los exponentes $1/z_x \approx 1/3$ y $1/z_y \approx 1/2$.

Coarsening cerca del umbral de bifurcación

Las ecuaciones de amplitud (4.42) son válidas para $\epsilon \ll 1$ y muestran que las direcciones \hat{x} y \hat{y} son equivalentes cuando las coordenadas x y y son escaladas en la forma (4.41), lo cual explica a priori que las evoluciones temporales de $L_x(t)$ y $L_y(t)$ presenten el mismo exponente. Asimismo, en la figura 5.38 se observa que la magnitud relativa entre las longitudes de correlación $L_x(t)/L_y(t)$ obtenida numéricamente es prácticamente constante en el tiempo y cercana a la estimación (4.45) obtenida a partir del análisis débilmente no lineal de la sección 4.2.2. Lo anterior muestra que en efecto, las escalas de longitud de los dominios a lo largo de \hat{x} y \hat{y} tienen una magnitud relativa dada por (4.44), y que el *coarsening* presenta leyes de crecimiento para las longitudes de correlación (en el sistema de coordenadas (x', y') dado por la transformación (4.41)), de la forma

$$L_{x'}(t) \simeq a_{x'} t^{1/z}, \quad L_{y'}(t) \simeq a_{y'} t^{1/z},$$

en donde $z \approx 2$ y $a_{x'}$ y $a_{y'}$ son constantes reales tales que $a_{x'} = a_{y'}$, esto es, $L_{x'}(t) = L_{y'}(t)$.

Es de particular interés investigar si esta invariancia en las leyes de crecimiento de dominios se mantiene para una dirección arbitraria en el sistema. Para ello se puede tratar de encontrar un sistema de coordenadas (\tilde{x}, \tilde{y}) en el que las ecuaciones de amplitud (4.42) tengan una forma isotrópica, esto es, que el operador diferencial de segundo orden que actúa sobre las amplitudes se transforme en un laplaciano $\nabla_{\tilde{x}, \tilde{y}}^2 = \partial_{\tilde{x}}^2 + \partial_{\tilde{y}}^2$, que es invariante ante rotaciones sobre el plano del sistema.

Sea M^+ una transformación lineal de las coordenadas (x', y') (escaladas en la forma (4.41)) a las coordenadas buscadas (\tilde{x}, \tilde{y}) que transforma a la ecuación

$$\partial_t A^+ = \epsilon A^+ + \frac{4}{k_0^2} \left(\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2 + 2 \frac{1-\eta}{\sqrt{1+c}} \partial_{x'} \partial_{y'} \right) A^+ + t.n.l.$$

en la ecuación isotrópica

$$\partial_t A^+ = \epsilon A^+ + \frac{4}{k_0^2} (\partial_{\tilde{x}}^2 + \partial_{\tilde{y}}^2) A^+ + t.n.l.,$$

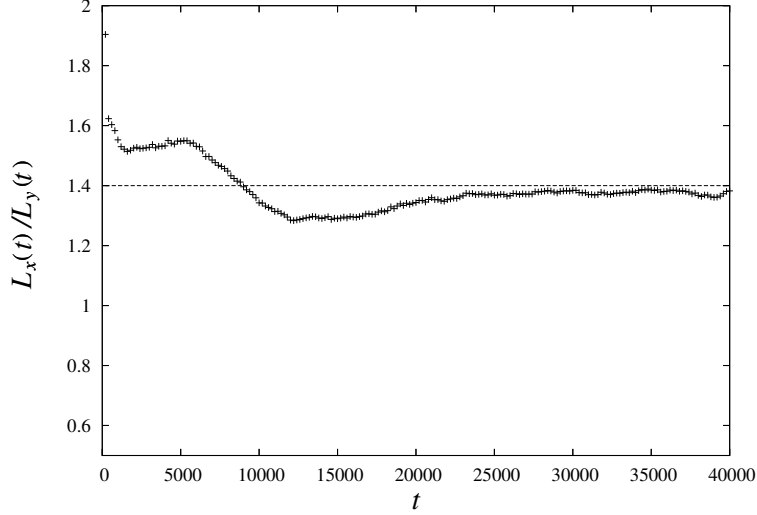


Figura 5.38: Evolución temporal de la magnitud relativa entre las longitudes de correlación $L_x(t)/L_y(t)$ para el no modelo potencial 1, cerca del umbral de bifurcación ($\epsilon = 0.0392$). La línea discontinua corresponde a la estimación obtenida del análisis débilmente no lineal (4.44).

y M^- una transformación que lleva a la ecuación

$$\partial_t A^- = \epsilon A^- + \frac{4}{k_0^2} \left(\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2 - 2 \frac{1-\eta}{\sqrt{1+c}} \partial_{x'} \partial_{y'} \right) A^- + t.n.l.,$$

a la forma isotrópica

$$\partial_t A^- = \epsilon A^- + \frac{4}{k_0^2} (\partial_x^2 + \partial_y^2) A^- + t.n.l.,$$

en donde *t.n.l.* denota a los términos no lineales correspondientes. Después de un poco de manipulación algebraica, se encuentra que existen dos conjuntos continuos de transformaciones lineales, $\{M_\alpha^+ : 0 \leq \alpha < 2\pi\}$ y $\{M_\alpha^- : 0 \leq \alpha < 2\pi\}$, definidas por

$$M_\alpha^\pm = \begin{pmatrix} \cos \alpha \pm \frac{1-\eta}{\sqrt{c+2\eta-\eta^2}} \sin \alpha & -\sqrt{\frac{1+c}{c+2\eta-\eta^2}} \sin \alpha \\ \sin \alpha \mp \frac{1-\eta}{\sqrt{c+2\eta-\eta^2}} \cos \alpha & \sqrt{\frac{1+c}{c+2\eta-\eta^2}} \cos \alpha \end{pmatrix},$$

que llevan a las dos ecuaciones (4.42) a una forma isotrópica de manera independiente. Si existe un valor α_0 del parámetro α , tal que

$$M_{\alpha_0}^+ = M_{\alpha_0}^-, \quad (5.18)$$

se habrá encontrado el sistema de coordenadas (\tilde{x}, \tilde{y}) en el que ambas ecuaciones (4.42) son isotrópicas simultáneamente. La condición (5.18) sólo se cumple cuando $\eta = 1$, en cuyo

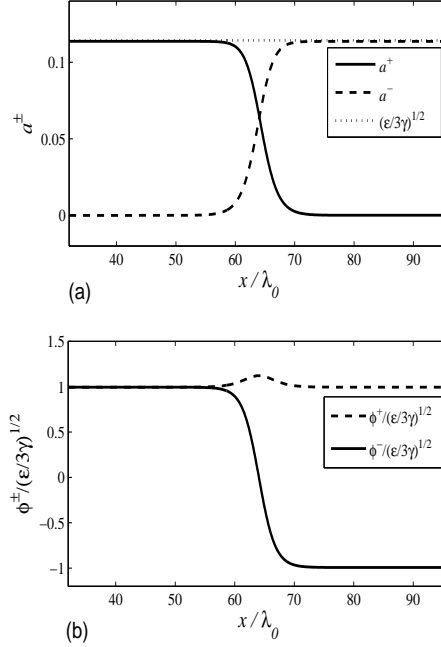


Figura 5.39: a) Solución numérica estacionaria (a^+ , a^-) de las ecuaciones de amplitud (4.37) para una interfaz plana vertical (arreglo de dislocaciones), con $\epsilon = 0.0392$ y $\gamma = 1$. En (b) se muestran los parámetros de orden ϕ^+ y ϕ^- correspondientes, definidos por (5.19) y (5.20), respectivamente.

caso las transformaciones lineales M_α^\pm son simples rotaciones en el plano $x - y$, siendo α el ángulo de rotación. Este corresponde al caso en el que las ecuaciones (4.42) ya tienen forma isotrópica y por lo tanto cualquier rotación de coordenadas sigue manteniéndolas isotrópicas. Asimismo, no es necesario hacer ningún escalamiento de coordenadas de la forma (4.41) ya que la magnitud relativa entre las longitudes características en las coordenadas originales estimada mediante (4.44) es en este caso $L_x(t)/L_y(t) = 1$. El resultado anterior implica que solamente para $\eta = 1$, la dinámica de las amplitudes es un proceso completamente isotrópico, a pesar de que la ecuación (4.10) para el parámetro de orden local ψ que describe la dinámica *del patrón periódico de franjas oblicuas* es anisotrópica. Para otros valores de $\eta \neq 1$, la dinámica de las amplitudes correspondientes a los dominios es anisotrópica. Una posible consecuencia de esto es que los perfiles de las interfaces dependen de la orientación, siendo idénticos únicamente a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} después de hacer la transformación de coordenadas (4.41).

Ahora investiguemos el posible efecto de la anisotropía de las ecuaciones de amplitud en el *coarsening* del sistema. Para ello, podemos definir los siguientes parámetros de orden

$$\phi^+ = A^+ + A^-, \quad (5.19)$$

$$\phi^- = A^+ - A^-. \quad (5.20)$$

Recordemos que cualquier dominio de franjas con orientación $+\theta$ ($-\theta$) está descrito por una amplitud A^+ (A^-) prácticamente uniforme, con el valor $\sqrt{\epsilon/(3\gamma)}$ dentro del dominio y 0 dentro de los dominios de la orientación contraria. En la Fig. 5.39(a) se muestran los perfiles estacionarios a^+ y a^- de las amplitudes A^+ y A^- , respectivamente, para una interfaz plana vertical, que son soluciones estacionarias de las Ecs. (4.37). Las amplitudes varían espacialmente sólo en la vecindad de una interfaz. Por consiguiente, podemos suponer que ϕ^+ es prácticamente uniforme sobre el sistema y constante en el tiempo (ver la figura 4.2)

$$\phi^+(\vec{r}, t) \simeq \sqrt{\frac{\epsilon}{3\gamma}}, \quad (5.21)$$

con muy ligeras variaciones únicamente en las interfaces. Por otro lado, ϕ^- toma aproximadamente el valor $+\sqrt{\epsilon/(3\gamma)}$ o $-\sqrt{\epsilon/(3\gamma)}$ dentro de cada dominio, y 0 en el centro de una interfaz, por lo que puede ser considerado como una definición equivalente al parámetro de orden orientacional ψ_d definido en la sección 4.3

$$\phi^-(\vec{r}, t) \equiv \sqrt{\frac{\epsilon}{3\gamma}} \psi_d(\vec{r}, t). \quad (5.22)$$

En la Fig. 5.39(b) se verifica numéricamente que la aproximación (5.21) se cumple adecuadamente tanto dentro de un dominio como en una interfaz. Restando la ecuación para A^- de la ecuación para A^+ en (4.42), sustituyendo las expresiones (5.19) y (5.20) y empleando la aproximación (5.21) para ϕ^+ , se obtiene la ecuación que describe aproximadamente la dinámica de ψ_d y por consiguiente el crecimiento del orden orientacional en el patrón de franjas oblicuas, cerca del umbral de bifurcación

$$\partial_T \psi_d = \frac{3}{4} \psi_d + \frac{4}{k_0^2} \nabla_{X', Y'}^2 \psi_d - \frac{3}{4} \psi_d^3, \quad (5.23)$$

con $\nabla_{X', Y'}^2 = \partial_{X'}^2 + \partial_{Y'}^2$, y en donde las coordenadas (X', Y', T) varían como $X' = \epsilon^{1/2} x'$, $Y' = \epsilon^{1/2} y'$ y $T = \epsilon t$. La ecuación (5.23) es isotrópica y en consecuencia las leyes de crecimiento de dominios deben ser invariantes en cualquier dirección en el sistema de coordenadas (x', y') . Esto es, el crecimiento del orden orientacional es un proceso isotrópico cerca del umbral de bifurcación aún cuando la dinámica del patrón periódico y de las interfaces sea localmente anisotrópica. La ley de crecimiento $t^{1/z}$ ($z \approx 2$), en principio válidas únicamente para las longitudes de correlación a lo largo de \hat{x} y \hat{y} , deben cumplirse para cualquier dirección \hat{n} en el sistema: $L_n(t) \sim t^{1/z}$.

Interpretación del exponente $1/z = 1/2$ cerca del umbral

La Ec. (5.23) describe la dinámica de ordenamiento de un sistema bidimensional con parámetro de orden local escalar uniforme no conservado $\psi_d(\vec{r}, t)$ [2, 7]. Después de algunos cambios de escala, (5.23) puede ser escrita como una ecuación de Ginzburg-Landau cúbica con coeficientes iguales a 1

$$\partial_t \phi = \nabla^2 \phi + \phi - \phi^3 = \nabla^2 \phi - V'(\phi), \quad (5.24)$$

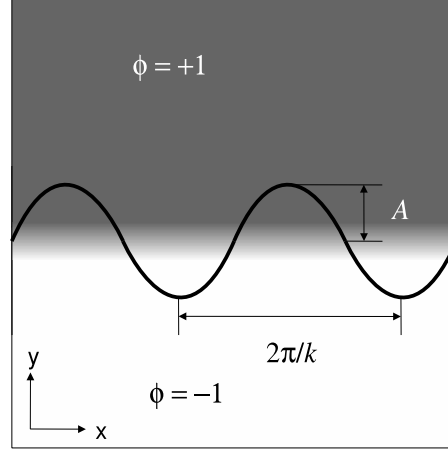


Figura 5.40: Esquema de una perturbación transversal a una interfaz plana correspondiente a una solución estacionaria de la ecuación (5.24).

en donde $V(\phi) = (1 - \phi^2)^2/4$. En la terminología de Hohenberg y Halperin, (5.24) se denomina *modelo A* [2, 3]. El *coarsening* en los sistemas descritos por la Ec. (5.23) obedece escalamiento dinámico y está caracterizado por una única escala de longitud que obedece una ley de evolución de la forma

$$L(t) \sim t^{1/z},$$

con $z \approx 2$ [2, 7]. El exponente $1/2$ es característico de procesos controlados por una reducción en la curvatura local de las interfaces, por tensión superficial.

Bray [5] propuso un método para derivar el exponente que caracteriza a algún proceso de *coarsening* a partir de la dinámica de relajación de defectos topológicos. Brevemente, este método consiste en suponer una pequeña perturbación espacial periódica con vector de onda \vec{k} a lo largo de un defecto topológico *extendido* (de dimensión $0 < d$) relevante para el sistema. Se encuentra la razón temporal asintótica de relajación lineal de la perturbación del defecto topológico, $\omega(k)$, y suponiendo válida la hipótesis de escalamiento dinámico, se deduce el exponente de *coarsening* de la siguiente manera. Si existe una única longitud característica, $L(t)$, la dinámica de relajación del defecto debe ser similar a la que ocurre para un defecto típico en el sistema parcialmente ordenado. Mediante un simple análisis dimensional se propone la relación $(1/L(t))dL(t)/dt \sim \omega(k)$, con $k \sim 1/L(t)$. Entonces, si la relación de dispersión para la relajación del defecto es de la forma $\omega(k) \sim k^z$ (con $k \rightarrow 0$), se espera que $L(t) \sim t^{1/z}$.

En particular, para un sistema caracterizado con un parámetro de orden escalar $\phi(\vec{r}, t)$ con una dinámica descrita por una ecuación de Ginzburg-Landau (5.24), los defectos topológicos son interfaces. Las interfaces separan a las dos fases uniformes de equilibrio en el sistema, $\phi = +1$ y $\phi = -1$, que corresponden a los mínimos del potencial $V(\phi)$. Al aplicar el método de relajación de defectos a una interfaz estacionaria, se obtiene la relación de dispersión

$$\omega(k) \sim k^2,$$

para una perturbación periódica pequeña transversal de la forma (ver Fig. 5.40)

$$\phi(x, y, t) = \phi_0(y) + A\phi_1(y) \exp(ikx - \omega t),$$

en donde \hat{x} y \hat{y} son las direcciones paralela y perpendicular a la interfaz, $\phi_0(y)$ es una solución de (5.24) para una interfaz estacionaria, y A es la amplitud de la perturbación ($A \ll 1$). A partir del argumento dimensional descrito anteriormente, se infiere entonces que la longitud característica de los dominios obedece la ley $L(t) \sim t^{1/2}$.

En el caso del *coarsening* de dominios de franjas oblicuas anisotrópicas, aplicamos el método de relajación de defectos a una frontera estacionaria entre dos dominios, uno con $\psi_d = 1$ (correspondientes a franjas con vector de onda \vec{k}_c^+) y el otro con $\psi_d = -1$ (correspondientes a franjas con vector de onda \vec{k}_c^-). Se infiere que la ley de crecimiento de dominios es $L(t) \sim t^{1/2}$, lo cual es consistente con los resultados numéricos. Por consiguiente, se puede concluir que el mecanismo físico que controla el *coarsening* cerca del umbral de bifurcación es la reducción de la energía en exceso por reducción de la longitud total de las interfaces entre dominios de franjas de diferente orientación. Asimismo, dado que el problema cerca del umbral de bifurcación queda descrito aproximadamente por una ecuación de Ginzburg-Landau isotrópica (5.23), se espera que haya escalamiento dinámico en cualquier dirección del sistema. Entonces, después de una transformación de coordenadas adecuada (dada por (4.41)), la función de correlación radial $C(r, t)$ y el factor de estructura $S(q, t)$ deben de obedecer el ansatz (5.6) y (5.7), respectivamente. La única escala de longitud relevante en el sistema es $L(t) \equiv L_{x'}(t) \simeq L_{y'}(t) \sim t^{1/z}$, con $z \approx 2$.

Esto significa que la anisotropía en las ecuaciones modelo para ψ solamente se manifiesta localmente, pero no en la dinámica de ordenamiento del patrón. Por lo tanto, el *coarsening* cerca del umbral está controlado por la curvatura de las interfaces entre dominios de franjas de diferente orientación y presenta aproximadamente las características básicas de la dinámica de ordenamiento de sistemas *potenciales* caracterizados por un parámetro de orden local uniforme no conservado. En este caso, la ley de crecimiento de dominios es $L(t) \sim t^{1/z}$, con $z \approx 2$. La dinámica de ordenamiento presenta escalamiento dinámico, con escala de longitud característica $L(t)$. Esta escala de longitud característica es proporcional a las longitudes de correlación $L_x(t)$ y $L_y(t)$, que representan a las longitudes medias de los dominios a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , respectivamente. En particular, se verifica numéricamente que hay escalamiento dinámico a lo largo cada una de las direcciones preferidas en el sistema (\hat{x} y \hat{y}). Resulta un poco desconcertante mencionar que experimentalmente nunca se ha observado una ley $L(t) \sim t^{1/2}$ en patrones de rollos zig-zag cerca del umbral. A priori las ecuaciones (4.11) son adecuadas para describir fenomenológicamente la formación de patrones de rollos normales y oblicuos en electroconvección de nemáticos. Es posible que los experimentos no hayan sido realizados suficientemente cerca del umbral.

Coarsening a valores intermedios de ϵ

Los resultados numéricos presentados anteriormente muestran que es posible identificar un segundo régimen de *coarsening* en los tres modelos estudiados, que ocurre a valores *intermedios* de ϵ . En este régimen la anisotropía en las ecuaciones modelo se manifiesta tanto en la estructura espacial periódica del patrón como en su dinámica de ordenamiento:

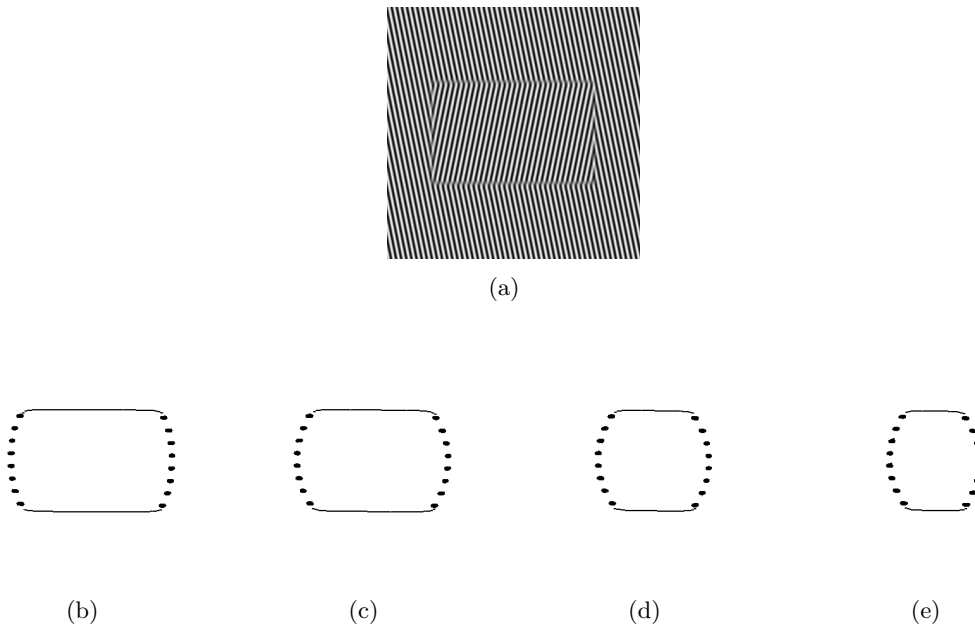


Figura 5.41: a) Dominio rectangular de franjas zag de tamaño $20\lambda_0 \times 36\lambda_0$ empleado como condición inicial para las soluciones numéricas mostradas en las siguientes figuras. b)-e) Movimiento de dislocaciones y fronteras de chevrones para el modelo no potencial 1 a diferentes tiempos: b) $t = 200$, c) $t = 600$, d) $t = 1800$ y e) $t = 2400$. La profundidad del *quench* es $\epsilon = 0.2157$.

las fronteras horizontales de chevrones permanecen inmóviles y el *coarsening* es controlado básicamente por el movimiento de arreglos de dislocaciones. La anisotropía en la cinética de defectos tiene consecuencias dramáticas en las leyes de crecimiento: la evolución temporal de cada una de las longitudes de correlación a lo largo de \hat{x} y \hat{y} se ajusta a una ley de potencia: $L_x(t) \sim t^{1/z_x}$ y $L_y(t) \sim t^{1/z_y}$, con $z_x \approx 3$ y $z_y \approx 2$. Como existen al menos dos longitudes características diferentes en el sistema ($L_x(t)$ y $L_y(t)$), el sistema deja de presentar escalamiento dinámico isotrópico. No obstante, el *coarsening* presenta escalamiento dinámico a lo largo de \hat{x} y \hat{y} . Las longitudes de correlación, $L_x(t)$ y $L_y(t)$, son las únicas escalas de longitud características en el *coarsening* a lo largo de estas direcciones, respectivamente. La existencia de escalamiento dinámico a lo largo de \hat{x} y \hat{y} a distancias cortas y medianas en unidades de $L_x(t)$ y $L_y(t)$ se manifiesta, por ejemplo, en el hecho de que las leyes de evolución de defectos son de la forma $\rho_{dis} \sim 1/L_x(t) \sim t^{-1/z_x}$ (para la densidad de dislocaciones) y $\rho_{ch} \sim 1/L_y(t) \sim t^{-1/z_y}$ (para la densidad de chevrones). Otra manifestación del escalamiento dinámico aproximado a lo largo de \hat{x} y \hat{y} es la verificación de la ley de Porod.

En este régimen, el mecanismo que controla el *coarsening* es la reducción de la longitud de las interfaces mediante el movimiento y aniquilación de dislocaciones de carga topológica opuesta, como fue expuesto en la sección 5.3. Una forma de verificar este mecanismo de ordenamiento es estudiando la dinámica de relajación de interfaces para un dominio aislado inicialmente rectangular (por ejemplo, de franjas oblicuas con vector de onda \vec{k}_c^-) rodeado por franjas con vector de onda \vec{k}_c^+ , como el que se muestra en la Fig. 5.41(a) (de tamaño $20\lambda_0 \times 36\lambda_0$). Para $\epsilon = 0.2157$, se verifica que en efecto, el sistema evoluciona reduciendo la longitud de las interfaces horizontales a medida que el dominio se contrae (Figs. 5.41(b)-5.41(e)). En este proceso las dos fronteras de chevrones permanecen inmóviles. En el siguiente capítulo se demuestra que la estructura periódica de franjas dentro de cada dominio induce potenciales periódicos en la dinámica de las interfaces, cuya amplitud depende de ϵ . La amplitud de los potenciales de bloqueo son varios órdenes de magnitud mayores para las fronteras horizontales que para los arreglos de dislocaciones.

La generalización más simple de la ecuación (5.23) que incorpora los efectos de bloqueo sobre las interfaces horizontales es:

$$\partial_t \psi_d = -\frac{\delta F}{\delta \psi_d} + f(y), \quad (5.25)$$

en donde F es el funcional de Lyapunov del cual deriva la ecuación (5.23)

$$F[\psi_d] = \int d\vec{r} \left[\frac{4}{k_0^2} (\nabla \psi_d)^2 - \frac{3\epsilon}{8} \psi_d^2 + \frac{3\epsilon}{16} \psi_d^4 \right], \quad (5.26)$$

y $f(y) = p(\epsilon) \cos(K_y y)$ es un término nuevo que no es despreciable lejos del umbral y permite que las fronteras horizontales de chevrones queden bloqueadas. Este término es análogo a un campo magnético externo estacionario y espacialmente periódico. El modelo (5.25) se reduce a la ecuación (5.23) cuando $\epsilon \rightarrow 0$, ya que en este límite $p(\epsilon) \rightarrow 0$, como se discute en el capítulo 6. El modelo (5.25) resulta a priori adecuado para describir el crecimiento del orden orientacional en dominios de franjas oblicuas anisotrópicas para valores moderados de ϵ . Ecuaciones de la forma (5.25) han sido empleados para modelar procesos

de separación de fases con parámetro de orden conservado en presencia de forzamientos espaciales periódicos estacionarios, en donde también se observa anisotropía en las leyes de crecimiento de dominios [84].

5.5.2. Dinámica no relajacional de defectos lejos del umbral

Para valores suficientemente grandes de ϵ , los tres modelos presentan entre sí diferencias notables en su dinámica de ordenamiento. Una de ellas es la selección del número de onda predominante en el patrón periódico. En el caso del modelo potencial (4.11), el vector de onda seleccionado corresponde al número de onda marginal que maximiza la tasa lineal de crecimiento y minimiza el funcional de Lyapunov del cual deriva. Los modelos no potenciales 1 (4.12) y 2 (4.13) presentan mecanismos de selección de número de onda más complejos que están íntimamente relacionados con la dinámica de defectos topológicos lejos del umbral de bifurcación. Para valores grandes de ϵ , la combinación de varios factores tales como la dinámica no potencial (no relajacional) de interfaces, efectos no adiabáticos (mencionados en la subsección anterior, ver también el capítulo 6) y selección de número de onda, dan lugar a dinámicas de ordenamiento diferentes dependiendo de los detalles de las no linealidades del modelo empleado, a pesar de que presenten las mismas simetrías. Por ejemplo, mientras que para los modelos potencial y no potencial 1 la dinámica de ordenamiento es cada vez más lenta al incrementar ϵ y el sistema permanece muy desordenado incluso a tiempos grandes, en el caso del modelo no potencial 2 la dinámica es cada vez más rápida, presentando leyes de evolución más complejas que leyes de potencia simples. A pesar de las diferencias observadas entre los modelos, en todos los casos se observa que el *coarsening* se aleja de un régimen de escalamiento dinámico a medida que se incrementa la profundidad del *quench*.

Las figuras 5.42(a)-5.42(d) muestran la evolución temporal del campo de defectos de un dominio de franjas zig, tomando la misma condición inicial de la Fig. 5.41(a), para el modelo no potencial 1 con $\epsilon = 0.6078$. Para esta profundidad del *quench* se observa que el movimiento de dislocaciones no está restringido a reducir la longitud de las interfaces horizontales (su dinámica es *no relajacional*). En su lugar, la forma del dominio rompe su simetría axial inicial con respecto a \hat{x} y \hat{y} . Tal comportamiento está asociado a los efectos de los términos no potenciales (4.12), y puede interpretarse como una repulsión efectiva entre los dos arreglos de dislocaciones que delimitan al dominio. Adicionalmente, al comparar con la evolución del campo de defectos de las Figs. 5.41(b)-5.41(e) para $\epsilon = 0.2157$, se observa que la dinámica de las dislocaciones es muy lenta para $\epsilon = 0.6078$, lo cual está asociado a los efectos no adiabáticos y sobre todo a la repulsión de dislocaciones debida a efectos no potenciales. Tanto los efectos no potenciales como los no adiabáticos son importantes lejos del umbral de bifurcación.

En el caso del modelo no potencial 2 (figuras 5.42(e)-5.42(h)) los términos no potenciales (4.13) tienen efectos más dramáticos en la dinámica de defectos. En este caso, el sistema tampoco tiende a reducir la longitud de las interfaces, lo que sugiere que la dinámica de los defectos es no potencial debido a que no tienen definido ningún funcional de Lyapunov. Se observa que las fronteras de chevrones (inicialmente planas) permanecen prácticamente inmóviles, pero se curvan en sus extremos a medida que las dislocaciones se mueven.

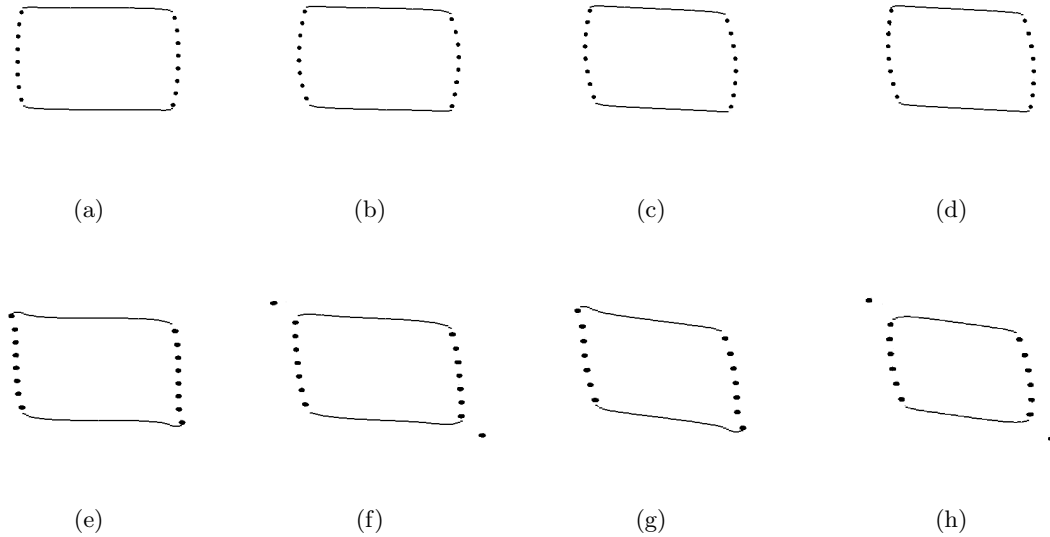


Figura 5.42: Dinámica no relajacional de dislocaciones y fronteras de chevrones para: a)-d) modelo no potencial 1 con $\epsilon = 0.6078$ a a) $t = 200$, b) $t = 600$, c) $t = 1800$ y d) $t = 2400$; e)-h) modelo no potencial 2 con $\epsilon = 0.2157$ a a) $t = 200$, b) $t = 600$, c) $t = 1800$ y d) $t = 2400$. La condición inicial en ambos casos es el dominio rectangular de la Fig. 5.41(a).

Las dislocaciones no están restringidas a moverse en conjunto con la fronteras verticales a lo largo de \hat{x} , ya que pueden separarse de éstas y alejarse aisladamente del dominio. La separación de pares de dislocaciones (simétricas) de carga topológica opuesta reduce gradualmente el tamaño del dominio en la dirección vertical.

Las observaciones anteriores revelan que, para valores suficientemente grandes de ϵ , los términos no potenciales juegan un papel muy importante en la dinámica de ordenamiento. El mecanismo físico que controla el *coarsening* lejos del umbral puede cambiar de un modelo no potencial a otro y reflejarse en leyes de crecimiento diferentes, como las obtenidas numéricamente en el caso de los modelos no potenciales 1 y 2 para los mismos valores de ϵ . Algo similar ocurre en el caso de patrones de franjas en sistemas isotrópicos. Un estudio numérico reciente basados en modelos de Swift-Hohenberg no potenciales muestran que la dinámica y relajación de interfaces cambia drásticamente de un modelo no potencial a otro, sugiriendo que existen diferentes regímenes de *coarsening* dependiendo del valor de la profundidad del *quench* [85].

5.5.3. Comparación con experimentos previos en electroconvección

En [26] se reporta el primer estudio experimental de *coarsening* de franjas oblicuas obtenido en electroconvección de nemáticos con alineación plana. Uno de los resultados cualitativamente comparables con el régimen de *coarsening* observado numéricamente en el presente trabajo para valores moderados de ϵ : los dominios crecen en promedio más rápi-

damente a lo largo de \hat{y} que a lo largo de \hat{x} , obedeciendo leyes de la forma $L_x(t) \sim t^{1/5}$ y $L_y(t) \sim t^{1/4}$. A tiempos cortos $L_x > L_y$, por lo que aparentemente existe un tiempo t^* en el que $L_x(t^*) = L_y(t^*)$. El resultado puede ser explicado cualitativamente mediante el siguiente argumento simple. Como las fronteras de chevrones permanecen bloqueadas e inmóviles en posiciones fijas, el *coarsening* está controlado por el movimiento (prácticamente a lo largo de \hat{x}) de fronteras curvadas formadas por dislocaciones. Por simplicidad, consideremos el caso de un dominio de forma cuasirectangular de franjas zag rodeado completamente por un dominio de franjas zig (como el mostrado anteriormente en las Figs. 5.41(a)-5.41(e)). La aniquilación de cada una de sus dos fronteras horizontales de chevrones es debida al movimiento de del par de dislocaciones de carga topológica opuesta localizado en sus extremos. El movimiento de interfaces verticales disminuye continuamente la longitud de las fronteras de chevrones. Por el contrario, las dislocaciones son eliminadas en pares solamente cuando las fronteras de chevrones son completamente aniquiladas. Podemos generalizar este mecanismo a un proceso de *coarsening* (con muchos dominios) considerando que en este caso el crecimiento del tamaño promedio de dominios se lleva a cabo a expensas del colapso de dominios pequeños. De esta manera, las fronteras de chevrones son eliminadas en promedio más rápidamente que las dislocaciones. Esto es

$$\frac{d\rho_{ch}(t)}{dt} < \frac{d\rho_{dis}(t)}{dt} < 0. \quad (5.27)$$

Ahora, considerando un régimen en el que $\rho_{dis}(t) = a_{dis}t^{-1/z_{dis}}$ y $\rho_{ch}(t) = a_{ch}t^{-1/z_{ch}}$, con a_{dis} y a_{ch} constantes del mismo orden, la desigualdad (5.27) conduce a la relación

$$t^{1/z_{dis}-1/z_{ch}} < \frac{z_{ch}a_{dis}}{z_{dis}a_{ch}} \sim O\left(\frac{z_{ch}}{z_{dis}}\right), \quad (5.28)$$

la cual se cumple para todo $T < t$ solamente si $z_{ch} < z_{dis}$, en donde T es de orden $O((z_{dis}/z_{ch})^{z_{ch}z_{dis}/(z_{dis}-z_{ch})})^2$. Entonces, cuando hay escalamiento dinámico a lo largo de cada una de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , se infiere de los argumentos presentados en las secciones anteriores que $z_y < z_x$, lo que implica que $L_y(t)$ crece más rápidamente que $L_x(t)$.

En un estudio experimental ulterior [27] se muestran las evoluciones temporales de ρ_{dis} y ρ_{ch} . Cabe mencionar que [27] presenta resultados contradictorios con el estudio anterior [26], por lo que no se cuenta hasta el momento con resultados experimentales del todo confiables para hacer comparaciones con nuestros resultados numéricos. En dicho trabajo se observa una cinética anisotrópica de las fronteras de dominios, parecida a los resultados numéricos obtenidos en la presente tesis para valores moderados de ϵ : las fronteras de chevrones permanecen inmóviles y el *coarsening* es dominado por el movimiento horizontal de dislocaciones. Las leyes reportadas en [27] son consistentes con $\rho_{dis} \sim t^{-1/3}$, $\rho_{ch} \sim t^{-1/5}$. Para la densidad de dislocaciones el acuerdo cuantitativo con nuestros resultados es muy bueno. No obstante, mientras que del mecanismo descrito en el párrafo anterior se esperaría una ley de evolución con $z_{ch} < 3$ para las fronteras de chevrones, se observa el comportamiento contrario: $3 < z_{ch} = 5$. Una posible explicación de esta discrepancia se

²En el caso de $z_x \simeq 3$ y $z_y \simeq 2$, se tiene que $T \sim 10$, que es notablemente menor que los tiempos registrados en las soluciones numéricas.

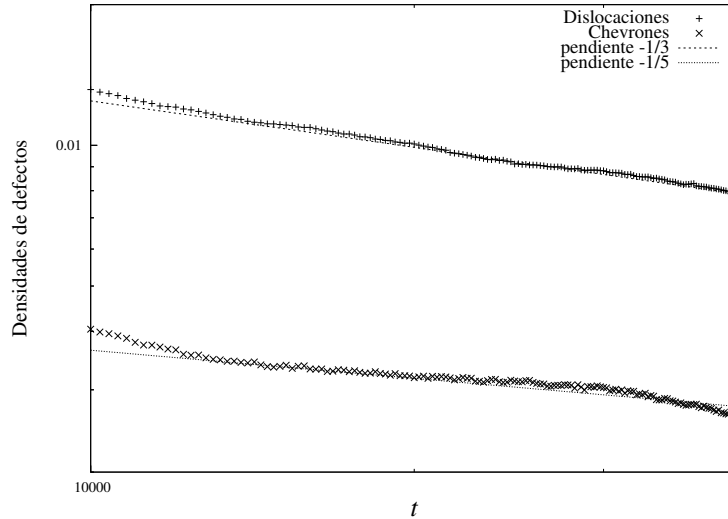


Figura 5.43: Evoluciones temporales de ρ_{dis} y ρ_{ch} a tiempos largos ($10000 \leq t \leq 40000$) para $\epsilon = 0.2157$ (modelo no potencial 1).

presenta a continuación. La dinámica en los experimentos podría ser afectada, entre otros factores, a efectos de tamaño finito, para los cuales el tamaño vertical de los dominios es de orden del tamaño del campo de visualización del nemático. Hay que recordar que de acuerdo a los resultados numéricos del presente trabajo, L_y crece más rápidamente que L_x , por lo que el tiempo t_0 necesario para que los efectos de tamaño finito sean apreciables es menor a lo largo de \hat{y} en caso de que exista algún tiempo t^* tal que $L_x(t^*) = L_y(t^*)$. Cuando $t \approx t_0$, L_y es comparable con el tamaño vertical del sistema y la densidad de fronteras de chevrões debe muy baja, por lo que se espera que para $t_0 < t$ la evolución temporal de $\rho_{ch}(t)$ sea muy lenta. Numéricamente, la Fig. 5.43 muestra que para $\epsilon = 0.2157$, la evolución de ρ_{dis} es consistente con la ley de potencia $t^{-1/3}$ aún a tiempos $10000 < t < 40000$. Sin embargo, la evolución temporal de ρ_{ch} cambia de la ley de potencia $t^{-0.5}$ observada para $0 < t < 10000$ (ver Fig. 5.17), a una ley consistente con $t^{-1/5}$ para $10000 < t < 40000$, como consecuencia de efectos de tamaño finito a lo largo de \hat{y} . En este caso, el tiempo en el que ocurre la transición al régimen dominado por efectos de tamaño finito es $t_0 \approx 10^4$. Posiblemente éste corresponde al régimen observado en los experimentos realizados en [27].

Un factor que puede resultar importante en la dinámica de ordenamiento en los experimentos de electroconvección es el ruido, que puede ser aditivo o multiplicativo, en forma parecida al caso de sistemas de franjas isotrópicas [15, 16, 20, 86, 87]. Por ejemplo, en [27] se observa nucleación de dominios, debido a la aparición espontánea de pares de dislocaciones de carga topológica opuesta. Este fenómeno puede ocurrir en forma similar a la generación de defectos puntuales en materia condensada por fluctuaciones térmicas [88]. Aunque estos eventos son muy escasos para los valores de ϵ empleados en [27] y no parecen contribuir significativamente a la dinámica de ordenamiento, se espera que afecten las leyes de crecimiento al incrementar la intensidad del ruido. Por otra parte, en los experimentos de electroconvección realizados en [28] se verifica que la dinámica de ordenamiento se vuelve

más lenta a medida que se incrementa la intensidad del ruido en el parámetro de control principal ϵ del sistema (ruido multiplicativo). La presencia de ruido no es capturada por los modelos deterministas empleados en el presente trabajo. Una posible forma de abordar el problema es mediante la inclusión de términos estocásticos multiplicativos y aditivos en el modelo generalizado (4.10).

Capítulo 6

Efectos no adiabáticos sobre interfaces en patrones de franjas oblicuas

6.1. Introducción

En los resultados mostrados anteriormente para el *coarsening* lejos del umbral de bifurcación se observa una marcada anisotropía tanto en el crecimiento de dominios a lo largo de las direcciones \hat{x} y \hat{y} , como en la dinámica de los dos tipos de defectos topológicos, principalmente orientados a lo largo de estas direcciones. En este capítulo se presentan algunas evidencias teóricas de que este comportamiento anisotrópico es en su mayor parte debido a los llamados *efectos no adiabáticos*. Estos efectos no adiabáticos surgen en un patrón periódico cuando la profundidad del *quench* no es pequeña y se manifiestan como potenciales periódicos efectivos que se oponen e incluso bloquean el movimiento de defectos. Los efectos no adiabáticos actúan sobre los dos tipos de fronteras presentes en el *coarsening* de franjas oblicuas anisotrópicas con intensidades que pueden variar en muchos órdenes de magnitud.

Cerca de un punto de bifurcación, $\epsilon \rightarrow 0^+$, las escalas de variación (rápidas) de un patrón periódico y las escalas de variación (lentas) de sus amplitudes son muy diferentes y por lo tanto independientes. El análisis de multiescalas es válido y permite derivar las ecuaciones de amplitud que describen la dinámica lenta de las inhomogeneidades espaciales (tales como los defectos) alrededor de un patrón periódico perfecto. Sin embargo, cuando ϵ es finito y grande, las escalas lentas y rápidas dejan de ser muy diferentes y su acoplamiento da lugar a correcciones en la dinámica de los defectos. A estas correcciones es a lo que se le denomina efectos no adiabáticos. Una manifestación de los efectos no adiabáticos es el *bloqueo de defectos*. La periodicidad del patrón de base y su acoplamiento con las escalas lentas de las amplitudes induce potenciales efectivos periódicos que afectan la cinética de los defectos, manteniéndolos inmóviles para profundidades del *quench* suficientemente grandes [79, 89, 90]. Los potenciales de bloqueo sólo pueden aparecer en fases espacialmente moduladas y no ocurren en fases uniformes. Mencionamos que estos potenciales son análogos a las barreras de Peierls que actúan sobre los defectos en sólidos cristalinos [91].

De manera general, el movimiento de un defecto obedece una ley de la forma

$$\mu^{-1} \frac{dx}{dt} = f - p \cos(k_p x), \quad (6.1)$$

en donde μ es la movilidad, x la posición del defecto, dx/dt su velocidad, f es alguna fuerza externa que actúa sobre el defecto y $p \cos(k_p x)$ es el potencial efectivo de bloqueo. Por ejemplo, supongamos una frontera plana orientada a lo largo de \hat{y} y separando dominios de franjas de periodicidad k_0 . La posición de la frontera, x , se puede definir como los puntos x de amplitud media $A(x) = A_0/2$, en donde A_0 es la amplitud máxima dentro de cada dominio. Las correcciones no adiabáticas a orden más bajo en la ecuación isotrópica de Swift-Hohenberg [20], conducen a ecuaciones de movimiento de la forma dada por (6.1). De manera general, la intensidad del potencial de bloqueo depende del *quench* de manera no analítica

$$p \sim \epsilon^2 \exp(-|a|/\sqrt{\epsilon}), \quad (6.2)$$

con $|a|$ una constante de $O(1)$. En el ejemplo anterior, la periodicidad del potencial de bloqueo es

$$2\pi/k_p = \pi/k_0,$$

para una interfaz separando dominios con franjas perpendiculares.

Se puede utilizar la ecuación (6.1) para describir cualitativamente la evolución de un sistema durante un proceso de *coarsening*, en donde f representa la fuerza motriz del crecimiento que actúa sobre una interfaz típica en el sistema. Si $L(t)$ representa la escala de longitud característica de un dominio, entonces $f = f(L(t))$. Por ejemplo, $f = 1/L(t)$ corresponde a la ley de Allen-Cahn para crecimientos controlados por tensión superficial. Sustituyendo en la ecuación de movimiento general para un defecto (6.1) (con $p = 0$ en el caso de fases de simetría rota uniformes) se obtiene

$$\frac{dL}{dt} \sim \frac{1}{L},$$

de donde se obtiene directamente la ley de crecimiento

$$L(t) \sim t^{1/2}.$$

En sistemas con franjas, para ϵ finito, $p \neq 0$ en la ecuación (6.1). A tiempos cortos se forman dominios suficientemente pequeños y $p \ll f$, por lo que las fronteras de dominios se mueven fácilmente y $L(t)$ aumenta en el tiempo. El incremento en el tamaño de dominios reduce la intensidad de f hasta que llega un momento en que $f \sim p$ y las fronteras quedan bloqueadas e inmóviles en las posiciones correspondientes a un mínimo local del potencial de bloqueo [20]. Esto es análogo al movimiento de una partícula sobreamortiguada en un potencial ondulado con inclinación dependiente del tiempo. Efectos similares en la cinética de fronteras entre fases espacialmente moduladas periódicas de diferente orientación han sido observados numéricamente en patrones con otras simetrías, tales como hexágonos [92].

En el caso de la cinética de fronteras entre dominios de franjas oblicuas anisotrópicas, se ha observado numéricamente que el *coarsening* de dominios para profundidades moderadas y grandes del *quench* está dominado por el movimiento horizontal de dislocaciones,

mientras que las fronteras horizontales de chevrones permanecen inmóviles o bloqueadas [30]. Experimentalmente se ha observado el mismo efecto para diversos valores de la profundidad del *quench* en el *coarsening* de dominios de rollos oblicuos en electroconvección de nemáticos [27]. En el presente capítulo mostramos que la amplitud del potencial de bloqueo p depende fuertemente de la orientación de la interfaz. Se investiga el origen de la anisotropía en el movimiento de interfaces en base a las correcciones no adiabáticas a orden más bajo de las ecuaciones de amplitud (4.37). Se discute el efecto que tienen estas correcciones sobre el ordenamiento global del sistema durante un proceso de *coarsening*.

6.2. Solución numérica para el perfil de una interfaz plana

Para calcular la intensidad del potencial de bloqueo (6.2) que actúa sobre una frontera plana (horizontal o vertical) entre dominios de franjas oblicuas de diferente orientación, se requiere primero conocer su perfil estacionario (ver la siguiente sección). Una frontera plana horizontal es paralela a \hat{x} , mientras que una vertical es paralela a \hat{y} . Empleando las siguientes condiciones iniciales para el parámetro de orden local ψ de la ecuación de Swift-Hohenberg anisotrópica (4.10)

$$\psi(\vec{r}, t = 0) = \begin{cases} a_0^+(y) \cos(p_c x + q_c y) + a_0^-(y) \cos(p_c x - q_c y), & \text{front. horizontal,} \\ a_0^+(x) \cos(p_c x + q_c y) + a_0^-(x) \cos(p_c x - q_c y), & \text{front. vertical,} \end{cases}$$

se obtienen numéricamente configuraciones del patrón de franjas correspondientes a una frontera plana separando dos dominios de franjas de diferente orientación. Se eligen $a_0^+(z)$ y $a_0^-(z)$ como funciones reales con perfil de tangente hiperbólica y tales que

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow -\infty} a^+(z) &= \sqrt{\epsilon/(3\gamma)}, & \lim_{z \rightarrow -\infty} a^-(z) &= 0, \\ \lim_{z \rightarrow \infty} a^+(z) &= 0, & \lim_{z \rightarrow \infty} a^-(z) &= \sqrt{\epsilon/(3\gamma)}. \end{aligned}$$

La configuración inicial $\psi(\vec{r}, t = 0)$ se relaja en el tiempo a una configuración estacionaria, como las de las figuras 6.1(a)-6.1(f).

Como fue discutido en el capítulo anterior, el perfil de una frontera entre dominios puede describirse mediante amplitudes A^+ y A^- tales que

$$\psi = A^+ e^{i\vec{k}_c^+ \cdot \vec{r}} + A^- e^{i\vec{k}_c^- \cdot \vec{r}} + c.c. \quad (6.3)$$

A orden más bajo A^+ y A^- son soluciones de las ecuaciones de Ginzburg-Landau acopladas

$$\begin{aligned} \partial_t A^\pm &= \epsilon A^\pm + \frac{4}{k_0^4} [p_c^2 \partial_x^2 \pm 2(1-\eta)p_c q_c \partial_x \partial_y + (1+c)q_c^2 \partial_y^2] A^\pm \\ &\quad - 3\gamma |A^\pm|^2 A^\pm - 6\gamma |A^\mp|^2 A^\pm. \end{aligned} \quad (6.4)$$

En las figuras 6.2(a) y 6.2(b) se muestran las soluciones estacionarias (a $t = 40000$), denotadas por a^+ y a^- , para una frontera horizontal y para una vertical, respectivamente. En

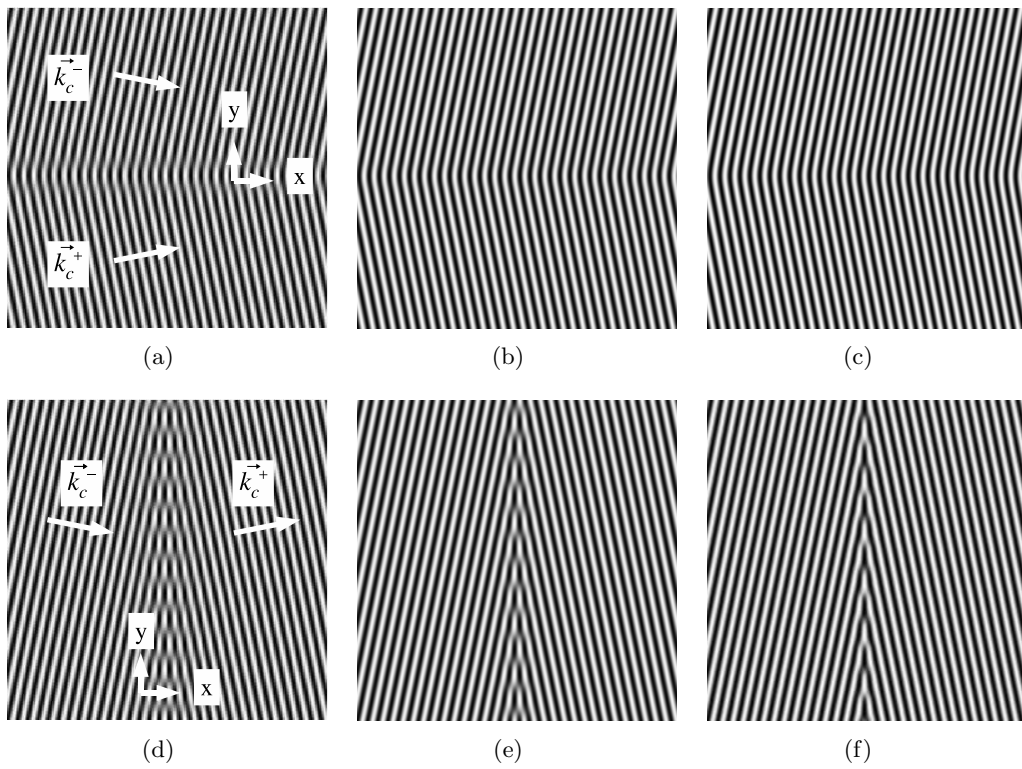


Figura 6.1: Configuraciones estacionarias ($t = 40000$) de las fronteras planas horizontales obtenidas por solución numérica con condiciones iniciales de frontera plana en el modelo no potencial 1 para: a) $\epsilon = 0.0392$; b) $\epsilon = 0.2157$; c) $\epsilon = 0.8039$; y fronteras planas verticales (4.13) para: d) $\epsilon = 0.0392$; e) $\epsilon = 0.2157$; f) $\epsilon = 0.8039$.

este caso se resolvieron numéricamente las ecuaciones de Ginzburg-Landau unidimensionales (6.4) con $\epsilon = 0.0392$, empleando el método pseudoespectral descrito en el apéndice A. Las condiciones iniciales son

$$\left. \begin{aligned} a^+(y, t = 0) &= a_0^+(y) \\ a^-(y, t = 0) &= a_0^-(y), \end{aligned} \right\} \text{frontera horizontal,}$$

$$\left. \begin{aligned} a^+(x, t = 0) &= a_0^+(x) \\ a^-(x, t = 0) &= a_0^-(x), \end{aligned} \right\} \text{frontera vertical,}$$

en donde $a_0^+(z)$ y $a_0^-(z)$ son las mismas funciones iniciales empleadas para obtener las configuraciones de las figuras 6.1(d)-6.1(f). Para obtener los perfiles estacionarios de las amplitudes se dejan evolucionar las amplitudes a^+ y a^- hasta que las soluciones prácticamente no cambian en el tiempo.

6.3. Correcciones no adiabáticas

Consideremos una frontera horizontal plana de chevrons separando dos dominios de franjas oblicuas de diferente orientación (Fig. 6.1(a)). En esta configuración el parámetro de orden local ψ se describe por la Ec. (6.3), con \vec{k}_c^\pm dado por la ecuación (4.34). Para una frontera plana las amplitudes A^+ y A^- asociadas a cada dominio no dependen de la coordenada x . Cuando ϵ es suficientemente pequeño, la dinámica de A^+ y A^- queda descrita por las siguientes ecuaciones unidimensionales de Ginzburg-Landau

$$\partial_t A^\pm = \epsilon A^\pm + \xi_y^2 \partial_y^2 A^\pm - 3\gamma |A^\pm|^2 A^\pm - 6\gamma |A^\mp|^2 A^\pm, \quad (6.5)$$

en donde la longitud de coherencia ξ_y a lo largo de y es

$$\xi_y = \frac{2}{k_0} \sqrt{\frac{\eta(1+c)}{c+2\eta-\eta^2}}. \quad (6.6)$$

Las ecuaciones (6.5) se obtienen a partir de las ecuaciones de amplitud cerca del umbral de bifurcación (6.4), igualando a cero todas las derivadas de las amplitudes con respecto a la coordenada x .

Vale la pena recordar como se obtienen formalmente las ecuaciones (4.37) para realizar adecuadamente las correcciones no adiabáticas cuando las escalas rápidas y lentas no son muy diferentes. Para una frontera horizontal plana, el análisis de multiescalas en el formalismo de ecuaciones de amplitud usual conduce a la solución para el parámetro de orden al orden más bajo $O(\epsilon^{1/2})$, de la forma

$$\psi_0 = A_0^+(\sqrt{\epsilon}y, \epsilon t) e^{+i\vec{k}_c^+ \cdot \vec{r}} + A_0^-(\sqrt{\epsilon}y, \epsilon t) e^{+i\vec{k}_c^- \cdot \vec{r}} + c.c.$$

Asimismo, a $O(\epsilon^{3/2})$ se obtiene la condición de solubilidad dada por

$$\int_y^{y+l_y} \frac{dy'}{l_y} \int_x^{x+l_x} \frac{dx'}{l_x} (\partial_T \psi_0 - \hat{N}_2 \psi_0) e^{-i\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r}} = 0, \quad (6.7)$$

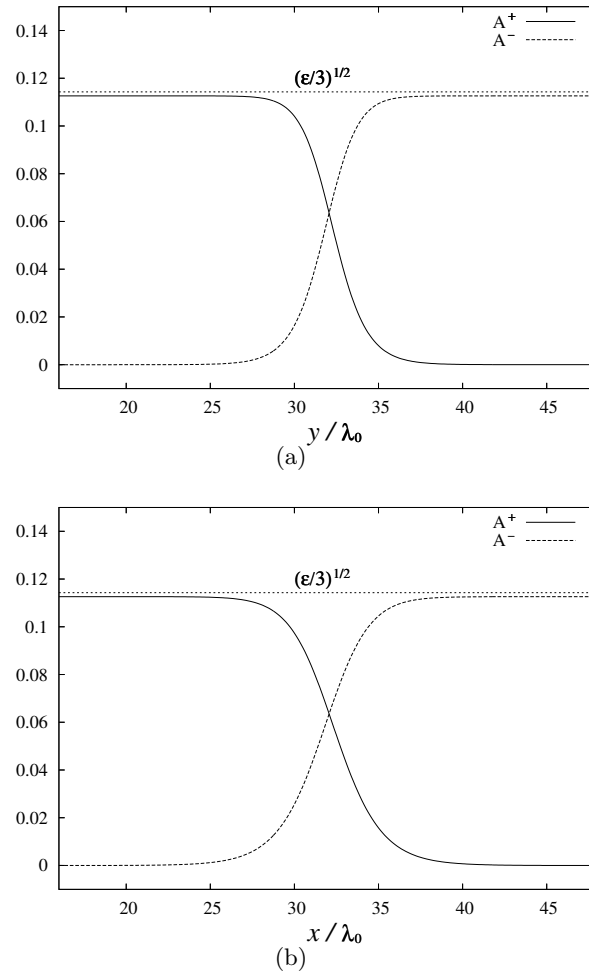


Figura 6.2: a) Perfiles estacionarios (a $t = 40000$) de las amplitudes correspondientes a una frontera horizontal para $\epsilon = 0.0392$, obtenidos al resolver numéricamente las ecuaciones de Ginzburg-Landau (6.5), con condiciones iniciales de frontera plana. b) Perfiles estacionarios de las amplitudes correspondientes a una frontera vertical para los mismos valores de los parámetros.

en donde

$$\hat{N}_2 = 1 - \frac{2}{k_0^4} [3(1+c)\partial_y^2 \partial_Y^2 + k_0^2 \partial_Y^2 + (1-\eta)\partial_x^2 \partial_Y^2] + NL;$$

l_y es una longitud de orden $O(2\pi/q_c)$ y NL el operador no lineal de la ecuación de Swift-Hohenberg. En (6.7) es conveniente tomar el límite $l_x \rightarrow \infty$, dado que las amplitudes que describen la frontera horizontal son invariantes a lo largo de \hat{x} . Cerca del umbral de bifurcación, $\epsilon \rightarrow 0^+$, las variables en las exponenciales complejas (x, y) y la variable $Y = \sqrt{\epsilon}$ en las amplitudes pueden ser consideradas como independientes. La única contribución a priori diferente de cero en la integral (6.7) proviene de los términos en $(\partial_T \psi_0 - \hat{N}_2 \psi_0)$, que oscilan como $\exp(+i\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r}')$ (términos resonantes). Cualquier otro término que no oscile como $\exp(+i\vec{k}_c^\pm \cdot \vec{r}')$ (término no resonante) conduce a un término oscilante en el integrando de (6.7). La integral de los términos no resonantes es igual a cero sobre un período espacial l_y , puesto que cuando $\epsilon \rightarrow 0^+$ las envolventes A^\pm se mantienen prácticamente constantes sobre un periodo $l_y = 2\pi/q_c$ a lo largo de y . Lo anterior no sucede para los términos resonantes: su suma debe ser igual a 0 para evitar soluciones infinitas, conduciendo directamente a las ecuaciones de amplitud (6.5).

Consideremos ahora $\epsilon \ll 1$ pero finito. En este caso las escalas rápidas de variación del patrón periódico (x, y) y las escalas lentas de las envolventes ($Y = \sqrt{\epsilon}y$) dejan de ser muy diferentes, de modo que A^+ y A^- dejan de ser estrictamente constantes a lo largo de un periodo $[y, y + l_y]$. Esto implica que la integral de cualquier término oscilante en (6.7) con un vector de onda \vec{K} en la dirección y (perpendicular a la frontera horizontal) no es exactamente igual a cero en un periodo l_y . Más adelante se muestra que estos términos contribuyen a orden $O(\exp(-\|\vec{K}\|\zeta))$ en la ecuación de movimiento de la frontera, siendo $\zeta \sim O(1/\sqrt{\epsilon})$ la anchura de la frontera. Estos términos son despreciables para $\epsilon \rightarrow 0^+$, pero no necesariamente para ϵ finito. Por otra parte, los términos en (6.7) con vector de onda \vec{K} que tiene una proyección diferente de cero en el eje x se integran a cero dado que $l_x \rightarrow \infty$ y no contribuye a los efectos no adiabáticos. Por ejemplo, para los modelos de Swift-Hohenberg con no linealidad cúbica, a primer orden $O(\exp(-2q_c\zeta))$, las correcciones no adiabáticas de la ecuación de amplitud para A^+ (6.5) provienen de los términos no lineales $A_0^{+2}\bar{A}_0^-$, $|A_0^+|^2 A_0^-$ y $|A_0^-|^2 A_0^-$, que oscilan en el integrando de (6.7) como

$$\begin{aligned} A_0^{+2}\bar{A}_0^- &\rightarrow \vec{K} = 2\vec{k}_c^+ - \vec{k}_c^- - \vec{k}_c^+ = +2q_c\hat{y}, \\ |A_0^+|^2 A_0^- &\rightarrow \vec{K} = \vec{k}_c^+ - \vec{k}_c^+ + \vec{k}_c^- - \vec{k}_c^+ = -2q_c\hat{y}, \\ |A_0^-|^2 A_0^- &\rightarrow \vec{K} = \vec{k}_c^- - \vec{k}_c^- + \vec{k}_c^- - \vec{k}_c^+ = -2q_c\hat{y}, \end{aligned}$$

(ver Fig. 6.1(a)). De esta manera se encuentran las correcciones no adiabáticas de las ecuaciones de amplitud (6.5) a primer orden

$$\begin{aligned} \partial_t A^\pm &= -\frac{\delta F_y}{\delta A^\pm} \\ &\quad - \frac{3\gamma}{l_y} \int_y^{y+l_y} dy' \left(A^{\pm 2} \bar{A}^\mp e^{\pm 2iq_c y'} + 2|A^\pm|^2 A^\mp e^{\mp 2iq_c y'} \right. \\ &\quad \left. + |A^\mp|^2 \bar{A}^\mp e^{\mp 2iq_c y'} \right). \end{aligned} \tag{6.8}$$

El primer término del lado derecho de (6.8) representa los términos usuales de las ecuaciones de amplitud (6.5), que derivan del funcional de Lyapunov

$$F_y = \int d\vec{r} [-\epsilon(|A^+|^2 + |A^-|^2) + \xi_y^2(|\partial_y A^+|^2 + |\partial_y A^-|^2) + \frac{3}{2}\gamma(|A^+|^4 + |A^-|^4) + 6\gamma|A^+|^2|A^-|^2],$$

mientras que el segundo término, correspondiente a las correcciones no adiabáticas a primer orden, muestra el acoplamiento entre las escalas rápidas y lentas.

Ahora, a partir de la ecuación (6.8) podemos derivar la ecuación de movimiento de una interfaz horizontal que separa dos dominios de franjas oblicuas de diferente orientación. Las soluciones estacionarias de las ecuaciones de Ginzburg-Landau (6.5), a^+ y a^- , introducidas anteriormente, son soluciones de la ecuación

$$0 = \frac{\delta F_y}{\delta \bar{a}^\pm}.$$

Sea $y_{gb}(t)$ la posición de la interfaz horizontal al tiempo t . Puesto que queremos obtener la ley de movimiento para $y_{gb}(t)$, buscamos soluciones de las ecuaciones (6.8) de la forma

$$A^\pm(y, t) = a^\pm(y - y_{gb}(t)). \quad (6.9)$$

Suponiendo que las correcciones no adiabáticas son pequeñas y que no afectan los perfiles a^\pm , multiplicamos cada una de las ecuaciones (6.8) por $\partial_t \bar{A}^\pm$. Sumando las ecuaciones resultantes, integrando sobre todo el espacio 2D y sustituyendo el ansatz (6.9) en las ecuaciones resultantes, se obtiene la ecuación de movimiento a orden más bajo para una interfaz horizontal plana

$$\frac{dy_{gb}(t)}{dt} = -\frac{p_y(\epsilon)}{D_y(\epsilon)} \cos(2q_c y_{gb} + \phi_y), \quad (6.10)$$

en donde $p_y(\epsilon)$ es una constante que depende de ϵ , dada por

$$p_y(\epsilon) = 9\gamma \max_\phi \int_{-\infty}^{\infty} dy [(3a^{+2}a^- + a^{-3})\partial_y a^+ + (3a^{-2}a^+ + a^{+3})\partial_y a^-] \cos(2q_c y + \phi), \quad (6.11)$$

y

$$D_y(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dy [(\partial_y a^+)^2 + (\partial_y a^-)^2]. \quad (6.12)$$

La ecuación (6.10) es equivalente a la ecuación de movimiento sobreamortiguado de una partícula bajo la acción de una fuerza espacialmente periódica de intensidad $p_y(\epsilon)$ y periodo π/q_c , y con coeficiente de fricción $D_y(\epsilon)$. Por lo tanto, una frontera horizontal inicialmente en una posición arbitraria, se relaja al mínimo más cercano del potencial que actúa como potencial de bloqueo con número de onda en la dirección normal a la interfaz. El potencial de bloqueo es generado por el patrón periódico mismo. Una generalización de (6.10) puede incluir una fuerza externa f que actúe sobre la interfaz.

Un análisis completamente análogo al anterior conduce a las ecuaciones unidimensionales acopladas de Ginzburg-Landau para la evolución de una interfaz vertical plana (invariante por traslación a lo largo de y) con correcciones no adiabáticas a primer orden

$$\begin{aligned} \partial_t A^\pm &= -\frac{\delta F_x}{\delta \bar{A}^\pm} \\ &\quad -\frac{3\gamma}{l_x} \int_x^{x+l_x} dx' \left(A^{\pm 2} \bar{A}^\mp e^{\pm 2ip_c x'} + 2|A^\pm|^2 A^\mp e^{\mp 2ip_c x'} \right. \\ &\quad \left. + |A^\mp|^2 \bar{A}^\mp e^{\mp 2ip_c x'} \right), \end{aligned} \quad (6.13)$$

en donde el funcional de Lyapunov está dado por

$$\begin{aligned} F_x &= \int d\bar{r} [-\epsilon(|A^+|^2 + |A^-|^2) + \xi_x^2(|\partial_x A^+|^2 + |\partial_x A^-|^2) \\ &\quad + \frac{3}{2}\gamma(|A^+|^4 + |A^-|^4) + 6\gamma|A^+|^2|A^-|^2], \end{aligned}$$

y en donde la longitud de coherencia ξ_x a lo largo de x es

$$\xi_x = \frac{2}{k_0} \sqrt{\frac{c + \eta}{c + 2\eta - \eta^2}}. \quad (6.14)$$

A partir de (6.13) se deduce la siguiente ecuación de movimiento para la interfaz vertical al orden más bajo

$$\frac{dx_{gb}(t)}{dt} = -\frac{p_x(\epsilon)}{D_x(\epsilon)} \cos(2p_c x_{gb} + \phi_x), \quad (6.15)$$

en donde $x_{gb}(t)$ denota la posición de la interfaz al tiempo t . La amplitud de la fuerza periódica de bloqueo sobre una frontera vertical es

$$\begin{aligned} p_x(\epsilon) &= 9\gamma \max_\phi \int_{-\infty}^{\infty} dx [(3a^{+2}a^- + a^{-3})\partial_x a^+ \\ &\quad + (3a^{-2}a^+ + a^{+3})\partial_x a^-] \cos(2p_c x + \phi), \end{aligned} \quad (6.16)$$

y el coeficiente de fricción es

$$D_x(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dx [(\partial_x a^+)^2 + (\partial_x a^-)^2], \quad (6.17)$$

donde a^+ y a^- son ahora soluciones de las ecuaciones

$$0 = \frac{\delta F_x}{\delta \bar{a}^\pm},$$

que están graficadas en la figura 6.2(b). Hay que notar que ahora la periodicidad del potencial de bloqueo es π/p_c , es decir, menor que la del potencial de bloqueo de interfaces horizontales. Las ecuaciones que describen la evolución espaciotemporal de las amplitudes en los dos tipos de interfaces (6.8) y (6.13), así como las ecuaciones de movimiento de las

fronteras (6.10) y (6.15) tienen la misma estructura. En ausencia de fuerzas externas o de ruido, se espera que tengan perfiles y movimientos cualitativamente similares. Sin embargo, hay dos factores que determinan las intensidades p_x y p_y de las fuerzas de bloqueo. El primero es la anchura de las fronteras $\zeta_{x,y}$, que se relaciona con las longitudes de coherencia $\xi_{x,y}$ mediante $\zeta_{x,y} \sim \xi_{x,y}/\sqrt{\epsilon}$ ¹. Entonces, para el mismo valor de la profundidad del *quench* se tiene que

$$\frac{\zeta_x}{\zeta_y} = \sqrt{\frac{c + \eta}{\eta(1 + c)}}. \quad (6.18)$$

En el caso de los valores de los parámetros anisotrópicos empleados en las soluciones numéricas de este trabajo, (6.18) corresponde a una razón de anchuras $\zeta_x/\zeta_y \approx 1.4$, es decir, las interfaces verticales tienden a ser más anchas que las horizontales. Asimismo hay que recordar que las amplitudes son de orden $\sqrt{\epsilon}$. Lo anterior implica que

$$a^\pm(y) = \sqrt{\epsilon} f_y^\pm \left(\frac{\sqrt{\epsilon} y}{\xi_y} \right),$$

para una interfaz horizontal y

$$a^\pm(x) = \sqrt{\epsilon} f_x^\pm \left(\frac{\sqrt{\epsilon} x}{\xi_x} \right),$$

para una interfaz vertical. Se puede comprobar en las figuras 6.1(a) y 6.1(d) que las interfaces verticales son más anchas que las horizontales. Asimismo se verifica que cerca del umbral de bifurcación la evolución de las amplitudes correspondientes a los dos tipos de dominios de franjas oblicuas queda muy bien descrita por las ecuaciones de Ginzburg-Landau (4.37), y podemos usar estos perfiles estacionarios para poder calcular las intensidades de los potenciales de bloqueo (6.11) y (6.16).

La amplitud del potencial de bloqueo depende fuertemente de la anchura de las interfaces. Lejos de una frontera, es decir, dentro de un dominio, las amplitudes a^+ y a^- tienen un valor casi constante y cercano a $\sqrt{\epsilon/(3\gamma)}$. Entonces las derivadas espaciales de las amplitudes dentro de un dominio son casi nulas $\partial_{x,y} a^\pm \approx 0$. Sólo en la región interfacial las derivadas espaciales son diferentes de cero y contribuyen en las integrales (6.11) y (6.16). A medida que aumenta la anchura de una interfaz, las derivadas espaciales de las amplitudes a lo largo de dirección normal a la interfaz son menores. Por consiguiente, las correcciones no adiabáticas son a priori de mayor intensidad para una frontera horizontal (más estrecha) que para una vertical.

El segundo (y más importante) factor que determina la intensidad de las fuerzas de bloqueo es la periodicidad en el coseno de las integrales de las expresiones (6.11) y (6.16). Esta periodicidad es la mitad de la periodicidad del patrón en la dirección perpendicular a la interfaz. Recordando que $\partial_{x,y} a^\pm \neq 0$ solamente en la región interfacial, las integrales en las expresiones (6.11) y (6.16) son aproximadamente las transformadas de Fourier unidimensionales de funciones $g(x/\zeta)$ que tienden rápidamente a cero cuando $|x/\zeta| \gg 1$. Por

¹Hay que recordar que las escalas espaciales lentas se relacionan con las escalas rápidas mediante $X \sim \sqrt{\epsilon} x$ y $Y \sim \sqrt{\epsilon} y$, por lo que las anchuras de las interfaces, siendo escalas de longitud propias de las amplitudes, deben ser grandes y variar como $\zeta_{x,y} \sim \xi_{x,y}/\sqrt{\epsilon}$.

lo tanto

$$\int_{-\infty}^{\infty} g\left(\frac{x}{\zeta}\right) \cos(Kx) dx \sim \exp(-K\zeta).$$

En el caso de una interfaz horizontal, los términos oscilantes resultantes de la condición de solubilidad tienen vector de onda $\vec{K}_y = \pm 2q_c \hat{y}$, mientras que para una frontera vertical, $\vec{K}_x = \pm 2p_c \hat{x}$. Dado que $q_c < p_c$ siempre que $0 < c$ (ver la ecuación (4.17)), $\|\vec{K}_y\| < \|\vec{K}_x\|$. Además las fronteras verticales son más anchas que las horizontales, $\zeta_y < \zeta_x$, por lo que se cumple

$$\|\vec{K}_y\|\zeta_y < \|\vec{K}_x\|\zeta_x.$$

Dado que $\zeta_{x,y} \sim \xi_{x,y}/\sqrt{\epsilon}$, es importante notar que cerca del umbral de bifurcación ($\epsilon \ll 1$) se cumple

$$1 \ll \|\vec{K}_y\|\zeta_y < \|\vec{K}_x\|\zeta_x,$$

lo que implica

$$\exp(-\|\vec{K}_x\|\zeta_x) \ll \exp(-\|\vec{K}_y\|\zeta_y).$$

Se concluye que las contribuciones no adiabáticas son más importantes para las interfaces horizontales que para las verticales y en consecuencia, el bloqueo de defectos es más intenso para las fronteras de chevrons que para los arreglos verticales e inclinados de dislocaciones. Estos efectos de bloqueo pueden variar en órdenes de magnitud según la orientación de la interfaz.

6.4. Resultados numéricos

A continuación calculamos la intensidad del potencial periódico de bloqueo sobre cada tipo de frontera para diferentes valores de ϵ , empleando las ecuaciones (6.11) y (6.16). Se requiere en principio resolver las ecuaciones integrodiferenciales de Ginzburg-Landau unidimensionales (6.8) y (6.13) para obtener los perfiles de las amplitudes A^+ y A^- . En la sección anterior se hizo una simplificación válida para ϵ pequeño, sustituyendo A^+ y A^- por a^+ y a^- , las soluciones estacionarias de las ecuaciones (6.8) y (6.13) sin correcciones no adiabáticas. Las soluciones para a^+ y a^- , obtenidas para diversos valores de ϵ , son sustituidas en las expresiones (6.11) y (6.16) y con ello se obtiene una aproximación al orden más bajo de $p_y(\epsilon)$ y $p_x(\epsilon)$ para la intensidad de los potenciales de bloqueo. En la figura 6.3 se muestran los resultados numéricos obtenidos por este método. Ahora resulta evidente el origen de la anisotropía en la cinética de una frontera, dependiendo de su orientación con respecto al patrón periódico de franjas oblicuas. Para una profundidad del *quench* tan pequeña como $\epsilon = 0.0096$, la amplitud del potencial de bloqueo es 4 órdenes de magnitud más intensa para una frontera horizontal que para una frontera vertical. Esta enorme diferencia tiene como consecuencia que las fronteras horizontales sean mucho más fácilmente bloqueadas que las fronteras verticales. Para poder mover una frontera horizontal por encima de las barreras de potencial de bloqueo, se necesitan fuerzas externas muy intensas, de al menos cuatro órdenes de magnitud mayores que para una frontera vertical. Estas fuerzas externas pueden ser inducidas por la curvatura de la frontera, mediante perturbaciones en la periodicidad del patrón o mediante la influencia de ruido.

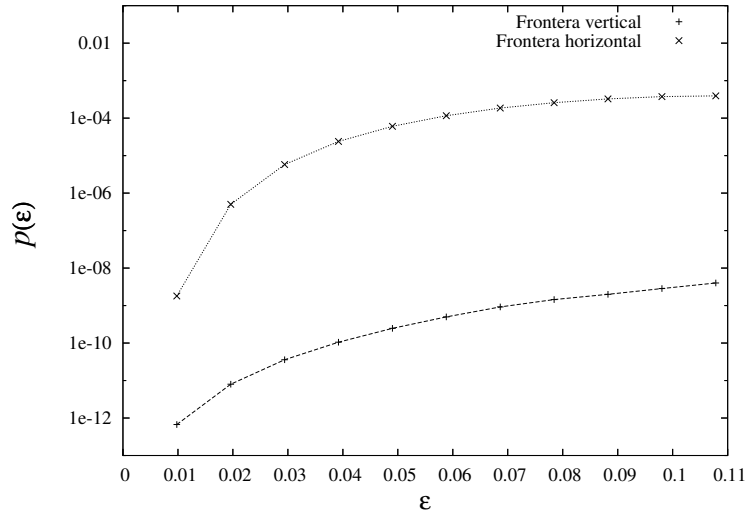


Figura 6.3: Amplitudes de los potenciales periódicos de bloqueo que actúan sobre fronteras planas horizontales y verticales entre dominios de franjas oblicuas, para diversos valores de la profundidad del *quench* cercanos al umbral de bifurcación, calculadas a partir de las ecuaciones (6.11) y (6.16).

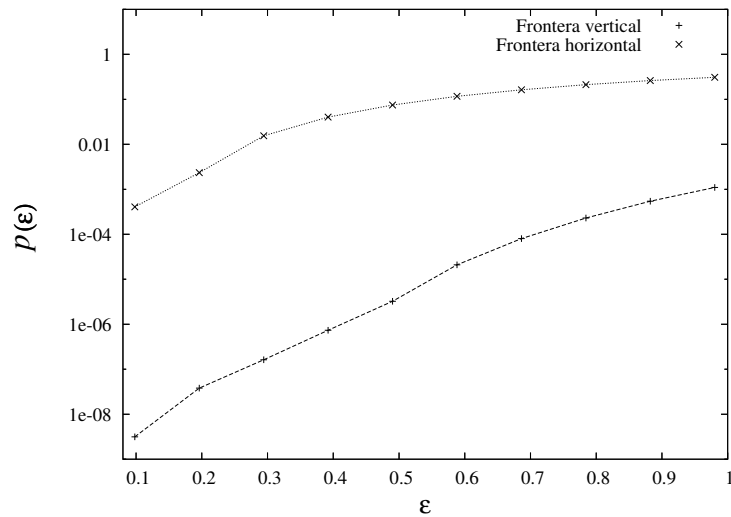


Figura 6.4: Amplitudes de los potenciales periódicos de bloqueo que actúan sobre fronteras planas horizontales y verticales entre dominios de franjas oblicuas, calculadas a partir de las ecuaciones (6.11) y (6.16), lejos del umbral de bifurcación.

A medida que se incrementa la profundidad del *quench*, la intensidad los potenciales periódicos aumenta en varios órdenes de magnitud. Para valores $\epsilon \approx 0.1$, $p_x(\epsilon) \sim 10^{-9}$ y $p_y(\epsilon) \sim 10^{-4}$, una diferencia de 5 órdenes de magnitud. Por comparación, a $\epsilon = 0.1$ la intensidad del potencial de bloqueo en una frontera entre dominios de franjas isotrópicas es de orden 10^{-7} , mientras que para una frontera entre dos dominios de fase hexagonal es de orden 10^{-4} [92]. Esto es, el potencial de bloqueo de una frontera vertical entre dominios de franjas oblicuas anisotrópicas es incluso 2 órdenes de magnitud más débil que para el caso isotrópico, mientras que las fronteras horizontales están sometidas a potenciales tan intensos como los que actúan sobre fronteras en fases hexagonales. Esta propiedad es sorprendente a priori, pues indica que las fronteras de chevrones en fases de franjas (que son *esméticas*, en la terminología de cristales líquidos) son tan *duras* como las fronteras en fases cristalinas (o *sólidas*) de menor simetría.

Hay que enfatizar que en la derivación de las correcciones no adiabáticas para la cinética de fronteras, se emplearon las ecuaciones de Ginzburg-Landau a orden más bajo (4.37), en las que se consideraron amplitudes reales. Es equivalente a suponer que el número de onda de las franjas está muy cercano al valor marginal dado por el análisis lineal (4.17). En principio, sólo podemos aplicar las fórmulas anteriores a las fronteras de dominios de franjas en los modelos potencial (4.11) y no potencial 1 (4.12), ya que presentan patrones cuyo número de onda se mantiene muy cercana a $k = k_c$ para un intervalo amplio de ϵ (figuras 5.3(a) y 5.3(b)). Por el contrario, el modelo no potencial 2 (4.13) exhibe patrones cuyo número de onda disminuye rápidamente con ϵ , por lo que el análisis anterior es aplicable en este modelo solamente cerca del umbral de bifurcación. Para valores crecientes de ϵ se deben permitir modulaciones en la fase de las franjas (por ejemplo, permitiendo que las amplitudes sean complejas o derivando ecuaciones de fase). Estas correcciones de orden mayor no fueron investigadas en el presente trabajo.

A pesar de que para $0.1 < \epsilon$ las ecuaciones de amplitud sin correcciones no adiabáticas deben incluir otros términos de órdenes más altos en ϵ , y que estos nuevos términos generan nuevas correcciones no adiabáticas, se puede hacer una estimación razonable de las intensidades de los potenciales de bloqueo lejos del umbral de bifurcación. Utilizando las mismas fórmulas que permiten obtener numéricamente la curva de la figura 6.3, se obtienen las amplitudes de los potenciales periódicos de bloqueo para $0.1 < \epsilon \leq 1$ de la figura 6.4. Se puede observar ahora que, si bien la intensidad del potencial para una frontera vertical sigue siendo varios órdenes de magnitud menor que para una frontera horizontal, crece más rápido con ϵ , reduciéndose a sólo dos ordenes de magnitud para $\epsilon \approx 1$. Los resultados presentados en este capítulo explican en forma cualitativa los resultados numéricos obtenidos en el *coarsening* de dominios de franjas oblicuas y justifican la ecuación (5.25) del capítulo 5 como modelo del crecimiento del orden orientacional en el patrón de franjas oblicuas para valores moderados de ϵ .

Capítulo 7

Conclusiones

Se ha estudiado la dinámica de ordenamiento de fases de franjas oblicuas modeladas por tres ecuaciones anisotrópicas de tipo Swift-Hohenberg. Estos modelos reducidos permiten observar diferentes regímenes en la dinámica de ordenamiento para diferentes valores del parámetro de control ϵ . Las propiedades más importantes de cada régimen de *coarsening* son las siguientes:

- Cerca del umbral de bifurcación, es posible reducir la dinámica de ordenamiento a la de un sistema caracterizado por un parámetro de orden local no conservado (modelo A, en la terminología de Hohenberg y Halperin [3]). Este régimen está caracterizado por un crecimiento isotrópico y autosimilar de dominios, con una longitud característica que crece en el tiempo como $L(t) \sim t^{1/z}$, con $z \approx 2$. El mecanismo responsable del crecimiento de dominios es la reducción de la curvatura de las interfaces. Este régimen debe ser genérico cerca del umbral de bifurcación para cualquier sistema de franjas oblicuas que presente las simetrías de la ecuación (4.1) (por ejemplo, la electroconvección y termoconvección de nemáticos con alineación plana).
- Un segundo régimen de *coarsening*, que ocurre para valores moderados de ϵ , consiste en un crecimiento anisotrópico de dominios, con longitudes características $L_x(t) \sim t^{1/z_x}$ y $L_y(t) \sim t^{1/z_y}$ ($z_x \approx 3$ y $z_y \approx 2$). El *coarsening* presenta aproximadamente escalamiento dinámico a lo largo de \hat{x} y \hat{y} . En este régimen la anisotropía del patrón periódico conduce a efectos no adiabáticos que tienen consecuencias dramáticas en la dinámica de defectos. Las fronteras horizontales de chevrons permanecen inmóviles debido a potenciales de bloqueo de varios órdenes de magnitud mayores que para las fronteras verticales. En consecuencia, el *coarsening* está dominado por el movimiento horizontal de dislocaciones, que tienden a reducir el exceso de energía en las interfaces. El crecimiento del orden orientacional en este régimen debe quedar descrito adecuadamente por una extensión del modelo A que incorpore los efectos de bloqueo sobre interfaces horizontales (por ejemplo, con la adición de un término análogo a un campo externo estacionario y espacialmente periódico).
- Para valores suficientemente grandes de ϵ , se hacen evidentes aspectos no genéricos en el *coarsening*, que dependen del modelo en particular. La contribución de los efec-

tos no adiabáticos, efectos no potenciales y selección de número de onda son muy importantes en este régimen. Los efectos no adiabáticos conducen a una dinámica de dislocaciones muy lenta debido a los potenciales efectivos de bloqueo intensos que se oponen a su movimiento. Por otro lado, los efectos no potenciales se manifiestan en una dinámica de defectos que no está restringida a disminuir el valor de ningún funcional de Lyapunov y conducen a mecanismos de ordenamiento complejos, como los mostrados en las figuras 5.42. Las leyes de evolución de las longitudes características en el *coarsening* son más complejas que leyes de potencia simples. Se observan desviaciones del escalamiento dinámico a lo largo de \hat{x} y \hat{y} para los tres modelos. Un modelo que describa el crecimiento del orden orientacional en este régimen debe de ser deducido a priori de las ecuaciones de amplitud a orden $O(\epsilon^2)$ o superior, con las correcciones adiabáticas adecuadas, por lo que dependerá fuertemente de la forma de los términos no lineales del modelo empleado.

Los modelos no potenciales estudiados capturan algunas características observadas experimentalmente en el *coarsening* de patrones de rollos oblicuos en electroconvección de nemáticos, tales como la selección no trivial de número de onda y la anisotropía en las leyes de crecimiento para valores moderados de ϵ . El acuerdo con el exponente experimental $1/z_x = 1/3$ es muy bueno. Se encuentran diferencias cuantitativas en el exponente $1/z_y$. Sin embargo, se puede argumentar que la discrepancia en el valor de z_y puede ser debida a efectos de tamaño finito y que a tiempos intermedios se debería observar efectivamente un exponente $1/z_x < 1/z_y$. Se infiere que los efectos no potenciales y no adiabáticos deben jugar un papel muy importante lejos del umbral de bifurcación en situaciones experimentales y conducir a transiciones entre los diferentes regímenes de *coarsening* observados al incrementar la profundidad del *quench*.

Los resultados presentados en esta tesis muestran que existen diferentes dinámicas de defectos (congelación de la dinámica de dislocaciones, repulsión de dislocaciones de carga topológica opuesta y emisión de dislocaciones aisladas) dependiendo del término no lineal del modelo empleado, suficientemente lejos del umbral de bifurcación. Por otro lado, se espera que los experimentos de electroconvección queden descritos adecuadamente por un modelo que incorpore tanto los términos no lineales aquí estudiados como otros posibles términos no lineales adicionales (por ejemplo, de flujo medio), como ocurre en el caso de la convección térmica de fluidos. En este sentido, en el presente trabajo se ha investigado la posible *contribución* a los mecanismos de ordenamiento del patrón periódico de cada uno de los términos no lineales empleados en las ecuaciones modelo. Por consiguiente, en una situación experimental lejos del umbral se espera una dinámica de ordenamiento más compleja que la de los modelos aquí presentados, resultante de la contribución de cada uno de los términos no lineales (potenciales y no potenciales) que describen al problema. El estudio del movimiento de defectos en la relajación de un dominio aislado puede resultar una forma adecuada de profundizar en el entendimiento de los mecanismos que controlan el *coarsening* de patrones de franjas oblicuas en sistemas anisotrópicos sometidos a algún forzamiento externo y de los mecanismos de selección del número de onda.

Una generalización de los modelos presentados aquí debe incluir términos estocásticos, pues algunos experimentos recientes en electroconvección revelan que un ruido suficiente-

mente intenso en la amplitud del campo eléctrico ac aplicado al nemático puede modificar las leyes de crecimiento en el *coarsening* [28]. Este ruido puede ser incluido en los modelos reducidos como *ruido multiplicativo*. Adicionalmente, en los experimentos se observan eventos de nucleación de dominios debido a la creación espontánea de pares de dislocaciones [27]. Este fenómeno posiblemente esté asociado a fluctuaciones térmicas en el nemático y puede en principio modelarse como *ruido aditivo*. Otro aspecto a investigar a partir de estos modelos estocásticos es la existencia de transiciones de fase en dos dimensiones inducidas por ruido.

Apéndice A

Métodos numéricos de solución

Dada la periodicidad esperada en las soluciones de las ecuaciones modelo (4.10) para los valores de los parámetros r , c y η empleados, un método pseudoespectral, como el desarrollado en [93], es una buena opción para resolverlas numéricamente. Esta técnica se basa en el empleo de la transformada de Fourier finita bidimensional del campo escalar $\psi(\vec{r}, t)$

$$\tilde{\psi}(q_x, q_y, t) = \frac{1}{R_x R_y} \int_0^{R_x} dx \int_0^{R_y} dy \psi(x, y, t) \exp(-iq_x x) \exp(-iq_y y), \quad (\text{A.1})$$

en donde $R_x \times R_y$ es el tamaño del sistema, el cual es discretizado espacialmente sobre una red rectangular de $N_x \times N_y$ nodos. Como $\psi(\vec{r}, t)$ es real, su transformada de Fourier cumple con la siguiente propiedad

$$\overline{\tilde{\psi}(q_x, q_y, t)} = \tilde{\psi}(-q_x, -q_y, t), \quad (\text{A.2})$$

en donde la barra indica el complejo conjugado. Este método pseudoespectral permite calcular las derivadas parciales espaciales del campo escalar real $\psi(\vec{r}, t)$, como productos en el espacio de Fourier, de la siguiente forma

$$\partial_j^n \psi(\vec{r}, t) \rightarrow (iq_j)^n \tilde{\psi}(\vec{q}, t), \quad j = x, y, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (\text{A.3})$$

y regresar al espacio real para calcular los términos no lineales cuando éstos involucran productos de derivadas del campo $\psi(\vec{r}, t)$, como ocurre con los modelos no potenciales 1 y 2. De esta manera se evitan los errores debidos a diferencias finitas cuando se discretizan los operadores diferenciales en el espacio real.

La integración temporal se realiza mediante un procedimiento de propagación exponencial en el que, dada una solución numérica al tiempo t , permite conocer la solución al tiempo $t + \Delta t$ (con paso de tiempo Δt), de la siguiente manera. La transformada de Fourier de la ecuación (4.10) es

$$\partial_t \tilde{\psi} = \alpha \tilde{\psi} + \widetilde{NL}[\tilde{\psi}], \quad (\text{A.4})$$

con α asociado a la parte lineal de (4.10)

$$\alpha = r - \frac{1}{k_0^4} ((k_0^2 - q_x^2 - q_y^2)^2 + cq_y^4 - 2\eta q_x^2 q_y^2) \quad (\text{A.5})$$

y $\widetilde{NL}[\tilde{\psi}]$ la transformada de Fourier finita del término no lineal $NL[\psi]$. La ecuación (A.4) es una ecuación diferencial de primer orden para el campo $\tilde{\psi}$ con un término de forzamiento no lineal $\widetilde{NL}[\tilde{\psi}]$, el cual puede ser integrado por un método *predictor-corrector*. Suponiendo que en el intervalo $t \leq t' \leq t + \Delta t$, $\widetilde{NL}[\tilde{\psi}]$ es una función lineal del tiempo t'

$$\widetilde{NL}[\tilde{\psi}] = \tilde{N}_0 + \tilde{N}_1(t - t_1), \quad (\text{A.6})$$

en donde

$$\begin{aligned} \tilde{N}_0 &= \widetilde{NL}[\tilde{\psi}(t), t], \\ \tilde{N}_1 &= \frac{\widetilde{NL}[\tilde{\psi}(t + \Delta t), t + \Delta t] - \widetilde{NL}[\tilde{\psi}(t), t]}{\Delta t}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

se puede deducir que la solución numérica al tiempo $t + \Delta t$ está dada por el siguiente algoritmo

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(t + \Delta t) &= \exp(\alpha \Delta t) \tilde{\psi}(t) + \tilde{N}_0 \frac{\exp(\alpha \Delta t) - 1}{\alpha} + \\ &+ \tilde{N}_1 \frac{\exp(\alpha \Delta t) - (1 + \alpha \Delta t)}{\alpha^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Para calcular \tilde{N}_1 , se estima $\tilde{\psi}(t + \Delta t)$ a partir de la ecuación (A.8) con $\tilde{N}_1 = 0$ y luego se sustituye en la ecuación (A.7), esto es, se predice y se corrige el valor de $\psi(t + \Delta t)$.

Bibliografía

- [1] J. D. Gunton, M. San Miguel, and P. S. Sahni, *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Academic, New York, 1989).
- [2] A. Bray, *Adv. Phys.* **43**, 357 (1994).
- [3] P. Hohenberg and B. Halperin, *Rev. Mod. Phys.* **49**, 435 (1977).
- [4] A. J. Bray and A. D. Rutenberg, *Phys. Rev. E* **49**, R27 (1994).
- [5] A. J. Bray, *Phys. Rev. E* **58**, 1508 (1998).
- [6] I. M. Lifshitz and V. V. Slyozov, *J. Phys. Chem. Solids* **19**, 35 (1961).
- [7] S. M. Allen and J. W. Cahn, *Acta Metall* **27**, 1085 (1979).
- [8] M. C. Cross and P. C. Hohenberg, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851 (1993).
- [9] F. S. Bates, *Science* **251**, 898 (1991).
- [10] S. Miura, M. Mino, and H. Yamazaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **70**, 2821 (2001).
- [11] D. Walgreaf, *Spatio-Temporal Pattern Formation* (Springer-Verlag, 1997).
- [12] C. Bowman and A. C. Newell, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 289 (1998).
- [13] J. P. Gollub and J. S. Langer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S396 (1999).
- [14] M. I. Rabinovich, A. B. Ezersky, and P. D. Weidman, *The Dynamics of Patterns* (World Scientific, 2000).
- [15] K. R. Elder, J. Viñals, and M. Grant, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3024 (1992).
- [16] K. R. Elder, J. Viñals, and M. Grant, *Phys. Rev. A* **46**, 7618 (1992).
- [17] M. C. Cross and D. I. Meiron, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2152 (1995).
- [18] J. J. Christensen and A. J. Bray, *Phys. Rev. E* **58**, 5364 (1998).
- [19] D. Boyer and J. Viñals, *Phys. Rev. E* **64**, 050101 (2001).
- [20] D. Boyer and J. Viñals, *Phys. Rev. E* **65**, 046119 (2002).

-
- [21] H. Qian and G. F. Mazenko, Phys. Rev. E **67**, 036102 (2003).
- [22] H. Qian and G. F. Mazenko, Phys. Rev. E **68**, 021109 (2003).
- [23] C. Harrison, D.H. Adamson, Z. Cheng, J.M. Sebastian, S. Sethuraman, D.A. Huse, R.A. Register, and P.M. Chaikin, Science **290**, 1558 (2000).
- [24] C. Harrison, Z. Cheng, S. Sethuraman, D. A. Huse, P. M. Chaikin, D. A. Vega, J. M. Sebastian, R. A. Register, and D. H. Adamson, Phys. Rev. E **66**, 011706 (2002).
- [25] K. Kim and H. K. Pak, Phys. Rev. Lett. **88**, 204303-1 (2002).
- [26] L. Purvis and M. Dennin, Phys. Rev. Lett. **86**, 5898 (2001).
- [27] C. Kamaga, F. Ibrahim, and M. Dennin, Phys. Rev. E **69**, 066213 (2004).
- [28] M. Griffith and M. Dennin, Phys. Rev. E **74**, 027201 (2006).
- [29] L. Kramer and W. Pesch, Annu.Rev. Fluid. Mech. **27**, 515 (1995).
- [30] D. Boyer, Phys. Rev. E **69**, 066111 (2004).
- [31] W. Pesch and L. Kramer, Z. Phys. B: Condens. Matter **63**, 121 (1986).
- [32] E. Bodenschatz, W. Pesch, and L. Kramer, Physica D **32**, 135 (1988).
- [33] M. Keiser and W. Pesch, Phys. Rev. E **48**, 4510 (1993).
- [34] M. Treiber and L. Kramer, Phys. Rev. E **58**, 1973 (1998).
- [35] P. Manneville, *Dissipative Structures and Weak Turbulence* (Academic Press, 1990).
- [36] M. R. Paul, K-H. Chiam, M. C. Cross, P. F. Fischer, and H. S. Greenside, Physica D **184**, 144 (2003).
- [37] M. R. Paul, K-H. Chiam, M. C. Cross, and P. F. Fischer, Phys. Rev. Lett. **93**, 064503 (2004).
- [38] R. B. Hoyle, *Pattern formation, an introduction to methods* (Cambridge University Press, 2006).
- [39] Lord Rayleigh, Proc. R. Soc. London **93**, 148 (1916).
- [40] H. Bénard, Ann. Chim. Phys. **7**, 62 (1990).
- [41] J. Guckenheimer and P. Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields* (Springer, New York, 1983).
- [42] J. B. Swift and P. C. Hohenberg, Phys. Rev. A **15**, 319 (1977).
- [43] Y. Tsori and D. Andelman, Europhys. Lett. **53**, 722 (2001).

-
- [44] R. HilleRisLambers, M. Rietkerk, F. van den Bosch, H. H. T. Prins, and H. de Kroon, *Ecology* **82**, 50 (2001).
- [45] A. C. Newell and J. A. Whitehead, *J. Fluid. Mech.* **36**, 239 (1969).
- [46] L. A. Segel, *J. Fluid. Mech.* **38**, 203 (1969).
- [47] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, *Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki* **20**, 1064 (1950).
- [48] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, Pergamon Press, Oxford (1987).
- [49] I. S. Aranson and L. Kramer, *Rev. Mod. Phys.* **74**,99 (2002).
- [50] H. S. Greenside and M. C. Cross, *Phys. Rev. A* **31**,2492 (1985).
- [51] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky *Principles of condensed matter physics* (Cambridge University Press, 2000).
- [52] S. Chandrasekhar, *Liquid Crystals* (University Press, Cambridge, 1992).
- [53] P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals* (Clarendon Press, Oxford, 1993).
- [54] E. F. Carr, *J. Mol. Cryst.* **7**, 253 (1969).
- [55] W. Helfrich, *J. Chem. Phys.* **51**, 4092 (1969).
- [56] E. Dubois-Violette, P. G. de Gennes, and O. Parodi, *J. Phys. (Paris)* **32**, 305 (1971).
- [57] A. Buka and L. Kramer, *Pattern Formation in liquid crystals* (Springer-Verlag, New York, 1996).
- [58] E. Plaut and W. Pesch, *Phys. Rev. E* **59**, 1747 (1999).
- [59] H. Riecke and L. Kramer, *Physica D* **137**, 124 (2000).
- [60] M. Dennin, D. S. Canell, and G. Ahlers, *Phys. Rev. E* **57**, 638 (1997).
- [61] D. Funfschilling, B. Sammulu, and M. Dennin, *Phys. Rev. E* **67**, 016207 (2003).
- [62] M. Dennin, *Phys. Rev. E* **62**, 6780 (2000).
- [63] M. Dennin, G. Ahlers, and D. S. Canell, *Science* **272**, 388 (1996).
- [64] M. Dennin, G. Ahlers, and D. S. Canell, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2475 (1996).
- [65] S. Kai and W. Zimmermann, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **99**, 458 (1989).
- [66] J. G. Amar and F. Family, *Phys. Rev. A* **41**, 3258 (1990).
- [67] A. J. Bray, *J. Phys. A* **22**, L67 (1990).

-
- [68] A. Coniglio and M. Zannetti, *Europhys. Lett.* **10**, 575 (1989).
- [69] M. San Miguel, A. Amengual, and E. Hernández-García, *Phase Transitions* **48**, 65 (1994).
- [70] M. Hoyuelos, P. Colet, M. San Miguel, and D. Walgraef, *Phys. Rev. E* **58**, 2992 (1998).
- [71] R. Gallego, M. San Miguel, and R. Toral, *Phys. Rev. E* **61**, 2241 (2000).
- [72] A. Hari and A. A. Nepomnyashchy, *Phys. Rev. E* **61**, 4835 (1999).
- [73] H. Qian and G. F. Mazenko, *Phys. Rev. E* **70**, 031104 (2004).
- [74] L. I. Berge, G. Ahlers, and D. S. Canell, *Phys. Rev. E* **48**, R3236 (1993).
- [75] E. Plaut and R. Ribotta, *Eur. Phys. Lett.* **38**, 441 (1997).
- [76] E. Plaut, L. Pastur, and R. Ribotta, *Eur. Phys. J. B* **5**, 283 (1998).
- [77] K. Ouchi and H. Fujisaka, *Phys. Rev. E* **70**, 036210 (2004).
- [78] H. Qian and G. F. Mazenko, *Phys. Rev. E* **73**, 036117 (2006).
- [79] B. A. Malomed, A. A. Nepomnyashchy, and M. I. Tribelsky, *Phys. Rev. A* **42**, 7244 (1990).
- [80] E. Plaut and R. Ribotta, *Eur. Phys. J. B* **5**, 265 (1998).
- [81] K. M. S. Bajaj and G. Ahlers, unpublished; www.nls.physics.ucsb.edu.
- [82] G. Tesauero and M. C. Cross, *Phys. Rev. A* **34**, 1363 (1986).
- [83] G. Porod, *Kolloid Z.* **125**, 51 (1952).
- [84] A. P. Krekhov and L. Kramer, *Phys. Rev. E* **70**, 061801 (2004).
- [85] Z.-F. Huang and J. Viñals, [arXiv:cond-mat/0612264v1](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0612264v1).
- [86] T. Taneike and Y. Shiwa, *J. Phys: Condens. Matter* **11**, L147 (1997).
- [87] T. Taneike, T. Nihei, and Y. Shiwa, *Phys. Lett. A* **303**, 212 (2002).
- [88] D. R. Nelson, *Defects and Geometry in Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, 2002).
- [89] Y. Pomeau, *Physica D* **23**, 3 (1986).
- [90] D. Bensimon, B. Shraiman, and V. Croquette, *Phys. Rev. A* **38**, 5461 (1988).
- [91] *Proc. Phys. Soc. London* **52**, 34 (1940).
- [92] D. Boyer and J. Viñals, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 055501 (2002).
- [93] M. C. Cross, D. Meiron, and Y. Tu, *Chaos* **4**, 607 (1994).