

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS MATEMÁTICAS Y DE LA ESPECIALIZACIÓN EN ESTADÍSTICA APLICADA

TRANSICIONES DE FASE EN TEORÍA GEOMÉTRICA LINEAL DE PELÍCULA DELGADA.

MODALIDAD DE TITULACIÓN:

TESINA

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA:

LAURO MORALES MONTESINOS

DIRECTOR DE LA TESINA:

DR. ANTONIO CAPELLA KORT

ENTIDAD DE ADSCRIPCIÓN:

IMATE-UNAM

MÉXICO D.F., ENERO DE 2016



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.

TRANSICIONES DE FASE EN TEORÍA GEOMÉTRICA LINEAL DE PELÍCULA DELGADA.

ÍNDICE

1. Antecedentes	1
1.1. El modelo variacional	2
1.2. Rigidez a energía elástica nula	3
1.3. Perturbaciones de la energía y la enegía de superficie	4
1.4. Películas delgadas	5
2. Modelo	6
3. Juntas dobles en película delgada	7
3.1. Condiciones necesarias y suficientes para la existencia de juntas simples	8
4. Determinación de estados martensíticos dada una dirección de corte	9
4.1. Representantes martensíticos y austeníticos 2-D	10
4.2. Determinación de juntas dobles y el conjunto \mathscr{B}	11
4.3. Ecuación para soluciones elásticas	12
4.4. Resultado de rigidez parcial	13
4.5. Estabilidad de laminados simples ante perturbaciones pequeñas de la energía	15
5. Juntas Triples	20
5.1. Juntas triples en película delgada entre estados martensíticos	21
6. Líneas futuras de investigación.	22
Referencias	24

1. ANTECEDENTES

En la naturaleza existen aleaciones metálicas con distintas propiedades mecánicas y termodinámicas interesantes que son la base de los materiales inteligentes. Un ejemplo de este tipo de materiales es el InTl, una aleación metálica que presenta estructura cristalina del tipo cúbica centrada en la cara (FCC) para temperaturas mayores a cierta temperatura crítica (θ_c). Esta fase cristalina simétrica se conoce como el estado Austenítico. Si el material es enfriado por debajo de la temperatura crítica ocurre una transformación no difusiva y reversible conocida como la fase Martensítica, donde la estructura cristalina cambia a tetragonal centrada en la cara. Esta fase final resulta ser menos simétrica que la austenita y por lo tanto tendremos varias variantes martensíticas. El número de estas depende de la nueva simetría de la red cristalina (nuestro ejemplo tiene tres variantes martensíticas). Una consecuencia de la existencia de varias variantes martensíticas es la formación de un gran número de patrones que son observables experimentalmente. Explicar dichos patrones es un reto interesante tanto desde el punto de vista de la ciencia de materiales, como del punto de vista matemático.

2 TRANSICIONES DE FASE EN TEORÍA GEOMÉTRICA LINEAL DE PELÍCULA DELGADA.

1.1. El modelo variacional.

Este tipo de sistemas cristalinos se pueden estudiar por medio de un modelo variacional, donde se tiene un funcional de energía positivo (o acotado por abajo) no convexo, el cual se anula en los estados que corresponden a la austenita y a las variantes martensíticas. De forma más precisa, sea $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ abierto acotado y conexo un dominio de referencia que describe a una muestra del material, sea $y \in W^{1,2}(\Omega, \mathbb{R}^3)$ la función que modela la deformación de la muestra y $F = \nabla y(x)$ su gradiente. La energía de deformación a una temperatura θ está dada por el siguiente funcional de energía

$$\phi(F,\theta) = \int_{\Omega} f(\nabla y,\theta) dx, \quad F \in \mathscr{F} \equiv \{F \in M_{3\times 3}(\mathbb{R}) | \ DetF > 0\}.$$

Donde f satisface la siguiente condición de crecimiento

(1)
$$c_1(|F|^2 - 1) \le f(F,\theta) \le c_2(|F|^q - 1), \quad 2 < q < 6$$

Dado que la energía no depende del sistema de referencia de laboratorio, ϕ debe tener una simetría rotacional (la simetría traslacional esta implícita al tomar derivadas de y), es decir

(2)
$$\phi(RF,\theta) = \phi(F,\theta)$$
 para toda $R \in SO(3)$.

Por el teorema de descomposición polar de Cauchy, podemos escribir a $F = \tilde{R}A$ donde $\tilde{R} \in SO(3)$ y $A = (F^T F)^{(1/2)\dagger}$ entonces

(3)
$$\phi(F,\theta) = \phi((F^T F)^{1/2}, \theta)$$
 para toda F admisible.

Por otro lado, debido a la simetría en la red cristalina existe un grupo finito de rotaciones \tilde{D} en el cual ocurre que

$$\phi(FP,\theta) = \phi(F,\theta)$$
 para todo $P \in \tilde{D} \subset SO(3)$

Es inmediato que 1 representa al estado austenítico. Si U_0 es un estado martensítico, los demás quedan determinados por transformaciones de similitud vía los elementos de \tilde{D} , es decir

$$U_i = P_i^T U_o P_i$$
 para todo $P_i \in \tilde{D}_i$

Entonces podemos definir el conjunto de estados martensíticos como

$$\Lambda = \{ U_i \in \mathscr{F} | \text{ existe } P_i \in \tilde{D} \text{ tal que } U_i = P_i^T U_o P_i \}$$

Dado que el estado austenítico y los estados martensíticos son fases estables, se debe satisfacer que ϕ se minimiza localmente en dichos estados; en términos del modelo

(4)
$$\phi(F,\theta) \ge \phi(U,\theta)$$
 para toda $F \in \mathscr{F}$ y $U \in K_{\theta}$

donde

(5)
$$K_{\theta} = \begin{cases} SO(3)\mathbf{1} & \text{si } \theta > \theta_{c} \\ SO(3)\Lambda \cup SO(3)\mathbf{1} & \text{si } \theta = \theta_{c} \\ SO(3)\Lambda & \text{si } \theta < \theta_{c} \end{cases}$$

[†]Dado que $F^T F$ es simétrica y positiva definida (pues DetF > 0) todos sus valores propios son positivos, entonces existe $P \in SO(3)$ tal que $P^T F^T F P = D$ donde D diagonal de valores propios. Decimos que $(F^T F)^{1/2} = PD^{1/2}P^T$ con $D^{1/2}$ la matriz diagonal de la raíz cuadrada de los valores propios.

es el espacio de todos los posibles estados que minimizan la energía a una temperatura θ . Por ello es claro que el funcional de energía es no convexo y por (2) resulta tener una no linealidad geométrica. De lo anterior, el problema genérico de cálculo de variaciones que queremos estudiar es

$$\min_{\nabla y \in K_{\theta}} \phi(\nabla y, \theta),$$

donde ϕ satisface las propiedades anteriores y K_{θ} es el espacio de matrices mencionado en (5).

Este modelo es complejo y su estudio requiere considerar de forma separada distintos aspectos del mismo. Una forma para reducir dicha complejidad es quedarnos con la esencia no convexa del problema dada por los diferentes pozos, elementos de $\Lambda \cup \{1\}$ y eliminar la invariancia bajo rotaciones descrita por (2). Para esto consideraremos la linealización del problema respecto a las rotaciones cercanas a la identidad. En este caso, la simetría rotacional queda reemplazada por la invarianza del funcional de energía ante sumas de matrices antisimétricas, mientras que el gradiente de deformación ∇y se remplaza por su parte simétrica $E(\nabla y) = (\nabla y + \nabla^T y)/2$. Esta reducción se conoce como el modelo de elasticidad geométrica lineal (ver [10]) y será detallada líneas abajo .

1.2. Rigidez a energía elástica nula.

El problema más simple a estudiar consiste en caracterizar al conjunto K_{θ} en (5). Evidentemente los estados U_i y sus rotaciones son soluciones admisibles, sin embargo estos no son los únicos estados posibles, Ball y James probaron en [1] el siguiente resultado

Proposición 1. Sea Ω abierto y conexo. Si $y \in W^{1,\infty}(\Omega, \mathbb{R}^m)$ satisface que

(6)
$$\nabla y(x) = \begin{cases} A & c.d. \ en \ \Omega_A \\ B & c.d. \ en \ \Omega_B \end{cases}$$

donde $A, B \in M_{m \times n}(\mathbb{R})$ y Ω_A , Ω_B son conjuntos disjuntos medibles tal que $\Omega = \Omega_A \cup \Omega_B$ con meas $\Omega_A > 0$ y meas $\Omega_B > 0$. Entonces

$$(7) A - B = a \otimes n$$

Para algún $a \in \mathbb{R}^n$, |n| = 1. Además

(8)
$$y(x) = y_0 + Bx + \beta(x)a, \quad x \in \Omega$$

donde $y_0 \in \mathbb{R}^m$, $y_0 \cdot a = 0$, $\beta \in W^{1,\infty}(\Omega, \mathbb{R})$ y β satisface $\nabla \beta(x) = \chi_A n \ c.d.$ (χ_A es la función indicadora de Ω_A). Si además Ω es convexo entonces $\beta(x) = \beta_E(x \cdot n) \ con \ \beta_E$ lipschitz con derivada 0 o 1 c.d. en Ω .

Esta proposición sugiere la existencia de estructuras mixtas, por ejemplo las juntas dobles[‡] o simples que resultan ser el caso más simple.

Corolario 1. Sean $A, B \in M_{n \times m}$, Ω abierto y conexo tal que existen $\Omega_A, \Omega_B \subset \Omega$ disjuntos de medida positiva que satisfacen que $\partial \Omega_A \cap \partial \Omega_B$ es un segmento de recta perpendicular a $n \in S^2$ y $\Omega = \Omega_A \cup \Omega_B$. Si estos conjuntos, matrices y vector satisfacen (6) y (7), entonces

$$\nabla y(x) = \begin{cases} A & si \ x \cdot n > 0 \\ B & si \ x \cdot n < 0 \end{cases} \quad \text{para toda } x \in \Omega$$



FIGURA 1. a) Región teórica Ω. b) Twin en InTl. c) Laminado cruzado

Por la propiedad (2) para n = m = 3, $A = Q_1 U_i$ y $B = Q_2 U_j$ dos estados minimizantes del funcional, este resultado es aplicable. Iterando estas estructuras, esto es tomado copias periódicas en la dirección n es posible formar los laminados simples o "twins", que han sido ampliamente observados en los experimentos. En el caso no lineal para transiciones cúbico tetragonal, las U_i son bien conocidas [11] y han sido ampliamente revisadas por Ball y James en [1] donde encontraron que existen ciertas estructuras (en el sentido de curvas generalizadas) que también son soluciones a energía elástica cero.

Existen tipos de transiciones de fase (cúbico-tetragonal) donde se puede demostrar que (localmente) los twins son el único tipo de patrones que existe (vease Dolzmann y Müller [4]), mientras que en otro tipo de transiciones (ej. cúbico-ortorómbico) existen estructuras más complejas que involucran juntas cuádruples, estas generalizan a las juntas simples y también son únicas (ver [6]). A este tipo de resultados de "unicidad" (en el tipo de estructuras admisibles) es lo que se conoce como un *resultado de rigidez*.

1.3. Perturbaciones de la energía y la enegía de superficie.

Los resultados descritos hasta ahora tratan sobre la existencia y clasificación de los estados (o patrones) con energía elástica cero. En el caso de las sucesiones minimizantes, o estados de baja energía elástica es bien sabido que los resultados de rigidez no son válidos y existen muchos estados con estructuras muy complejas. Esto se debe a que la energía elástica no es débilmente semicontinua inferiormente de modo que sucesiones de deformaciones cuyos gradientes oscilan rápidamente pueden bajar la energía. Para arreglar esto se introduce un término de energía de superficie el cual penaliza las oscilaciones y permite recuperar la compacidad. El problema prototipo es en este caso

(9)
$$\min_{\substack{y \in W^{2,2}(\Omega,\mathbb{R}^3)\\\nabla y \in K_0}} e[\nabla y,\theta], \qquad e[\nabla y,\theta] \equiv \left\{\eta \int_{\Omega} |D\nabla y| + \phi(\nabla y,\theta)\right\}$$

donde el primer término representa la norma de variación acotada de ∇y que esencialmente mide el área o la superficie de las transiciones entre los pozos de energía, y $\eta > 0$ es un parámetro que mide el peso relativo entre la energía elástica y la de superficie.

Esta estrategia más la hipótesis de elasticidad lineal fue usada en [2, 3] para un modelo con transiciones cúbico a tetragonal y en [6, 7] para un modelo reducido con transiciones de fase cúbico a ortorómbico. En el primer caso se demostró la rigidez de los laminados simples (es decir soluciones

[‡]En este caso las juntas dobles se conocen también como *conexión de rango uno* (ver (7))

uno dimensionales), en tanto que en el segundo se demostraron resultados similares para patrones más complejos como son los laminados cruzados ó "crossing twins" (ver Figura 1c).

1.4. Películas delgadas.

Dado que esta teoría ha resultado ser fructífera, se han usado herramientas de cálculo de variaciones (Γ -convergencia) para estudiar casos límites en los parámetros de la teoría. Un ejemplo de mucho interés para nosotros resulta ser el caso de película delgada, donde a partir de la teoría de cuerpo descrita anteriormente se toma el Γ -límite cuando el espesor tiende a cero (ver [5] y [11]). La teoría resultante es una relajación de la teoría de cuerpo y por lo tanto sus estados de energía cero cambian. Dicho resultado se enuncia a continuación:

Proposición 2. Sea $\{e^1, e^2, e^3\}$ base ortonormal de \mathbb{R}^3 y $\Omega_h = \Omega \times [0, h]$, con $\Omega \subset \langle e^1, e^2 \rangle$, si f satisface (1) y $y^h \in W^{2,2}(\Omega_1, \mathbb{R}^3)$ un mínimo de (9) para Ω_h con condiciones de frontera y(x) = Ax sobre $\partial\Omega \times (0, h)$ y $A = (\mathbf{a}^1 | \mathbf{a}^2 | \mathbf{a}^3)$, entonces existe una subsucesión de minimizantes de (9) (llamada igual) tal que si $h \to 0$

$$\left. \begin{array}{ccc} D_p^2 y^h & \rightarrow D_p^2 \bar{y} \\ \frac{1}{h} D_p^2 y^h_{,3} & \rightarrow D_p \bar{b} \\ \frac{1}{h^2} y^h_{,33} & \rightarrow 0 \end{array} \right\} \ en \ L^2(\Omega).$$

Donde $D_p y^h = (y_{,1}^h, y_{,2}^h, 0)$ (análogo para los demás). (\bar{y}, \bar{b}) no dependen de x_3 y minimizan la siguiente energía límite

$$e[y,\theta] = \int_{\Omega} \eta(|D_p^2 y|^2 + 2|D_p b|^2) + f(y_1|y_2|b) \, dx_1 dx_2, \qquad \begin{array}{l} (y,b) \in W^{2,2}(\Omega,\mathbb{R}^3) \times W^{1,2}(\Omega,\mathbb{R}^3) \\ y(x_1,x_2) = \mathbf{a}^1 x_1 + \mathbf{a}^2 x_2 \\ b(x_1,x_2) = \mathbf{a}^3 \end{array}$$

Al despreciar la energía superficial en película delgada, el funcional a resolver es

$$\phi_t[[y_{,1}|y_{,2}|b],\theta] = \int_{\Omega} f(y_{,1}|y_{,2}|b) \, dx_1 dx_2.$$

Este funcional límite sigue minimizandose por los elementos de K_{θ} , ya que estos minimizan el problema con dominio Ω_h para todo h > 0. Por ello (y, b) es mínimo de ϕ_t si $D_p y + b \otimes e^3 \in K_{\theta}$. De este modo, si $A, B \in K_{\theta}$ por la proposición 1 el siguiente resultado es inmediato.

Proposición 3. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ abierto, conexo. Si $(y, b) \in W^{1,\infty}(\Omega, \mathbb{R}^3) \times L^{\infty}(\Omega, \mathbb{R}^3)$ satisface que

$$[\nabla y(x)|b] = \begin{cases} A & \Omega_A & c.d. \\ B & \Omega_B & c.d. \end{cases}$$

donde $A, B \in M_{3\times 3}(\mathbb{R})$ y Ω_A , Ω_B son conjuntos disjuntos medibles tal que $\Omega = \Omega_A \cup \Omega_B$ con meas $\Omega_A > 0$ y meas $\Omega_B > 0$. Entonces

(10)
$$A - B = a \otimes n + c \otimes e^3$$

Para algunos $a, c \in \mathbb{R}^3$, $n \in S^2 \cap \{e^3\}^{\perp}$, además

(11)
$$y(x) = y_0 + [B^1|B^2]x + \beta(x)a, \quad x \in \Omega$$

(12)
$$b = (B^3 + c\chi_A) \otimes e^3$$

donde $y_0 \in \mathbb{R}^3$, $y_0 \cdot a = 0$, $\beta \in W^{1,\infty}(\Omega, \mathbb{R})$ tal que $\nabla \beta(x) = \chi_A n$, casi donde sea en Ω .



Con esto resulta claro que las juntas dobles y los laminados simples siguen existiendo, pero al ser (10) menos restrictiva que (7), pueden existir extructuras más complejas en película delgada que en la teoría de cuerpo ya que la tercera fila de los elementos de K_{θ} no tiene relación con la primera y segunda como pasaba en la teoría de cuerpo, esto es evidente en la condición (12).

2. Modelo

Partiendo de las ideas anteriores proponemos ahora el modelo concreto a estudiar. Primero supondremos que estamos en el régimen de elasticidad lineal en película delgada, es decir propondremos deformaciones pequeñas^{††} y rotaciones infinitesimales

(13)
$$F = \mathbf{1} + H, \quad |H| << 1$$

(14) Para toda $Q \in SO(3)$, $Q \sim 1 + W$, con W matriz antisimétrica y , |W| << 1

Así, los funcionales para la densidad de energía que se usarán en el caso lineal deben satisfacer

 $\phi_{tl}(H+W,\theta) = \phi_{tl}(H,\theta)$ para toda W antisimétrica,

(15) Por lo tanto
$$\phi_{tl}(H,\theta) = \phi_{tl}(E(H),\theta), \quad E(H) = \frac{H^i + H^{iT}}{2}$$

El papel del conjunto de los estados martensíticos Λ se reemplaza por

$$\Lambda_l = \{ A \in M_{3 \times 3}(\mathbb{R}) | \text{ existe } U_i \in \Lambda \text{ t.q. } A = E(U_i) - \mathbf{1} \}$$

El estado Austenítico se representa ahora por la matriz nula y K_{θ} se sustituye por

(16)
$$K_{\theta l} = \{ A \in M_{3 \times 3}(\mathbb{R}) | \text{ exista } C \in \mathcal{L}_{\theta} \text{ y } W \text{ antisimétrica t.q. } A = C + W \}$$

 \cos

$$\mathbf{L}_{\theta} = \begin{cases} 0 & \text{si } \theta > \theta_c \\ \Lambda_l \cup \{0\} & \text{si } \theta = \theta_c \\ \Lambda_l & \text{si } \theta < \theta_c \end{cases}$$

Definición 1. Llamemos \mathscr{B} al conjunto de estados minimizantes contenido en \mathcal{I}_{θ} tal que para todo $M \in \mathscr{B}$ existe $N \in \mathscr{B}$ con el que forman una transición en película delgada.

 \mathscr{B} tiene un número finito de elementos. Además se identificará la región ocupada por el estado $U_i \in \mathscr{B}$ dentro de Ω por una función indicadora, es decir

$$\chi_i(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } E(\nabla y(x)) = U_i \\ 0 & \text{si } E(\nabla y(x)) \neq U_i \end{cases}, \quad x \in \Omega, \ U_i \in \mathscr{B}.$$

 $^{^{\}dagger\dagger}$ Al referirnos el valor absoluto de una matriz o un vector, estamos pensando en la norma de Frobenius es decir, la raíz cuadrada de la suma de los cuadrados de cada una de las entradas.

Por (15) y (16) proponemos el funcional de energía elástica (ver [2] y [3]) como

(17)
$$\phi_{tl}(F,\chi) = 2\mu \int_{\Omega} \left| E(F) - \sum_{U^i \in \mathscr{B}} \chi_i U^i \right|^2 dy \quad \text{para todo } F \in \mathscr{F}.$$

Donde μ es una constante del material (módulo de corte). Por consistencia con la teoría de la elasticidad geométrica lineal pediremos que

(18)
$$\mathscr{F} = \left\{ F \in M_{3\times3} \middle| \begin{array}{c} DetF > 0, \ y \ E(F) \ \text{satisface (en sentido distribucional)} \\ \partial_1^2 E(F)_{22} + \partial_2^2 E(F)_{11} - 2\partial_1\partial_2 E(F)_{12} = 0 \end{array} \right\}$$

Es fácil ver que esta propuesta satisface la condición de crecimiento (1), la propiedad de simetría (15) y además se minimiza en $\mathscr{B} \subset K_{\theta l}$. Para estudiar las perturbaciones de la energía proponemos a la energía superficial como

$$E_{surf}(\chi) = \kappa \sum_{U^i \in \mathscr{B}} \int_{\Omega} |\nabla \chi_i|$$

donde cada sumando es la norma de variación acotada de la función característica, o el perímetro de $\partial \{\chi_i = 1\}$ para $U_i \in \mathscr{B}$ y κ es la energía por unidad de longitud interfacial. Así, nuestro problema se reduce a estudiar la existencia y propiedades de los estados $(y,\chi) \in W^{1,\infty}(\Omega,\mathbb{R}^3) \times [BV(\Omega,\mathbb{R})]^{\#\mathscr{B}}$ tal que $\nabla y \in \mathscr{F}$ y minimizan al funcional

(19)
$$e[y,\chi,\theta] = \phi_{tl}(E(\nabla y),\chi) + E_{surf}(\chi)$$

donde $E(\nabla y)$ es la parte simétrica de ∇y .

3. Juntas dobles en película delgada

En los resultados anteriores se muestran las condiciones necesarias y suficientes para la existencia de juntas dobles en la teoría de cuerpo. Ahora se estudiará el caso de película delgada (elasticidad lineal) para obtener resultados análogos.

Si consideramos una base ortonormal $\{e^1, e^2, e^3\}$ de \mathbb{R}^3 donde e^3 es perpendicular al plano de la película delgada, dadas $U^1, U^2 \in M_{3\times 3}(\mathbb{R})$ tal que $Det U^i > 0$, decimos que forman una transición en película delgada si existe $Q \in SO(3)$, $a, b \in \mathbb{R}^3$ y $n \in S^2 \cap \langle e^1, e^2 \rangle$ tal que

(20)
$$QU^1 - U^2 = a \otimes n + b \otimes e^3$$

Se puede probar que esta condición es equivalente a encontrar $Q \in SO(3)$ y $e \in S^2 \cap < e^1, e^2 >$ tal que

(21)
$$(QU^1 - U^2)e = 0, \quad e \cdot e^3 = 0, \quad e \cdot n = 0$$

Entonces si existen (Q, e) como antes tal que (21) es satisfecha decimos que existe una junta simple en película delgada bajo el régimen de elasticidad geométrica no lineal. La solución a este problema se encuentra con gran detalle en el libro de Battacharya [11]. TRANSICIONES DE FASE EN TEORÍA GEOMÉTRICA LINEAL DE PELÍCULA DELGADA.

3.1. Condiciones necesarias y suficientes para la existencia de juntas simples.

Usando las restricciones (13) y (14) en (20) llegamos a que si $H^1, H^2 \in \mathscr{B}$ y forman una junta simple[§] entonces

(22)
$$H^1 - H^2 + W = a \otimes n + b \otimes e^3$$

Por estar en el régimen de elasticidad geométrica lineal resulta importante la parte simétrica de los tensores, por ello de manera equivalente

(23)
$$E^{1} - E^{2} = \frac{a \otimes n + n \otimes a}{2} + \frac{b \otimes e^{3} + e^{3} \otimes b}{2}$$

(24)
$$S^{1} - S^{2} + W = \frac{a \otimes n - n \otimes a}{2} + \frac{b \otimes e^{3} - e^{3} \otimes b}{2}$$

Donde $E^{i} = (H^{i} + H^{iT})/2$ y $S^{i} = (H^{i} - H^{iT})/2$,

Proposición 4. Sean $E^1, E^2 \in M_{3\times 3}(\mathbb{R})$ simétricas y $\Delta E = E^1 - E^2$, entonces E^1 y E^2 forman una transición en película delgada (elasticidad geométrica lineal) si y sólo si

$$Det_2 \Delta E \equiv (e^{1T} \Delta E e^1)(e^{2T} \Delta E e^2) - (e^{1T} \Delta E e^2)^2 \le 0.$$

Demostración. Supongamos $a = \sum_{i=1}^{3} a_i e^i$, $b = \sum_{i=1}^{3} b_i e^i$ y $e = \alpha e^1 + \beta e^2$ y que las matrices E^i están dadas respecto a la base $\{e_1, e_2, e_3\}$). Con esto (23) se escribe como

$$E^{1} - E^{2} = \left[\frac{\alpha a + a_{1}n + b_{1}e^{3}}{2} \left|\frac{\beta a + a_{2}n + b_{2}e^{3}}{2}\right| \frac{a_{3}n + b_{3}e^{3} + b_{3}e^{3}}{2}\right]$$

donde cada uno de los tres términos dentro de los corchetes cuadrados es el vector columna correspondiente y en conjunto forman la matriz respectiva. Así el sistema de ecuaciones será

(25)
$$\begin{cases} \alpha a_1 = \Delta E_{11} \\ \beta a_2 = \Delta E_{22} \\ b_3 = \Delta E_{33} \end{cases}$$

(26)
$$\begin{cases} \beta a_1 + a_2 \alpha = 2\Delta E_{12} \\ \alpha a_3 + b_1 = 2\Delta E_{13} \\ \beta a_3 + b_2 = 2\Delta E_{23}. \end{cases}$$

Donde $(\Delta E)_{ij} = (E^1 - E^2)_{ij}$.

8

Multiplicando por $\alpha\beta$ la primera ecuación de (26) y usando las primeras dos ecuaciones de (25) tendremos

(27)
$$\beta^2 \Delta E_{11} - 2\beta \alpha \Delta E_{12} + \alpha^2 \Delta E_{22} = 0, \qquad \alpha^2 + \beta^2 = 1.$$

Por ser α,β soluciones reales de las ecuaciones (27₁) y (27₂) se sigue que el discriminante ($Det_2\Delta E$) de (27₁) necesita ser menor o igual a cero.

Ahora bien, si el discriminante de (27_1) se anula es por que $\Delta E_{11} = 0$ ó $\Delta E_{22} = 0$; sin pérdida de generalidad supongamos que ΔE_{22} se anula, en este caso se tiene que

[§]Las juntas simples en película delgada se conocen conexiones de rango dos (ver (22))

$$\mathbf{\Delta E_{22}} = \mathbf{0} \Rightarrow \begin{cases} a = a_1 e^1 + a_3 e^3, & n = \frac{1}{a_1} \begin{pmatrix} \Delta E_{11} \\ 2\Delta E_{12} \\ 0 \end{pmatrix}, & a_1 = \sqrt{4\Delta E_{12}^2 + \Delta E_{11}^2} \\ a = \begin{pmatrix} \Delta E_{11} \\ 2\Delta E_{12} \\ 0 \end{pmatrix} + a_3 e^3, & n = e^1. \end{cases}$$

Cuando el discrimimante es estrictamente menor a cero podemos usar (27) junto con (25) para determinar los valores de a y n, de donde

$$\Delta \mathbf{E_{22}} \neq \mathbf{0} \Rightarrow \begin{cases} a = \begin{pmatrix} \frac{\Delta E_{11}}{\alpha} \\ a_2 \\ 0 \end{pmatrix} + a_3 e^3, \quad n = \begin{pmatrix} \alpha \\ \frac{\Delta E_{22}}{a_2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a_2 = \sqrt{(\Delta E_{22})^2 + k^2} \\ \alpha a_2 = k, \\ k = \left(\Delta E_{12} \pm \sqrt{-Det_2(\Delta E)} \right) \end{cases}$$

En cualquiera de los casos anteriores

$$b = (2\Delta E_{13}, 2\Delta E_{23}, \Delta E_{33})^T - a_3 n^T$$

Notemos que $Det_2(\Delta E)$ es el determinante de la submatriz de 2 × 2 generada al quitar la tercera fila y columna de la matriz ΔE . Por lo tanto en el pegado de película delgada en elasticidad geométrica lineal es conveniente trabajar con las respectivas submatrices de 2 × 2 de E_i .¶

Notemos de la demostración anterior que $a, b \ge W$ se pueden reescribir como

(28)
$$b = (2\Delta E_{13}, 2\Delta E_{23}, \Delta E_{33})^T - a_3 n^T \equiv \tilde{b}^T - a_3 n^T$$

(29)
$$a = (a_1, a_2, 0)^T + a_3 e^{3T} \equiv \tilde{a}^T + a_3 e^{3T}$$

(30)
$$W = \tilde{W} - a_3(n \otimes e^3 - e^3 \otimes n), \quad \tilde{W} = \frac{\tilde{a} \otimes n - n \otimes \tilde{a}}{2} + \frac{\tilde{b} \otimes e^3 - e^3 \otimes \tilde{b}}{2} + S^2 - S^1$$

y que

$$a \otimes n + b \otimes e^3 = \tilde{a} \otimes n + \tilde{b} \otimes e^3 - a_3(n \otimes e^3 - e^3 \otimes n)$$

Una solución admisible se obtiene al escoger $a = \tilde{a}, b = \tilde{b}$ y $W = \tilde{W}$ como en (28), (29) y (30). Notemos que el término eliminado $(-a_3(n \otimes e^3 - e^3 \otimes n))$ es la versión lineal (rotación infinitesimal) de una matriz de rotación por un ángulo a_3 con eje e (recordemos que n, e, e^3 es base ortonormal de \mathbb{R}^3).

4. Determinación de estados martensíticos dada una dirección de corte

En esta sección se determinarán las matrices que representan a los estados martensíticos (y austenítico) desde otro sistema de coordenadas determinado parcialmente por la dirección en la que se "cortará" el material para obtener la película delgada. Posteriormente se encontrará que fases que pueden formar juntas simples y a partir de esto determinar al conjunto \mathcal{B} .

[¶]Esto no puede extenderse al caso de elasticidad geométrica no lineal pues la relación que determina la existencia de juntas simples es una expresión cuadrática de los tensores U_i y aunque sólo nos interese una submatriz de dicha expresión cuadrática, los elementos de las tercera fila de U_i si están involucrados en la submatriz.

4.1. Representantes martensíticos y austeníticos 2-D.

Lo primero por hacer es suponer que dado un material podemos cortarlo (o desbastarlo) en alguna dirección predeterminada para obtener una película delgada. Para ello considere $\{e^x, e^y, e^z\}$ base ortonormal de \mathbb{R}^3 "paralela" a los vectores de la red cristalina del material^{††} y $e^3 \in S^2$ vector normal al plano de corte. Con este vector es posible construir una matriz de rotación Q tal que mande e^z en e^3 ; note que $e^z \times e^3$ es paralelo al eje de rotación de la matriz Q, y que la base

$$\{e^1, e^2, e^3\}$$
 con $e^1 = \frac{e^z \times e^3}{\|e^z \times e^3\|}$ y $e^2 = e^3 \times e^1$

es ortonormal derecha (en el sentido estandar de álgebra lineal). Así una^{‡‡} de las matrices buscadas es $Q = [e^1 | e^2 | e^3]$.

Usando coordenadas polares esféricas con eje polar y azimutal iguales a e^z y e^x respectivamente, e^3 se expresa como

$$e^{3} = \begin{pmatrix} \sin \omega \cos \varphi \\ \sin \omega \sin \varphi \\ \cos \omega \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad Q = \begin{pmatrix} -\sin \varphi & -\cos \omega \cos \varphi & \sin \omega \cos \varphi \\ \cos \varphi & -\cos \omega \sin \varphi & \sin \omega \sin \varphi \\ 0 & \sin \omega & \cos \omega \end{pmatrix}, \quad (\omega, \varphi) \in (0, \pi] \times [0, 2\pi)$$

Los estados martensíticos en la transformación cúbico a tetragonal están dados por

(31)
$$U^{i} = (1+\epsilon)I - 3e^{i} \otimes e^{i} \quad \Rightarrow \quad H^{i} = \epsilon(I - 3e^{i} \otimes e^{i})$$

donde e^i son los elementos de la base canónica. Observemos que $H^x + H^y + H^z = 0$. Además el estado austenítico se representa por

$$U^A = I \quad \Rightarrow \quad H^A = 0.$$

La transformación de similitud de H^i generada por Q es

$$\bar{H}^i = Q^T H^i Q = \epsilon \left(I - 3Q^T e^i \otimes Q^T e^i \right).$$

Por ser una transformación de similitud de matrices simétricas se sigue cumpliendo que

$$\bar{H}^x + \bar{H}^y + \bar{H}^z = 0, \quad \& \quad \bar{H}^{iT} = \bar{H}^i \quad \text{para toda } i \in \{x, y, z, A\}.$$

Con esto las ecuaciones (23) y (24) se reducen a

(32)
$$\bar{H}^{i} - \bar{H}^{j} = \frac{a^{ij} \otimes n^{ij} + n^{ij} \otimes a^{ij}}{2} + \frac{b^{ij} \otimes e^{3} + e^{3} \otimes b^{ij}}{2}$$

(33)
$$W^{ij} = \frac{a^{ij} \otimes n^{ij} - n^{ij} \otimes a^{ij}}{2} + \frac{b^{ij} \otimes e^3 - e^3 \otimes b^{ij}}{2}$$

para $i \neq j \in i, j \in G \equiv \{x, y, z, A\}.$

Si tomamos la submatriz de 2×2 adecuada (por la proposición 4) de cada \overline{H}^i tendremos que los representantes^{††††} de las fases martensíticas y austenítica para la dirección de corte e^3 son

^{††}Esta base será llamada base canónica.

 $^{{}^{\}ddagger \ddagger}Q$ no es única pues cualquier rotación con eje de giro e^3 aplicada a esta matriz sigue teniendo la misma función.

^{††††}Para facilitar la escritura dichas submatrices se llamarán H^i .

$$\begin{split} H^x &= \epsilon \begin{pmatrix} 1 - 3\sin^2\varphi & -3\cos\omega\sin\varphi\cos\varphi \\ -3\cos\omega\sin\varphi\cos\varphi & 1 - 3\cos^2\omega\cos^2\varphi \end{pmatrix}, \ H^y &= \epsilon \begin{pmatrix} 1 - 3\cos^2\varphi & 3\cos\omega\sin\varphi\cos\varphi \\ 3\cos\omega\sin\varphi\cos\varphi & 1 - 3\cos^2\omega\sin^2\varphi \end{pmatrix} \\ H^z &= \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 - 3\sin^2\omega \end{pmatrix}, \quad H^A &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{split}$$

4.2. Determinación de juntas dobles y el conjunto \mathscr{B} .

Resulta claro que los estados martensíticos tienen conexión en película delgada con el estado austenítico cuando el determinante de los representantes martensíticos es menor a cero pues $H^A = 0$, *i.e.* existe conexión entre la fase martensítica H^i con la austenítica H^A si

$$\|e^{3} \cdot e^{i}\| \leq \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

FIGURA 2. a) La región sombreada representa los valores de los ángulos ω, φ donde las tres fases martensíticas tienen conexión con la fase austenítica. b) Cada punto en esta región representa la dirección de corte dada por los ángulos ω, φ de la imagen a).

Es fácil probar que todos los estados martensíticos tienen conexión de rango uno entre ellos para cualquier dirección de corte. Con ello concluimos que el conjunto de estados que pueden formar transiciones en película delgada es

$$\mathscr{B} = \begin{cases} \{\bar{H}^A\} & \text{si } \theta > \theta_c \\ \{\bar{H}^x, \bar{H}^y, \bar{H}^z, \bar{H}^A\} & \text{si } \theta = \theta_c \\ \{\bar{H}^x, \bar{H}^y, \bar{H}^z\} & \text{si } \theta < \theta_c \end{cases}$$

Por ello a partir de ahora en todo el análisis posterior se considerará $\theta \leq \theta_c$ pues en el caso $\theta > \theta_c$ sólo tenemos una fase que al menos en teoría geométrica lineal no da más estructuras que las triviales.

12 TRANSICIONES DE FASE EN TEORÍA GEOMÉTRICA LINEAL DE PELÍCULA DELGADA.

4.3. Ecuación para soluciones elásticas.

Por la forma en que se propuso al funcional ϕ_{tl} en (17) la energía elástica puede desacoplarse en dos contribuciones, una debida a la tercera columna de F que esta asocida al vector de Cosserat^{§§} y otra asociada a la deformación 2D de modo que

$$\phi_{tl}(F,\chi) = 2\mu \int_{\Omega} \left| L(F) - \sum_{U^i \in \mathscr{B}} \chi_i L(U^i) \right|^2 dy + 4\mu \int_{\Omega} \left| E(F)_{3\cdot} - \sum_{U^i \in \mathscr{B}} \chi_i U_{3\cdot}^i \right|^2 dy \quad \text{para todo } F \in \mathscr{F}$$

Con $L : M_{3\times3}(\mathbb{R}) \to M_{2\times2}(\mathbb{R})$ dado por $L(M)_{ij} = (M_{ij} + M_{ji})/2$ para $i, j \in \{1, 2\}$ y $M \in M_{3\times3}(\mathbb{R})$. Mientras que la notación M_k . representa al k-ésimo vector columna de M. De este modo los minimizantes de la energía elástica son aquellos donde

(34)
$$L(F) = \sum_{U^i \in \mathscr{B}} \chi_i L(U^i),$$

(35)
$$E(F)_{3\cdot} = \sum_{U^i \in \mathscr{B}} \chi_i U_3^i$$

Por la proposición 4 sabemos que la condición de pegado depende únicamente de las matrices $L(U^i)$ y no de la tercera columna de U^i , entonces resolver el problema a energía elástica cero es determinar las funciones indicadoras χ_i para cada estado $U^i \in \mathscr{B}$ de la ecuación (34), y con ellas $E(F)_3$. queda completamente determinado. Para transiciones cúbico tetragonal las matrices $L(U^i)$ son las matrices H^i ; además

(36)
$$\chi_{\theta_c}(\theta)\chi_A + \chi_x + \chi_y + \chi_z = 1$$

(37)
$$H^x + H^y + H^z = 0$$

donde $\chi_{\theta_c}(\theta_c) = 1$ y $\chi_{\theta_c}(\theta) = 0$ para $\theta < \theta_c$. Con esto resulta que

$$L(F) = (2H^{x} + H^{y})\chi_{x} + (2H^{y} + H^{x})\chi_{y} + (H^{x} + H^{y})\chi_{A}\chi_{\theta_{c}}(\theta) - (H^{x} + H^{y}).$$

Dado que $F \in \mathscr{F}$ (ver (18)), a una temperatura $\theta \leq \theta_c$ las soluciones al problema de energía elástica nula satisfacen en sentido de distribuciones

$$\partial_{11}^2 L(F)_{22} + \partial_{22}^2 L(F)_{11} - 2\partial_1 \partial_2 L(F)_{12} = 0.$$

Al sustituir las expresiones de H^i tenemos

(38)
$$(\sin\varphi\partial_2 - \cos\omega\cos\varphi\partial_1)^2\chi_x + (\cos\varphi\partial_2 + \cos\omega\sin\varphi\partial_1)^2\chi_y - \sin^2\omega\partial_{11}^2(\chi_x + \chi_y) \\ -\frac{1}{3}\chi_{\theta_c}(\theta) \left[(2 - 3\cos^2\omega)\partial_{11}^2 - \partial_{22}^2 \right]\chi_A = 0.$$

Las soluciones a la ecuación (38) determinan todos los posibles patrones admisibles al problema para las distintas direcciones de corte determinadas por $\omega \neq \varphi$. A pesar de que (38) es una ecuación diferencial parcial lineal de segundo orden, el problema es altamente no lineal pues las funciones incógnitas son funciones indicadoras, de modo que la suma de dos soluciones al problema no necesariamente es una solución.

^{§§}Ver [14] para una definición precisa de este concepto.

4.4. Resultado de rigidez parcial.

Algunas direcciones de corte "fáciles" de analizar es la familia $\{110\} \equiv \{[110], [101], [011], [1\bar{1}0], [10\bar{1}], [01\bar{1}], [01\bar{1}]\}^{\P}$ Notemos que en esta familia, las fases martensíticas se unen con la austenítica. Separando en casos tenemos

•[011], [011]. En estas direcciones $\varphi = \frac{\pi}{2}$ y $\omega = \frac{\pi}{4}$ o $\frac{3\pi}{4}$, esto implica que $H^2 = H^3 = -2H^1$, es decir los estados martensíticos 2 y 3 son "indistinguibles" (a este nivel) y con ello

$$(38) \rightarrow \left[\partial_{22}^2 - \frac{1}{2}\partial_{11}^2\right] \left(\chi_x + \frac{1}{3}\chi_{\theta_c}(\theta)\chi_A\right) = 0.$$

•[101], [101]. En este caso $\varphi = 0$ y $\omega = \frac{\pi}{4}$ o $\frac{3\pi}{4}$, esto implica que $H^1 = H^3 = -2H^2$, es decir los estados martensíticos 1 y 3 son "indistinguibles", entonces

$$(38) \rightarrow \left[\partial_{22}^2 - \frac{1}{2}\partial_{11}^2\right] \left(\chi_y + \frac{1}{3}\chi_{\theta_c}(\theta)\chi_A\right) = 0.$$

•[110], [110]. Aquí $\varphi = \frac{\pi}{4}$ o $\frac{7\pi}{4}$ y $\omega = \frac{\pi}{2}$; usando esto y el hecho que $\chi_z = 1 - \chi_x - \chi_y - \chi_{\theta_c}(\theta)\chi_A$ se tiene

$$(38) \rightarrow \left[\partial_{11}^2 - \frac{1}{2}\partial_{22}^2\right] \left(\chi_z + \frac{1}{3}\chi_{\theta_c}(\theta)\chi_A\right) = 0.$$

En este caso sucede algo análogo pues $H^1 = H^2 = -2H^3$, *i.e.* los estados martensíticos 1 y 2 son "indistinguibles".

En cualquiera de los tres casos tenemos ecuaciones de onda en sentido distribucional. Con la proposición 4 es inmediato ver que las características en cada ecuación son perpendiculares a las transiciones (el vector n de las transiciones es paralelo a las características) entre la fase martensítica distinguible i y cualquiera de las otras dos fases martensíticas indistinguibles. El hecho de que haya a lo más dos características justifica el que existan a lo más dos direcciones normales en las cuales se pueden formar juntas simples entre dos fases.

Sobre esta familia de direcciones de corte se pueden determinar resultados de rigidez parcial. Como ejemplo analicemos el tercer caso, para esto probaremos un resultado que nos será de utilidad.

Lema 1. Sea $f: \Omega \subset \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ función no constante, $g_1, g_2: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ y P_{ξ}, P_{η} las proyecciones en las coordendas ξ y η tales que $f^{-1}[\{0\}] \cup f^{-1}[\{1\}] = \Omega$ y $f(\xi, \eta) = g_1 \circ P_{\xi}(\xi, \eta) + g_2 \circ P_{\eta}(\xi, \eta)$ entonces g_1 ó g_2 son constantes.

Demostración. Supongamos que la conclusión es falsa, es decir g_1 y g_2 no son constantes, entonces cada una de ellas toma al menos dos valores *i.e.* existen $c_+, c_-, d_+, d_- \in \mathbb{R}$ tal que

$$\Omega \cap \left[(g_1^{-1}[c_+] \cup g_1^{-1}[c_-]) \times \mathbb{R} \right) = \Omega, \quad \Omega \cap \left[(g_2^{-1}[d_+] \cup g_2^{-1}[d_-]) \times \mathbb{R} \right) = \Omega$$

Entonces

(39)
$$g_1 \circ P_{\xi}(\xi, \eta) = c_+ \chi_{\Omega \cap (g_1^{-1}[c_+] \times \mathbb{R})}(\xi, \eta) + c_- \chi_{\Omega \cap (g_1^{-1}[c_-] \times \mathbb{R})}(\xi, \eta)$$

(40)
$$g_2 \circ P_\eta(\xi,\eta) = d_+ \chi_{\Omega \cap (\mathbb{R} \times g_2^{-1}[d_+])}(\xi,\eta) + d_- \chi_{\Omega \cap (\mathbb{R} \times g_2^{-1}[d_-])}(\xi,\eta)$$

^{¶¶}Esta clase de equivalencia se hereda de la simetría cúbica del problema. Para facilitar la notación se usará $\overline{1} = -1$, además de que se considera que la dirección $[110] = [\overline{1}\overline{1}0]$ pues son paralelos, algo análogo sucede en los demás casos.

De este modo

$$\begin{split} f(\xi,\eta) &= (c_+ + d_+)\chi_{\Omega \cap (g_1^{-1}[c_+] \times \mathbb{R}) \cap (\mathbb{R} \times g_2^{-1}[d_+])} + (c_+ + d_-)\chi_{\Omega \cap (g_1^{-1}[c_+] \times \mathbb{R}) \cap (\mathbb{R} \times g_2^{-1}[d_-])} \\ &+ (c_- + d_+)\chi_{\Omega \cap (g_1^{-1}[c_-] \times \mathbb{R}) \cap (\mathbb{R} \times g_2^{-1}[d_+])} + (c_- + d_-)\chi_{\Omega \cap (g_1^{-1}[c_-] \times \mathbb{R}) \cap (\mathbb{R} \times g_2^{-1}[d_-])} \end{split}$$

Como f toma los valores 0 y 1, al menos uno de los factores de las funciones indicadoras debe ser 0 pero al anularse sólo una, la función puede tomar cuatro valores. Para reducir el número es necesario que dos factores de las indicadoras se anulen, además como g_1 y g_2 no son constantes tenemos que $\{c_+ = -d_+, c_- = -d_-\}$ o $\{c_+ = -d_-, c_- = -d_+\}$, en ambos casos, es inmediato ver que los valores que toma f son 0, $d_+ - d_-$ y $d_- - d_+$ *i.e.* f es idénticamente cero o toma 3 valores que en cualquier caso es una contradicción.

Proposición 5. Sean $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ abierto y conexo y e^3 (dirección de corte) paralela al vector [110]. Si existen conjuntos disjuntos $\Omega_{xy}, \Omega_z \subset \Omega$ de medida positiva y $\Omega_A \subset \Omega$ (disjunto a los dos conjuntos anteriores) con $\Omega_A \neq \emptyset$ sólo si $\theta = \theta_c$ tal que satisfacen $\Omega_{xy} \cup \Omega_z \cup \Omega_A = \Omega$. Entonces los patrones de energía elástica nula son localmente laminados simples múltiples.

Con laminados simples múltiples nos referimos a que las soluciones son estructuras que dependen únicamente de una dirección y que pueden tomar (en este caso) a lo más cuatro valores.



FIGURA 3. Posibles configuraciones mínimas sugeridas por la proposición anterior.

Demostración. Sea $(x_1^0, x_2^0) \in \Omega$ y defina el cambio de variables dado por $\xi = x_1 + \sqrt{2}x_2$ y $\eta = x_1 - \sqrt{2}x_2$, con este cambio la ecuación (38) se ve como

$$\partial_{\xi}\partial_{\eta}\left(\chi_{z}+\frac{1}{3}\chi_{\theta_{c}}(\theta)\chi_{A}\right)(\xi,\eta)=0.$$

Si $(\xi^0, \eta^0) = (\xi(x_1^0, x_2^0), \eta(x_1^0, x_2^0))$ por ser Ω abierto exite $\delta > 0$ tal que $B_{\delta}(\xi^0, \eta^0) \subset \Omega$, entonces podemos escoger h_{ξ} y h_{η} mayores a cero tal que $h_{\xi}^2 + h_{\eta}^2 < h^2$. Integrando sobre la dirección ξ una longitud h_{ξ} y sobre η una cantidad h_{η} desde el punto (ξ^0, η^0) encontramos:

(41)
$$\partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta}^{h_{\eta}} \left(\chi_{z} + \frac{1}{3} \chi_{\theta_{c}}(\theta) \chi_{A} \right) (\xi^{0}, \eta^{0}) = 0$$

donde la diferencia finita $\partial_{\xi}^{h_{\xi}} f(\xi,\eta) = f(\xi+h_{\xi},\eta) - f(\xi,\eta)$ para toda f medible. Es decir $\chi_z(\xi,\eta) + \frac{1}{3}\chi_{\theta_c}(\theta)\chi_A(\xi,\eta)$ satisface (localmente) la igualdad del paralelogramo para la ecuación de onda (ver [12]). Por ser (x_1^0, x_2^0) arbitrario esta propiedad se satisface para todo punto en Ω . Por otra parte (41) se puede escribir como

(42)
$$\partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta}^{h_{\eta}} \chi_{z} = -\frac{1}{3} \chi_{\theta_{c}}(\theta) \partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta}^{h_{\eta}} \chi_{A}.$$

14

Dado que

$$\chi_z, \ \chi_A \in \{0,1\} \quad \Rightarrow \partial_\eta^{h_\eta} \chi_A, \ \partial_\eta^{h_\eta} \chi_z \in \{-1,0,1\} \quad \Rightarrow \partial_\xi^{h_\xi} \partial_\eta^{h_\eta} \chi_z, \ \partial_\xi^{h_\xi} \partial_\eta^{h_\eta} \chi_A \in \{-2,-1,0,1,2\}$$

y el factor 1/3 del segundo miembro de (42) implican que la única solución admisible es que por separado χ_z y χ_A sean soluciones de la ecuación de onda homogénea. Más aún, dado que χ_z se escribe en términos de χ_x, χ_y y χ_A concluimos que

$$\partial_{\xi}^{h_{\xi}}\partial_{\eta}^{h_{\eta}}\chi_{z} = 0, \qquad \chi_{\theta_{c}}(\theta)\partial_{\xi}^{h_{\xi}}\partial_{\eta}^{h_{\eta}}\chi_{A} = 0, \qquad \partial_{\xi}^{h_{\xi}}\partial_{\eta}^{h_{\eta}}(\chi_{x} + \chi_{y}) = \partial_{\xi}^{h_{\xi}}\partial_{\eta}^{h_{\eta}}(\chi_{x+y}) = 0$$

Donde χ_{x+y} es la indicadora de la fase $x \neq y$ que son indistinguibles (a este nivel)^{†††}. Por ser χ_z, χ_{xy} y $\chi_{\theta_c}(\theta)\chi_A$ soluciones a la ecuación de onda en sentido distribucional, es bien sabido que cada una de ellas satisface la fórmula de d'Alambert es decir

- (43) $\chi_z(\xi,\eta) = -f_z(\xi) + g_z(\eta)$
- (44) $\chi_{xy}(\xi,\eta) = f_{xy}(\xi) + g_{xy}(\eta)$
- (45) $\chi_A(\xi,\eta) = -f_A(\xi) + g_A(\eta)$

Por el lema 1

$\chi_z(\xi,\eta) = f_z(\xi)$	0	$\chi_z(\xi,\eta) = g_z(\eta)$
$\chi_{xy}(\xi,\eta) = f_{xy}(\xi)$	0	$\chi_{xy}(\xi,\eta) = g_{xy}(\eta)$
$\chi_A(\xi,\eta) = f_A(\xi)$	0	$\chi_A(\xi,\eta) = g_A(\eta)$

El tipo de conjuntos donde cualquier indicadora toma el valor 1 ó 0 (*i.e.* juntas admisibles) se obtienen a partir de las características $\xi = \xi_0$ y $\eta = \eta_0$ y sus cruces, pero debido al lema 1 ó la igualdad del paralelogramo el único tipo de juntas admisibles son las simples



Así queda determinada la forma de las funciones indicadoras; con ello y las ecuaciones (34) y (35) se puede determinar la parte simétrica de las estructuras mínimas de ϕ_{tl} .

4.5. Estabilidad de laminados simples ante perturbaciones pequeñas de la energía.

Hasta este momento hemos estudiado la energía elástica para la familia de corte {110} y se encontró el tipo de estructuras que la anulan (recordemos que ϕ_{tl} no es semicontinuo inferiormente). En esta sección mostraremos que este tipo de estructuras son estables ante perturbaciones pequeñas de la energía siempre y cuando consideramos el término de energía superficial. Esta demostración es una adaptación de las ideas utilizadas en [3] y [6].

Lo primero por hacer será adimensionalizar la expresión para la energía. Por ser Ω acotado llamaremos l al diámetro de la muestra Ω . Además notemos que la deformación está dada en términos de ϵ *i.e.* lo usaremos como unidad de medida de la deformación. Con esto es claro que

- $2\mu\epsilon^2$ tiene unidades de energía por unidad de área.
- κ tiene unidades de energía por unidad de longitud.

^{†††}En este caso la suma de dos indicadoras es una indicadora pues son sobre conjuntos disjuntos.

Por tanto

$$\gamma = \frac{\kappa l}{2\mu\epsilon^2 l^2} = \frac{\kappa}{2\mu\epsilon^2 l} \quad \text{ es adimensional}.$$

Kohn y Müller [13] mostraron que si $\gamma \ll 1^{\ddagger\ddagger}$ las estructuras admisibles para pequeñas energías son aquellas donde existen ramificaciones (un ejemplo de estas estructuras puede verse en [2] [6]). En este caso la energía escala como $e[y, \chi, \theta] \sim (\kappa l^2)^{2/3} (2\epsilon^2 l^3 \mu)$ para la teoría de cuerpo, por ello proponemos el siguiente re-escalamiento en las variables de (19).

$$\begin{aligned} x &= l\tilde{x} & E(F) = \epsilon \tilde{E}(F) & e[y,\chi,\theta] = \gamma^{2/3} 2\mu \epsilon^2 l^2 \tilde{e}[y,\chi,\theta] \\ \phi_{tl} &= 2\mu \epsilon^2 l^2 \tilde{\phi}_{tl} & E_{surf} = \kappa l \tilde{E}_{surf} \end{aligned}$$

De lo anterior es claro que $e[y, \chi, \theta] \ll 1$ pues la energía del sistema $\tilde{e}[y, \chi, \theta]$ es acotada, $\gamma \ll 1$, $\epsilon \ll 1$ y μL^2 son fijos para una muestra del material a analizar.

Si omitimos las tildes en cada término (19) se reescribe como

(46)
$$e[y,\chi,\theta] = \gamma^{1/3} E_{surf} + \gamma^{-2/3} \phi_{tl}$$

Donde

$$E_{surf} = \sum_{U^i \in \mathscr{B}'} \int_{\Omega} \left| \nabla \chi_i \right| dx, \phi \quad {}_{tl}(F, \chi) = \int_{\Omega} \left| E(F) - \sum_{U^i \in \mathscr{B}'} \chi_i U^i \right|^2 dx, \quad \mathscr{B}' = \{ \epsilon^{-1} M : M \in \mathscr{B} \}.$$

Al igual que en la subsección 4.3, el funcional de energía elástica se puede dividir en dos contribuciones, una debida al vector de Cosserat y otra asociada a la deformación 2D; esta separación no afecta a la energía de superficie pues ella sólo depende las funciones indicadoras.

$$e[y,\chi,\theta] = \gamma^{1/3} \sum_{U^i \in \mathscr{B}'} \int_{\Omega} |\nabla \chi_i| dx + \gamma^{-2/3} \int_{\Omega} \left| L(\nabla y) - \sum_{U^i \in \mathscr{B}'} \chi_i L(U^i) \right|^2 dx + \gamma^{-2/3} \int_{\Omega} \left| E(\nabla y)_{3\cdot} - \sum_{U^i \in \mathscr{B}'} \chi_i U_{3\cdot}^i \right|^2 dx$$

Observe que los primeros dos sumandos representan al problema 2D y que una vez que se determine la estructura y estabilidad de dicho problema, el término debido al vector de Cosserat queda completamente determinado. En base a esto llamaremos

$$e_{elast} = \gamma^{-2/3} \int_{\Omega} \left| L(\nabla y) - \sum_{U^i \in \mathscr{B}'} \chi_i L(U^i) \right|^2 dx$$

Para empezar el análisis probaremos una serie de resultados que nos aseguran que en energías pequeñas las soluciones tipo onda (es decir laminados simples), prevalecen a primer orden para perturbaciones de la energía.

Lema 2. Para todo $(x_1, x_2) \in \Omega$ existen h > 0, h_{ξ} , $h_{\eta} > 0$ con $h_{\xi}^2 + h_{\eta}^2 \leq h^2$ $((\xi, \eta)$ dadas como en la proposición 5) y funciones $\rho_{11}, \rho_{12}, \rho_{22} : B_h(\xi, \eta) \to \mathbb{R}$ tal que

$$\left(\partial_{11}^2 - \frac{1}{2}\partial_{22}^2\right)\tilde{\chi} = \partial_{11}^2\rho_{22} + \partial_{22}^2\rho_{11} + \partial_1\partial_2\rho_{12} \quad en \ D'(B_h(\xi,\eta)) \quad y \ \int_{B_h(\xi,\eta)} \rho_{22}^2 + \rho_{11}^2 + \rho_{12}^2 \, dx \lesssim e_{elast}$$

16

 $^{^{\}ddagger\ddagger\ddagger}\gamma << 1$ es el régimen donde la energía por unidad de longitud contribuye mucho menos que la energía elástica.

Demostración. Observemos que en la dirección de corte [110] se cumple

$$\sum_{U_i \in \mathscr{B}'} \chi_i L(U_i) = \begin{pmatrix} \tilde{\chi} & 0\\ 0 & -2\tilde{\chi} \end{pmatrix}, \quad \text{con } \tilde{\chi} = \frac{1}{2} (3\chi_z + \chi_A - 1) = \chi_z - \frac{1}{2} (\chi_x + \chi_y)$$

Por la ecuación de consistencia $(\nabla y \in \mathscr{F})$ tenemos

$$\left(\partial_{11}^2 - \frac{1}{2}\partial_{22}^2\right)\tilde{\chi} = \partial_{11}^2 \left(\frac{L(\nabla y)_{22} + 2\tilde{\chi}}{2}\right) + \partial_{22}^2 \left(\frac{L(\nabla y)_{11} - \tilde{\chi}}{2}\right) - \partial_1 \partial_2 L(\nabla y)_{12}$$

Al escoger $2\rho_{22} = L(\nabla y)_{22} + 2\tilde{\chi}, \ 2\rho_{11} = L(\nabla y)_{11} - \tilde{\chi} \text{ y } \rho_{12} = -L(\nabla y)_{12}$ la afirmación se sigue trivialmente pues $e[y, \chi, \theta] << 1.$

Con esto tenemos un control H^{-2} sobre la función $\tilde{\chi}$. Podemos mejorar este control hasta H^{-1} en términos de diferencias finitas de la función indicadora.

Lema 3. Para todo $(x_1, x_2) \in \Omega$ existen h > 0, h_{ξ} , $h_{\eta} > 0$ con $h_{\xi}^2 + h_{\eta}^2 \leq h^2$ $((\xi, \eta)$ dadas como en la proposición 5) y funciones $j_{11}, j_{22}, j : B_r(\xi, \eta) \to \mathbb{R}$ tal que

$$\partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta}^{h_{\eta}} \tilde{\chi} = \partial_{\xi} j_{11} + \partial_{\eta} j_{22} + j \quad en \ D'(B_h(\xi, \eta)) \quad y \quad \int_{B_h(\xi, \eta)} j_{11}^2 + j_{22}^2 + j^2 dx \lesssim e_{elast}$$

Demostración. Sea $(x_1^0, x_2^0) \in \Omega$, al usar el cambio de variables (ξ, η) descrita en la proposición 5, el punto se transforma en (ξ^0, η^0) . En una vecindad del punto suficientemente pequeña tendremos

$$\partial_{\xi}\partial_{\eta}\left(\tilde{\chi}+\rho_{11}-\frac{\rho_{22}}{2}\right)(\xi^{0}+\xi,\eta^{0}+\eta) = \left(\partial_{\xi\xi}^{2}\left(\frac{\rho_{22}+2\rho_{11}-\sqrt{2}\rho_{12}}{4}\right)+\partial_{\eta\eta}^{2}\left(\frac{\rho_{22}+2\rho_{11}+\sqrt{2}\rho_{12}}{4}\right)\right)(\xi^{0}+\xi,\eta^{0}+\eta)$$

Por la proposición 5 podemos integrar sobre una distancia h_{ξ} en la dirección ξ y una cantidad h_{η} en la dirección η de donde

$$\partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta}^{h_{\eta}} \left(\tilde{\chi} + \rho_{11} - \frac{\rho_{22}}{2} \right) = \quad \partial_{\xi} \int_{0}^{h_{\eta}} \partial_{\xi^{0}}^{h_{\xi}} \left(\frac{\rho_{22} + 2\rho_{11} - \sqrt{2}\rho_{12}}{4} \right) (\cdot, \eta^{0} + \eta) d\eta \\ + \partial_{\eta} \int_{0}^{h_{\xi}} \partial_{\eta^{0}}^{h_{\eta}} \left(\frac{\rho_{22} + 2\rho_{11} + \sqrt{2}\rho_{12}}{4} \right) (\xi^{0} + \xi, \cdot) d\xi.$$

Terminamos la demostración al definir

$$j_{11} = \int_{0}^{h_{\eta}} \partial_{\xi^{0}}^{h_{\xi}} \left(\frac{\rho_{22} + 2\rho_{11} - \sqrt{2}\rho_{12}}{4} \right) (\cdot, \eta^{0} + \eta) d\eta, \quad j = \partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta^{\eta}}^{h_{\eta}} \left(\frac{\rho_{22}}{2} - \rho_{11} \right),$$
$$j_{22} = \int_{0}^{h_{\xi}} \partial_{\eta^{0}}^{h_{\eta}} \left(\frac{\rho_{22} + 2\rho_{11} + \sqrt{2}\rho_{12}}{4} \right) (\xi^{0} + \xi, \cdot) d\xi$$

pues el que $||j_{11}||_2^2 + ||j_{22}||_2^2 + ||j||_2^2 \lesssim e_{elast}$ se sigue de la desigualdad de Jensen (renormalizando la integral de línea en las expresiones de j_{11} y j_{22}) y el hecho de que $||\rho_{11}||_2^2 + ||\rho_{22}||_2^2 + ||\rho_{12}||_2^2 \lesssim e_{elast}$.

El siguiente paso es usar una desigualdad de interpolación para acotar la norma $\|\partial_{\xi}^{h_{\xi}}\partial_{\eta}^{h_{\eta}}\tilde{\chi}\|_{L^{1}(B_{r})}$ con $0 < r \leq h$ donde h < 1; esto se logra con el lema 4 de [6] (probada previamente en [3]), la prueba no se realizará pues en ambos trabajos está hecha con detalle, únicamente hacemos notar que la prueba se basa en la siguiente desigualdad de interpolación

$$\int_{B_h} f^{4/3} \le \int_{B_1} |\nabla f| \, dx \, \sup_{B_1} |f| + \int_{B_1} |\nabla^{-1} f| \, dx$$

mostrada [15].

Lema 4. Sea $\gamma \leq 1$. Existe un radio h > 0 tal que

$$\sup_{h_{\xi}|,|h_{\eta}|\leq h} \int_{B_{r}} |\partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta}^{h_{\eta}} \tilde{\chi}| \, d\xi d\eta \lesssim \gamma^{-2/3} e_{elast} + \gamma^{1/3} E_{surf}$$

Lo siguiente por hacer es notar que este tipo de control por medio de la energía se hereda para las funciones indicadoras χ_z y χ_A , el siguiente resultado lo hace más evidente

Lema 5. Para cada $(x_1, x_2) \in \Omega$ exists un radio h > 0 tal que si $|h_{\xi}|, |h_{\eta}| < h$ se tiene

$$\int_{B_h} |\partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta}^{h_{\eta}} \chi_z| \, d\xi d\eta + \int_{B_h} |\partial_{\xi}^{h_{\xi}} \partial_{\eta}^{h_{\eta}} \chi_A| \, d\xi d\eta \lesssim \gamma^{-2/3} e_{elast} + \gamma^{1/3} E_{surf}$$

La demostración de este lema es idéntica a la de la proposición 5 de este trabajo^{††††††}.

El siguiente lema es la demostración de que una función f que cumple la igualdad del paralelogramo se puede expresar como la suma de dos funciones donde cada una depende de una dirección característica. Más aún, si f no satisface la igualdad del paralelogramo pero las segundas diferencias cruzadas son pequeñas entonces f se aproxima por dos funciones que dependen de una sóla variable. De manera precisa

Definición 2. Sea $\{a, b\} \subset \mathbb{R}^3$ una base $y \{a^*, b^*\}$ la base dual. Para cada $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ definimos $f_{a^*} = f(a^* \cdot x)$.

Lema 6. Sean $\{a, b\} \subset \mathbb{R}^2$. Para toda función $f : B_2(0) \subset \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, existe h > 0 y funciones g_{a^*}, g_{b^*} tal que

$$\int_{B_h} |f - g_{a^*} - g_{b^*}| \, dx \le C(a, b, r) \sup_{|h_a|, |h_b| \le 1} \int_{B_1} |\partial_a^{h_a} \partial_b^{h_b} f| \, dx$$

La demostración de este lema se encuentra en detalle en [3] y [6].

Con los lemas anteriores es claro que para energía pequeña tanto χ_A como χ_z se pueden aproximar por la suma de los funciones donde cada una dependen de una de las direcciones características y esta aproximación se controla en L^1 por la energía.

La siguiente colección de resultados son con el fin de mostrar que los laminados simples siguen persistiendo a energías pequeñas. Por simplicidad denotaremos nuevamente al simbolo $d\xi d\eta = dx$ dentro de cada integral.

Lema 7. Existen functiones $\tilde{g}_{a^*}, \tilde{g}_{b^*} : B_1(0) \subset \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ tales que $\tilde{g}_{a^*} \in \{a_1, a_1+1\}, \tilde{g}_{b^*} \in \{a_2, a_2+1\}$ para algunas $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$ y

$$\int_{B_h} |g_{a^*} - \tilde{g}_{a^*}| \, dx \lesssim E, \quad \int_{B_h} |g_{b^*} - \tilde{g}_{b^*}| \, dx \lesssim E,$$

^{††††††}Si se desea más detalle remitimos al lector a la referencia [3].

La demostración es análoga a la presentada en $[3]^{\S\S\S}$. Este teorema se puede interpretar como el hecho de que las funciones g_{a^*} y g_{b^*} se pueden aproximar por otras dos que toman dos valores.

El siguiente resultado hace clara la dicotomía que presentan el estado martensítico χ_z y el austenítico χ_A , pues menciona que alguna de las dos funciones bivaludas encontradas en el lema anterior es casi constante, lo cual implica que los laminados simples existen sobre la dirección determinada por la función restante.

Lema 8. Para g_{a^*} y g_{b^*} podemos encontrar $\tilde{a} \in \mathbb{R}$ tal que:

$$\min\left\{\int_{B_h} |\tilde{g}_{a^*} - \tilde{a}| \, dx, \, \int_{B_h} |\tilde{g}_{b^*} - \tilde{a}| \, dx\right\} \lesssim \left(\int_{B_h} |\chi - \tilde{g}_{b^*} - \tilde{g}_{a^*}|\right)^{1/2} \lesssim E^{1/2}$$

La demostración de este lema es básicamente la misma que la presentada en [3] y [6], con la diferencia que $\chi \in \{0, 1\}^{\P\P\P}$. Con estos últimos resultados podemos concluir lo siguiente

Proposición 6. Sea $\chi = \chi_z$ (ó $\chi = \chi_A$). Entonces existe un radio h > 0 y funciones $f_a, f_b \in \{0, 1\}$ tal que

$$\int_{B_h} |\chi - f_a| \, dx \lesssim E^{1/2} \quad \delta \quad \int_{B_h} |\chi - f_b| \, dx \lesssim E^{1/2}$$

Demostración. Por los lemas 2, 3, 4, 5 y 6 tenemos que

$$\int_{B_h} |\chi - g_{a^*} - g_{b^*}| \, dx \lesssim E \quad \text{con} \quad \chi = \chi_A \text{ ó } \quad \chi = \chi_z$$

Por el lema 1 alguna de las dos funciones g_{a^*} o g_{b^*} es cero, supongamos sin pérdida de generalidad $g_{b^*} = 0$ y que $a, b \in \mathbb{R}^2$ (ver lema 6) son los vectores e^1, e^2 (respectivamente), de manera que $e^i \cdot x = x_i$. Con esto y los lemas 7 y 8 tenemos

$$\int_{B_h} |\chi(x_1, x_2) - g_{e^1}(x_1)| \, dx \lesssim E^{1/2}$$

Si cambiamos la región de integración B_h por $(-h,h)^{2\dagger\dagger\dagger\dagger\dagger}$ y usamos que $|g_{e^1}| \leq 1$ (por lema 7) tendremos

$$\int_{(-h,h)^2} |\chi(x_1,x_2) - g_{e^1}(x_1)|^2 \, dx \lesssim E^{1/2}$$

De análisis funcional sabemos que dada $f \in L^2((-h, h))$ la mejor aproximación que le podemos dar en el subespacio de funciones constantes es el promedio. Usando este hecho y el que la función $g_{e^1}(x_1)$ (constante como función de x_2) aproxima a $\chi(x_1, x_2)$ en $L^2((-h, h))$ en dicho subespacio implica

$$\int_{(-h,h)^2} \left| \chi(x_1,x_2) - \frac{1}{2h} \int_{(-h,h)} \chi(x_1,x_2') \, dx_2' \right|^2 \, dx \le \int_{(-h,h)^2} |\chi(x_1,x_2) - g_{e^1}(x_1)|^2 \, dx \lesssim E^{1/2}.$$

Definiendo

$$\chi^* = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{1}{2h} \int_{(-h,h)} \chi(x_1, x_2') \, dx_2' \ge \frac{1}{2} \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

\$\$\$ Se basa en que si $f\in L^1$ existe un punto $x\in \Omega$ tal que f(x) es menor que el promedio de la función sobre Ω .

^{¶¶¶}En [6] $\tilde{\chi}_3 \in \{-1, 1\}$ pero la prueba de este lema se basa en que la función toma dos valores *i.e.* puede aplicarse a este caso.

^{††††} $\{B_{\delta}(x): \delta > 0, x \in \mathbb{R}^2\}$ y $\{(-\delta + x, x + \delta)^2: \delta > 0, x \in \mathbb{R}^2\}$ generan la misma topología en \mathbb{R}^2 .

y notando que $\left|\chi(x_1, x_2) - \frac{1}{2h} \int_{(-h,h)} \chi(x_1, x_2') dx_2'\right| \ge 1/2$ sobre $\{\chi \neq \chi^*\}$ tenemos

$$\frac{1}{2}\mathcal{L}^2(\{\chi \neq \chi^*\} \cap (-h,h)^2) \le \int_{\{\chi \neq \chi^*\} \cap (-h,h)^2} \left| \chi(x_1,x_2) - \frac{1}{2h} \int_{(-h,h)} \chi(x_1,x_2') \, dx_2' \right| \, dx \lesssim E^{1/2}.$$

Con esto es inmediato que

$$\int_{(-h,h)^2} |\chi - \chi^*|^2 \, dx = \int_{\{\chi \neq \chi^*\} \cap (-h,h)^2} |\chi(x_1,x_2) - \chi^*(x_1)|^2 \, dx \le \mathcal{L}^2(\{\chi \neq \chi^*\} \cap (-h,h)^2) \lesssim E^{1/2}$$

Al escoger $f_a = \chi^*$ y notar que la estimación en L^1 se sigue de que el dominio es acotado, la afirmación es inmediata.

Hemos probado que en la dirección de corte [110] existe un resultado de rigidez parcial (un resultado análogo se tiene para la familia de direcciones $\{110\}$), pues para energías pequeñas, a primera aproximación siguen siendo laminados simples.

5. JUNTAS TRIPLES

Un resultado importante en esta teoría es la existencia de las juntas triple pues en la teoría de cuerpo dos dimensional se sabe que si las deformaciones (pequeñas) U^0, U^1, U^2 preservan volumen a primer orden^{‡‡‡‡} no existe este tipo de juntas. Aquí probamos un resultado más general.

Proposición 7. Sea $\Omega' \subset \mathbb{R}^2$ abierto y conexo. Si U^0 , U^1 , $U^2 \in M_{2 \times 2}(\mathbb{R})$ son tres deformaciones tal que dos a dos están conectadas por rango uno i.e.

(47)
$$U^{i} - U^{i+1} = a^{i+2} \otimes n^{i+2}, \quad con \ a^{k} \in \mathbb{R}^{2} \setminus \{0\}, \ n^{k} \in S^{1}, \quad i \in \mathbb{N} \ mod \ 3$$

con $\{n^1, n^2, n^3\}$ linealmente independientes dos a dos y $a^{i+2} = Qn^{i+2}$ para i = 0, 1, 2 y $Q \in M_{2\times 2}(\mathbb{R})$ invertible, entonces no existen juntas triples.

Demostración. Procedamos por contradicción y supongamos que existen las juntas triples, entonces podemos sumar (47) para $i \in \{0, 1, 2\}$, de donde

$$a^{3} \otimes n^{3} + a^{2} \otimes n^{2} + a^{1} \otimes n^{1} = 0, \quad \Rightarrow \quad n^{3} \otimes n^{3} + n^{2} \otimes n^{2} + n^{1} \otimes n^{1} = 0$$

La última igualdad se tiene por hipótesis pues Q es invertible. Por ser n^1, n^2 linealmente independientes, podemos escribir $n^3 = \alpha e^1 + \beta e^2$ de modo que

(48)
$$(1+\alpha^2)n^1 \otimes n^1 + (1+\beta^2)n^2 \otimes n^2 + \alpha\beta(n^1 \otimes n^2 + n^2 \otimes n^1) = 0$$

Esto es una contradicción, pues al ser n^1, n^2 linealmente independientes, los productos $n^1 \otimes n^1$, $n^1 \otimes n^2, n^2 \otimes n^1$ y $n^2 \otimes n^2$ son linealmente independientes, por tanto los coeficientes que acompañan a estos términos en (48) deben ser cero, pero esto no sucede para $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$.

Como se comentó, la situación en película delgada es distinta pues la proposición 8 nos dará condiciones necesarias y suficientes para que haya este tipo de juntas.

^{‡‡‡‡}Si la deformación es pequeña entonces el gradiente de deformación a primer orden se escribe como $\nabla y = \mathbf{1} + \epsilon H$ y el cambio de volumen se determina a travéz de $Det(\nabla y) = 1 + \epsilon Tr(H) + O(\epsilon^2)$, por ello si las deformaciones U^0, U^1, U^2 preservan volumen a primer orden su traza es cero, y dado que la traza es lineal $Tr(a^{i+2} \otimes n^{i+2}) = a^{i+2} \cdot n^{i+2} = 0$.

Definición 3. Decimos que en película delgada (elasticidad geométrica lineal) existe junta triple si dadas $H^1, H^2, H^3 \in M_{3\times 3}(\mathbb{R}), W^{12}, W^{32}$ matrices antisimétricas, $a^{12}, b^{12}, a^{32}, b^{32} \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} y$ $n^{12}, n^{32} \in S^2$, existen $a, b \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} y n \in S^2$ tal que las siguientes relaciones son satisfechas:

- (49) $H^1 H^2 + W^{12} = a^{12} \otimes n^{12} + b^{12} \otimes e^3$
- (50) $H^3 H^2 + W^{32} = a^{32} \otimes n^{32} + b^{32} \otimes e^3$
- (51) $H^3 H^1 + W^{32} W^{12} = a \otimes n + b \otimes e^3$

y los vectores n^{12} , n^{32} y n son linealmente independientes dos a dos y dependientes entre los tres.

Proposición 8. Existen juntas triples si y sólo si los vectores a^{12} y a^{32} son linealmente dependientes.

Demostración. Por hipótesis las ecuaciones (49) y (50) son satisfechas.

- $\begin{array}{l} \Leftarrow) \mbox{ Restando (49) a (50) y usando que } a^{32} = ka^{12} \mbox{ para algún } k \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \mbox{ tenemos} \\ \\ H^3 H^1 + W^{32} W^{12} = \|kn^{32} n^{12}\|a^{12} \otimes \frac{kn^{32} n^{12}}{\|kn^{32} n^{12}\|} + (b^{32} b^{12}) \otimes e^3 \end{array}$
- ⇒) Se sigue de la ortogonalidad de e^3 con $\{n, n^{12}, n^{32}\}$, la independencia lineal (2 a 2) de los elementos de dicho conjunto y de restar (50) a la suma de (49) y (51).

Notemos que si en película delgada, existe $Q \in M_{3\times 3}(\mathbb{R})$ invertible tal que $a^{ij} = Qn^{ij}$ entonces no existen juntas triples entre las fases $H^1, H^2 \ge H^3$, pues por hipótesis los vectores unitarios n^{ij} son independientes dos a dos pero los vectores a^{ij} son todos paralelos.

Con un poco de esfuerzo esta proposición puede generalizarse para la teoría de cuerpo en dos dimensiones pero no se incluirá pues no será de utilidad.

5.1. Juntas triples en película delgada entre estados martensíticos.

Usando las ideas de la subsección anterior, las expresiones de $n \neq \tilde{a}$ (determinada por la proposición 4 y la ecuación (28)) y las de H^x , $H^y \neq H^z$, se puede determinar por un cálculo directo pero extenso que los ángulos de corte donde existen juntas triples formadas por estas tres fases están determinadas por alguna de las siguientes tres ecuaciones

$$\cos^2\theta = \frac{\cos^2 2\varphi}{\cos^2 2\varphi + (\sin 3\varphi \mp \cos \varphi)^2}, \quad \cos^2\theta = \frac{\cos^2 2\varphi}{\cos^2 2\varphi + (\cos 3\varphi \pm \sin \varphi)^2}, \quad \cot^2\omega = (\cos\varphi \pm \sin\varphi)^2.$$

Notemos que la familia {110} usada en la subsección 4.4 satisface las tres ecuaciones y eso se debe a que dos fases martensíticas en esa dirección de corte resultan ser indistinguibles. Una dirección de corte donde podemos determinar fácilmente las juntas triples es cuando e^3 es paralelo al vector $[\bar{1}12]^T$. Sobre esta dirección los estados martensíticos se ven como

$$H^{1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{2}} \\ \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad H^{2} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{3}{2}} \\ -\sqrt{\frac{3}{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad H^{3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

22 TRANSICIONES DE FASE EN TEORÍA GEOMÉTRICA LINEAL DE PELÍCULA DELGADA.



FIGURA 4. Esquema sobre la esfera unitaria de las direcciones en las cuales existen juntas triples.

Para este caso tenemos

$$a^{31} = a^{32} = \frac{\pm\sqrt{33}}{2} \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}, a = \pm 2\sqrt{6} \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}, \ n^{31} = \frac{\pm 1}{\sqrt{11}} \begin{pmatrix} \sqrt{3}\\-\sqrt{8} \end{pmatrix}, \ n^{32} = \frac{\pm 1}{\sqrt{11}} \begin{pmatrix} \sqrt{3}\\\sqrt{8} \end{pmatrix}, \ n = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$



FIGURA 5. Posibles juntas triples que podemos formar al cortar en la dirección $[\overline{1}12]$.

Note que a partir de estas juntas es posible formar patrones más complejos que los laminados simples.

6. Líneas futuras de investigación.

Como hemos notado en las páginas anteriores, este es un problema muy extenso, rico y complejo. A continuación enunciamos algunas líneas futuras de investigación.

• Un proyecto de investigación muy interesante emerge en las primeras secciones y consiste en probar rigurosamente la condición sobre el conjunto admisible \mathscr{F} (ver (18)). Como es

bien sabido, una solución a un problema de elasticidad lineal 3D debe satisfacer en sentido distribucional las ecuaciónes de compatibilidad de Saint-Venant

$$\nabla \times \nabla \times E(\nabla y) = 0$$

Notemos que una de esas seis ecuaciones es justo

$$\partial_{11}^2 E(\nabla y)_{22} + \partial_{22}^2 E(\nabla y)_{11} - 2\partial_1 \partial_2 E(\nabla y)_{12} = 0$$

y es esta la condición que determina al conjunto \mathscr{F} . El objetivo de este proyecto es determinar rigurosamente vía Γ —límites que estas seis ecuaciones para el problema 3D se reducen en el caso 2D a la ecuación anterior más algunas otras restricciones.

- Como se vió en la parte de los antecedentes, nuestro modelo de película delgada en elasticidad geométrica lineal se obtuvo primeramente de unΓ –límite de elasticidad geométrica no lineal 3D a película delgada en el régimen no lineal y posteriormente con respaldo en las referencias [9] y [10] se linealizó el problema; aquí es donde surge otra rama de investigación pues resultaría interesante determinar vía unΓ –límite el régimen de parámetros donde el modelo de elasticidad geométrica lineal en película delgada se deriva de la elasticidad geométrica no lineal 3D.
- Notemos que la maquinaria desarrollada en las proposiciones 4 y 8 y subsección 4.1 es fácilmente aplicable a cualquier otro tipo de transformaciones de fase (por ejemplo las trasformaciones cúbico-ortorómbico) sólo necesitamos escribir los estados martensíticos en una forma similar a (31). Esto es interesante pues en base a los resultados de [6] es posible obtener estructuras más complejas.
- Otra posibilidad es estudiar la ecuación (38) con el fin de encontrar más direcciones de corte donde exista algún otro tipo de rigidez, un posible candidato es la dirección [111] por su alta simetría.
- El resultado de rigidez parcial (sección 4.4) resulta ser muy interesante pues de la estructura interna entre las fases indistiguibles no se tiene información. Por lo tanto, un reto matemático interesante es determinar las posibles " estructuras internas" que se pueden presentar en las regiones donde se localizan los estados indistinguibles (regiones H¹² en la Figura 3). Cabe notar que la información de la estructura interna se perdió al evaluar la ecuación (38) en los ángulos críticos (ω,φ) = (π/2, π/4). Por ello resulta factible analizar este problema por medio de unΓ −límite a la energía adecuadamente renormalizada cuando (ω,φ) → (π/2, π/4).
- Como se notó en la última sección, nuestro estudio acerca de juntas triples es aún incipiente, pues tenemos antecedentes de que al menos en el ejemplo visto para la dirección de corte [112] existen estructuras más complejas como juntas sextuples y nos gustaría saber si son las únicas estructuras posibles o existen más. Otra posible idea es tratar de caracterizar dependiendo la dirección de corte si existen o no juntas sextuples o estructuras tipo panal de abejas.
- En vista de los resultados de [6] resulta factible estudiar direcciones de corte donde puedan formarse juntas cuadruples y estructuras iteradas tipo laminados cruzados buscando los correspondientes resultados de rigidez para estas estructuras.

Referencias

- Ball, J. M., James, R.D.: Fine phase mixtures as minimizers of energy. In: Analysis and Continuum Mechanics, pp 647-686. Springer (1989).
- [2] Capella, A., Otto, F.: A rigidity result for a perturbation of the geometrically linear three-well problem. In: Comunications on Pure and Applied Mathematics, 62 (12) pp 1632-1669. (2009).
- [3] Capella, A., Otto, F.: A quantitative rigidity result for cubic-to-tetragonal phase transition in the geometrically linear theory with interfacial energy. In: Proceedings fo the Royal Society of Edinburgh: Section A Mathematics , 142, pp 273-327, doi:10.1017/S0308210510000478 (2012).
- [4] Dolzmann, G., Müller, S.: The influence of the surface energy on stress-free microstructures in shape memory alloys. *Meccanica* **30**, 527-539 (1995).
- [5] Battacharya, K., James, R.D.: A theory of thin films of martensitic materials with applications to microactuators. In: Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 47 (12) pp 531-576. (1999).
- [6] Angkana, R.: A rigidity result for a reduced model of a cubic-to-orthorombic phase transition in the geometrically linear theory of elasticity. In: *Journal of Elasticity*, Preprint.
- [7] Angkana, R.: Rigidity properties of the cubic-to-orthorombic phase transition in the linear theory of elasticity with surface energy. In: *Journal of Elasticity*, Thesis (2010).
- [8] Conti, S.: Quasiconvex functions incorporating volumetric constraints are rank-one convex. In: Journal de Mathématiques Pures et Appliquées, pp 15-30, (2008).
- [9] Agostiniani, V., Dal Masso, G., DeSimone A.: Linear elasticity obtained from finite elasticity byΓ –convergence under weak coerciveness conditions. Annales de l'Institut Henri Poincare (C) Non Linear Analysis 29 (5), pp. 715-735 (2012).
- [10] Schmidt B.: LinearΓ –limits of multiwell energies in nonlinear elasticity theory. Continuum Mechanics and Thermodynamics 20 (6), pp. 375-396 (2008).
- [11] Battacharya, K.: Microstructure of martensite: why it forms and how it gives rise to the shape-memory effect. Oxford series on materials modeling, Oxford University Press (2003).
- [12] Johns, F.: Partial Differential Equations Springer-Verlag, Tercera edición. New York (1978).
- [13] Kohn, R.V., Müller, S.: Branching of twins near an austenite-twinned-martensite interface. *Philosophical Magazine A* 66 (5), 697-715 (1992).
- [14] Antman, S. S.: Nonlinear Problems in Elasticity Springer-Verlag, Segunda edición. New York (2004).
- [15] Choksi, R., Kohn, R.V., Otto, F.: Domain branching in uniaxial ferromagnetic: A scaling law for the minimum energy. Comm. Math. Phys. 201, 61-79 (1999).

24