



Universidad Carlos III de Madrid
Departamento de Matemáticas

**Estudio analítico y numérico de
ecuaciones diferenciales estocásticas:
Aplicación a la Mecánica Estadística**

Esteban Moro Egado

Memoria presentada para optar al grado de Doctor por la Universidad Carlos III de Madrid.

Abril de 1999



Universidad Carlos III de Madrid
Departamento de Matemáticas

Tesis doctoral

**Estudio analítico y numérico de
ecuaciones diferenciales estocásticas:
Aplicación a la Mecánica Estadística**

Memoria presentada por D. Esteban Moro Egido para optar al grado de Doctor por la Universidad Carlos III de Madrid en el programa de tercer ciclo "Ingeniería Matemática".

Realizada bajo la dirección de D. Rodolfo Cuerno Rejado, Profesor Titular Interino de Universidad del Departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III de Madrid y D. Angel Sánchez Sánchez, Profesor Titular de Universidad del Departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III de Madrid.

Leganés, Abril de 1999.

Agradecimientos

Por experiencia, ésta es una de las secciones más leídas por la gente que está a tu alrededor; bien por curiosidad, bien porque probablemente sea la parte más interesante de la memoria junto con la introducción, las conclusiones y alguna figura que otra. Por ello es importante que aparezcan todos los nombres de aquellas personas que esperan ser incluidos en este apartado de agradecimientos.

Evidentemente, debo incluir en estos agradecimientos a Angel Sánchez y Rodolfo Cuerno por ofrecerme la oportunidad de trabajar con ellos y por sus consejos, apoyo, ideas y tiempo durante estos tres años. Sobre todo les agradezco que hayan creado un entorno de trabajo agradable, el que me hayan introducido en un tema de investigación actual y apasionante, así como que me hayan apoyado a la hora de desarrollar mis propias ideas.

Del mismo modo, quiero incluir en este agradecimiento a todas aquellas personas que me han ayudado en mi trabajo mediante discusiones, comentarios e ideas como Franz Mertens, Grant Lythe, Hiroaki Daido, José Cuesta y Luis López, así como a todos los miembros del Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complicados.

Sin la indispensable ayuda económica y logística proporcionada por el Departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III de Madrid, la Fundación Universidad Carlos III de Madrid, el Ministerio de Educación y Cultura de España y el Laboratorio de Los Alamos esta memoria no hubiera sido posible. Por último, doy las gracias a todos mis compañeros del Departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III.

En una segunda parte de los agradecimientos suelen aparecer los amigos y compañeros, que son esa parte de la tesis que no depende de uno mismo. En este apartado también me gustaría incluir a mis directores, Angel Sánchez y Rodolfo Cuerno que me han sabido transmitir muchas más cosas de las que aparecen en esta memoria y que no tienen nada que ver con ella. Quiero mencionar explícitamente a mis compañeros de departamento Enrique, Paco, Jesús, Niurka, Renato, Jorge Arvesú, Héctor, Vicente, Diego, Manolo Marco, Bernardo, Carlos y Ariel, que me han ayudado durante estos años y los han hecho más llevaderos. También quiero dar las gracias a todos mis amigos por apoyarme durante estos años y muy especialmente a Javier por compartirlos conmigo.

Por último, quiero dar las gracias y dedicar esta memoria a mis padres, a mis hermanas y a Raquel.

Contenidos

| | |
|---|-----------|
| 1. Prefacio | 1 |
| 1.1. Ecuaciones diferenciales estocásticas | 1 |
| 1.2. Objetivos de la tesis | 2 |
| 1.3. Esquema de la memoria | 3 |
| | |
| I Introducción a las ecuaciones diferenciales estocásticas | 5 |
| | |
| 2. EDE y aplicación a la Mec. Estadística. | 6 |
| 2.1. Introducción | 6 |
| 2.2. Algunas definiciones matemáticas | 6 |
| 2.3. Procesos estocásticos | 10 |
| 2.3.1. El proceso de Wiener y el ruido blanco | 11 |
| 2.3.2. Procesos de Markov | 12 |
| 2.3.3. Caminante aleatorio | 13 |
| 2.4. Ecuaciones Diferenciales Estocásticas | 14 |
| 2.4.1. Introducción | 14 |
| 2.4.2. Solución de las ecuaciones diferenciales estocásticas | 17 |
| 2.4.3. Fórmula de Itô | 17 |
| 2.4.4. Ejemplo: El proceso de Ornstein-Uhlenbeck | 18 |
| 2.4.5. Procesos de difusión: La ecuación de Fokker-Planck | 19 |
| 2.4.6. Integral de Stratonovič | 21 |
| 2.5. Ecuaciones en derivadas parciales estocásticas | 23 |
| 2.5.1. Ejemplo: Ecuación de Edwards-Wilkinson | 24 |
| 2.6. Ecuación de Langevin | 25 |
| 2.6.1. Movimiento Browniano | 25 |
| 2.6.2. Dinámica conservada y no conservada | 27 |
| 2.6.3. Equilibrio y soluciones estacionarias fuera del equilibrio | 28 |
| | |
| II Crecimiento de Superficies | 31 |
| | |
| 3. Procesos de crecimiento y autosimilaridad | 33 |
| 3.1. Introducción | 33 |
| 3.2. Autosimilaridad y autosemejanza | 35 |
| 3.3. Dinámica y escalado de intercaras | 35 |
| 3.4. Universalidad | 38 |
| | |
| 4. Crecimiento de cristales mediante MBE | 39 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 4.1. | Introducción | 39 |
| 4.2. | El crecimiento epitaxial mediante MBE | 40 |
| 4.3. | Modelos | 43 |
| 4.3.1. | Modelos Continuos | 44 |
| 4.3.2. | Modelos Discretos | 48 |
| 4.4. | Experimentos de MBE | 50 |
| 5. | Efectos de la red cristalina | 56 |
| 5.1. | Introducción | 56 |
| 5.2. | Efectos de la red cristalina en MBE | 57 |
| 5.3. | Transiciones de rugosidad | 58 |
| 5.3.1. | Transición de rugosidad traslacional | 59 |
| 5.3.2. | Transición de rugosidad orientacional | 62 |
| 5.4. | Resultados numéricos | 65 |
| 5.4.1. | Observables | 66 |
| 5.4.2. | Resultados en equilibrio | 68 |
| 5.4.3. | Resultados fuera del equilibrio | 74 |
| 6. | Aproximaciones analíticas | 80 |
| 6.1. | Introducción | 80 |
| 6.2. | Técnicas variacionales | 81 |
| 6.3. | Grupo de renormalización | 85 |
| 7. | Oscilaciones RHEED | 93 |
| 7.1. | Introducción | 93 |
| 7.2. | La técnica RHEED | 94 |
| 7.3. | Oscilaciones RHEED | 94 |
| 7.4. | Teoría cinemática de la difracción | 96 |
| 7.5. | Estudio de las oscilaciones en modelos continuos | 99 |
| 7.5.1. | Aproximación lineal | 100 |
| 7.5.2. | Simulaciones numéricas | 101 |
| III | Colectividades de osciladores acoplados | 107 |
| 8. | Colectividades de osciladores acoplados | 109 |
| 8.1. | Introducción | 109 |
| 8.2. | Sincronización de osciladores | 110 |
| 8.3. | Modelos | 113 |
| 8.3.1. | Ecuaciones de fase de oscilaciones auto-sostenidas | 113 |
| 8.3.2. | Redes de uniones Josephson | 115 |
| 8.3.3. | Modelo XY | 117 |
| 8.3.4. | Ondas de densidad de carga | 118 |
| 8.3.5. | Crecimiento de superficies | 119 |
| 8.4. | Tratamiento continuo mediante EDPs | 120 |
| 9. | Efec. del ruido en la fase sincronizada de osc. acoplados | 125 |
| 9.1. | Introducción | 125 |
| 9.2. | Modelos | 126 |

| | |
|--|------------|
| 9.3. Análisis de escalas múltiples | 128 |
| 9.3.1. Acoplamiento lineal | 129 |
| 9.3.2. Acoplamiento no lineal | 134 |
| 9.4. Comparación con las oscilaciones RHEED | 139 |
| | |
| IV Transiciones de fase dinámicas | 143 |
| | |
| 10. Transiciones de fase dinámicas | 145 |
| 10.1. Introducción | 145 |
| 10.2. Transiciones de fase y defectos topológicos | 147 |
| 10.3. ¿Cuándo se rompe la simetría, cuál es el tamaño de las piezas? | 150 |
| 10.3.1. Activación térmica | 150 |
| 10.3.2. Causalidad. El mecanismo de Kibble-Zurek | 151 |
| 10.3.3. Experimentos | 153 |
| 10.3.4. Simulaciones numéricas | 155 |
| 10.3.5. Inestabilidad espinodal | 155 |
| | |
| 11. Dinámica de defectos | 157 |
| 11.1. Introducción | 157 |
| 11.2. Ecuación de Landau Ginzburg con simetría $O(1)$ | 158 |
| 11.2.1. Análisis dimensional | 159 |
| 11.3. Aproximación lineal | 160 |
| 11.3.1. El problema cero dimensional | 161 |
| 11.4. Sistema unidimensional | 166 |
| 11.4.1. Aproximación lineal | 168 |
| | |
| V Conclusiones | 179 |
| | |
| 12. Conclusiones y cuestiones abiertas | 181 |
| 12.1. Conclusiones | 181 |
| 12.1.1. Parte I | 181 |
| 12.1.2. Parte II | 183 |
| 12.1.3. Parte III | 184 |
| 12.2. Cuestiones abiertas y posibles extensiones | 185 |
| | |
| Bibliografía | 189 |
| | |
| Apéndices | 201 |
| | |
| A. Estudio Analítico de las Teorías Lineales | 201 |
| A.1. Edward-Wilkinson | 204 |
| A.1.1. Dimensión $d = 1$ | 204 |
| A.1.2. Dimensión $d = 2$ | 206 |
| A.2. LMBE | 208 |
| A.2.1. Dimensión $d = 1$ | 208 |

| | |
|---|------------|
| A.2.2. Dimensión $d = 2$ | 209 |
| B. Transformaciones de dualidad | 211 |
| B.1. Modelo gaussiano discreto | 211 |
| B.2. Modelo laplaciano discreto | 212 |
| C. Desarrollos de alta temperatura | 214 |
| C.1. Energía | 214 |
| C.2. Rugosidad | 215 |
| D. Esquema de renormalización de Nozières-Gallet | 216 |
| D.1. Esquema estático | 217 |
| D.2. Esquema dinámico | 223 |
| D.2.1. Problema de equilibrio | 223 |
| E. Estudio analítico de trans. sincronización-desincronización en osc. acoplados | 229 |

Capítulo 1

Prefacio

1.1. Ecuaciones diferenciales estocásticas

Las ecuaciones diferenciales estocásticas fueron desarrolladas en los años 40 por los matemáticos (Itô, Gihman, Kolmogorov, Levy, Wiener y otros) como una herramienta para la construcción explícita de las trayectorias de procesos de difusión. Sin embargo, en física e ingeniería las ecuaciones diferenciales estocásticas surgen de manera natural en la descripción de sistemas que están afectados por ruido. De hecho, el primer modelo de este tipo fue propuesto por Langevin en 1908 para describir el movimiento Browniano de una partícula sometida a una fuerza externa aleatoria. Durante los últimos 20 años las aplicaciones de las ecuaciones diferenciales estocásticas se han extendido mucho más allá de la física o de la ingeniería. Una de las causas del retraso en la aplicación de este tipo de ecuaciones se debe a que su tratamiento riguroso es difícil. A pesar de ello, hoy podemos encontrar aplicaciones de estas ecuaciones en:

- Filtros no lineales de señales [113], como los utilizados en las guías de misiles.
- Física nuclear [1], para la descripción de las colisiones entre núcleos pesados.
- Mecánica estadística [114], para describir sistemas dentro y fuera del equilibrio.
- Economía financiera [241, 205], como modelos de derivados financieros.
- Neurociencia [230] para describir el comportamiento de una o muchas neuronas interconectadas entre si.
- Ingeniería [208]: para análisis de la estabilidad de estructuras frente a perturbaciones como terremotos, olas del mar, irregularidad de las carreteras, etc.

En todas estas aplicaciones las ecuaciones diferenciales estocásticas son utilizadas para modelar la dinámica del sistema sometido a un ruido externo. Tradicionalmente, el ruido se consideraba como un efecto inevitable y molesto de un sistema real. En mecánica estadística

proporcionaba las fluctuaciones térmicas que dan lugar a un movimiento alrededor de los mínimos del potencial determinista. Sin embargo, en los últimos años hemos asistido a un incremento de aplicaciones en las que el ruido es fundamental, como la llamada *resonancia estocástica*, las *transiciones de fase inducidas por ruido*, fenómenos fuera del equilibrio, etc.

Como ya hemos dicho, una de las aplicaciones de las ecuaciones diferenciales estocásticas es la descripción de sistemas sometidos a fluctuaciones térmicas tanto en equilibrio como fuera del equilibrio termodinámico. En ese caso las ecuaciones diferenciales estocásticas se denominan ecuaciones de Langevin. Si el sistema que estamos estudiando es extendido, entonces dichas ecuaciones diferenciales estocásticas son en derivadas parciales. Este tipo de ecuaciones será el objeto de estudio de esta memoria y su aplicación a diversos problemas de la mecánica estadística de equilibrio y fuera de él.

Para terminar esta breve introducción nos gustaría recalcar que el cálculo estocástico o la teoría de las ecuaciones diferenciales estocásticas es diferente del cálculo “ordinario” para las ecuaciones diferenciales deterministas. En particular, los algoritmos numéricos de integración de una ecuación diferencial estocástica son diferentes de los deterministas. Otro ejemplo proviene de la llamada fórmula de Itô, que es la generalización de la regla de la cadena para el cálculo estocástico y que no coincide, en general, con la determinista.

1.2. Objetivos de la tesis

En esta tesis se abordan tres tipos de problemas de mecánica estadística en los que el modelo viene dado en función de una ecuación diferencial estocástica en derivadas parciales. El objetivo inicial de esta tesis fue el de estudiar el crecimiento de superficies cristalinas mediante el método de epitaxia de haces moleculares (MBE, Molecular Beam Epitaxy). Hoy en día, la técnica de MBE es muy utilizada para la creación de capas finas de materiales, como las utilizadas en heteroestructuras y otros dispositivos semiconductores. Para las aplicaciones, es muy importante conseguir que estas capas finas tengan la menor rugosidad posible para que los contactos sean eficientes desde el punto de vista electrónico. La rugosidad de estas superficies proviene, principalmente, de la interacción entre la deposición aleatoria de átomos y la difusión a lo largo de la superficie de los mismos.

En 1997 propusimos un modelo *continuo* para describir este proceso de crecimiento que tiene en cuenta el carácter discreto de la superficie. El objetivo entonces era intentar caracterizar las propiedades de ese modelo (que denominamos xMBE) mediante simulaciones numéricas y técnicas analíticas. El resultado más interesante de esta parte de la tesis es que probamos la existencia de una transición de fase de rugosidad como resultado del carácter cristalino de las superficies. Todas las herramientas utilizadas (tanto las analíticas como las numéricas) corroboran este hecho. Desde el punto de vista experimental y teniendo en mente la aplicabilidad de nuestro modelo, estudiamos también las oscilaciones que se observan en las etapas iniciales del crecimiento del material en la intensidad reflejada por la técnica de RHEED. El resultado más interesante es que, dependiendo de cuál es el proceso que determina la morfología de la superficie (tensión superficial, difusión superficial, etc.) el decaimiento de las oscilaciones es muy diferente. Este hecho nos lleva a proponer un criterio para poder conocer en las etapas iniciales qué tipo de procesos se están produciendo.

Con el fin de intentar estudiar alguna de las propiedades de estos modelos de crecimiento, utilizamos una aproximación de campo medio en las ecuaciones diferenciales estocásticas o de Langevin. Utilizando una sencilla técnica de perturbaciones singulares directamente sobre la ecuación diferencial estocástica fuimos capaces de obtener en el límite de temperatura pequeña, por ejemplo, el periodo de las oscilaciones RHEED. Sin embargo, nos dimos cuenta

que, en esta aproximación de campo medio, la ecuación que estudiamos es parecida a la que se obtiene en otros contextos y en general a la que se utiliza en el estudio de colectividades de osciladores acoplados. De esta manera trasladamos nuestros cálculos a un contexto más general y vimos que mediante ellos podíamos obtener mucha más información de estos modelos que con las técnicas previamente utilizadas. En particular, y como resultado más importante de este estudio, vimos que el ruido tiene un efecto no trivial, aunque sea pequeño, en la dinámica de estos osciladores cuando están sincronizados. Aunque la idea inicial fue la de aplicarla a las oscilaciones RHEED, el haber obtenido resultados suficientemente consistentes nos ha llevado a separar el estudio de colectividades de osciladores acoplados en una parte diferente de la de crecimiento de cristales.

Por último, fruto de una visita al Laboratorio Nacional de Los Alamos en Estados Unidos, nos planteamos uno de los problemas de la mecánica estadística fuera del equilibrio más actuales por su posible relación con el modo en el que está distribuida la materia en el Universo. Este problema es el de la creación de defectos al pasar por una transición de fase continua en la que se produce una rotura de simetría, que en la actualidad está siendo estudiado experimentalmente en sistemas de materia condensada. A pesar de que en la literatura existían estimaciones para el número de defectos que se crean, nosotros vimos que mediante la aproximación lineal es posible calcular dicha densidad de defectos de manera exacta y comprobar, en particular, que las estimaciones obtenidas hasta la fecha sobreestiman el número de defectos.

1.3. Esquema de la memoria

El contenido de esta memoria está dividido en 5 partes que contienen varios capítulos cada una. En la parte I introducimos la teoría del cálculo estocástico y de las ecuaciones diferenciales estocásticas así como su aplicación a la mecánica estadística. En las partes II, III y IV aplicamos esta teoría a diversos sistemas estadísticos: el crecimiento de superficies mediante epitaxia, la sincronización de osciladores acoplados entre sí y la dinámica de las transiciones de fase, respectivamente. Por último, en la parte V presentamos las conclusiones de esta memoria.

En esta memoria he tratado de ser lo más autocontenido posible, lo que hace que sea tan voluminosa. Mi esperanza es que aquellos lectores que no son expertos en estos temas sean capaces de encontrar aquí una pequeña introducción a cada uno de los problemas físicos a los que he aplicado la teoría de las ecuaciones diferenciales estocásticas. Para simplificar la lectura a aquellas personas que tan sólo quieren conocer los resultados originales de esta tesis doctoral, he separado los capítulos por su contenido de carácter introductorio o de presentación de resultados originales como se detalla en la figura 1.1.

Como se ha mencionado las partes II, III y IV tienen como nexo común las ecuaciones diferenciales estocásticas. Aparte de este hecho, entre los capítulos 7 y 9 veremos que existe una relación más directa, y que los cálculos derivados para explicar la fase sincronizada de osciladores acoplados pueden aplicarse para estudiar las oscilaciones RHEED observadas en el crecimiento de cristales mediante la técnica MBE.

Por último, la memoria se completa con cinco apéndices. La misión de estos apéndices es doble: por una parte separar del texto aquellas partes puramente algebraicas, y por otra parte, el desarrollar en completo detalle los cálculos utilizados en algunas partes de la memoria. En concreto he incluido el apéndice D, en el que derivé las ecuaciones del Grupo de Renormalización para el modelo de crecimiento de superficies que introducimos en el capítulo 5. Con ello intento evitar la habitual sensación frustrante cuando se leen artículos

Parte I

Introducción a las ecuaciones diferenciales estocásticas

Capítulo 2

Ecuaciones diferenciales estocásticas y su aplicación a la mecánica estadística

Introducimos las ecuaciones diferenciales estocásticas ordinarias y en derivadas parciales y algunos resultados importantes como el lema de Itô y la ecuación de Fokker-Planck. Por último estudiamos la aplicación de las ecuaciones diferenciales estocásticas a la mecánica estadística, que se conocen como ecuaciones de Langevin.

2.1. Introducción

En este capítulo presentamos el formalismo de las ecuaciones diferenciales estocásticas y cómo se aplican al estudio de los sistemas estadísticos de equilibrio y no equilibrio. En una primera parte (apartados 2.2-2.5) daremos alguno de los conceptos matemáticos necesarios para entender las ecuaciones diferenciales estocásticas. El planteamiento de estas secciones sigue el del libro de Arnold [9]. Existen otros libros que contienen introducciones a estos conceptos matemáticos, como el de Gard [73] o el de Kloeden y Platen [128]. En otros (como sucede en esta memoria) la teoría de las ecuaciones diferenciales estocásticas se incluye como una introducción a otros temas relacionados, como en el manual de Gardiner [74] o el libro de Horsthemke y Lefever [96]. Para las ecuaciones diferenciales estocásticas en derivadas parciales, consultar [178] o [208] y las referencias en ellos. En la segunda parte del capítulo tratamos las ecuaciones de Langevin y su aplicación a la mecánica estadística. El lector interesado puede completar esta parte con la lectura de libros como el van Kampen [114] o artículos como el de Doering [52].

2.2. Algunas definiciones matemáticas

En este apartado introducimos algunos de los conceptos que aparecerán durante esta memoria relacionados con la teoría de la probabilidad. El principal de ellos es el llamado

espacio de probabilidad, que se representa matemáticamente mediante la terna (Ω, \mathcal{A}, P) consistente en un *espacio muestral* Ω , un σ -álgebra \mathcal{A} de subconjuntos de Ω llamados *sucesos*, y una función real $P : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ denominada *probabilidad*. Ω puede ser cualquier conjunto, mientras que \mathcal{A} y P deben satisfacer las siguientes propiedades

1. $\Omega \in \mathcal{A}$.
2. Si $A \in \mathcal{A}$, entonces $A^c \in \mathcal{A}$.
3. Para cada $\{A_n\} \subseteq \mathcal{A}$, se tiene que $\cup A_n \in \mathcal{A}$.

que definen \mathcal{A} como una σ -álgebra de subconjuntos de Ω , y

4. Si $A \in \mathcal{A}$, $P(A) \geq 0$.
5. Si $\{A_n\} \subseteq \mathcal{A}$ entonces $P(\cup A_n) = \sum P(A_n)$ siempre que $A_i \cap A_j = \emptyset$ cuando $i \neq j$.
6. $P(\Omega) = 1$.

Las propiedades 4 y 5 definen P como una *medida*, mientras que 6 define P como una *probabilidad*. En esta memoria generalmente consideraremos $\Omega = \mathbb{R}^n$, aunque en general Ω puede ser cualquier espacio métrico separable. Por ejemplo, cuando consideremos ecuaciones estocásticas en derivadas parciales Ω será un espacio de dimensión infinita. La probabilidad $P(A)$ de un suceso $A \in \mathcal{A}$ es un indicador de la esperanza de que A suceda.

Una *variable aleatoria real* es una función medible $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que verifica

$$A = \{\omega | X(\omega) \leq x\} \in \mathcal{A}, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad (2.1)$$

de manera que X se convierte en una manera de medir un experimento aleatorio asignándole un número real. Esta variable aleatoria sirve para “transportar” la probabilidad P de Ω a \mathbb{R} , de manera que la probabilidad de un suceso $B \in \mathbb{R}$ viene dada por

$$P_X(B) = P(X^{-1}(B)), \quad (2.2)$$

que se denomina *distribución* de la variable aleatoria X . Dada la estructura de \mathbb{R} y de la σ -álgebra asociada¹, para una variable aleatoria real la distribución queda completamente definida por la *función de distribución*,

$$F_X(x) = P(\{\omega : X(\omega) \leq x\}) = P(X \leq x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.3)$$

que verifica $F(-\infty) = 0$, $F(\infty) = 1$ y que es una función continua y no decreciente. Lo contrario también es válido: toda función que cumpla las propiedades anteriores puede ser una función de distribución de una variable aleatoria. Usando la distribución P_X , el triplete $(\mathbb{R}, \mathcal{B}, P_X)$ constituye también un espacio de probabilidad. Si sólo estamos interesados en los valores de la variable X (por ejemplo, la medida sobre un experimento), podemos olvidar el espacio de probabilidad inicial y concentrarnos en $(\mathbb{R}, \mathcal{B}, P_X)$, es decir, en una variable real caracterizada por su función de distribución.

En general, hay dos tipos importantes de variables aleatorias. El primer tipo son las variables *discretas*, en las que la función de distribución crece sólo en un número contable de puntos y es constante entre ellos; el segundo tipo es el de las variables continuas, para

¹La σ -álgebra formada por intervalos de la forma $[a, b] \in \mathbb{R}$, $a, b \in \mathbb{R}$ se denomina σ -álgebra de Borel y se denota por \mathcal{B}

las que la función de distribución crece continuamente y se puede definir la *densidad de probabilidad*, $p(x)$ por

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x p(x') dx'. \quad (2.4)$$

En otras palabras, $p(x)dx$ es la probabilidad de que $X(\omega)$ tome valores en el entorno infinitesimal $[x, x + dx]$. La noción de densidad de probabilidad puede generalizarse también para variables discretas utilizando deltas de Dirac. Diremos que una variable aleatoria es *gaussiana* cuando su densidad de probabilidad venga dada por

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (2.5)$$

siendo μ y σ dos constantes. Las distribuciones gaussianas (también llamadas *normales*) son muy comunes. Su ubicuidad se puede explicar a partir del Teorema del Límite Central que será considerado al final de este apartado.

El conocimiento de la densidad de probabilidad caracteriza por completo, desde el punto de vista probabilístico, la variable aleatoria X . Sin embargo, muchas veces sólo es necesario conocer algunas características de X como los llamados *momentos*. El primero de ellos, conocido como *valor medio* o *esperanza matemática* se define como

$$\langle X \rangle = \int_{\Omega} dP. \quad (2.6)$$

Aunque la integración sobre Ω requiere una definición, nosotros interpretaremos la integral en el siguiente sentido: si X es una variable aleatoria real, entonces

$$\langle X \rangle = \int_{\Omega} dP = \int_{-\infty}^{\infty} x dF_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx, \quad (2.7)$$

donde F_X es la distribución inducida por la función $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ y la última igualdad se tiene sólo cuando exista la densidad de probabilidad $p(x)$. El valor medio existe (es finito) si y sólo si $\langle |X| \rangle < \infty$. Esto se cumple para la distribución gaussiana, pero no para otras, como por ejemplo la de Cauchy

$$p(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}. \quad (2.8)$$

En general podemos calcular el valor medio de cualquier función de la variable aleatoria $g(X) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

$$\langle g(X) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dF_X(x). \quad (2.9)$$

En particular, recuperamos (2.7) cuando $g(X) = X$. Típicamente se consideran los polinomios $g(x) = x^r$ que definen los llamados *momentos de orden r* . Contrariamente a lo que pueda parecer, el conocimiento (si existen) de todos los momentos de una distribución no determina de manera unívoca la distribución. Una manera de medir el grado de aleatoriedad de un proceso estocástico es la llamada anchura de la densidad de probabilidad o las desviaciones de X respecto a la media,

$$\text{Var}(X) = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle X \rangle)^2 dF_X(x), \quad (2.10)$$

es decir, el segundo momento central de la distribución. La definición general de momento central de orden r es $\langle (X - \langle X \rangle)^r \rangle$. El tercer momento central tiene que ver con la asimetría de la densidad de probabilidad con respecto al valor medio.

Para terminar este apartado, introduciremos algunos conceptos de convergencia de variables aleatorias. Supongamos que $\{X_n\}$ es una secuencia de variables aleatorias definidas en un espacio de probabilidad común (Ω, \mathcal{A}, P) . Se dice que

1. $\{X_n\}$ converge con probabilidad 1 a X cuando

$$P(\omega : \lim_{n \rightarrow \infty} |X_n(\omega) - X(\omega)| = 0) = 1. \quad (2.11)$$

También se denomina *convergencia casi segura*.

2. $\{X_n\}$ converge en probabilidad o converge estocásticamente a X si, $\forall \epsilon > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(\omega : |X_n(\omega) - X(\omega)| \geq \epsilon) = 0. \quad (2.12)$$

3. $\{X_n\}$ converge en media cuadrática a X cuando

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle |X_n - X|^2 \rangle = 0. \quad (2.13)$$

4. $\{X_n\}$ converge en distribución a X si

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F_{X_n}(x) = F_X(x), \quad (2.14)$$

para todo punto x donde $F_X(x)$ sea continua.

En general estas definiciones no son equivalentes y se tiene que 1. \Rightarrow 2., 3. \Rightarrow 2. y 1. \Rightarrow 4.

Supongamos que $\{X_i\}$ es una secuencia de variables aleatorias idénticamente distribuidas e independientes y sea

$$S_n = \frac{X_1 + \cdots + X_n}{n}. \quad (2.15)$$

Entonces se verifica el siguiente *teorema o ley de los grandes números*: si $\langle X_i \rangle = \mu$, la secuencia $\{S_n\}$ converge con probabilidad 1 a μ . Este teorema es importante desde el punto de vista práctico pues indica que las nociones de promedio sobre realizaciones o experimentos y la esperanza matemática coinciden asintóticamente: dicho de otro modo, para un n suficientemente grande, las distintas realizaciones independientes de un experimento aleatorio X_1, \dots, X_n aproximan la esperanza de X_i de la forma:

$$\langle X_i \rangle \simeq \frac{X_1 + \cdots + X_n}{n}. \quad (2.16)$$

Si además se tiene que $\langle X_i \rangle = \mu < \infty$ y que $\sigma = [\text{Var}(X_i)]^{1/2} < \infty$, entonces la secuencia $\{Y_n\}$ dada por

$$Y_n = \sqrt{n} \frac{S_n - \mu}{\sigma}, \quad (2.17)$$

converge en distribución a la variable gaussiana Z con $\langle Z \rangle = 0$ y $\text{Var}(Z) = 1$, resultado que se conoce como *Teorema Central del Límite*, y que explica el papel tan importante que tienen las distribuciones gaussianas en probabilidad y estadística.

2.3. Procesos estocásticos

En esta memoria tratamos procesos físicos que varían en el tiempo y de manera aleatoria. Éstos pueden ser modelizados mediante variables aleatorias que describan el estado del sistema en cada instante de tiempo. De este modo obtenemos una familia de variables aleatorias parametrizadas por el tiempo t . De manera precisa, un *proceso estocástico* $\{X(t, \omega); t \in T, \omega \in \Omega\}$ es una función $X : T \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ donde $X(t) \equiv X(t, \cdot)$ es una variable aleatoria para cada $t \in T$. Los procesos estocásticos dependen de dos variables: el índice t y $\omega \in \Omega$. Si fijamos ω , es decir, escogemos una sola observación del proceso estocástico, la función $X(\cdot, \omega)$ se denomina *realización* o *trayectoria* del proceso.

Como vimos en el apartado anterior una variable aleatoria viene determinada por su función de distribución. Del mismo modo un proceso estocástico se caracteriza por un jerarquía de funciones de distribución

$$F(x, t) = P(X(t) \leq x), \quad (2.18)$$

$$F(x_1, t_1; x_2, t_2) = P(X(t_1) \leq x_1; X(t_2) \leq x_2), \dots, \quad (2.19)$$

que verifican las siguientes propiedades:

1. *Simetría*: Para cualquier permutación i_1, \dots, i_n de los enteros $1, \dots, n$

$$F(x_{i_1}, t_{i_1}; \dots; x_{i_n}, t_{i_n}) = F(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n). \quad (2.20)$$

2. *Compatibilidad*: Para $m < n$ y $t_1, \dots, t_m, t_{m+1}, \dots, t_n$ se tiene que

$$F(x_1, t_1; \dots; x_m, t_m; \infty, t_{m+1}; \dots; \infty, t_n) = F(x_1, t_1; \dots; x_m, t_m). \quad (2.21)$$

El teorema fundamental de Kolmogorov [9] establece que el recíproco es también cierto: para cada jerarquía de funciones de distribución que verifiquen las propiedades anteriores existen una terna (Ω, \mathcal{A}, P) y un proceso estocástico $X(t, \omega)$ definido en $T \times \Omega$, que posee dichas distribuciones.

Como hemos visto, $X(t)$ no es más que una función (aleatoria) que depende del tiempo. Al igual que en el análisis estándar de funciones deterministas podemos introducir el concepto de continuidad. Se dice que un proceso estocástico es

1. *Continuo con probabilidad uno* si

$$P(\omega | X(\cdot, \omega) \text{ es una función continua en } T) = 1. \quad (2.22)$$

2. *Continuo en media cuadrática* si

$$\lim_{s \rightarrow t} \langle |X(s, \omega) - X(t, \omega)|^2 \rangle = 0. \quad (2.23)$$

3. *Continuo en probabilidad* si, $\forall \epsilon > 0$

$$P(\omega \in \Omega : |X(s, \omega) - X(t, \omega)| \geq \epsilon) = 0. \quad (2.24)$$

4. *Continuo en distribución* si

$$\lim_{s \rightarrow t} F(x, s) = F(x, t) \text{ para todos los puntos de continuidad de } F(\cdot, t). \quad (2.25)$$

Continuidad con probabilidad uno en el instante t significa que la probabilidad $P(A_t) = 0$, donde $A_t = \{\omega \in \Omega : \lim_{s \rightarrow t} |X(s, \omega) - X(t, \omega)| \neq 0\}$ para todo $t \in T$. Si existen constantes positivas α, β, C y h de modo que

$$\langle |X(t, \omega) - X(s, \omega)|^\alpha \rangle \leq C|t - s|^{1+\beta}, \quad (2.26)$$

para todos $s, t \in T$ con $|t - s| \leq h$, entonces $X(t)$ es continuo con probabilidad uno. Este criterio se conoce como criterio de Kolmogorov [9].

Se dice que un proceso estocástico es *estacionario* si las distribuciones son invariantes bajo traslaciones temporales:

$$F(x_1, t_1 + t; \dots; x_n, t_n + t) = F(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) \quad \forall t. \quad (2.27)$$

Si, además, $\langle X^2(t) \rangle < \infty$

$$\langle X(t) \rangle = \mu, \quad (2.28)$$

y

$$\text{Cov}(X(t), X(s)) = C(t - s), \quad (2.29)$$

con μ constante independiente de t y donde $\text{Cov}(X(t), Y(s))$ es la *covarianza* de los procesos estocásticos $X(t)$ e $Y(t)$, que se define como

$$\text{Cov}(X(t), Y(s)) = \langle [X(t) - \langle X(t) \rangle][Y(s) - \langle Y(s) \rangle] \rangle, \quad (2.30)$$

y también se suele denominar *función de correlación* temporal.

Vamos a introducir varios ejemplos de procesos estocásticos que juegan un papel importante en la teoría de probabilidad y en las ecuaciones diferenciales estocásticas.

2.3.1. El proceso de Wiener y el ruido blanco

Un proceso de Wiener es un proceso estocástico gaussiano² con incrementos $W(t) - W(s)$ independientes, estacionarios y distribuidos gaussianamente con $\text{Var}(W(t) - W(s)) = |t - s|$, y que verifica que $\langle W(t) \rangle = 0$ y $W(0) = 0$ con probabilidad uno. Otras propiedades que se derivan de esta definición son

1. $\langle W(t)W(s) \rangle = \min(t, s)$,
2. $\langle (W(t) - W(s))^4 \rangle = 3(t - s)^2$,

siendo ésta última la que garantiza que el proceso de Wiener es continuo con probabilidad uno aplicando el criterio de Kolmogorov (2.26). Aunque las trayectorias de un proceso de Wiener son continuas, no son diferenciables con probabilidad uno en ningún punto, ya que $X^h(t) = (W_{t+h} - W(t))/h$ es una variable gaussiana con media cero y con varianza $1/h$, con lo que cuando $h \rightarrow 0$ esta distribución diverge. En otras palabras, el cociente anterior no converge en probabilidad a ninguna variable aleatoria finita en ningún instante de tiempo.

Un ruido blanco gaussiano, $\xi(t)$, es un proceso gaussiano con media nula y decorrelacionado en el tiempo (es decir, que su función de correlación es nula para $t \neq s$). Dicho de otro modo

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t - s), \quad (2.31)$$

²Un proceso estocástico $X(t, \omega)$ se dice que es *gaussiano* si $X(t, \cdot)$ es una variable gaussiana para cada $t \in T$.

donde $\delta(t-s)$ es la delta de Dirac. Evidentemente las trayectorias de este proceso son muy patológicas, ya que el valor de $\xi(t)$ no depende del valor que tome la función en *ningún* otro punto $t' \neq t$. Esto significa que la densidad espectral $f(\lambda)$ de $\xi(t)$ vale

$$f(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda t} \langle \xi(s)\xi(s+t) \rangle dt = 1. \quad (2.32)$$

Dado que la densidad espectral se puede entender como una medida de la contribución de la frecuencia λ a la señal $\xi(t)$, un ruido blanco posee con igual peso todas las frecuencias y de ahí el nombre “blanco”.

Calculemos las propiedades de la integral del ruido $\xi(t)$

$$Y(t) = \int_0^t \xi(s) ds. \quad (2.33)$$

Dado que $\xi(t)$ es un proceso gaussiano, $Y(t)$ también lo es y por tanto su media y varianza valen

$$\langle Y(t) \rangle = 0, \quad (2.34)$$

$$\text{Var}(Y(t) - Y(s)) = |t - s|, \quad (2.35)$$

es decir, $Y(t)$ no es más que un proceso Wiener, lo que nos llevaría a interpretar el ruido blanco como la derivada de un proceso Wiener. Sin embargo, como hemos visto antes las trayectorias de $W(t)$ no son diferenciables en ningún punto con probabilidad uno. A este problema hay que añadir el que la integral en (2.33) no está bien definida (es decir, no es una integral de Riemann). Pese a estos problemas, la identidad

$$\frac{dW}{dt} = \xi(t) \quad (2.36)$$

se puede establecer de manera coherente en el contexto de los llamados *procesos estocásticos generalizados* [9]. Su demostración va más allá de la intención de este capítulo aunque podemos mencionar que se enmarca en la teoría de distribuciones aleatorias.

Desde el punto de vista matemático el ruido blanco es una idealización de la situación real, en la que el espectro de una señal no es en general constante. Esto se traduce en que los valores que toma $\xi(t)$ en un instante de tiempo dependen en cierta medida de los que toma para $s \neq t$. Como veremos en el siguiente apartado, el tratar con ruidos blancos facilita los cálculos, aunque plantea algún tipo de indefinición matemática.

2.3.2. Procesos de Markov

Se dice que un proceso gaussiano es un proceso markoviano si el estado del sistema en un tiempo $t \geq s$ no depende de los anteriores $t < s$ siendo s el instante actual. Éste es el análogo de una importante propiedad de las soluciones de problemas de valor inicial en ecuaciones diferenciales y por tanto estos procesos estocásticos son muy comunes. De manera precisa, diremos que un *proceso estocástico es markoviano* cuando la densidad de probabilidad verifica que

$$P(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) = P(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots). \quad (2.37)$$

El proceso de Wiener es también markoviano.

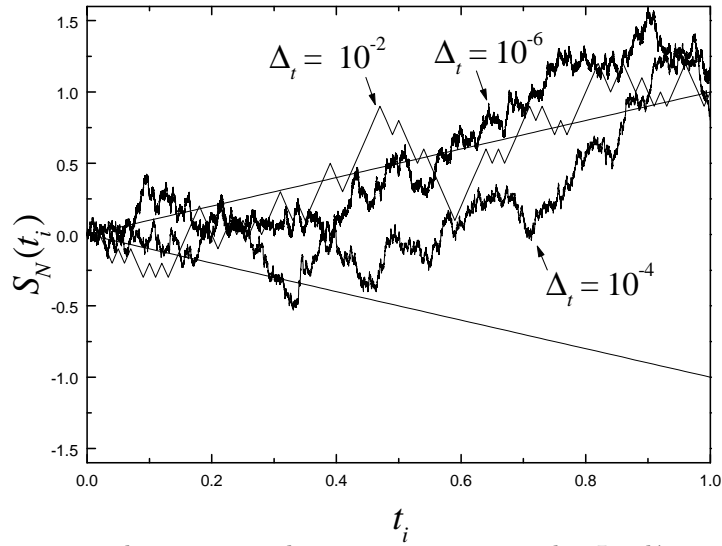


Figura 2.1: Caminante aleatorio para distintos pasos temporales. Las líneas rectas representan $\pm t_i$, es decir los valores entre los que está la varianza.

2.3.3. Caminante aleatorio

Históricamente éste fue el proceso estocástico que dio lugar a plantear las ecuaciones diferenciales estocásticas. Consideremos el proceso estocástico (en tiempos discretos) definido de la siguiente forma: subdividamos el intervalo T en N subintervalos con

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N-1} < t_N = T, \quad (2.38)$$

de igual longitud $\Delta_t = T/N$. En cada paso de tiempo realizamos pasos de longitud $\sqrt{\Delta_t} X_i$ donde $X_i = \pm 1$ con igual probabilidad. Después de n pasos definimos

$$S_N(t_n) = \sqrt{\Delta_t} (X_1 + X_2 + \dots + X_n). \quad (2.39)$$

El proceso $S_N(t)$ tiene incrementos independientes y se cumple que

$$\langle S_N(t_i) \rangle = 0, \quad \text{Var}(S_N(t_i)) = \Delta_t i. \quad (2.40)$$

Cuando $N = 1/\Delta_t \rightarrow \infty$ tenemos que $\text{Var}(S_N(t_i)) \rightarrow t_i$. Del mismo modo se tiene que $\text{Var}(S_N(t_i) - S_N(t_j)) \rightarrow (t_i - t_j)$ con $t_i > t_j$. Utilizando el teorema central del límite, tenemos que $S_N(t_i)$ converge cuando $N \rightarrow \infty$ en distribución a un proceso Wiener. A $S_N(t_i)$ se le conoce como *caminante aleatorio*. Por tanto una manera de generar numéricamente un proceso Wiener es a partir de un caminante aleatorio. En la figura 2.1 hemos representado las trayectorias del caminante aleatorio para diferentes Δ_t . La derivada temporal discreta de un caminante aleatorio

$$\frac{\Delta S_N}{\Delta_t} = \frac{S_N(t_i) - S_N(t_{i-1})}{\Delta_t}, \quad (2.41)$$

es también una aproximación del ruido blanco ya que $\langle \Delta S_N / \Delta_t \rangle = 0$ y $\langle (\Delta S_N / \Delta_t)^2 \rangle = \Delta_t^{-1}$.

La elección de que en cada instante de tiempo el caminante aleatorio tome pasos de $\pm \sqrt{\Delta_t}$ es la que hace que la varianza de los incrementos sea finita en el límite $N \rightarrow \infty$. Por ejemplo, si el tamaño de cada salto fuera proporcional a Δ_t entonces $\text{Var}(S_N(t_i)) \rightarrow 0$, mientras que si la distancia fuera proporcional a $\Delta_t^{1/4}$ entonces $\text{Var}(S_N(t_i)) \rightarrow \infty$.

2.4. Ecuaciones Diferenciales Estocásticas

2.4.1. Introducción

Una ecuación diferencial no es más que una regla que especifica el cambio de una variable dependiente en función de una variable independiente en términos de la función y sus derivadas. Una ecuación diferencial ordinaria del tipo

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = a(t, x), \quad (2.42)$$

puede entenderse como la forma degenerada de una ecuación diferencial estocástica en ausencia de aleatoriedad. Podemos reescribir (2.42) como

$$dx = a(t, x)dt, \quad (2.43)$$

o de manera integral

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t a(s, x(s))ds, \quad (2.44)$$

donde $x(t) = x(t; x_0, t_0)$ es una solución que cumple la condición inicial $x(t_0) = x_0$. Suponiendo que a es una función que cumple ciertas condiciones de regularidad (de Lipschitz) la solución de (2.42) existe y es única. Las soluciones de la ecuación (2.42) están relacionadas por la propiedad de evolución

$$x(t; x_0, t_0) = x(t; x(s; x_0, t_0), s), \quad (2.45)$$

para $t_0 \leq s \leq t$. Esta es la versión determinista de la propiedad de Markov (2.37).

La aplicabilidad de las ecuaciones diferenciales deterministas es reducida si queremos describir el comportamiento de sistemas sometidos a entornos o parámetros que fluctúan. En ese caso debemos reemplazar la ecuación (2.42) por la ecuación diferencial estocástica (EDE)³

$$\dot{X} = A(t, X, Y), \quad (2.46)$$

donde $Y(t)$ representa explícitamente un proceso estocástico. Por supuesto, la ecuación (2.46) es una ecuación más complicada que (2.42) desde dos puntos de vista:

- Dado que $Y(t)$ es un proceso estocástico, $X(t)$ lo es también y, por tanto, la solución de (2.46) vendrá dada por el conocimiento de la distribución de probabilidad de $X(t)$ para cada tiempo t . Es decir, la solución de (2.46) es una familia de funciones, mientras que la de (2.42) es sólo una función.
- El segundo problema, del que vamos a tratar en este apartado es que, si el proceso $Y(t)$ es suficientemente patológico (por ejemplo, si las trayectorias no son integrables), entonces el sentido de la ecuación (2.46) debe ser reinterpretado. En concreto (2.46) no puede ser interpretada como una ecuación diferencial ordinaria.

Para ser más concretos, estudiaremos ecuaciones del tipo⁴

$$\frac{dX}{dt} = a(X, t) + b(X, t)\xi(t), \quad X(t_0) = X_0, \quad (2.47)$$

³En este apartado de la memoria denotaremos con letras mayúsculas los procesos estocásticos $X(t)$ y con minúsculas los valores que pueden tomar, o las variables deterministas.

⁴La generalización de los resultados de este apartado y siguientes a sistemas de EDE es directa y puede encontrarse en [9, 74].

donde $\xi(t)$ es un ruido blanco. Del mismo modo que la solución de la ecuación (2.42) se puede expresar de manera integral, pediremos que la solución de la ecuación (2.46) verifique

$$X(t) = X_0 + \int_{t_0}^t a(s, X(s))ds + \int_{t_0}^t b(s, X(s))\xi(t)ds. \quad (2.48)$$

En general, la primera de las integrales puede interpretarse como una integral de Riemann. Sin embargo, la segunda es más problemática y no puede definirse de ninguna manera útil (ni siquiera como una integral de Riemann-Lebesgue). Para poder tratar con ella, la reemplazamos por

$$\int_{t_0}^t b(s, X(s))dW(s), \quad (2.49)$$

donde $W(s)$ es un proceso de Wiener y donde hemos aplicado que, al menos en el sentido de procesos estocásticos generalizados, $dW(s) = \xi(s)ds$. Como vimos en el apartado anterior un proceso estocástico puede no ser diferenciable, por lo que para evitar la notación $\frac{dX}{dt} = \dots$ diremos que la ecuación diferencial estocástica

$$dX = a(X, t)dt + b(X, t)dW(t), \quad (2.50)$$

tiene como solución la expresión (2.48).

La integral (2.49) no puede ser interpretada unívocamente, debido a que las variaciones de $W(s)$ no están acotadas, y por tanto debe ser definida en algún sentido. La definición más correcta desde el punto de vista matemático y la que dio lugar a la formulación matemática del llamado *cálculo estocástico* fue establecida por Itô en los años 40. Cualquier definición debe verificar una serie de propiedades. Por ejemplo, se debe cumplir que

1. Si b es una función que sólo depende del tiempo:

$$\int_{t_0}^t b(s)dW(s) = b(t)W(t) - b(t_0)W(t_0) - \int_{t_0}^t \frac{db(s)}{ds}W(s)ds, \quad (2.51)$$

donde la última integral se puede entender como una integral de Riemann-Stieltjes.

2. $\int_{t_0}^t dW(s) = W(t) - W(t_0)$.
3. $\int_{t_0}^t [b_1(s) + b_2(s)]dW(s) = \int_{t_0}^t b_1(s)dW(s) + \int_{t_0}^t b_2(s)dW(s)$.

El punto de partida de la definición de la integral está (al igual que la integral de Riemann) en las particiones del intervalo $[t_0, t]$. En cada partición de orden n tenemos las sumas

$$S_n = \sum_{i=1}^n b(\tau_i, X(\tau_i))(W_{t_i} - W_{t_{i-1}}), \quad (2.52)$$

donde $t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_n = t$, $t_{i-1} \leq \tau_i \leq t_i$. La manera más natural de definir la integral es tomarla como el límite (en algún sentido de convergencia) de las sumas anteriores cuando $\delta = \max_{i=1, \dots, n} |t_i - t_{i-1}| \rightarrow 0$. Itô adoptó el criterio de convergencia en media cuadrática. A pesar de eso, debido a que $W(t)$ tiene variaciones no acotadas en cualquier intervalo de

tiempo, la definición de la integral de Itô depende del punto τ_i que tomemos. Por ejemplo, si $\tau_i = (1 - a)t_{i-1} + at_i$ con $0 \leq a \leq 1$, y evaluemos la integral

$$\int_{t_0}^t W(s)dW(s), \quad (2.53)$$

utilizando las sumas (2.52) tenemos que

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} S_n = [W^2(t) - W^2(t_0)]/2 + (a - 1/2)(t - t_0), \quad (2.54)$$

en convergencia cuadrática. En la literatura podemos encontrar básicamente dos elecciones: si tomamos $a = 0$ obtenemos la definición de Itô de la integral estocástica, y tomando $a = \frac{1}{2}$ obtenemos la definición de Stratonovič. Ambas cumplen las propiedades 1-3 antes mencionadas, pero existen ciertas diferencias entre ellas:

- Desde el punto de vista probabilístico la integral de Itô es una martingala (como proceso estocástico función del límite superior) mientras que la de Stratonovič no.
- La integral de Stratonovič cumple la regla determinista de la cadena (como función del límite superior) mientras que la de Itô no.

Pero aún más importante que estas diferencias es el hecho de que la ecuación (2.47) no está definida hasta que especifiquemos en qué sentido debemos interpretar la última integral que aparece en la ecuación (2.48). Por ejemplo, en un intervalo infinitesimal $[t, t + dt]$ tenemos, utilizando (2.48), que

$$X(t + dt) = X(t) + a(t, X(t))dt + b(\tau, X(\tau))[W(t + dt) - W(t)], \quad (2.55)$$

donde $\tau = t$ si la integral es de Itô y $\tau = t + dt/2$ en el caso de la integral de Stratonovič. En este último caso, dado que $X(t + dt/2) = \frac{1}{2}[X(t + dt) + X(t)]$ la ecuación (2.55) nos dice que el valor de los incrementos infinitesimales de $X(t)$ dependen de los valores que esta variable tome en el futuro, mientras que en el caso de la integral de Itô sólo dependen de los valores que toma la variable $X(t)$ en el pasado. Debido a esto, la interpretación de la integral en (2.48) dependerá del contexto en el que estemos aplicando dicha ecuación. Por ejemplo, en la modelización de derivados financieros en los que $X(t)$ es el precio de una acción o activo elegiremos la interpretación de Itô, ya que el precio de un activo después de un periodo bursátil $[t, t + dt]$ sólo se conoce en el instante $t + dt$ [241]. En otros sistemas en los que el ruido es una idealización matemática de la aleatoriedad en el sistema. Por ello, esperaremos que exista cierta correlación entre las variables del sistema $X(t)$ y el ruido $\xi(t)$. En este caso debemos de utilizar la interpretación de Stratonovič.

En lo que sigue de memoria, y si no se especifica de otro modo, todas las ecuaciones diferenciales estocásticas se interpretan en el sentido de Itô. Si

$$I_f(t) = \int_{t_0}^t f(s)dW(s), \quad (2.56)$$

donde $f(s)$ es una función, algunas propiedades importantes de la integral de Itô son

$$\langle I_f(t) \rangle = 0, \quad (2.57)$$

$$\langle I_f(t)I_f(s) \rangle = \int_{t_0}^{\min(t,s)} \langle f^2(u) \rangle du. \quad (2.58)$$

En la última parte de este apartado volveremos sobre la definición de la integral estocástica.

2.4.2. Solución de las ecuaciones diferenciales estocásticas

Una vez definida la integral de Itô, la ecuación (2.48) define un proceso estocástico con trayectorias continuas (con probabilidad uno). Dicho proceso estocástico se denomina *solución* de la ecuación (2.47) que, además de ser continuo es también una función no anticipada, una martingala y un proceso markoviano, propiedades muy importantes desde el punto de vista probabilístico. La solución de (2.47) existe y es única (con probabilidad uno) si las funciones $a(t, x)$ y $b(t, x)$ cumplen las siguientes propiedades

1. (Condición de Lipschitz) Para cada $t \in [t_0, T]$, $x \in \mathbb{R}$, $y \in \mathbb{R}$

$$|a(t, x) - a(t, y)| + |b(t, x) - b(t, y)| \leq K|x - y|. \quad (2.59)$$

2. (Restricción en el crecimiento) Para cada $t \in [t_0, T]$, $x \in \mathbb{R}$

$$|a(t, x)|^2 + |b(t, x)|^2 \leq K(1 + |x|^2), \quad (2.60)$$

donde $K > 0$ es una constante. La demostración de este teorema de existencia y unicidad puede encontrarse en [9].

2.4.3. Fórmula de Itô

Como vimos en la sección anterior, se tiene que

$$\int_{t_0}^t W(s)dW(s) = [W^2(t) - W^2(t_0)]/2 - (t - t_0)/2, \quad (2.61)$$

lo cual nos indica que las reglas clásicas del cálculo integral no valen cuando tratamos con integrales de Itô. Expresando de forma diferencial la ecuación anterior, podemos decir que

$$d(W^2(t)) = 2W(t)dW(t) + dt. \quad (2.62)$$

Si construimos la diferencial de $W^2(t)$ formalmente (usando el teorema de Taylor) obtenemos:

$$d(W^2(t)) = W^2(t + dt) - W^2(t) = 2W(t)dW(t) + [dW(t)]^2. \quad (2.63)$$

Igualando las ecuaciones (2.62) y (2.63), podemos decir que

$$‘ (dW(t))^2 = dt ’ \quad (2.64)$$

en algún sentido. La ecuación anterior adquiere consistencia mediante el llamado *Teorema o Fórmula de Itô* [9]. Según éste si $u(t, x)$ es una función continua y con derivadas parciales continuas $\frac{\partial u}{\partial t}$, $\frac{\partial u}{\partial x}$ y $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ en $[t_0, T] \times \mathbb{R}$ y $X(t)$ es un proceso estocástico solución de la ecuación (2.47), entonces $Y(t) = u(t, X(t))$ verifica la ecuación diferencial estocástica

$$\begin{aligned} dY(t) = & \left(\frac{\partial u}{\partial t}(t, X(t)) + \frac{\partial u}{\partial x}(t, X(t))a(t, X(t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, X(t))b^2(t, X(t)) \right) dt \\ & + \frac{\partial u}{\partial x}(t, X(t))b(t, X(t))dW(t). \end{aligned} \quad (2.65)$$

La ecuación anterior nos dice que la regla de la cadena para las soluciones de EDE es diferente respecto a la de ecuaciones deterministas. La diferencia entre ambas (el tercer término dentro del paréntesis) se debe a que en las EDE, $(dW)^2$ es de orden dt y debemos de llegar hasta segundo orden en el desarrollo de Taylor.

2.4.4. Ejemplo: El proceso de Ornstein-Uhlenbeck

Con los conceptos introducidos en esta sección procedemos a integrar la EDE históricamente más antigua. Como veremos después, el movimiento browniano de una partícula sometida a fricción es la llamada *ecuación de Langevin*

$$\dot{X}(t) = -\alpha X(t) + \sigma \xi(t), \quad X(t_0) = X_0, \quad (2.66)$$

donde $\alpha > 0$ y σ son constantes. La EDE correspondiente a (2.66) es

$$dX(t) = -\alpha X(t)dt + \sigma dW(t), \quad X(t_0) = X_0. \quad (2.67)$$

siendo X_0 la condición inicial. La ecuación anterior es lineal, autónoma y su solución es

$$X(t) = e^{-\alpha t} X_0 + \sigma \int_{t_0}^t e^{-\alpha(t-s)} dW(s), \quad (2.68)$$

como se puede comprobar utilizando la fórmula de Itô (2.65), y que se conoce como *proceso de Ornstein-Uhlenbeck* (proceso de O-U). Como $W(t)$ es gaussiano la solución (2.68) es gaussiana siempre que la condición inicial lo sea. Los dos primeros momentos del proceso de O-U son

$$\langle X(t) \rangle = \langle X_0 \rangle e^{-\alpha t}, \quad (2.69)$$

$$\text{Cov}(X(t), X(s)) = e^{-\alpha(t+s)} [\text{Var}(X_0) + \sigma^2 (e^{2\alpha \min(t,s)} - 1) / 2\alpha], \quad (2.70)$$

luego cuando $t \rightarrow \infty$ la distribución de $X(t)$ tiende a una distribución normal con media cero y varianza $\sigma^2 / (2\alpha)$ para cualquier X_0 . Cuando X_0 está distribuida inicialmente de esta manera, el proceso de O-U es estacionario. En la literatura, se suele reservar el nombre de proceso de O-U cuando se cumple dicha propiedad. En ese caso la correlación o covarianza del proceso es

$$\text{Cov}(X(t+s), X(s)) = \frac{\sigma^2}{2\alpha} e^{-\alpha t}. \quad (2.71)$$

Aparte de constantes, el proceso de O-U es el único proceso estacionario gaussiano, resultado que se conoce como Teorema de Doob, y cuya demostración puede encontrarse en [53]. El proceso de O-U tiene trayectorias continuas con probabilidad uno. Además, su densidad espectral no es una constante, sino que

$$f(\lambda) = \frac{\sigma^2}{2\pi} \frac{1}{\lambda^2 + \alpha^2}, \quad (2.72)$$

y no todas las frecuencias temporales contribuyen por igual al proceso de O-U, por lo que a este tipo de procesos (aquéllos en los que la función espectral no es una constante) se los denomina *ruido de color*. Una medida de lo rápido que cambia un proceso estocástico, en el tiempo es lo que se denomina *tiempo de correlación*, τ_{cor} . Formalmente, si el proceso es estacionario se define como

$$\tau_{\text{cor}} = \frac{1}{\text{Cov}(X(0), X(0))} \int_0^\infty \text{Cov}(X(t+s), X(t)) ds. \quad (2.73)$$

Esta ecuación se puede interpretar de la siguiente manera: la parte derecha de la misma no es más que el área (normalizada) de la función de correlación. Si el proceso tiene una

correlación temporal muy grande, el área es grande y también τ_{cor} . En el caso del proceso de O-U se tiene que

$$\tau_{\text{cor}} = \alpha^{-1}. \quad (2.74)$$

Como vimos antes, el ruido blanco es un proceso gaussiano totalmente descorrelacionado en el tiempo, lo que significa que $\tau_{\text{cor}} = 0$. De este modo, podríamos decir que el ruido blanco no es más que el límite cuando $\alpha \rightarrow \infty$ de un proceso de O-U. Sin embargo eso no es cierto, ya que si tomamos el límite anterior en la densidad espectral tenemos que

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} f(\lambda) = 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}, \quad (2.75)$$

lo que significa que el límite es degenerado, pues no sólo el proceso tiende a estar descorrelacionado sino que también desaparece. Para recuperar el ruido blanco debemos cambiar alguna propiedad más del proceso de O-U, en particular, la varianza del mismo. Si tomamos $\sigma = \alpha$, entonces

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} f(\lambda) = \frac{1}{2\pi}, \quad (2.76)$$

la función espectral del ruido blanco, mientras que la correlación tiende a

$$\text{Cov}(X(t+s), X(t)) = \delta(s). \quad (2.77)$$

La igualdad entre el límite de un proceso de O-U y el ruido blanco no se restringe sólo a este nivel: si definimos el proceso

$$Y(t) = \int_0^t X(t)dt, \quad (2.78)$$

se tiene que

$$\langle Y(t) \rangle = 0, \quad \langle Y^2(t) \rangle = t + \frac{1}{2\alpha}(2e^{-\alpha t} - 1). \quad (2.79)$$

Por tanto, cuando $\alpha \rightarrow 0$, $Y(t)$ converge en distribución a un proceso de Wiener. Aquí tenemos (utilizando para ello una generalización con tiempo de correlación no nulo) una justificación de la igualdad

$$\frac{dW}{dt} = \xi(t), \quad (2.80)$$

que puede entenderse como el límite cuando $\alpha \rightarrow \infty$ de

$$\frac{dY}{dt} = X(t). \quad (2.81)$$

El proceso de O-U no es más que el resultado de aplicar un filtro pasa-baja de anchura τ_{cor}^{-1} al ruido blanco [52]. Dado que en los sistemas reales el tiempo de correlación nunca es nulo, podemos entender el ruido blanco como la idealización matemática $\tau_{\text{cor}} \rightarrow 0$. En la figura 2.2 vemos cómo varía el proceso de O-U cuando $\tau_{\text{cor}} \rightarrow 0$.

2.4.5. Procesos de difusión: La ecuación de Fokker-Planck

Se dice que un proceso markoviano $X(t)$ lo es de difusión si para todo $\epsilon > 0$ y $x \in \mathbb{R}$ se verifica

$$\lim_{t \downarrow s} \frac{1}{t-s} \int_{|y-x|>\epsilon} p(s, x; t, y)dy = 0; \quad (2.82)$$

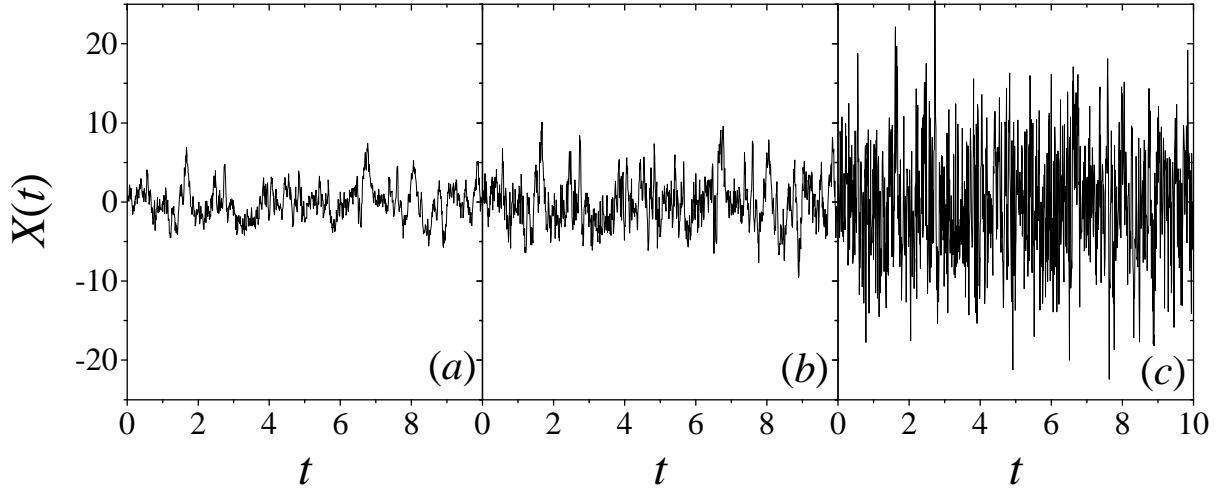


Figura 2.2: Proceso de O-U estacionario para diferentes valores del tiempo de correlación. $\tau_{\text{cor}} = 0,1$ (panel a), $\tau_{\text{cor}} = 0,05$ (panel b) y $\tau_{\text{cor}} = 0,01$ (panel c).

$$\lim_{t \downarrow s} \frac{1}{t-s} \int_{|y-x| \leq \epsilon} (y-x) p(s, x; t, y) dy = f(s, x); \quad (2.83)$$

y

$$\lim_{t \downarrow s} \frac{1}{t-s} \int_{|y-x| \leq \epsilon} (y-x)^2 p(s, x; t, y) dy = g^2(s, x), \quad (2.84)$$

donde $f(s, x)$ y $g(s, x)$ son funciones bien definidas y $p(s, x; t, y)$ es la densidad de probabilidad de transición del proceso $X(t)$. A $f(s, x)$ se la suele denominar *drift*⁵, mientras que $g(s, x)$ se le denomina *coeficiente de difusión*. La propiedad (2.82) asegura que el proceso markoviano $X(t)$ tenga trayectorias continuas con probabilidad uno, mientras que (2.83) y (2.84) hacen que el valor medio y la varianza de las variaciones de $X(t)$ sean proporcionales al intervalo de tiempo. Por ello, los procesos de difusión pueden ser básicamente definidos por los dos primeros momentos, lo que nos puede llevar a pensar que todo proceso de difusión es gaussiano. De hecho no es así y por ejemplo, el único proceso markoviano que es gaussiano y difusivo es el de O-U.

La dinámica de la probabilidad de transición $p(t, x; s, y)$ está únicamente determinada por los coeficientes de *drift* y difusión y se tiene que

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} \{f(t, y) p\} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{g^2(t, y) p\} = 0, \quad (s, x) \text{ fijos}, \quad (2.85)$$

y

$$\frac{\partial p}{\partial t} + f(s, x) \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{2} g^2(s, x) \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = 0, \quad (t, y) \text{ fijos}, \quad (2.86)$$

que se conocen como ecuaciones de Kolmogorov adelantadas y retrasadas respectivamente. La ecuación (2.85) es la adjunta de (2.86) y se conoce como la *ecuación de Fokker-Planck*. Multiplicando a ambos lados de dicha ecuación por la densidad de probabilidad $p(s, x)$ e integrando sobre x , obtenemos la ecuación de evolución de la densidad de probabilidad $p(t, y)$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \{f(t, y) p\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{g^2(t, y) p\}. \quad (2.87)$$

⁵La traducción podría ser *arrastre* o *deriva*.

Por ejemplo, el proceso de Wiener es también difusivo con coeficientes

$$f(t, y) = 0, \quad g^2(t, y) = 1, \quad (2.88)$$

siendo su densidad de probabilidad

$$p(t, w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-w^2/(2t)}. \quad (2.89)$$

Otro ejemplo es el proceso de O-U cuyos coeficientes son:

$$f(t, y) = -\alpha y, \quad g^2(t, y) = \sigma^2, \quad (2.90)$$

cuya densidad de probabilidad estacionaria ($t \rightarrow \infty$) es

$$p(t, x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x^2}{\sigma^2/(2\alpha)}\right), \quad (2.91)$$

donde hemos supuesto que es estacionario. Como vemos el límite en el que $\alpha \rightarrow \infty$, $\sigma = \alpha$ hace que la varianza del proceso tienda a infinito.

Las soluciones de las ecuaciones diferenciales estocásticas también son procesos de difusión. Si $X(t)$ verifica la ecuación (2.47), el coeficiente de *drift* es precisamente $f(t, x) = a(t, x)$, mientras que el de difusión es $g(t, x) = b(t, x)$. Tenemos por tanto una dualidad entre las ecuaciones diferenciales estocásticas y las de Fokker-Planck, siempre que los coeficientes cumplan condiciones de regularidad suficientes (que existan las derivadas).

2.4.6. Integral de Stratonovič

Como vimos antes, la de Itô no es la única manera de definir la integral (2.49). También podemos tomar $a = \frac{1}{2}$ en la definición y a dicha integral se la denomina *integral de Stratonovič*. Para distinguir entre ambas definiciones se suelen denotar por

$$\int f(t, X(t)) dW(t), \quad (2.92)$$

a la integral de Itô y

$$\int f(t, X(t)) \circ dW(t), \quad (2.93)$$

a la de Stratonovič. Aunque la definición de Stratonovič cumple las reglas del cálculo, es decir:

$$\int_{t_0}^t W(s) dW(s) = \frac{1}{2} [W^2(t_0) - W^2(t)], \quad (2.94)$$

no verifica, por ejemplo, que sea una martingala⁶ o que el valor medio de la misma no sea cero. Además las soluciones de una EDE en el sentido de Itô son procesos de difusión con $f(t, x) = a(t, x)$ y $g(t, x) = b(t, x)$ mientras que si interpretamos la integral en el sentido de Stratonovič, los coeficientes de *drift* y difusión no son $a(t, x)$ y $b(t, x)$ directamente.

Como vimos antes, al intentar describir la dinámica del sistema mediante la ecuación (2.47) debemos escoger entre la interpretación de Itô de la EDE

$$dX(t) = a(t, X(t))dt + b(t, X(t))dW(t), \quad (2.95)$$

⁶Algunos de los teoremas más importantes de la asintótica de procesos estocásticos requieren que el proceso sea una martingala [9].

o la de Stratonovič

$$dX(t) = a(t, X(t))dt + b(t, X(t)) \circ dW(t). \quad (2.96)$$

Cuando el ruido no es blanco está claro que no existe este problema de interpretación de la integral, por lo que el escogeremos de (2.95) o (2.96) la que describa de manera más apropiada el sistema en el límite de ruido blanco. Por ejemplo, si tenemos una secuencia de procesos aleatorios $W^{(n)}(t)$ que son continuos de variación acotada y con derivada continua a trozos que converjan con probabilidad uno a un proceso Wiener, entonces bajo ciertas condiciones de las funciones $a(t, x)$ y $b(t, x)$ las soluciones de

$$dX^{(n)}(t) = a(t, X^{(n)}(t))dt + b(t, X^{(n)}(t))dW^{(n)}(t), \quad (2.97)$$

que se pueden calcular utilizando integrales de Riemann ordinarias, convergen con probabilidad uno a la solución de la ecuación (2.96). Este resultado, que se conoce como el Teorema de Wong-Zakai es muy importante a la hora de tomar una u otra descripción de una integral estocástica en una EDE. Su demostración en un caso más general puede encontrarse en [96].

Las soluciones de las ecuaciones anteriores son diferentes. Sin embargo, estas ecuaciones están relacionadas: si $X(t)$ verifica (2.96) entonces la EDE en el sentido de Itô que verifica es

$$dX(t) = \left(a(t, X(t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial b}{\partial x}(t, X(t))b(t, X(t)) \right) dt + b(t, X(t)) dW(t). \quad (2.98)$$

Recíprocamente, si $X(t)$ es solución de (2.95) la ecuación de Stratonovič que verifica es

$$dX(t) = \left(a(t, X(t)) - \frac{1}{2} \frac{\partial b}{\partial x}(t, X(t))b(t, X(t)) \right) dt + b(t, X(t)) \circ dW(t). \quad (2.99)$$

Las soluciones de la ecuación (2.96) son también procesos de difusión con coeficientes *drift* y difusión dados por

$$f(t, x) = a(t, x) + \frac{1}{2} \frac{\partial b}{\partial x}(t, X(t))b(t, X(t)), \quad g(t, x) = b(t, x). \quad (2.100)$$

En el caso de que $b(t, x) = b(t)$, es decir, que el ruido es aditivo, las ecuaciones (2.95) y (2.96) describen el mismo proceso: la solución de ambas es la misma con probabilidad 1.

Veamos un ejemplo de las dos descripciones. Consideremos el procesos estocástico $X(t)$ definido por la ecuación

$$dX(t) = aX(t)dt + bX(t)dW(t), \quad X(0) = X_0, \quad (2.101)$$

cuya solución es

$$X(t) = X_0 e^{(a-b^2/2)t+bW(t)} \quad (2.102)$$

Sin embargo, si tomamos la ecuación

$$dX(t) = aX(t)dt + bX(t) \circ dW(t), \quad X(0) = X_0, \quad (2.103)$$

su solución es

$$X(t) = X_0 e^{at+bW(t)}. \quad (2.104)$$

Las propiedades de las soluciones (2.102) y (2.104) son muy diferentes. Se tiene que $\langle X(t) \rangle = X_0 e^{at}$ y $\langle X(t) \rangle = X_0 e^{at+b^2t/2}$ respectivamente si suponemos que X_0 es una constante. Si

$a < 0$ esto significa que el valor medio de la solución de (2.101) tiende a cero, mientras que sólo tiende a cero si $a + b^2/2 < 0$ para la solución de (2.103).

En esta memoria utilizaremos la interpretación de Itô por ser más fácilmente tratable desde el punto de vista matemático, aunque uno siempre puede trabajar en la interpretación de Stratonovič sin más que aplicar (2.99). Sin embargo, debido a que la mayoría de las ecuaciones estocásticas que trataré poseen ruido aditivo, la distinción anterior carece de sentido, ya que ambas interpretaciones dan lugar a los mismo resultados.

2.5. Ecuaciones en derivadas parciales estocásticas

Una ecuación diferencial ordinaria describe el movimiento de un punto en el espacio de fases. Una ecuación en derivadas parciales (EDP) describe la evolución en el tiempo de una función, lo que puede entenderse como el movimiento en un espacio de Hilbert. Del mismo modo que una EDE ordinaria puede entenderse como un proceso estocástico en el espacio de fases, una EDP estocástica (EDPE) puede interpretarse como un proceso estocástico con valores en un espacio de dimensión infinita H de funciones de la variable espacial \mathbf{x} . La motivación típica para considerar EDPEs es la de incluir fluctuaciones espaciales y temporales que han sido despreciadas en la derivación de la ecuación para la dinámica de nuestro sistema. Su uso se extiende desde problemas de turbulencia hasta sistemas de mecánica estadística, propiedades de materiales, fracturas, flujo de sistemas multicomponentes o economía financiera [77, 241, 208].

El caso más sencillo es aquél en el que añadimos a nuestra ecuación en derivadas parciales un *ruido blanco espacio-temporal* $\xi(\mathbf{x}, t)$ [178]. Para definir este ruido, introducimos el concepto de *hoja Browniana* $W(\mathbf{x}, t)$: éste es un proceso estocástico definido en H que es gaussiano y verifica

$$\langle W(\mathbf{x}, t) \rangle = 0, \quad \langle W^2(\mathbf{x}, t) \rangle = tV_{\mathbf{x}}, \quad (2.105)$$

donde $V_{\mathbf{x}}$ es el volumen de $[0, \mathbf{x}]$. Con ello, el ruido blanco se define como

$$\frac{\partial^2 W(\mathbf{x}, t)}{\partial t \partial \mathbf{x}} = \xi(\mathbf{x}, t), \quad (2.106)$$

en el sentido de procesos estocásticos generalizados. Por tanto, $\xi(\mathbf{x}, t)$ es un proceso gaussiano que verifica

$$\langle \xi(t, \mathbf{x}) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t, \mathbf{x}) \xi(t', \mathbf{x}') \rangle = \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (2.107)$$

donde hemos supuesto que $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$. Del mismo modo que definimos la integral de Itô para ecuaciones diferenciales ordinarias, podemos extender esta definición a $\xi(\mathbf{x}, t)$ y definir la integral

$$\int_0^t \int_{\mathcal{D}} \phi(\mathbf{x}, s) \xi(\mathbf{x}, s) ds d^d \mathbf{x}, \quad (2.108)$$

donde $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$.

En una dimensión espacial, la solución de una EDPE es un proceso estocástico con valores en un espacio de funciones continuas con probabilidad uno, es decir, para $\omega \in \Omega$ y t fijos, $X(\omega, x, t)$ es una función continua de x con probabilidad uno [178]. Del mismo modo para x fijo tenemos un proceso estocástico. Sin embargo, en dimensión mayor, la solución de una EDPE no es tan fácil de entender, puesto que $X(t, \mathbf{x})$ como proceso estocástico no necesariamente tiene que ser continuo con probabilidad uno. Esto se manifiesta en que, de

manera general, la función de correlación $\langle X(t, \mathbf{x})X(t, \mathbf{x}') \rangle$ diverge cuando $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ en $d > 1$. A pesar de este problema, se puede extender el concepto de solución de una EDPE en $d > 1$ considerando soluciones generalizadas o débiles [178, 208].

Numéricamente, las EDPE se aproximan por un conjunto de EDE. Hay dos maneras de hacerlo: utilizando un método de diferencias finitas con paso espacial Δ_x , o el método espectral, en el que $X(\mathbf{x}, t)$ se escribe en función de los coeficientes de su expansión de Fourier. La idea es que una elección apropiada de un sistema de N EDE hace que su solución tienda a la solución de la EDPE cuando $N \rightarrow \infty$. En $d = 1$ este límite está bien definido y, por ejemplo, las correlaciones espaciales convergen. Sin embargo, en $d > 1$ cuando hacemos $N \rightarrow \infty$ dichas correlaciones divergen. Este hecho estará presente en varios problemas a lo largo de esta memoria. Desde el punto de vista físico el hecho de que las correlaciones diverjan para $d > 1$ se debe a suponer que las fluctuaciones actúan a todas las escalas espaciales y puede ser remediado introduciendo una longitud que denominaremos *cut-off* que hace que el efecto del ruido sea nulo por debajo de esta longitud, es decir, un filtro pasa-baja espacial. Por ejemplo, en el caso del método de las diferencias finitas las N ecuaciones se obtienen suponiendo un paso espacial Δ_x en un intervalo de longitud $L = N\Delta_x$. En ese caso el límite $\Delta_x \rightarrow 0$ está mal definido y debemos tomar siempre $0 < \Delta_x \ll 1$ [152]. Esta aparente arbitrariedad a la hora de escoger un *cut-off* en nuestras ecuaciones puede tener base en ciertas propiedades físicas del sistema. Por ejemplo, en el estudio del crecimiento de las superficies veremos que Δ_x puede ser como mínimo el espaciado entre los átomos. Para terminar este apartado veamos un ejemplo para las ecuaciones parabólicas estocásticas lineales.

2.5.1. Ejemplo: Ecuación de Edwards-Wilkinson

Mediante este ejemplo pretendemos ilustrar las propiedades descritas en el apartado anterior. Tomemos la EDPE parabólica lineal

$$\frac{\partial X}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = \nabla^2 X(\mathbf{x}, t) + \xi(\mathbf{x}, t), \quad (2.109)$$

que se conoce como la ecuación de Edwards-Wilkinson y fue introducida como un modelo de evolución de intercaras [55] y donde $\nabla^2 = \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ es el operador laplaciano en dimensión d y $\mathbf{x} \in [0, L]^d$. Utilizando el método espectral (véase apéndice A) podemos ver que la varianza en el punto \mathbf{x} toma el valor asintótico:

$$\langle X^2(t \rightarrow \infty, \mathbf{x}) \rangle \sim \int_{\pi/L}^{\pi/\Delta_x} \mathbf{k}^{d-3} d^d \mathbf{k}. \quad (2.110)$$

De este modo:

$$\langle X^2(t \rightarrow \infty, x) \rangle \sim L \quad d = 1, \quad (2.111)$$

$$\langle X^2(t \rightarrow \infty, \mathbf{x}) \rangle \sim \ln \Delta_x^{-1} \quad d = 2, \quad (2.112)$$

$$\langle X^2(t \rightarrow \infty, \mathbf{x}) \rangle \sim \Delta_x^{2-d} \quad d > 2, \quad (2.113)$$

de manera que la varianza es infinita para dimensión mayor o igual que $d = 2$ en el límite $\Delta_x \rightarrow 0$. Por debajo de dicha dimensión las correlaciones son finitas y la solución de la ecuación es un proceso gaussiano finito. Sin embargo, para dimensiones mayores de dos, la solución es un proceso gaussiano con correlaciones infinitas⁷.

⁷Hay que distinguir entre este límite, en el que el tamaño del intervalo de integración es finito y el límite $L \rightarrow \infty$ que tomaremos en el siguiente capítulo, donde Δ_x es fijo y distinto de cero. Entonces se tiene que $\langle X^2(t \rightarrow \infty, x) \rangle \sim L^{2-d}$, con lo que para $d > d_c^{(1)} = 2$ la varianza es finita si Δ_x es fijo.

Por tanto en el caso $d > 1$ las derivadas parciales que aparecen en las EDPE de esta memoria han de entenderse en el sentido generalizado o bien como operadores discretos que actúan sobre un retículo espacial con $\Delta_x > 0$.

2.6. Ecuación de Langevin

En esta sección veremos cómo las propiedades de sistemas estadísticos dentro y fuera del equilibrio pueden aproximarse mediante una ecuación diferencial estocástica, que es lo que se denomina el formalismo de la ecuación de Langevin.

2.6.1. Movimiento Browniano

El primer sistema estadístico que fue estudiado mediante EDE es el movimiento browniano. En 1827 Robert Brown descubrió que las partículas de polen en suspensión tenían movimientos aleatorios. En 1905 A. Einstein dio una explicación correcta a dicho movimiento: en vez de fijarse en la trayectorias de una sola partícula, Einstein formuló una descripción probabilística válida para un conjunto de ellas. De este modo, la densidad de de partículas $n(\mathbf{x}, t)$ que podemos encontrar en el punto \mathbf{x} e instante de tiempo t , verifica la ecuación

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 n, \quad (2.114)$$

donde D es una constante positiva y ∇^2 es el operador laplaciano en dimensión $d = 3$. Si la condición inicial es que todas las partículas se encuentran en $\mathbf{x} = 0$ para $t = 0$, la solución a la ecuación anterior es

$$n(\mathbf{x}, t) = \frac{N}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\mathbf{x}^2/4Dt} \quad (2.115)$$

y, por tanto, la posición media es cero y la varianza de la posición de las partículas aumenta linealmente con el tiempo

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \rangle(t) &= 0, \\ \langle \mathbf{x}^2 \rangle(t) &= 6Dt. \end{aligned} \quad (2.116)$$

Después de los conceptos introducidos en la sección anterior, diríamos que $\mathbf{x}(t)$ no es más que un proceso de Wiener tridimensional (es decir que cada componente es un proceso de Wiener). Sin embargo, la aproximación anterior al problema es fenomenológica (de hecho no permite calcular la constante de difusión en término de cantidades microscópicas). En 1908 Langevin utilizó un tratamiento diferente que, de algún modo, puede considerarse como complementario del de Einstein. En su planteamiento, Langevin quería describir la trayectoria de una partícula Browniana como el resultado de aplicar la ley de Newton a dicha partícula (fuerza=masa×aceleración), y supuso que hay dos fuerzas actuando sobre la partícula: una fuerza de fricción que, de acuerdo a la ley de Stockes, es proporcional a la velocidad, y una fuerza aleatoria $\boldsymbol{\xi}(t)$ que representa la parte errática del movimiento y que puede ser debida al choque con las partículas del fluido. De este modo la ecuación de movimiento es:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -6\pi\eta a \mathbf{v} + \boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.117)$$

donde η es el coeficiente de viscosidad, a es el radio de la partícula Browniana (suponiendo que es esférica) y $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt}$ es la velocidad tridimensional de la misma. ¿Cuáles son las

propiedades de la fuerza $\boldsymbol{\xi}(t)$? Langevin supuso que su media era nula y que su correlación con la posición de la partícula es cero:

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{\xi}(t) \rangle &= 0, \\ \langle \mathbf{x}(t) \cdot \boldsymbol{\xi}(t) \rangle &= 0.\end{aligned}\quad (2.118)$$

De este modo, multiplicando (2.117) por \mathbf{x} y tomando promedios respecto a las realizaciones de $\boldsymbol{\xi}(t)$ tenemos que

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 \langle \mathbf{x}^2 \rangle}{dt^2} = m \langle \mathbf{x}^2 \rangle - 3\pi a \eta \frac{d \langle \mathbf{x} \rangle}{dt}.\quad (2.119)$$

Langevin supuso que la partícula browniana está en equilibrio térmico con el fluido que la rodea: esto implica en particular que, de acuerdo al teorema de equipartición [97], el promedio de la energía cinética es $\langle m\mathbf{v}^2/2 \rangle = 3k_B T/2$ (k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura de un fluido). De esta manera la ecuación (2.119) se puede resolver y en el régimen asintótico se tiene que

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x} \rangle &= 0, \\ \langle \mathbf{x}^2 \rangle &= \frac{k_B T}{\pi \eta a} t.\end{aligned}\quad (2.120)$$

que es la misma ley de difusión de Einstein, pero donde ahora tenemos una expresión explícita para el coeficiente de difusión

$$D = \frac{k_B T}{6\pi \eta a}.\quad (2.121)$$

Las condiciones de la ecuación (2.118) las cumple un ruido blanco gaussiano. De esta manera, la solución de la ecuación (2.117) es un proceso de O-U. La densidad de probabilidad de velocidades, $n(\mathbf{v}, t)$ verifica la ecuación de Fokker-Planck complementaria de la ecuación estocástica (2.117)

$$\frac{\partial n(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [6\pi \eta a \mathbf{v} n(\mathbf{v}, t)] + \frac{q^2}{2} \nabla_{\mathbf{v}}^2 n(\mathbf{v}, t),\quad (2.122)$$

donde hemos supuesto que $\boldsymbol{\xi}(t)$ es un ruido blanco con $\langle \boldsymbol{\xi}(t) \cdot \boldsymbol{\xi}(t') \rangle = q\delta(t - t')$. Para que se verifique (2.121) tenemos que pedir que $q = 12\pi \eta a k_B T$.

La ecuación (2.117) relaciona dos tipos de fuerza que actúan en nuestro sistema: por un lado el sistema está sometido a fluctuaciones térmicas $\boldsymbol{\xi}(t)$, pero también reacciona frente a esas fluctuaciones de acuerdo a la ley de Stokes. De este modo la ecuación (2.117) es efectiva ya que relaciona propiedades macroscópicas y microscópicas del sistema. Las relaciones entre los coeficientes del ruido (cantidades microscópicas) y las cantidades macroscópicas del sistema constituyen lo que se denomina *relaciones de fluctuación-disipación* de la que (2.121) es el ejemplo más sencillo.

El ruido puede entenderse como el promedio de los efectos del fluido sobre una partícula prueba: es decir nos quedamos con unos pocos grados de libertad para describir la evolución de la partícula modelizando el resto mediante un proceso aleatorio, más concretamente un ruido blanco.

La ecuación de Fokker-Planck asociada a la ecuación (2.117) tiene una solución estacionaria definida por

$$n_{est}(\mathbf{v}) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{1}{2k_B T} m \mathbf{v}^2\right),\quad (2.123)$$

que es el factor de Boltzmann para una colectividad canónica a temperatura T y con energía libre

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2. \quad (2.124)$$

De este modo la ecuación (2.117) puede reescribirse como

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\Gamma\nabla_{\mathbf{v}}\mathcal{F} + \sqrt{2\Gamma k_B T}\boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.125)$$

donde $\Gamma = 6\pi\eta a/m^2$ y hemos tomado $\boldsymbol{\xi}(t)$ como un ruido blanco con $\langle \boldsymbol{\xi}(t) \cdot \boldsymbol{\xi}(t') \rangle = \delta(t-t')$. En esta forma, queda más claro que la dinámica del sistema se debe a dos factores: el primero de ellos tiende a minimizar la energía libre del sistema, mientras que el segundo da cuenta del acoplamiento del sistema con un reservorio a temperatura T . Las propiedades del equilibrio se deben a los dos términos.

2.6.2. Dinámica conservada y no conservada

En general si tenemos un sistema con varios grados de libertad x_1, \dots, x_N , cuya energía libre es $\mathcal{F}(x_1, \dots, x_N)$ y en contacto con un reservorio a temperatura T la *ecuación de Langevin generalizada* es

$$\frac{dx_i}{dt} = -\Gamma \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x_i} + q\xi_i(t), \quad (2.126)$$

donde $\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = \delta_{ij}\delta(t-t')$. La ecuación de Fokker-Planck correspondiente para la densidad de probabilidad $p(x_1, \dots, x_N; t)$ es

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \Gamma \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x_i} p \right] + \frac{q^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 p}{\partial x_i^2}. \quad (2.127)$$

Si se cumple la relación de fluctuación-disipación $q^2 = 2\Gamma k_B T$, esta ecuación admite una solución estacionaria

$$p_{est}(x_1, \dots, x_N) = \mathcal{Z} \exp\left(-\frac{\mathcal{F}}{k_B T}\right), \quad (2.128)$$

donde \mathcal{Z} es la función de partición de la colectividad canónica.

$$\mathcal{Z} = \int dx_1 \cdots dx_N \exp\left(-\frac{\mathcal{F}}{k_B T}\right). \quad (2.129)$$

Además de reproducir las propiedades de equilibrio de la colectividad canónica con energía libre \mathcal{F} la ecuación (2.126) es un *modelo* para la dinámica de aproximación al equilibrio, y de cómo relajan las fluctuaciones cuando nos encontramos cerca del equilibrio. En la notación de Hohenberg y Halperin [95] la ecuación (2.126) se denomina *modelo A* para la dinámica disipativa de un sistema. El parámetro Γ es una propiedad del sistema cuando éste se encuentra fuera del equilibrio y define el tiempo medio de relajación del sistema, Γ^{-1} . En el modelo A, ni el parámetro de orden $\sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle$ ni la energía libre del sistema se conservan. Utilizando la fórmula de Itô (2.65) encontramos que

$$\frac{d\langle \mathcal{F} \rangle}{dt} = -\Gamma \sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle + \Gamma k_B T \sum_{i=1}^N \left\langle \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial x_i^2} \right\rangle. \quad (2.130)$$

En general el miembro derecho de la ecuación (2.130) no es nulo. Por ejemplo, en el caso de que \mathcal{F} venga dado por la ecuación (2.124), se tiene que

$$\frac{d\langle \mathcal{F} \rangle}{dt} = -2\Gamma m \langle \mathcal{F} \rangle + 3\Gamma T m, \quad (2.131)$$

y por tanto \mathcal{F} varía en el tiempo. La ecuación (2.131) nos dice que, en equilibrio ($t \rightarrow \infty$), el sistema verifica el teorema de equipartición en el que la energía libre vale $\frac{1}{2}k_B T$ por cada grado de libertad cuadrático de \mathcal{F} . En un sistema genérico el teorema de equipartición generalizado [97] nos dice que

$$\left\langle x_i \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x_i} \right\rangle = k_B T. \quad (2.132)$$

Es interesante comprobar que este teorema se puede derivar a partir de la ecuación (2.126) y utilizando el cálculo de Itô. Para ello calculamos la variación temporal del segundo momento

$$\frac{d\langle x_i^2 \rangle}{dt} = -2\Gamma \langle x_i \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x_i} \rangle + 2\Gamma k_B T. \quad (2.133)$$

En equilibrio se tiene que $\frac{d\langle x_i^2 \rangle}{dt} = 0$, y obtenemos la ecuación (2.132). El teorema de equipartición es importante desde el punto de vista teórico, pero mucho más desde el punto de vista numérico, ya que sirve de comprobación y medida de la temperatura en las simulaciones de la ecuación de Langevin (2.126).

El modelo A describe la dinámica puramente disipativa de un sistema en el que no se conserva el parámetro de orden. Supongamos, por ejemplo, que x_i son grados de libertad de un sistema extendido en el que i representa la posición en dimensión $d \geq 1$. Para modelizar la dinámica disipativa de este sistema suponiendo que se conserva el parámetro de orden $\sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle$, tomamos $\Gamma = \lambda \nabla^2$ y obtenemos la ecuación de Cahn-Hilliard o *modelo B*

$$\frac{dx_i}{dt} = -\lambda \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x_i} + \zeta_i(t), \quad (2.134)$$

donde $\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = 2\Gamma k_B T \nabla^2 \delta_{ij} \delta(t - t')$ y ∇^2 es el operador laplaciano. En este caso se tiene que $\sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle(t) = 0$.

En los casos anteriores, el sistema alcanza el equilibrio después de cierto tiempo. En otras situaciones dicho equilibrio no se alcanza nunca, como en el caso de que el sistema esté sometido a la acción de un campo $F_i(t)$ que actúa sobre cada uno de los grados de libertad. En tal caso, el modelo A se generaliza a

$$\frac{dx_i}{dt} = -\Gamma \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x_i} + F_i(t) + \sqrt{2\Gamma k_B T} \zeta_i(t). \quad (2.135)$$

La elección del modelo A o B vendrá determinada por las simetrías y las leyes de conservación de nuestro sistema. De manera general, las ecuaciones (2.126), (2.134) y (2.135) son EDPE. En el modelo A aparecen operadores en derivadas parciales debido a las interacciones entre los distintos grados de libertad, mientras que en el modelo B aparecen explícitamente debido a la elección del parámetro Γ .

2.6.3. Equilibrio y soluciones estacionarias fuera del equilibrio

En la literatura existen ejemplos de sistemas estadísticos cuya ecuación dinámica no puede expresarse de ninguna de las formas anteriores. Generalmente son modelos para

sistemas lejos del equilibrio en los que la derivación de la ecuación estocástica es puramente fenomenológica. Las ecuaciones para dichos sistemas se pueden expresar de la forma

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^M g_{ij}(\mathbf{x})\xi_j(t), \quad (2.136)$$

donde, por simplicidad, suponemos que $\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = 2\varepsilon\delta_{ij}\delta(t-t')$ y $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$. Pese a esto, en algunos casos, bien porque el ruido es muy pequeño [79] o bien porque el sistema tiene soluciones estacionarias para la ecuación de Fokker-Planck correspondiente [52], podemos definir una función $V(\mathbf{x})$ de manera que⁸

$$p_{est}(\mathbf{x}) \simeq \mathcal{N} \exp\left(-\frac{V(\mathbf{x})}{\varepsilon}\right). \quad (2.137)$$

Por ello, es conveniente definir lo que entendemos por un sistema en equilibrio. La ecuación de Fokker-Planck correspondiente a (2.136) es

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} [f_i(\mathbf{x})p] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} [D_{ij}p], \quad (2.138)$$

donde $D_{ij}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^M g_{ik}(\mathbf{x})g_{jk}(\mathbf{x})$, que puede escribirse como una ecuación de continuidad

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial J_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.139)$$

siendo las componentes del vector corriente \mathbf{J}

$$J_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} [D_{ij}(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t)]. \quad (2.140)$$

La solución estacionaria de la ecuación (2.138) (si existe) verifica la ecuación

$$0 = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ -f_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij} \right\} p_{est}(\mathbf{x}). \quad (2.141)$$

La existencia de esta solución implica que el sistema posee una corriente estacionaria $\mathbf{J}_{est}(\mathbf{x})$ cuyas componentes verifican

$$J_{est,i}(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x})p_{est}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} [D_{ij}(\mathbf{x})p_{est}(\mathbf{x})]. \quad (2.142)$$

de forma que

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_{est} = 0. \quad (2.143)$$

Diremos que una solución estacionaria de la ecuación de Fokker-Planck es un estado estacionario de equilibrio cuando se verifique no sólo la ecuación (2.143) sino también que

$$\mathbf{J}_{est} = 0. \quad (2.144)$$

⁸El problema de encontrar una solución estacionaria de la ecuación de Fokker-Planck asociada a una ecuación diferencial estocástica para N grados de libertad es, en general, muy difícil. En el caso $N = 1$ siempre puede encontrarse dicha solución. Véase [96].

A la condición (2.144) se la conoce como *balance detallado* y es una característica general de un sistema que se encuentra en equilibrio termodinámico. En general, aquellos sistemas estocásticos que cumplan balance detallado pueden ser tratados como sistemas termodinámicos en equilibrio. Matemáticamente, la condición de balance detallado facilita encontrar la solución estacionaria de la ecuación (2.138) ya que hay que resolver la ecuación (2.144) en vez de (2.143).

Cuando la solución $p_{est}(\mathbf{x})$ no cumpla la ecuación (2.144) diremos que el estado es estacionario aunque fuera del equilibrio. Un ejemplo de este tipo de soluciones lo tenemos para la ecuación KPZ en dimensión $d = 1$ [116]. Se trata de la siguiente ecuación diferencial estocástica

$$\frac{\partial h_i}{\partial t} = \nu \nabla^2 h_i + \frac{\lambda}{2} (\nabla h_i)^2 + \sqrt{2k_B T} \xi_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.145)$$

donde $h_i(t)$ es la altura de una intercara en la posición i de un sustrato de dimensión d . La ecuación de Fokker-Planck correspondiente verifica la ecuación (2.139) con

$$J_i(h_1, \dots, h_N) = \left\{ \nu \nabla^2 h_i + \frac{\lambda}{2} (\nabla h_i)^2 \right\} p(h_1, \dots, h_N) + k_B T \frac{\partial}{\partial h_i} p(h_1, \dots, h_N). \quad (2.146)$$

De este modo, y si $d = 1$, la ecuación (2.139) posee la siguiente solución estacionaria

$$p_{est}(h_1, \dots, h_N) = \exp \left(\frac{\nu}{k_B T} \sum_{i=1}^N (\nabla h_i)^2 \right), \quad (2.147)$$

cuya corriente es

$$J_{est,i} = \frac{\lambda}{2} (\nabla h_i)^2 \neq 0. \quad (2.148)$$

Por tanto dicha solución es estacionaria aunque fuera del equilibrio y no se cumple balance detallado. En el lenguaje de los fenómenos de crecimiento se dice que KPZ tiene una velocidad de exceso, ya que $\mathbf{J}_{est} > 0$ y por tanto localmente la probabilidad de que h crezca en una de las direcciones es siempre mayor que la del en sentido opuesto. Esto da lugar a que la superficie crezca en una dirección determinada por el signo de λ .

Parte II

Crecimiento de Superficies

Capítulo 3

Procesos de crecimiento y autosimilaridad

Introducimos los conceptos de escalado, autosimilaridad y autosemejanza en la descripción de intercaras. Asimismo, definimos los diferentes exponentes para determinar las propiedades de la intercara.

3.1. Introducción

En los últimos años ha aumentado mucho el interés en el estudio de diversos procesos de crecimiento, como por ejemplo el del frente de llamas en un bosque, el de una fractura en un material, la invasión de fluidos en medios porosos, el crecimiento de colonias bacterianas, estructura del ADN, la erosión o el crecimiento epitaxial de semiconductores mediante la técnica de haces moleculares, etc. En todos estos fenómenos, se forman diferentes morfologías en la intercara que separa los distintos medios.

Estas intercaras pueden ser suaves a simple vista y, sin embargo, parecer muy rugosas cuando se observan al microscopio. Un ejemplo de este hecho lo podemos encontrar en este mismo papel en el que está escrita esta memoria. En la figura 3.1 vemos al microscopio cómo el papel es muy inhomogéneo o rugoso a esa escala. Aunque a simple vista la superficie parece homogénea, si pasamos el dedo por encima de la hoja sentiremos que ésta es algo rugosa. Por tanto la rugosidad del papel depende de la escala a la que la midamos.

En concreto en éste y sucesivos capítulos trataremos con superficies e intercaras en las que sus propiedades *no* dependen de la escala a la que las midamos, es decir, que son autosimilares o autosemejantes. Esta invariancia de escala de las propiedades del sistema es un fenómeno ubicuo en la naturaleza. Las manifestaciones más familiares tanto en espacio como en el tiempo son los objetos fractales o el ruido $1/f$. Esta invariancia de escala se presenta en la forma de leyes de potencias para ciertas propiedades. Algunas de estas leyes de potencias son, por ejemplo, la ley empírica de Gutenberg-Richter

$$P(E) \sim E^{-B+1} \quad (3.1)$$

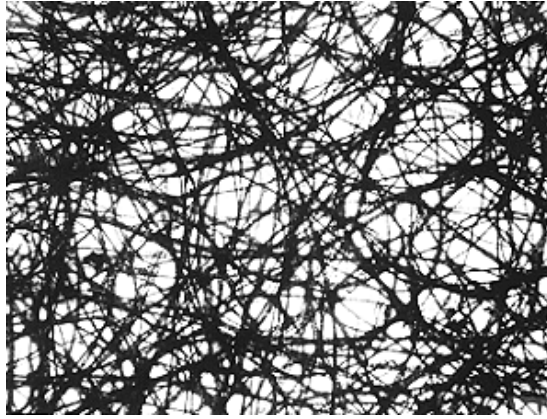


Figura 3.1: Imagen al microscopio ($\times 20$) de una hoja de papel normal. Reproducido de [12].

que nos da la probabilidad de que ocurra un terremoto de energía E ($B \simeq 1$) o la ley de Kleiber que relaciona el promedio metabólico de un organismo vivo τ con la masa M del mismo $\tau \sim M^{3/4}$ y que se extiende sobre 27 ordenes de magnitud desde una célula hasta el elefante [239].

Esta ausencia de escala consiste en que el sistema no tiene ninguna longitud característica de forma que sus propiedades son las mismas cuando lo observamos a diferentes escalas. Si definimos la longitud de correlación del sistema, ξ como la distancia típica del sistema para la que las propiedades no dependen de la escala, diríamos que, en ausencia de escala típica, $\xi = \infty$. Sin embargo, influenciados por la teoría de fenómenos críticos o transiciones de fase continuas, sabemos que la longitud de correlación de un sistema sólo es infinita para ciertos valores de los parámetros, que determinan los puntos críticos en los que tienen lugar las transiciones de fase de segundo orden. Por ejemplo, en el modelo de Ising en equilibrio debemos hacer cero el campo externo y ajustar la temperatura hasta un valor dado para que $\xi \rightarrow \infty$. Dado que muchas de las intercaras que observamos en la naturaleza son autosimilares o autosemejantes, ¿qué es lo que hace que en estos sistemas fuera del equilibrio diverja la longitud de correlación? Una de las respuestas proviene de la Criticalidad Autorganizada (Self-Organized Criticality, SOC) [11], según la cual algunos sistemas disipativos fuera del equilibrio (como pilas de arena o terremotos) pueden ser capaces de tener invariancia de escala por si mismos. A pesar de que la SOC puede ser la causa de que algunos sistemas sean invariantes de escala, es lógico pensar que no todas las intercaras autosimilares o autosemejantes presentes en la naturaleza se deban a que el sistema tenga SOC. Otra explicación a esta ubicuidad de sistemas con invariancia de escala se debe a Grinstein [81], según la cual la invariancia de escala resulta al imponer que nuestro sistema posea ciertas simetrías o leyes de conservación. Veamos un ejemplo: consideremos una intercara $h(\mathbf{r}, t)$ con $\mathbf{r} \in [0, L]^d$ por simplicidad. Supongamos que el sistema tiende a minimizar las alturas de la intercara respecto a un origen, de manera que el hamiltoniano efectivo de este sistema sea

$$\mathcal{H} = \int_{L^d} d^d \mathbf{r} \left[\frac{\nu}{2} [\nabla h(\mathbf{r}, t)]^2 + \frac{q}{2} h^2(\mathbf{r}, t) \right], \quad (3.2)$$

donde hemos incluido también un término que tiene en cuenta la tensión superficial ν de la intercara y que tiende a minimizar el área de la misma. Por último, supongamos que el sistema está en contacto con un baño térmico a temperatura T de manera que la dinámica

del sistema viene dada por la ecuación de Langevin (2.126)

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \Gamma[\nu \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) - qh(\mathbf{r}, t)] + \sqrt{2k_B \Gamma T} \eta(\mathbf{r}, t). \quad (3.3)$$

Si suponemos que el parámetro de orden $\int_{L^d} \langle h(\mathbf{r}, t) \rangle$ no se conserva, podemos tomar el modelo A definido en el capítulo anterior y entonces Γ es una constante. En ese caso, la función de correlación $C(r) = \langle h(\mathbf{r} + \mathbf{s})h(\mathbf{s}) \rangle$ decae como $\exp(-r/\xi)/r^{(d-1)/2}$ para $r \gg \xi$, donde $\xi \sim q^{-1/2}$. Esto nos dice que la intercara no es invariante de escala, ya que existe una escala fijada por ξ a partir de la cual la correlación es prácticamente nula. Sin embargo, si nuestro modelo pretende describir el crecimiento de una intercara en la que hay invariancia respecto a la simetría $h \rightarrow h + c$, donde c es cualquier constante, en la ecuación (3.3) no puede haber ningún término como $-qh(\mathbf{r}, t)$. Por tanto, $q = 0$, y así $C(r) \sim r^{(d-1)/2}$, con lo que el sistema posee invariancia de escala ($\xi \rightarrow \infty$).

3.2. Autosimilaridad y autosemejanza

Un objeto (en particular una intercara) se dice que es autosimilar si cualquier parte de él es similar al todo. En el caso determinista, objetos con esta propiedad se denominan fractales, mientras que cuando en el sistema existe cierta aleatoriedad podemos definir los fractales aleatorios o estocásticos como aquellos objetos en los que cualquier observable estadístico (valores medios, varianzas, etc.) que midamos sobre una parte del fractal es idéntica a la medida sobre la totalidad del objeto. De este modo, un objeto autosimilar es invariante bajo transformaciones isótropas. Un objeto es autosemejante si cualquier parte de él es similar al todo después de una transformación de escala no isotrópica. Al igual que antes podemos definir también objetos autosemejantes estocásticos o aleatorios. El caso más sencillo es el proceso de Wiener, $W(t)$. Consideremos dos instantes de tiempo, t y bt donde b es una constante positiva. La varianza del proceso de Wiener en ambos instantes pueden relacionarse de la siguiente manera:

$$\langle W^2(bt) \rangle = bt = b \langle W^2(t) \rangle. \quad (3.4)$$

Por tanto, las propiedades del proceso Wiener al hacer un cambio de escala $t \rightarrow bt$ son las mismas que en t una vez que multiplicamos $W(t)$ por el factor de escala; en otras palabras las propiedades estadísticas del proceso Wiener no cambian bajo la transformación

$$W(t) \rightarrow b^{-\alpha} W(bt), \quad (3.5)$$

con $\alpha = 1/2$. Este exponente α se denomina exponente de rugosidad por razones que veremos después. En particular, (3.5) supone que el proceso Wiener es un fractal de dimensión fractal $d_f = 2 - \alpha = 1,5$ (véase [12]).

3.3. Dinámica y escalado de intercaras

En este apartado nos restringimos al estudio y caracterización del crecimiento de intercaras. No sólo estamos interesados en las propiedades del sistema en equilibrio, sino también cuando están fuera del equilibrio. Supongamos que la intercara viene definida por una función $h(\mathbf{r}, t)$ que representa la altura de la intercara respecto a un origen sobre la posición $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$, donde d es la dimensión del sustrato. El hecho de que podamos escribir la función $h(\mathbf{r}, t)$ supone que la intercara es univaluada, lo cual puede conseguirse definiendo $h(\mathbf{r}, t)$

como la mayor altura de la intercara en la posición \mathbf{r} .¹ Dado que nos interesan las propiedades estadísticas de la intercara tomamos para su descripción los dos primeros momentos, es decir, la altura media

$$\bar{h}(t) \equiv \left\langle \frac{1}{L^d} \int_{L^d} d^d \mathbf{r} h(\mathbf{r}, t) \right\rangle, \quad (3.6)$$

y la varianza o *rugosidad*

$$w^2(t, L) \equiv \left\langle \frac{1}{L^d} \int_{L^d} d^d \mathbf{r} [h(\mathbf{r}, t) - \bar{h}(t)]^2 \right\rangle, \quad (3.7)$$

donde L es el tamaño lateral del sustrato. Supongamos que en nuestro sistema $w^2(t)$ converge a una constante cuando $t \rightarrow \infty$, y que en ese límite, la intercara es autosemejante, de manera que haciendo el cambio de escala

$$\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}, \quad h \rightarrow b^\alpha h, \quad (3.8)$$

las propiedades estadísticas no cambien. Este hecho lo expresaremos de la siguiente forma

$$h(\mathbf{r}, t) \sim b^{-\alpha} h(b\mathbf{r}, t). \quad (3.9)$$

Con (3.9) y (3.7) tenemos que (suponiendo que $\bar{h} = 0$).

$$w^2(t \rightarrow \infty, L) \simeq \left\langle \frac{1}{L^d} \int_{L^d} d^d(\mathbf{r}) b^{-2\alpha} h^2(b\mathbf{r}) \right\rangle \sim b^{-2\alpha} w^2(Lb). \quad (3.10)$$

En particular, si tomamos $b = L^{-1}$ se tiene que

$$w^2(t \rightarrow \infty, L) \equiv w_{\text{sat}}^2 \sim L^{2\alpha}, \quad (3.11)$$

donde α es el llamado *exponente de rugosidad*. Como vemos la rugosidad del sistema depende del tamaño a la que la midamos.

Sin embargo, la autosimilaridad no sólo se manifiesta en las propiedades estacionarias ($t \rightarrow \infty$) del sistema, sino también en las dinámicas. En muchos procesos, la rugosidad del sistema crece de la forma que hemos reflejado en la gráfica de la izquierda de la figura 3.2 para distintos tamaños. De este modo para tiempos pequeños tenemos que

$$w(t, L) \sim t^\beta, \quad (3.12)$$

donde β es el llamado *exponente de crecimiento* y es independiente del tamaño del sistema. Después de un tiempo t_\times la rugosidad satura a un valor constante que depende del tamaño del sistema de la forma (3.11). El tiempo t_\times depende de L de la forma

$$t_\times = L^z, \quad (3.13)$$

donde z se denomina *exponente dinámico*. Estos tres exponentes no son independientes, ya que por ejemplo si representamos $w(t, L)/w_{\text{sat}}$ frente a t/t_\times las gráficas colapsan a una sola, verificándose la hipótesis de escalado de Family-Vicsek [63]

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) \quad (3.14)$$

¹En algunos sistemas esta aproximación puede no estar justificada. En general, su validez depende de la física del sistema.

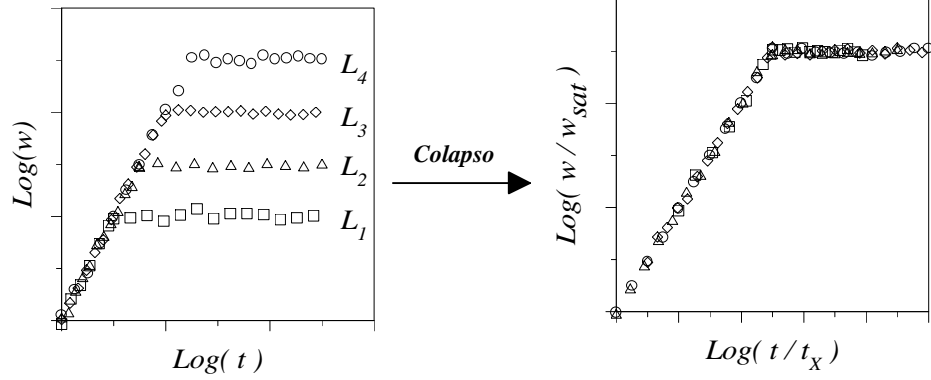


Figura 3.2: Panel de la izquierda: Valores de la rugosidad en función del tiempo para diferentes tamaños $L_1 < \dots < L_4$. Panel de la derecha: Colapso de las gráficas, compatible con la hipótesis de escalado de Family-Viseck.

donde $f(u)$ es la función de escalado, con $f(u) \sim u^\beta$ para $u \ll 1$ y $f(u) \sim \text{cte.}$ cuando $u \gg 1$. Esta hipótesis ha sido verificada en muchos experimentos, cálculos analíticos y simulaciones numéricas [87]. En particular, para que exista este colapso se debe verificar que $z = \alpha/\beta$ y el hecho de que la rugosidad colapse de la forma (3.14) significa que las propiedades de la superficie son invariantes respecto al cambio de escala

$$\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}, \quad h \rightarrow b^\alpha h, \quad t \rightarrow b^z t \quad (3.15)$$

Además, la relación (3.14) define una longitud característica $\xi(t) \sim t^{1/z}$ que denominaremos *longitud de correlación*. Cuando esta longitud es muy pequeña comparada con el tamaño del sistema, la rugosidad crece con el tiempo de la forma (3.12), mientras que cuando $t = t_x$ tenemos que $\xi \sim L$ y la rugosidad satura a una constante.

Con la relación (3.14) podemos calcular cómo varían el resto de las correlaciones del sistema. Por ejemplo, la función de correlación altura-altura (véase apéndice A)

$$C(\mathbf{r}, t) = \langle [h(\mathbf{r} + \mathbf{s}, t) - h(\mathbf{s}, t)]^2 \rangle, \quad (3.16)$$

verifica la siguiente ley de escalado

$$C(\mathbf{r}, t) = 2w^2(t)g\left(\frac{r}{\xi(t)}\right), \quad (3.17)$$

donde $g(u)$ es una función que vale $g(u) = u^{2\alpha}$ para $u \ll 1$ y $g(x) = 1$ cuando $u \gg 1$. En particular se tiene que $C(\mathbf{r}, t) \sim r^{2\alpha}$ para $\mathbf{r} \ll \xi(t)$ y que $C(\mathbf{r} \rightarrow \infty, t) = w^2(t)$, con lo que podemos también expresar la ecuación anterior como

$$C(\mathbf{r}, t) = r^{2\alpha}g'\left(\frac{r}{\xi(t)}\right), \quad (3.18)$$

con $g'(u)$ otra función de escalado.

Por último, la suposición de que la superficie es autosemejante a todas las escalas y que la relación de escalado se cumple para nuestro sistema, nos dice que la rugosidad de un sistema medida en un intervalo de longitud $l < L$ es

$$w^2(l, t) = l^{2\alpha_{\text{loc}}}\tilde{f}\left(\frac{t}{l^z}\right), \quad (3.19)$$

donde $\alpha_{\text{loc}} = \alpha$ y $\tilde{f}(u)$ es una función con el mismo comportamiento que $f(u)$. Sin embargo, existen modelos que, aún cumpliendo la relación o ansatz de Family-Viseck, verifican la

ecuación (3.19) con un exponente $\alpha_{loc} \neq \alpha$. Una de las situaciones en las que ocurre esto es en aquellos modelos denominados superrugosos [135, 150] en los que $\alpha \geq 1$. En estos sistemas la función de correlación tiene la forma

$$C(\mathbf{r}, t) = \xi(t)^{2(\alpha-1)} r^{2\alpha_{loc}} \tilde{g}\left(\frac{r}{\xi(t)}\right). \quad (3.20)$$

Se dice entonces que el sistema presenta *escalado anómalo*. En el capítulo siguiente veremos que uno de los modelos lineales propuestos para explicar el crecimiento de superficies mediante la técnica experimental de MBE verifica que $\alpha = 1$ en $d = 2$ y por tanto la función de correlación va como

$$C(\mathbf{r}, t) \sim r^2 \ln(\xi(t)/r), \quad \mathbf{r} \ll \xi(t). \quad (3.21)$$

Dado que el modelo es lineal, puede resolverse y las expresiones correctas las podemos encontrar en el apéndice A.

3.4. Universalidad

El hecho de que una intercara pueda ser caracterizada por un conjunto de exponentes críticos ($\alpha, \beta, z, \alpha_{loc}$, etc.) ayuda a clasificarlas en diferentes clases de universalidad. A pesar de que los procesos microscópicos que dan lugar a la morfología de las intercaras pueden ser muy diferentes, existen ejemplos de superficies originadas en procesos físicos distintos, pero cuyos exponentes críticos son los mismos. Ello se debe a que, a grandes escalas, la morfología de la superficie sólo depende de procesos mesoscópicos como la difusión, la aleatoriedad del proceso, términos no lineales efectivos, etc. De este modo, por ejemplo, las intercaras de un tumor en tejido humano [31] o el crecimiento de semiconductores mediante la técnica de epitaxia de haces moleculares (Molecular Beam Epitaxy, MBE) poseen los mismos exponentes críticos. Aunque existen en la literatura muchos modelos microscópicos que dan lugar a estas clases de universalidad, la descripción macroscópica de las intercaras puede hacerse en función de ecuaciones estocásticas en derivadas parciales, donde cada uno de los términos se obtiene a partir de identificar los procesos mesoscópicos de nuestro sistema o bien descartando de una forma general de la ecuación aquellos que no tienen en cuenta las simetrías o leyes de conservación del crecimiento. De este modo, algunas clases de universalidad vienen asociadas a una ecuación diferencial estocástica en derivadas parciales. De entre ellas, la más famosa probablemente durante los años ochenta es la de KPZ [116]. Esta ecuación diferencial estocástica es no lineal y supone que no existe conservación. Sin embargo, en el estudio del crecimiento de semiconductores, debido a la conservación del material que llega a la superficie y su difusión en ella, la ecuación es distinta a la de KPZ. La ecuación más sencilla (y lineal) propuesta por Wolf, Villain, Das Sarma y Tamborenea [243, 48] se conoce como ecuación lineal de MBE, que determina otra clase de universalidad diferente a la de KPZ.

Capítulo 4

Crecimiento de cristales mediante MBE

Introducimos la técnica experimental de crecimiento por Molecular Beam Epitaxy (MBE) además de comentar alguno de los experimentos más recientes. Determinamos los principales procesos físicos que tienen lugar en la superficie y los diferentes modelos continuos y discretos propuestos para explicar las morfologías encontradas experimentalmente.

4.1. Introducción

El descubrimiento de que las ideas de escalado y autosimilaridad son aplicables a las superficies de películas delgadas de semiconductores obtenidas mediante la técnica de MBE (Molecular Beam Epitaxy) ha generado un interés creciente en estos sistemas por parte de grupos experimentales y teóricos. Teóricamente ha puesto de manifiesto el papel decisivo que juega la difusión de los átomos sobre la superficie, mientras que desde el punto de vista experimental ha hecho retomar la atención sobre un aspecto olvidado de los procesos de crecimiento con MBE: la rugosidad de la superficie.

En este capítulo pretendemos dar una introducción a cómo se han aplicado las ideas de escalado y autosimilaridad al crecimiento de cristales durante los últimos años. La primera sección se dedica a la descripción del crecimiento por MBE y de los procesos microscópicos que tienen lugar en la superficie. En la segunda sección describimos los modelos propuestos en la literatura para MBE y por último algunos experimentos de MBE especialmente diseñados para estudiar cómo se vuelven rugosas las superficies. Una introducción sobre el crecimiento cristalino en general se encuentra en [225, 156]. En [12, 146, 158, 133, 237, 138, 182] el estudio se centra en las propiedades de escalado de las superficies, tanto desde el punto de vista experimental como teórico.

4.2. El crecimiento epitaxial mediante MBE

Experimentalmente se conocen diversos métodos para crecer capas finas de materiales, como CVD (Chemical Vapor Deposition), MOCVD¹ (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition), MBE (Molecular Beam Epitaxy), *sputter-deposition*, etc. Mientras que las primeras dan lugar a capas de material en forma cristalina, la última produce compuestos amorfos.

CVD es una técnica en la que la sustancia a depositar es transportada en forma de vapor utilizando un gas (normalmente noble) hacia un sustrato caliente. Las reacciones químicas que tienen lugar en el sustrato o en la fase gaseosa dan lugar al crecimiento de monocapas. MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) es el mismo tipo de proceso, pero utilizando compuestos orgánicos en el transporte. Por ejemplo, en el crecimiento de Si se suele utilizar SiH₄, utilizando como gas H₂ además de otros compuestos clorados.

En la técnica de *sputter-deposition* un haz de partículas incide directamente sobre una muestra del material que queremos depositar, de modo que parte del material es arrancado hacia otro sustrato donde se deposita. Las partículas llegan al sustrato formando un cierto ángulo con la normal al mismo y por lo general las películas que se forman son amorfas.

Estas técnicas son epitaxiales, es decir, se deposita una sustancia en forma cristalina sobre un sustrato del mismo (homoepitaxia) o distinto (heteroepitaxia) material. En el caso de heteroepitaxia, las diferencias entre la estructura cristalina del sustrato y del material depositado pueden dar lugar a tensiones estructurales que tienen efectos importantes. Por ello, supondremos que cuando decimos epitaxia nos referimos a homoepitaxia o bien a heteroepitaxia entre materiales con estructura cristalina parecida.

En éste y en sucesivos capítulos nos vamos a centrar en la técnica MBE: propuesta y utilizada por primera vez en los años sesenta, dicha técnica ha experimentado un desarrollo muy grande. Hoy en día se utiliza MBE para crecer capas delgadas de semiconductores tipo IV, III-V y II-VI, metales, materiales magnéticos y óxidos, utilizando para ello fuentes sólidas gaseosas o metal-orgánicas. El éxito de MBE se debe a su versatilidad y a lo simple de su principio operativo: es un proceso de depósito epitaxial de haces moleculares o atómicos en un sistema de *alto vacío* (UHV, Ultra High Vacuum). Los haces son usualmente generados térmicamente de modo que tanto la composición como la cantidad del material que se deposita son controladas de forma precisa. La disposición experimental está representada esquemáticamente en la figura 4.1. Los haces son guiados hacia el sustrato y el material se deposita allí. Para que la cantidad de material depositado sea la misma que la inyectada, las condiciones de vacío en la cámara son muy altas (en torno a 10⁻¹⁰ torr). En la cámara se introducen también varios instrumentos de medida y modificación de la superficie. Los más habituales suelen ser un cañón de electrones, un difractor, un espectrómetro de masas y un cañón de iones. El espectrómetro se utiliza para colimar los haces y para detectar dónde se encuentran las moléculas residuales. El cañón de electrones y el difractor dan información sobre la calidad de la superficie estudiando la difracción provocada por la superficie de los electrones que inciden sobre ella a ángulos pequeños. Esta técnica se denomina RHEED (Reflection High-energy Electron Diffraction), y hablaremos de ella en la sección 4.4 y el capítulo 7. El cañón de iones se utiliza para limpiar inicialmente el sustrato. Éste se mantiene a alta temperatura para aumentar la calidad de la muestra que se crece.

En parte debido a las dificultades tecnológicas asociadas con el UHV, MBE no es una técnica que haya tenido mucha aceptación hasta los años 90, ya que la mayoría de los dispositivos semiconductores se fabricaban utilizando otras técnicas más baratas como MOCVD.

¹Esta técnica también se conoce como MOVPE, Metal Organic Vapor Phase Epitaxy.

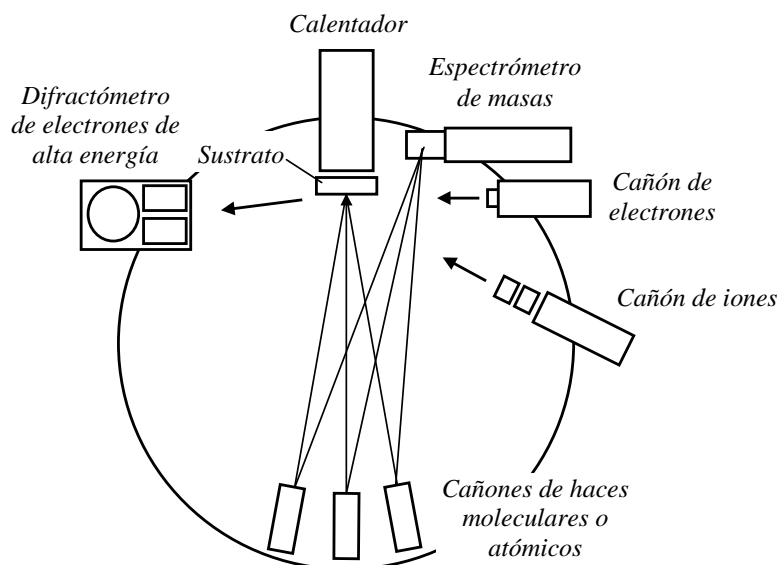


Figura 4.1: Esquema de la disposición experimental de la técnica MBE.

Sin embargo, para la fabricación de dispositivos muy especiales, como las heteroestructuras, MBE es la única técnica posible. El éxito de MBE en la investigación y desarrollo de nuevos dispositivos o de los fenómenos que tienen lugar en el crecimiento se debe principalmente a tres razones:

- MBE permite un control preciso del grosor de la muestra hasta nivel microscópico.
- Al contrario que en otras técnicas, no existen reacciones químicas en la superficie, lo que facilita el control de procesos como la difusión a lo largo de la superficie o la incorporación de dopantes.
- El entorno de UHV en el que se crecen las muestras permite varias técnicas de medición in-situ para estudiar las superficies.

La morfología de la superficie resultante es fundamentalmente producto de los siguientes procesos que tienen lugar en ella a nivel microscópico (ver Fig. 4.2):

- *Depósito:* Cuando un átomo llega a la superficie en una posición aleatoria, forma enlaces con los de la superficie y se adhiere a ella.
- *Desorción:* Éste es un efecto que compite con el anterior. Como resultado de la agitación térmica en el sustrato, un átomo que forme parte de la superficie puede romper los enlaces químicos con sus vecinos y volver al reservorio. La desorción es pues un efecto activado térmicamente: la vida media τ_s de un átomo en la superficie cumple una ley de Arrhenius del tipo

$$\tau_s = \tau_0 \exp(E_d/k_B T), \quad (4.1)$$

donde E_d es la diferencia de energía entre la superficie y el vapor y τ_0 es una constante positiva. La desorción suele ser despreciable en condiciones normales de crecimiento MBE, ya que $\tau_s \gg 1/F$, es decir, el número de átomos desorbido por unidad de tiempo es muy pequeño comparado con flujo medio de material depositado. Esta eficiencia se consigue normalmente aumentando la temperatura del sustrato o el flujo.

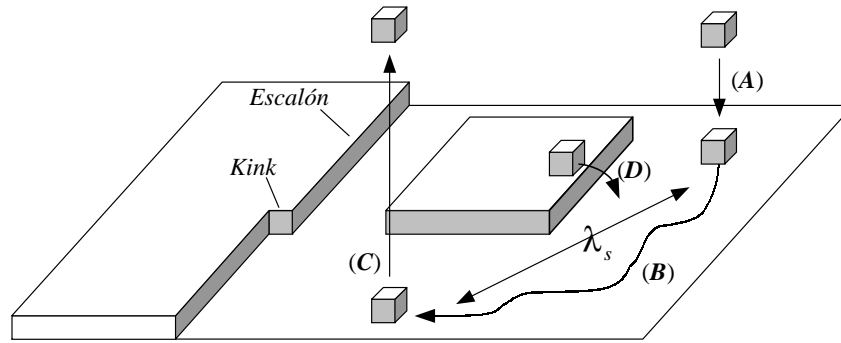


Figura 4.2: Esquema de los diferentes procesos que tienen lugar en la superficie del cristal. (A) deposición, (B) difusión, (C) desorción y (D) barrera de Schwoebel.

- *Difusión sobre la superficie:* Cuando un átomo llega a la superficie tiene una energía como resultado de la interacción con los átomos que forman parte de ella. De esta forma, existen posiciones más favorables energéticamente que otras. Debido a la activación térmica el átomo se difunde a otras posiciones antes de quedar fijo definitivamente. La longitud de difusión media sobre la superficie, λ_s , varía en función del material y de las condiciones de crecimiento. La constante de difusión superficial D_s varía como

$$D_s = D_0 \exp(-E_{\text{diff}}/k_B T), \quad (4.2)$$

donde E_{diff} es la energía necesaria para pasar de un sitio en la red al vecino (barrera de difusión), que depende de la dirección cristalográfica de crecimiento. Utilizando la relación de Einstein [véase la ec. (2.121)] la longitud media recorrida por un átomo antes de ser desorbido es $\lambda_s^2 = 4D_s\tau_s$. Variando la temperatura podemos variar la longitud de difusión como veremos después. En condiciones típicas de crecimiento industrial, $\lambda_s/a_{\parallel} \gg 1$ para que el crecimiento sea capa a capa, donde a_{\parallel} es el espaciado de red. Cuando un átomo encuentra una isla o un escalón se adhiere a ellos, de manera que la longitud de difusión es menor en el caso de superficies vecinales² o rugosas. Este proceso es prácticamente irreversible, pues la barrera de energía entre permanecer en el escalón o no, es muy grande.

Dependiendo de estos procesos, podemos tener diferentes modos de crecimiento. En el primero de ellos, llamado de Frank-van der Merwe, la longitud de difusión media es muy grande, de manera que el crecimiento se produce capa a capa puesto que los átomos tienen tiempo de llenar una capa antes de que otra empiece a crecer. Este modo de crecimiento se suele denominar también *crecimiento 2D*, o capa a capa. La situación opuesta es el modo de Volmer-Weber o *crecimiento 3D*, en el que crecen varias capas de material a la vez debido a que el flujo incidente es mucho mayor que en el caso anterior. En epitaxia es usual encontrar un tercer modo denominado de Stranski-Krastanov en el que el material primero crece capa a capa, pero después de un tiempo el crecimiento se vuelve tridimensional. El modo de crecimiento puede cambiar con la temperatura del sustrato o con el flujo. En el caso de MBE se tiene que a altas temperaturas el modo de crecimiento es capa a capa debido a

²Una superficie vecinal es aquella que está cortada en una dirección que no es paralela a una de las caras del cristal o en la que el flujo de partículas incide sobre la superficie formando un ángulo finito, lo cual lleva a que se forme una disposición regular de escalones sobre la superficie.

que la longitud de difusión es grande (posiblemente mayor que el tamaño del sistema) y los átomos que se depositan encima de una capa que está creciendo pueden saltar a la capa inferior. De este modo los átomos pueden encontrar un *kink* o un escalón (ver figura 4.2) y se adhieren a ellos. En este modo de crecimiento la rugosidad no excede una monocapa. A menor temperatura la difusión no es tan alta, de manera que antes de llegar a los escalones o *kinks* varios átomos pueden agregarse en una nueva capa y formar un cluster. El proceso puede repetirse, y se crean así estructuras tridimensionales que hacen que la superficie sea macroscópicamente rugosa (es decir, la rugosidad es mucho mayor que una monocapa). Bajando más aún la temperatura podemos suprimir completamente la difusión de modo que la superficie se vuelve rugosa debido exclusivamente a la aleatoriedad en la deposición.

Cuando un átomo se deposita encima de una isla, la difusión puede verse restringida por el efecto de *Ehrlich-Schwoebel* [56]: el átomo llega al borde del escalón, pero no se difunde hacia abajo, ya que es energéticamente desfavorable (ver Figura 4.2). Esta barrera de Ehrlich-Schwoebel interrumpe el crecimiento capa a capa del material y crea estructuras inestables en forma de *mounds* o pirámides que tienden a crecer indefinidamente. Esta forma de crecimiento fue predicha por Villain en 1991 [233]. Recientemente estas predicciones han sido confirmadas por experimentos en diferentes superficies: GaAs/GaAs(001) [108], Cu/Cu(001) [60], Ge/Ge(001) [172], Fe/MgO(001) [224], Fe/Fe(001) [216] y Rh(111) [229] y se han propuesto algunos modelos para explicar sus propiedades. Este tipo de morfologías tiene un tamaño característico y por tanto la superficie no es autosimilar.

En el caso de que la superficie no sea singular³ podemos tener otro modo de crecimiento denominado *flujo de escalones*: debido a que el flujo de átomos incidente no es perpendicular a la superficie o a que el sustrato es vecinal se forma un conjunto de escalones los cuales avanzan sobre el escalón inferior, ya que los átomos que llegan a la superficie se difunden hacia los escalones. A temperatura más baja es posible que se creen islas encima de estos escalones haciendo que este modo desaparezca y que la superficie crezca tridimensionalmente. Finalmente, la forma del sustrato también puede afectar la manera en la que crece el cristal. Por ejemplo, si éste presenta una dislocación, la superficie crece alrededor de ella de forma espiral (*modo espiral*), o si el sustrato es rugoso inicialmente puede hacer que el crecimiento sea directamente tridimensional (aunque para una superficie singular en las mismas condiciones de crecimiento esperásemos un crecimiento capa a capa).

4.3. Modelos

Hay dos aproximaciones complementarias al problema del crecimiento cristalino:

- *Atomística*: en la que la posición de cada átomo está bien definida. Técnicas como la de STM nos permiten conocer no sólo la estructura cristalina del semiconductor, sino las posiciones de cada átomo. Basados en primeros principios, se han propuesto modelos que simplifican la dinámica de los átomos y proporcionan descripciones de las morfologías observadas.
- *Continua*: en este tipo de aproximación la superficie se estudia a una escala en la que cada propiedad se promedia sobre un pequeño volumen que contiene muchos átomos, lo que hace que las variables del sistema varíen de manera continua. La ventaja de este tipo de teorías es que permiten un tratamiento continuo y muchas veces analítico.

³Una superficie es singular si inicialmente es plana o está cortada paralela a una cara del cristal y el flujo incidente es perpendicular a ella. Por tanto una superficie no singular es una superficie vecinal o inicialmente rugosa.

Los modelos basados en cada una de estas aproximaciones incorporan mecanismos como la difusión, desorción y deposición, basándose en leyes de conservación, simetrías del problema, etc. Desde el punto de vista teórico es importante conocer qué procesos microscópicos pueden dar lugar a diferentes morfologías y cuáles de ellos son relevantes o cuáles no. Finalmente también es fundamental conocer el grado de aplicabilidad de las teorías continuas. Aunque las teorías continuas reproducen cualitativamente muchos de los aspectos del crecimiento cristalino, es corriente encontrar en la literatura la afirmación de que dichas teorías no pueden reproducir algunos modos de crecimiento como el de Stranski-Krastanov, dado que en éstos la estructura cristalina del material juega un papel fundamental. Sin embargo, como veremos en los capítulos 5 y 7, los modelos continuos también son capaces de describir propiedades debidas a la estructura discreta del cristal, como la transición de rugosidad o las oscilaciones RHEED presentes en el modo de crecimiento de Stranski-Krastanov.

Aunque los modelos considerados tienen como motivación la descripción del crecimiento de cristales mediante MBE, constituyen también problemas independientes de la mecánica estadística y, como tales, tienen relación con otros modelos propuestos para otros sistemas físicos, como el gas de Coulomb, la transición sólido-líquido, etc.

Aparte de la clasificación anterior, también podemos distinguir entre modelos *conservativos*, es decir, aquellos en los que la velocidad de crecimiento del cristal es igual al flujo incidente de partículas, y *no conservativos* cuando suceda lo contrario. En este último caso, parte de los átomos que llegan a la superficie son desorbidos. Como vimos antes, las condiciones experimentales son las que determinan qué tipo de modelo debemos utilizar.

4.3.1. Modelos Continuos

Estos modelos describen la altura de la superficie mediante una variable continua $h(\mathbf{r}, t)$, donde \mathbf{r} es la posición sobre el sustrato⁴. Esto significa que el modelo es SOS (Solid-on-Solid), es decir, existe un perfecto empaquetamiento de los átomos por debajo de la altura h (cristal de Kossel). La idea es encontrar una ecuación del tipo

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F(h, \mathbf{r}, t), \quad (4.3)$$

que describa la dinámica de la superficie. Si suponemos que el proceso es isótropo en el sustrato y que no depende de dónde pongamos el origen $h = 0$, F no puede incluir términos que dependan de h^n ó \mathbf{r}^n para ningún n . La forma de F la determina la difusión superficial, la cual supone la existencia de una corriente macroscópica de material a lo largo de la superficie $\mathbf{j}_{\parallel}(\mathbf{r}, t)$. Los cambios locales en la altura de la superficie se deben a corrientes distintas de cero. Dado que el número de partículas debe permanecer constante, la corriente debe satisfacer la ley de continuidad

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_{\parallel}(\mathbf{r}, t). \quad (4.4)$$

Por otro lado, bajo la hipótesis de equilibrio local, la corriente de material a lo largo de la superficie se debe a diferencias en el potencial químico local $\mu(\mathbf{r}, t)$

$$\mathbf{j}_{\parallel}(\mathbf{r}, t) \propto -\nabla \mu(\mathbf{r}, t). \quad (4.5)$$

⁴En una red cristalina, las posiciones en el sustrato vienen dadas por una variable \mathbf{r} que depende de la estructura cristalina. Si no se menciona explícitamente supondremos que esta red es cuadrada con un espaciado de red $a_{\parallel} \neq 0$. De este modo los operadores espaciales en éste y sucesivos capítulos son aproximaciones discretas y por tanto, tal y como dijimos en el capítulo 2, las ecuaciones estocásticas en derivadas parciales están bien definidas. Por último, las integrales $\int d^2\mathbf{r}$ sobre el sustrato son sumas sobre todas las posiciones de la red.

El potencial químico depende del proceso de difusión del átomo a nivel microscópico y, en particular, del número de enlaces con los vecinos, de manera que el átomo se difunde hacia posiciones que tengan mayor número de enlaces [166, 93]. De manera geométrica las posiciones que tienen mayor número de enlaces son aquéllas en las que la curvatura es mayor y positiva. La suposición más simple es hacer $\mu \propto -1/R$, donde R es el radio de curvatura. Aproximando la curvatura para pendientes pequeñas obtenemos que [166, 93]

$$\mu(\mathbf{r}, t) \propto -\Delta h(\mathbf{r}, t). \quad (4.6)$$

De esta manera, combinando (4.4)-(4.6) obtenemos

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t)], \quad (4.7)$$

donde κ es una constante positiva. La ecuación anterior es determinista. Para incorporar los efectos aleatorios del depósito de material añadimos un término $F(\mathbf{r}, t)$ que describa el flujo incidente como suma de dos términos

$$F(\mathbf{r}, t) = F + \delta F(\mathbf{r}, t), \quad (4.8)$$

donde la constante F es el flujo medio y δF son las fluctuaciones locales, descorrelacionadas en tiempo y espacio, es decir, un ruido blanco. Con ello la forma de la ecuación final es

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t)] + F + \eta_F(\mathbf{r}, t), \quad (4.9)$$

donde⁵

$$\langle \eta_F(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \eta_F(\mathbf{x}, t) \eta_F(\mathbf{x}', t') \rangle = 2F \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (4.10)$$

En otras situaciones experimentales, debemos también tener en cuenta las fluctuaciones debidas a la temperatura del sustrato. Éstas hacen que $h(\mathbf{r}, t)$ fluctúe independientemente de F , por lo que debemos incluir un término aleatorio más:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t)] + F + \eta_F(\mathbf{r}, t) + \eta_T(\mathbf{r}, t), \quad (4.11)$$

donde $\langle \eta_T(\mathbf{r}, t) \eta_T(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D_T \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$ con D_T función de la temperatura T en el sustrato.

Resumiendo, a orden lineal la ecuación estocástica que incorpora difusión superficial y la deposición, y que denominaremos *ecuación lineal de MBE (LMBE)*, es

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t)] + F + \eta(\mathbf{r}, t), \quad (4.12)$$

con $\eta = \eta_F + \eta_T$ y que fue propuesta independientemente por Wolf y Villain [243] y Das Sarma y Tamborenea [48]. Dado que el origen de κ es la difusión a lo largo de la superficie debemos esperar que $\kappa \sim \exp(-E_{\text{diff}}/k_B T)$ [166]. Por último haciendo el cambio de coordenadas $h \rightarrow h + Ft$, podemos tomar $F = 0$ en la ecuación anterior que, en ese caso, describe las fluctuaciones de la superficie alrededor de la altura media.

La ecuación (4.12) puede expresarse de la forma (2.126) donde el hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = \frac{\kappa}{2} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla^2 h(\mathbf{r}))^2. \quad (4.13)$$

⁵En ausencia de difusión, el depósito de material es un proceso de Poisson [128] y puede ser representado por un campo externo F y un ruido cuya varianza sea proporcional a F [12].

| Ecuación | Nombre | α | β | z |
|---|--------|-----------------|-------------------|-----------------|
| $\partial h/\partial t = \eta(\mathbf{r}, t)$ | RD | - | 1/2 | - |
| $\partial h/\partial t = -\kappa \nabla^2[\nabla^2 h] + \eta(\mathbf{r}, t)$ | LMBE | $\frac{4-d}{2}$ | $\frac{4-d}{8}$ | 4 |
| $\partial h/\partial t = -\kappa \nabla^2[\nabla^2 h] + \lambda \nabla^2(\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{r}, t)$ | cKPZ | $\frac{4-d}{3}$ | $\frac{4-d}{8+d}$ | $\frac{8+d}{3}$ |
| $\partial h/\partial t = \nu \nabla^2 h + \eta(\mathbf{r}, t)$ | EW | $\frac{2-d}{2}$ | $\frac{2-d}{4}$ | 2 |
| $\partial h/\partial t = \nu \nabla^2 h + \lambda(\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{r}, t)$ | KPZ | $d = 1$ | $\frac{1}{3}$ | $\frac{3}{2}$ |
| | | $d = 2$ | 0,38* | 0,24* |
| | | | | 1,58* |

Cuadro 4.1: Resumen de las principales ecuaciones continuas utilizadas en la descripción de MBE con sus exponentes en función de la dimensión del sustrato, d . Los exponentes marcados con (*) son estimaciones numéricas (véase [12]).

Dicho hamiltoniano ha sido estudiado extensivamente en el contexto de membranas, donde la energía debida a la curvatura domina el escalado [93, 192].

Dado que la ecuación (4.12) es lineal, se puede resolver analíticamente y obtener todos los exponentes críticos como se puede ver en el Apéndice A y que están resumidos en la tabla 4.1 y comparados con las correspondientes a las otras ecuaciones que discutiremos a continuación.

En vista de que el propósito de la ecuaciones continuas es describir el comportamiento asintótico del sistema debemos estudiar cuál es la relevancia en dicho límite de los procesos de desorción. De forma análoga a como vimos antes, un átomo será desorbido con mayor facilidad si el número de enlaces que debe romper es menor. Como el número de enlaces depende de la curvatura, el número de átomos n_0 que abandona la superficie por unidad de tiempo será proporcional a $1/R$ y, a primer orden, tendremos que $n_0 \propto -\nabla^2 h$. Por tanto la ecuación lineal que incluye efectos de desorción, difusión y deposición es

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - \kappa \nabla^2[\nabla^2 h] + F + \eta(\mathbf{r}, t). \quad (4.14)$$

Los exponentes de esta ecuación vienen determinados únicamente por el Laplaciano⁶, ya que su efecto a grandes escalas es mayor que el bilaplaciano, que domina a escalas pequeñas [12]. La longitud característica a la que se produce este cambio es

$$L_\times = \left(\frac{\kappa}{\nu}\right)^{1/2}. \quad (4.15)$$

De este modo para $L \ll L_\times$ el escalado viene dado por la ecuación (4.12), mientras que para $L \gg L_\times$ los exponentes son los mismos que los de la ecuación

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \eta(\mathbf{r}, t), \quad (4.16)$$

que se conoce como ecuación de Edwards-Wilkinson (**EW**) [55]. Una realización física de esta ecuación es la sedimentación de partículas en un fluido viscoso bajo la acción de la gravedad [175]⁷. Por tanto la existencia de desorción, aunque sea pequeña, determina las propiedades asintóticas de la superficie para tamaños superiores a L_\times . Sin embargo, debido a que la desorción en procesos MBE es muy pequeña, L_\times puede ser muy grande, incluso mayor que el tamaño de la muestra. Además, como vimos antes κ depende de la temperatura, luego

⁶Si hacemos en la ecuación (4.14) la transformación $\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}$, $h \rightarrow b^\alpha h$ y $t \rightarrow b^z t$, los coeficientes de la ecuación se transforman como $\kappa \rightarrow \kappa' \equiv \kappa b^{z-4}$ y $\nu \rightarrow \nu' \equiv \nu b^{z-2}$, luego $\nu'/\kappa' \rightarrow \infty$ en el límite hidrodinámico $b \rightarrow \infty$.

⁷Obsérvese que, utilizando la misma discusión que precede a la ecuación (4.12), el término $\nabla^2 h$ proviene de suponer un potencial químico $\mu \sim h$ como efecto, por ejemplo, de la gravedad.

L_\times variará con las condiciones experimentales. La ecuación (4.16) también puede escribirse de la forma (2.126) donde el hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = \int d^2\mathbf{r} \frac{\nu}{2} [\nabla h(\mathbf{r})]^2, \quad (4.17)$$

que se conoce como el modelo gaussiano (continuo) en otros contextos [34, 20].

Los modelos (4.12), (4.14) y (4.16) son lineales, lo que permite conocer analíticamente sus propiedades de escalado. Sin embargo, existen situaciones en las que los términos no lineales son relevantes. Como vimos antes, el potencial químico es proporcional a $-1/R$, siendo $\nabla^2 h$ el primer orden lineal del desarrollo en pendientes pequeñas. Pero $\alpha = 1$ en dimensión 2 para la ecuación (4.12), lo que supone que $|\nabla h| \sim L^{\alpha-1}$. Por tanto los términos no lineales de la expansión de $1/R$ son marginalmente relevantes. En vez de desarrollar localmente el potencial químico escribimos la ecuación conservativa más general hasta orden cuarto en derivadas espaciales

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h] + \lambda_1 \nabla^2 (\nabla h)^2 + \lambda_2 \nabla \cdot (\nabla h)^3 + F + \eta(\mathbf{r}, t). \quad (4.18)$$

El término $\nabla \cdot (\nabla h)^3$ podemos excluirlo, pues de acuerdo con (4.4) corresponde a una corriente $\mathbf{j}_\parallel = (\nabla h)^3$, que no puede escribirse como el gradiente de un potencial químico. Por tanto nos queda la ecuación que se conoce como *KPZ conservada* (**cKPZ**) [233]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \kappa \nabla^2 [\nabla^2 h] + \lambda_1 \nabla^2 [(\nabla h)^2] + \eta(\mathbf{r}, t), \quad (4.19)$$

que es la versión de dinámica conservada y ruido no conservado de la ecuación de Kardar-Parisi-Zhang (**KPZ**) [116]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \lambda (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{r}, t), \quad (4.20)$$

en donde el término λ da cuenta del crecimiento lateral de la superficie⁸.

Un simple argumento de escala⁹ nos dice que el término no lineal en (4.19) es más relevante que la difusión. De hecho, como vemos en la tabla 4.1, los exponentes de la ecuación (4.19) son diferentes a los de la ecuación lineal (4.12). Como vemos, $\alpha = \frac{2}{3}$ en $d = 2$ para cKPZ, con lo que la aproximación de pendientes pequeñas vuelve a tener sentido.

Como resumen de esta sección diremos que cuando el término de desorción $\nabla^2 h$ y/o el no lineal $(\nabla h)^2$ están presentes, el escalado de la ecuación viene determinado por ellos independientemente de la difusión superficial $\nabla^2 [\nabla^2 h]$, siempre que el tamaño de la muestra sea mayor que L_\times . En algunas situaciones experimentales esperamos que la desorción sea pequeña, o bien que L_\times sea muy grande, por lo que la clase de universalidad será la de LMBE. Como veremos en la sección 4.4, existen algunos ejemplos experimentales que corroboran esta suposición.

Finalmente, otro tipo de efectos, como la anisotropía en la difusión de los átomos a lo largo de la superficie [244], las barreras de Schwoebel [56], etc., pueden incorporarse también a la ecuación (4.19). Sin embargo, alguno de estos efectos da lugar a ecuaciones cuyas soluciones no son autosimilares, como por ejemplo las que incluyen barreras de Schwoebel, que dan lugar a inestabilidades [233].

⁸Obsérvese que el término cuyo coeficiente es λ_1 en (4.19) corresponde a un potencial químico de la forma $\mu = (\nabla h)^2$, compatible con la existencia de una corriente lateral conservada en el sustrato.

⁹Si transformamos la ecuación (4.19) mediante $\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}$, $h \rightarrow b^\alpha h$ y $t \rightarrow b^z t$, la forma de la ecuación queda invariante si redefinimos los coeficientes como $\kappa \rightarrow \kappa' = \kappa b^{z-4}$ y $\lambda_1 \rightarrow \lambda'_1 = \lambda_1 b^{\alpha+z-4}$, con lo que $\lambda'_1/\kappa' \rightarrow \infty$ en el límite hidrodinámico $b \rightarrow \infty$ si $\alpha > 0$.

4.3.2. Modelos Discretos

Si bien los modelos continuos propuestos son fácilmente clasificables, la zoología de modelos discretos que se encuentra en la literatura es difícil de ordenar. En los modelos discretos, la altura h toma sólo valores discretos, $(h/a_{\perp} \in \mathbb{Z})$ tal y como sucede microscópicamente. Estos modelos al igual que los que vimos en la sección anterior son fenomenológicos y se suele utilizar Monte Carlo dinámico en su simulación. Principalmente podemos diferenciar entre:

- Modelos no hamiltonianos: en los que se establecen varias reglas microscópicas de deposición, difusión y desorción utilizadas para controlar la dinámica de los átomos en la superficie. Localmente los movimientos de los átomos no tienden a minimizar ningún tipo de función hamiltoniana, de ahí que sean modelos puramente de no equilibrio. La ventaja de estos modelos es que permiten conocer independiente la influencia de cada uno de los procesos microscópicos en el escalado de la superficie.
- Modelos hamiltonianos: En éstos, los movimientos de los átomos vienen descritos por una función $\mathcal{H}(h)$ en la que h es también discreta. Dentro de este tipo de modelos podemos encontrar aquéllos que surgen de la discretización en alturas de los hamiltonianos (4.13) y (4.17) u otros en los que se postula una forma funcional para $\mathcal{H}(h)$ [134].

El primer modelo discreto de no equilibrio utilizado para describir crecimiento mediante MBE fue introducido por Wolf y Villain [243] y Das Sarma y Tamborenea [48] independientemente (véase Figura 4.3). Se diferencian en el proceso de relajación: en cada paso de tiempo se añade una partícula a la superficie en una posición aleatoria. La partícula tiene tres opciones: permanecer donde está o moverse a la izquierda o a la derecha. En el modelo de Wolf-Villain la partícula elige de entre estas tres opciones aquel sitio que ofrece más enlaces con vecinos, mientras que en el de Sarma-Tamborenea la partícula se mueve hacia aquel sitio que aumenta el número de vecinos, independientemente de si es el máximo o no. Aunque el modelo es bastante simple, incorpora los principales ingredientes del crecimiento MBE¹⁰. De hecho en $d = 1$ se tiene que hasta tiempos muy largos, $\beta = 0,365 \pm 0,015$, $\alpha = 1,4 \pm 0,1$, lo que indica que la clase de universalidad del modelo es consistente con la ecuación LMBE (4.12). Sin embargo, simulaciones recientes [180] muestran que a tiempos más grandes los modelos de Wolf-Villain y Sarma-Tamborenea escalan como la ecuación de EW y la de cKPZ, respectivamente. Esto demuestra que en los modelos discretos están presentes diferentes tipos de procesos que se manifiestan a diferentes escalas.

Los modelos que hemos visto hasta ahora son irreversibles, ya que un átomo que llega a la superficie queda fijo en ella después de un solo paso temporal. Sin embargo, en realidad un átomo puede difundirse a lo largo de la superficie debido a la activación térmica y al número de vecinos que tenga. La escala de tiempo en que un átomo deja de difundirse viene determinada por el flujo incidente y la temperatura. Recientemente un número de modelos han incorporado estos procesos de activación en la difusión de un átomo. Por ejemplo, en $d = 1$ Das Sarma y Tamborenea [48] han estudiado un modelo en el que los átomos de la superficie se difunden mediante la ley de Arrhenius

$$D_s = D_0 \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), \quad (4.21)$$

¹⁰A pesar de que dan lugar, por ejemplo, a la formación de escalones muy grandes o de pendientes muy grandes, algo que no se observa experimentalmente.

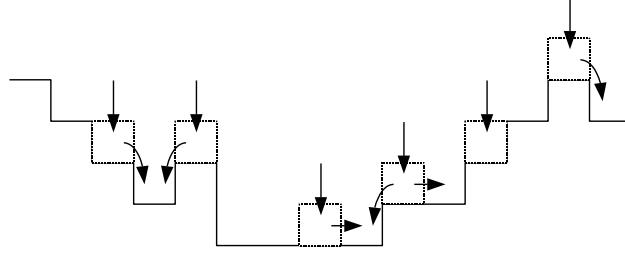


Figura 4.3: Esquema del modelo de de Wolf-Villain: los movimientos de los átomos que llegan a la superficie tienden a maximizar el número de enlaces de los átomos.

donde D_s es la constante de difusión y $E = E_0 + nE_N$ con n es el número de vecinos próximos ocupados y E_0 , E_N son energías de activación. Para optimizar el tiempo de simulación se prohíbe la difusión si $n > 2$. A pesar de eso las simulaciones son muy costosas desde el punto de vista computacional y sólo es posible obtener el valor del exponente β . A temperaturas intermedias, donde la difusión es relevante, se obtiene $\beta = 3/8$ en una dimensión, que coincide con el valor obtenido de (4.12). A temperaturas inferiores, donde la difusión está inhibida, $\beta = 1/2$, es decir, crecimiento aleatorio, mientras que a temperaturas muy altas la longitud de difusión del sistema se hace muy grande; como resultado, un átomo siempre puede encontrar el sitio más energéticamente favorable y la superficie se vuelve muy suave.

Por último, tenemos los modelos hamiltonianos en los que la difusión está determinada por un hamiltoniano \mathcal{H} , de manera que la probabilidad para un átomo depositado de pasar de un sitio i a uno j es, por ejemplo, $[1 + \exp(\beta\Delta\mathcal{H}_{i\rightarrow j})]^{-1}$, donde $\Delta\mathcal{H}_{i\rightarrow j}$ es el cambio de energía debido a este movimiento. En las simulaciones se añade un átomo a la superficie en el sitio i con una probabilidad p , y con probabilidad $1 - p$ se produce la difusión con la regla anterior. El hamiltoniano que se utiliza tiene la forma general

$$\mathcal{H} = \sum_i [g_1(h_i - h_{i-1}) + g_2(h_i - h_{i-1})^2 + g_4(h_i - h_{i-1})^4 + g_6(h_i - h_{i-1})^6]. \quad (4.22)$$

La morfología es muy diversa dependiendo del conjunto de parámetros g_i , obteniendo, por ejemplo inestabilidades [134].

Dentro de los modelos discretos debemos incluir también aquéllos cuya dinámica viene gobernada por la discretización de los hamiltonianos (4.13) y (4.17), es decir, imponiendo que los valores que toma $h(\mathbf{r}, t)$ sean discretos. Así, por ejemplo, discretizando también las posiciones sobre el sustrato, tenemos el llamado *Modelo Gaussiano Discreto* (GD) cuyo hamiltoniano es¹¹

$$\mathcal{H}_{DG} = \frac{\nu}{2} \sum_{i,j} [\nabla_d h_{i,j}]^2, \quad h/a_{\perp} \in \mathbb{Z}, \quad (4.23)$$

donde ∇_d es el gradiente discreto, es decir, (en 2D)

$$(\nabla_d h_{i,j})^2 = \frac{1}{a_{\parallel}^2} [(h_{i+1,j} - h_{i,j})^2 + (h_{i,j+1} - h_{i,j})^2]. \quad (4.24)$$

En el caso del modelo LMBE el hamiltoniano discreto, que denominaremos *modelo laplaciano discreto de Nelson*, es

$$\mathcal{H}_{DxMBE} = \frac{\kappa}{2} \sum_{i,j} (\nabla_d^2 h_{i,j})^2, \quad h/a_{\perp} \in \mathbb{Z}, \quad (4.25)$$

¹¹Para remarcar el carácter discreto de los modelos presentados en esta sección escribimos explícitamente el carácter discreto del sustrato de manera que $h(\mathbf{r}, t) = h_{i,j}(t)$.

donde $\nabla_d^2 h_{i,j}$ es el operador laplaciano discreto, es decir

$$\nabla_d^2 h_{i,j} = \frac{1}{a_{\parallel}^2} [h_{i+1,j} + h_{i-1,j} + h_{i,j+1} + h_{i,j-1} - 4h_{i,j}]. \quad (4.26)$$

En ambos casos hemos supuesto que la red cristalina del sustrato es cuadrada.

Hay dos características que diferencian estos modelos de sus respectivas ecuaciones continuas: la primera de ellas es que no son resolubles analíticamente y deben ser estudiados numéricamente, por ejemplo, mediante técnicas de Monte Carlo. Por otro lado, dado que $h/a_{\perp} \in \mathbb{Z}$ dichos modelos poseen una energía característica E_d , definida como la energía necesaria para añadir un átomo más a la superficie. Dicha energía es proporcional a κ y ν , respectivamente. En equilibrio¹², y a bajas temperaturas, la probabilidad de que se depositen átomos en una capa nueva es muy pequeña, y por tanto la superficie que inicialmente es plana permanece plana. Cuando la temperatura es muy grande, dicha probabilidad es grande y la superficie se vuelve rugosa. Estas ideas las desarrollaremos en el capítulo 5 y veremos cómo influye el flujo externo de partículas.

En la literatura el hamiltoniano (4.23) se ha estudiado de manera extensiva tanto teórica como numéricamente por su relación con otros sistemas como el gas de Coulomb o el modelo XY. El hamiltoniano (4.25) también se ha estudiado porque, en el caso de que la red cristalina sea triangular, constituye un modelo para la transición sólido-líquido en dos dimensiones. Diferimos la discusión de dichos modelos hasta el capítulo 5 donde hablaremos de la principal característica que poseen: la transición de rugosidad en equilibrio y su modificación cuando existe un flujo de átomos sobre la superficie.

4.4. Experimentos de MBE

Dado que las superficies crecidas mediante MBE son microscópicas, la observación y medida de las propiedades de las superficies no es fácil. De hecho, hasta los años 90 no existían en la literatura ejemplos experimentales de las ideas de escalado o autosemejanza en los procesos de crecimiento de cristales. Ello se debe a que, para una comparación precisa con la teoría, es necesario conocer la topografía de la muestra a nivel microscópico. Esto último se ha conseguido mediante la utilización de nuevas técnicas experimentales como microscopía de efecto túnel o la adaptación a este nuevo escenario de técnicas más antiguas como las de absorción, *scattering* de rayos X, de electrones o de átomos. Hoy en día, el STM (Scanning Tunneling Microscopy) y la reflectividad de rayos X son las técnicas más utilizadas para caracterizar la superficie de la muestra a nivel microscópico. Otras técnicas son la absorción de gas, microscopía de fuerza atómica (AFM), Reflection High-Energy Electron Diffraction (RHEED), High Resolution Low-Energy Electron Diffraction (HRLEED), Scanning Electron Microscopy (SEM), Transmission Electron Microscopy (TEM) y el *scattering* de átomos de helio (HBS). No todas las técnicas se pueden utilizar en cualquier contexto: en algunas de ellas, para que la información que obtengamos de las medidas sea relevante, es necesario que las superficies sean suficientemente suaves y así minimizar la atenuación del flujo de partículas (rayos X, átomos de Helio, etc.), o bien condiciones de vacío muy alto para el *scattering* de átomos o electrones. Del mismo modo, no todas las técnicas nos permiten obtener todos los exponentes de escalado: RHEED y TEM sirven para conocer β , mientras que la absorción de gas sólo puede utilizarse para evaluar α .

¹²Es decir, cuando no existe un flujo de átomos hacia la superficie y la morfología es resultado únicamente de la difusión y las fluctuaciones térmicas.

Podemos diferenciar estos métodos experimentales en directos (como STM, AFM, TEM, SEM) e indirectos (Rayos X, RHEED, HRLEED, HBS). En los primeros, se obtiene una descripción a escala atómica de la superficie; sin embargo tal precisión lleva consigo algunas desventajas, como el excesivo coste en tiempo para estudiar una muestra de varios micras de tamaño, así como que la observación ha de hacerse *ex situ*, lo que lleva a que la superficie se enfríe o tengan en ella otro tipo de procesos no presentes en la deposición. En los métodos indirectos, se relaciona una medida sobre la superficie (típicamente la intensidad reflectada) con su morfología. Por ello, estas técnicas precisan una teoría que relacione la morfología de la superficie con las medidas experimentales. Sinha *et al.* [207] estudiaron el problema del *scattering* de rayos X por una superficie univaluada, autoafín y homogénea utilizando la aproximación de Born de scattering débil. En términos del vector de momento transferido \mathbf{q} , el factor de estructura de la difracción por una superficie puede ser separado en dos partes: el llamado pico δ y una componente difusiva más ancha

$$S(q_{\perp}, q_{\parallel}, t) \sim e^{-[\phi]^2 w^2(t)} \delta(q_{\parallel}) + S_{\text{diff}}(q_{\perp}, q_{\parallel}, t), \quad (4.27)$$

donde $\phi = q_{\perp} a_{\perp}$, siendo q_{\perp} (q_{\parallel}) la componente perpendicular (paralela) al plano de la superficie del momento transferido, a_{\perp} el espaciado vertical de la superficie y $[\phi]$ el valor de ϕ módulo 2π de ϕ . $[\phi/\pi] = 1$ corresponde a la condición fuera de fase, mientras que $[\phi/\pi] = 0$ corresponde a la condición en fase. La intensidad del pico δ nos sirve para determinar el exponente β , para lo cual se suelen utilizar condiciones fuera de fase. Del mismo modo, la anchura del pico de la intensidad difundida medida para un determinado q_{\perp} está dada por

$$\sigma_{q_{\parallel}} \sim [\phi]^{1/\alpha}, \quad (4.28)$$

para cuya medida se suelen utilizar también condiciones de fuera de fase.

Estas relaciones han sido aplicadas muy frecuentemente en varios experimentos de scattering durante los últimos años [37, 235, 89, 254, 60, 223, 64, 197, 248, 258, 70, 58], lo cual no nos tiene que hacer olvidar que su aplicabilidad requiere un modelo de superficie para la interpretación de los resultados. Además, las relaciones (4.27) y (4.28) son relaciones asintóticas que pueden estar sometidas a correcciones y a *crossovers*. La situación es más compleja cuando el sustrato y el material depositado son diferentes. Entonces, si la anchura del material depositado es pequeña, es necesaria una teoría sobre el scattering por dos o más superficies [35] para interpretar de forma positiva los resultados.

Pese al esfuerzo experimental realizado durante los años 1990-1996 (principalmente), la situación actual no es del todo satisfactoria. Hasta donde el autor de esta memoria conoce, ninguno de los resultados experimentales ha sido confirmado de manera independiente por otro grupo experimental, debido sobre todo a la sensibilidad de los resultados a las condiciones experimentales. Además, en algunos trabajos recientes [37] se ha puesto de manifiesto que los exponentes obtenidos y asociados con ecuaciones de crecimiento conservado pueden ser explicados también en el contexto de inestabilidades o *mounds*. Por último, el hecho de que el exponente de rugosidad sea $\alpha \sim 1$ en algunos casos hace que existan problemas de interpretación de dicho exponente (diferenciándolo del α_{loc}) o bien diferencias entre el exponente medido utilizando medidas en espacio real (las obtenidas con métodos como STM, AFM o TEM) y el medido en el espacio recíproco (reflexión de Rayos X, electrones o átomos de helio) [249]. La sensación es que, debido a la cantidad de procesos que tienen lugar en la deposición, es difícil separar unos de otros: la observación de superficies que crecen y desarrollan rugosidad de manera cinética es pues muy difícil. Sin embargo, debido a que la mayoría de los procesos son activados térmicamente, la temperatura a la que se crece la muestra puede servir como filtro a la hora de determinar los procesos que tienen lugar.

| Material | Substrato | Técnica | T (K) | α | β | $\alpha/\beta - 2\alpha$ | Ref. |
|-------------------|------------------------|------------|-------------|----------|-----------|--------------------------|------------|
| Si(amorfo) | Si(amorfo) | AFM | 284 | 0.96 | 0.26 | 1.77 | [252]⇐ |
| Si | Si(111) | HRLEED | 548 | 1 | 0.25 | 2 | [248]⇐ |
| Si | Si(111) | RHEED | 523-673 | | ~ 1 | | [70, 36]⇐ |
| Si(100) | Si(001) | AFM/TEM | | 0.85 | 0.6 | -0.28 | [145] |
| Si(110) | Si(001) | AFM/TEM | | 0.8 | 0.6 | -0.27 | [145] |
| Ag | Si | X-ray, STM | 288 | 0,70 | 0,26 | 1.29 | [223]⇐ |
| Ag(111) | Ag(111) | X-ray | 150-300 | | ~ 0,5 | | [58] |
| | | | >300 | | < 0,5 | | [58] |
| Ag(001) | Ag(001) | X-ray | 200 | | 0.28 | | [58] |
| | | | 300 | | 0.17 | | [58] |
| Ag | Ag(111) | STM | 288 | 1 | | | [94] |
| Ag | Ag | X-Ray/Abs. | 80 | 0.46 | | | [37] |
| Ag | Cuarzo | Abs. | 77 | 0.7 | | | [181, 177] |
| | | | 77 | 0.37 | | | [117] |
| Ag | Cuarzo | STM | ? | 0.82 | 0.29 | 1.94 | [176]⇐ |
| Cu(110) | Cu(110) | HBS | 200 | ~ 1 | 0.56 | -0.21 | [60] |
| | | | 160 | ~ 1 | 0.26 | 1.84 | [60] |
| Cu | Cu | AFM | 288 | 0.87 | 0.45 | 0.19 | [103] |
| Pb | Pb(110) | HRLEED | 363 | 1.33 | 0.77 | 0.4 | [64] |
| Pb | Cu(100) | HBS | 150 | 1 | 0.3 | 1.5 | [258]⇐ |
| Fe | Fe(001) | HRLEED | ? | 0.79 | 0.22 | 2.01 | [89]⇐ |
| Fe | Si(111) | RHEED | 323 | | 0.23-0.3 | | [35]⇐ |
| Fe | Erosión | STM | | 0.52 | | | [132] |
| CH _{1,3} | Si | AFM | 318 | 0.9-1.1 | 0.7-1.0 | -0.11/-1.1 | [41] |
| W/Si | W/Si | X-ray | | ~ 0* | | | [197] |
| CuCl | CaF ₂ (111) | AFM | 353-383 | 0,84 | | | [226] |
| InP | InP | AFM/STM | 773-793 | - | 0.1-0.2 | | [42] |
| Pt | Glass | STM | 288 | 0.9 | 0.26 | 1.66 | [107]⇐ |
| Au | Si | X-ray | 200-300 | 0.42 | 0.40-0.42 | 0.21-0.16 | [254]⇐ |
| Au | Vidrio | STM | 298 | 0.35 | | | [92] |
| AlCu | Si | X-ray/STM | 573 | 0.7 | | | [235] |
| Grafito | Erosión | STM | 300-600-900 | 0.2-0.4 | | | [57] |

Cuadro 4.2: Resumen de algunos experimentos de crecimiento de superficies y las propiedades de escalado encontradas. (*) significa escalado logarítmico, Abs. significa Absorción y X-ray es la técnica de scattering de rayos X. Los experimentos marcados con ⇐ son comentados en el texto.

En la Tabla 4.2 hemos esquematizado la situación experimental actual. En ella hemos resumido varios experimentos de crecimiento alguno de los cuales discutimos a continuación. El comportamiento descrito por la ecuación (4.12) ha sido observado en algunas situaciones experimentales. Por ejemplo, He *et al.*, utilizando la técnica de RHEED, estudiaron la formación de superficies rugosas en la deposición de Fe sobre Fe(001). Midiendo la relación entre la intensidad del pico para q_{\parallel} y la inicial cada 3 minutos y utilizando (4.27) observaron como la rugosidad crecía con el tiempo como $w \sim t^{\beta}$ con $\beta \approx 0,22 \pm 0,02$ [89]. Del mismo modo, obtuvieron que $\alpha \approx 0,79 \pm 0,05$ comparando la dependencia de la anchura del pico de la intensidad con la condición de difracción ϕ . Sin embargo, esta anchura fue medida solo sobre un rango de ϕ que es menor que un orden de magnitud, lo que parece indicar que la incertidumbre en este exponente es mayor que $\pm 0,05$. Recientemente el mismo sistema ha sido estudiado por Strosio *et al.* [216] que encontraron claramente formación de estructuras inestables. Strosio *et al.* atribuyen esta discrepancia al hecho de que el sustrato utilizado en el experimento de He *et al.* era bastante rugoso, lo que puede dar lugar a la supresión del desarrollo de *mounds*.

El mismo tipo de comportamiento fue encontrado por Yang *et al.* [248] en el estudio por medio de HRLEED del crecimiento epitaxial de Si sobre Si(111). Mediante la anchura y la altura del pico de la intensidad reflejada obtuvieron que $0,95 \leq \alpha \leq 1,1$ y $\beta \approx 0,25$, que coinciden con el comportamiento descrito por la ecuación (4.12). Un argumento más a favor de esta interpretación teórica es que la técnica de HRLEED permite medir también el promedio de las pendientes locales. Yang *et al.* encontraron que dicho promedio evolucionaba como $(\ln t)^{1/2}$, tal y como predice (4.12). A temperaturas mayores que 350°C no se observa decaimiento en el pico de la intensidad, lo cual indica que la rugosidad permanece prácticamente constante. En este experimento queda claro que el crecimiento de la superficie y el hecho de que la rugosidad crezca es debido a fluctuaciones estadísticas y no a otro tipo de efectos como las barreras de Schwoebel. En un experimento posterior [252] los mismos autores estudiaron el crecimiento de silicio amorfo mediante el microscopio de fuerza atómica, y vieron que dicho sistema puede ser descrito por la ecuación (4.12). La figura 4.4 recoge un ejemplo de las morfologías obtenidas en este experimento. Es interesante comprobar que en las conclusiones de dicho artículos los propios autores llaman la atención sobre la posible dependencia de los resultados obtenidos en el crecimiento de Si cristalino sobre la preparación inicial de la superficie. Así en [250], Yang *et al.* comprobaron como para unas determinadas condiciones de crecimiento es posible el desarrollo de facetas o caras en la superficie (similar a la formación de *mounds*) en el crecimiento de Si/Si(111).

Utilizando STM, Jeffries *et al.* estudiaron la rugosidad cinética en el crecimiento de Pt depositado sobre vidrio a temperatura ambiente [107]. Aunque el artículo habla de inestabilidad en la morfología de la superficie, dicho término se refiere a que los exponentes que ellos caracterizan ($\alpha \simeq 0,9$ y $\beta \simeq 0,26$) y la dependencia del promedio de la pendiente $(\ln t)^{1/2}$ vienen descritos por la ecuación (4.12). Muchos autores adoptan la terminología “inestabilidad” para referirse a aquellas superficies donde $\alpha \geq 1$. Como argumentan los autores, en este sistema es difícil que se desarrollen estructuras tipo *mounds* al ser una deposición de policristales y estar estos orientados aleatoriamente.

El crecimiento heteroepitaxial de Pb en Cu(100) a bajas temperaturas ha sido estudiado por Zheng y Vidali [258] utilizando scattering de átomos de helio. La superficie del material depositado se vuelve rugosa después de las primeras 16 monocapas. Un análisis de la intensidad difundida indica que $\alpha \approx 1$ y que la anchura de la superficie crece como $\beta \sim t^{\beta}$ con $\beta \approx 0,3$, resultados consistentes con la ecuación (4.12). Sin embargo, en este experimento la anchura de la superficie crece muy despacio después de 40 monocapas, algo que puede

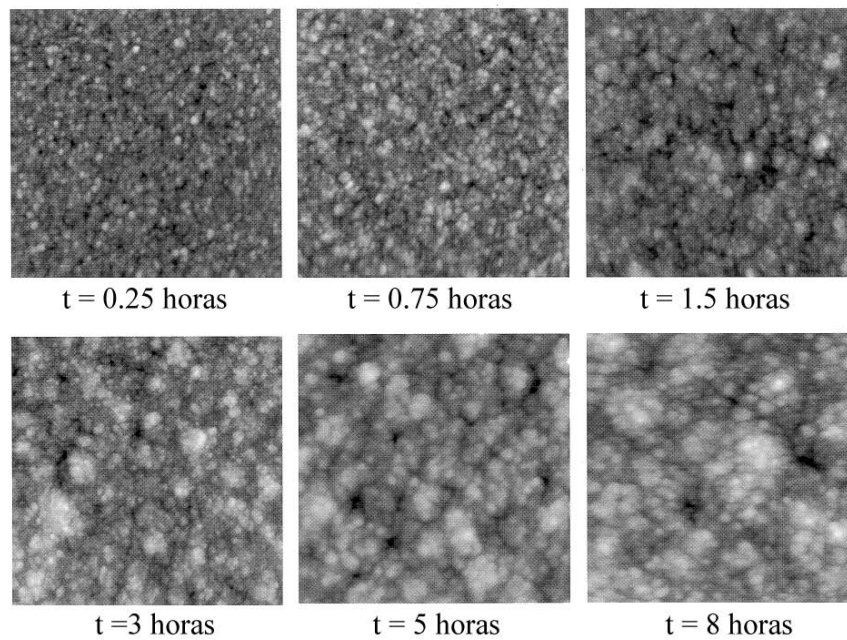


Figura 4.4: Imágenes tomadas por AFM de tamaño $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ del crecimiento de silicio amorfo depositado a temperatura ambiente. Reproducido de [252].

ser descrito, según los autores, por la ecuación de EW (4.16).

Existen otro tipo de experimentos, llevados a cabo por Chevrier y colaboradores sobre deposición de Fe [35] y Si [36] sobre Si(111) utilizando RHEED. En el primero de ellos un exponente de $0,23 \leq \beta \leq 0,30$ se halló para una temperatura de crecimiento de 50°C . Desafortunadamente el exponente α no fue medido en dicho experimento, por lo que, aunque el valor es compatible con el crecimiento mediante la ecuación (4.12), no quedan excluidos otros modelos. El mismo tipo de comportamiento se observó en la deposición de Fe sobre Fe(111). En el segundo de los experimentos [36], se estudió el crecimiento de Si sobre Si(111) a temperaturas entre 250°C y 400°C , obteniendo $\beta \approx 1$. Este valor está muy lejos del valor $\beta \approx 0,25$ obtenido por Yang *et al.* [248] a 275°C . Aunque los dos experimentos no son compatibles (ya que los exponentes se han medido en diferentes rangos de grosor de la muestra), indican que las medidas dependen críticamente de las condiciones experimentales. En un trabajo posterior, Gallas *et al.* [70] reprodujeron el exponente $\beta \approx 1$ para el crecimiento de Si sobre Si(111), y utilizando microscopía electrónica fueron capaces de ver que la dependencia lineal de la rugosidad con el tiempo se debía a un crecimiento inestable debido a los defectos que se creaban en el cristal de Silicio.

En otras situaciones experimentales, la morfología de las superficies son diferentes con respecto a las mencionadas anteriormente. Así, en experimentos de deposición de vapores de metales¹³, α toma valores $\approx 3/4$ y $\beta \approx 1/4$. El hecho de que en esta técnica de deposición la movilidad superficial de los metales sea pequeña y la presencia de intersticios en el crecimiento, hace pensar que el régimen asintótico sea el dado por KPZ conservado (4.19), algo que parece bastante bien establecido en los experimentos de deposición de Ag sobre sustratos fríos a flujos pequeños [223, 254, 176].

Como resumen a esta parte sobre los experimentos de crecimiento epitaxial por MBE vemos que, debido a la cantidad de procesos que tienen lugar en la superficie, el escalado de la misma varía de un material a otro e incluso para el mismo material dependiendo de

¹³Obtenidos mediante evaporación térmica o *sputter-deposition*.

las condiciones de crecimiento. A pesar de ello, hemos visto que existen experimentos en los que se ha encontrado el escalado de la ecuación LMBE.

Capítulo 5

Efectos de la red cristalina

Utilizando un modelo continuo se investigan los efectos de la red cristalina en el crecimiento mediante MBE. Se encuentra una transición de rugosidad análoga a aquella que se encuentra en sistemas con tensión superficial. Dicha transición se compara con otras existentes en la literatura y se estudia en equilibrio y en no equilibrio de manera numérica.

5.1. Introducción

Como vimos en el capítulo anterior, existen algunas situaciones experimentales en las que las corrientes conservadas de material son el principal proceso en la superficie y el que determina su morfología. De este modo, la ecuación LMBE (4.12) describe asintóticamente las propiedades de la superficie. En particular, dicha ecuación nos dice que la rugosidad de la superficie crece con el área de la misma como $w^2 \sim L^2$. La descripción proporcionada por la ecuación (4.12) es la misma a grandes y pequeñas escalas y prescinde del carácter discreto del proceso de crecimiento cristalino. Sin embargo, en general a bajas temperaturas la superficie es plana y el crecimiento se realiza capa a capa. Es obvio que la ecuación LMBE no puede capturar este régimen de crecimiento. Como vimos en el capítulo anterior, debido al carácter discreto del proceso de deposición, existe una energía característica en nuestro sistema, E_d , que es la energía necesaria para incorporar un átomo a la superficie. Si $k_B T \gg E_d$ la descripción continua de la superficie es válida, mientras que cuando $k_B T \leq E_d$, las teorías continuas fallan al intentar reproducir su morfología. En este capítulo veremos cómo es posible tratar dentro de un formalismo continuo el carácter discreto de una superficie cristalina. Para ello, en la siguiente sección introduciremos un modelo de crecimiento que incorpora la difusión superficial y el carácter discreto de la superficie. A continuación, en la sección 5.3 veremos que, en equilibrio, nuestro modelo se puede comparar con otros propuestos en la literatura que poseen transiciones de rugosidad traslacional y/o orientacional al variar la temperatura. Por último, en la sección 5.4 presentaremos los resultados numéricos tanto en equilibrio como fuera del equilibrio y discutiremos la existencia y carácter de dichas

transiciones.

5.2. Efectos de la red cristalina en MBE

La mayor diferencia entre la ecuación LMBE y un cristal real es que LMBE describe un sistema continuo, mientras que la superficie de un cristal es discreta. La altura del cristal no cambia de manera continua, sino que lo hace en unidades de longitud iguales a la constante de red vertical, a_{\perp} . Una manera simple de tener en cuenta esto es introducir un potencial $V(h)$ que favorezca las variaciones discretas de h . De este modo, la energía de la superficie en equilibrio viene dada por

$$\mathcal{H} = \int d^2\mathbf{r} \left[\frac{\kappa}{2} [\nabla^2 h(\mathbf{r})]^2 - V[h(\mathbf{r})] \right]. \quad (5.1)$$

Para describir cristales reales, V necesariamente tendría que ser una función delta. Pero desde el punto de vista numérico y analítico es más conveniente elegir un potencial continuo como

$$V(h) = V_0 - V_0 \cos \frac{2\pi h(\mathbf{r})}{a_{\perp}}. \quad (5.2)$$

También es posible ver que el hamiltoniano (5.1) con el potencial (5.2) se puede obtener como una aproximación del modelo puramente discreto (ver apéndice B). Debemos subrayar que h sigue siendo una variable continua y puede tomar todos los valores (por ejemplo, h puede valer media monocapa). Sin embargo, aquellas posiciones en donde $h \neq na_{\perp}$, $n \in \mathbb{Z}$ son energéticamente desfavorables. A temperatura cero, la configuración de la superficie que tiene energía mínima es aquella cuya altura es la misma en todos los puntos del sustrato e igual a un múltiplo de a_{\perp} .

Para estudiar la dinámica de la superficie con energía dada por (5.1) utilizaremos la ecuación de Langevin con dinámica no conservada (2.126)

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h(\mathbf{r})] - \frac{2\pi V_0}{a_{\perp}} \sin \left(\frac{2\pi h(\mathbf{r})}{a_{\perp}} \right) + F + \eta_F(\mathbf{r}, t) + \eta_T(\mathbf{r}, t), \quad (5.3)$$

donde hemos incluido también el flujo de partículas F y sus fluctuaciones $\eta_F(\mathbf{r}, t)$, y que denotaremos como modelo **xMBE**. Si queremos conservar el carácter absolutamente discreto de las alturas, podemos considerar el modelo totalmente discreto, dado por el hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{DxMBE} = \frac{\kappa}{2} \sum_{i,j} (\nabla_d^2 h_{i,j})^2, \quad (5.4)$$

donde $h_{i,j}/a_{\perp} \in \mathbb{Z}$, (i, j) son todas las posiciones en un retículo cuadrado de constante de red a_{\parallel} y, como en el capítulo anterior, los operadores son las discretizaciones a primer orden en dicho retículo. Por haber sido introducido por Nelson en otro contexto [170] lo denominaremos *modelo laplaciano discreto de Nelson*, o **DxMBE**.

La relación entre los modelos (5.3) y (5.4) es análoga a la que existe entre los modelos GD [eq. (4.23)] y el de sine-Gordon (**sG**) (véase el apéndice B), cuya ecuación de Langevin es

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{r}) - \frac{2\pi V_0}{a_{\perp}} \sin \left(\frac{2\pi h(\mathbf{r})}{a_{\perp}} \right) + F + \eta_F(\mathbf{r}, t) + \eta_T(\mathbf{r}, t), \quad (5.5)$$

en los que el término relajación en la superficie viene determinado por un efecto de tensión superficial. Tanto el modelo GD como el sG han sido estudiados de forma muy extensa

en la literatura y se conocen la mayoría de sus propiedades en equilibrio y fuera de él [39, 206, 38, 173, 71, 188, 6].

En el caso del modelo xMBE, el potencial es un término no conservado por la dinámica, es decir, no puede escribirse como la divergencia de una corriente. Aunque se puede encontrar una justificación de dicho término en el apéndice B, también podemos argumentar sobre el posible significado físico del mismo. Como veremos después, el hecho de que no sea conservativo supone que, en general, la velocidad de crecimiento de la superficie no es igual a F . Así, de manera efectiva, este término supone efectos de evaporación y/o condensación, ya que para temperaturas pequeñas no todos los átomos que llegan a la superficie se quedan en ella: algunos se evaporan, y por tanto la velocidad de crecimiento es menor que F .

La principal propiedad de los modelos que presentamos en esta sección es que existe una energía característica. Como veremos en la próxima sección, ésta es la razón de que en equilibrio exista una transición de rugosidad traslacional entre una fase plana y otra rugosa en la que $w^2 \sim L^2$. Pero, además, en el caso de los modelos (5.3) y (5.4) la interacción se extiende no sólo a primeros vecinos, sino también a segundo vecinos. Esto nos llevará, como veremos en la siguiente sección a estudiar la posible existencia de una transición de rugosidad orientacional, entre una fase plana y otra rugosa pero con correlaciones entre las pendientes.

5.3. Transiciones de rugosidad

Debido a la gran cantidad de procesos que tienen lugar en un cristal y al hecho de que, en general, éstos sean activados térmicamente, a medida que aumentamos la temperatura del sustrato la superficie pasa por varias transiciones de fase. Algunas de estas posibles transiciones termodinámicas incluyen la de rugosidad traslacional [33] y orientacional [170, 147], la de prerrugosidad traslacional y orientacional [187], la de deconstrucción [232], etc. En esta sección vamos a revisar las de rugosidad. De manera sucinta, éstas tienen lugar cuando la energía libre de un escalón se hace cero, es decir, cuando el coste energético para crear otra capa diferente es nulo. La transición de prerrugosidad es entre una fase plana y otra rugosa en la que las diferencias de altura son de un solo escalón y ocurre a una temperatura T_{PR} en la que se anula el coste energético de crear un escalón, pero no el de crear dos. Esta aparente contradicción proviene de que en el cristal la interacción entre los átomos no es la misma entre primeros y segundos vecinos: la transición de prerrugosidad tiene lugar en sistemas en los que la interacción a segundos vecinos es mayor que la interacción a primeros vecinos. En general, a una temperatura mayor, T_R , el sistema posee una transición de rugosidad traslacional en la que las alturas se desordenan, y para la cual se anula el coste energético para crear dos o más escalones.

La transición orientacional de rugosidad es aquella que tiene lugar a una temperatura T^* entre una fase en la que la superficie es rugosa (es decir, desordenada en alturas y por tanto la energía de un escalón es nula) pero que tiene cierta orientación en pendientes y otra fase en la que la superficie está desordenada en alturas y en pendientes. Al contrario que en el caso de la transición de prerrugosidad, en estos sistemas la transición de rugosidad traslacional tiene lugar a una temperatura T_R menor que T^* . Aunque puede parecer que la fase intermedia en los casos de prerrugosidad y rugosidad orientacional es la misma, en el caso de prerrugosidad las pendientes sólo pueden valer $0, \pm 1$, mientras que en la orientacional pueden tomar cualquier valor siempre y cuando estén correlacionadas.

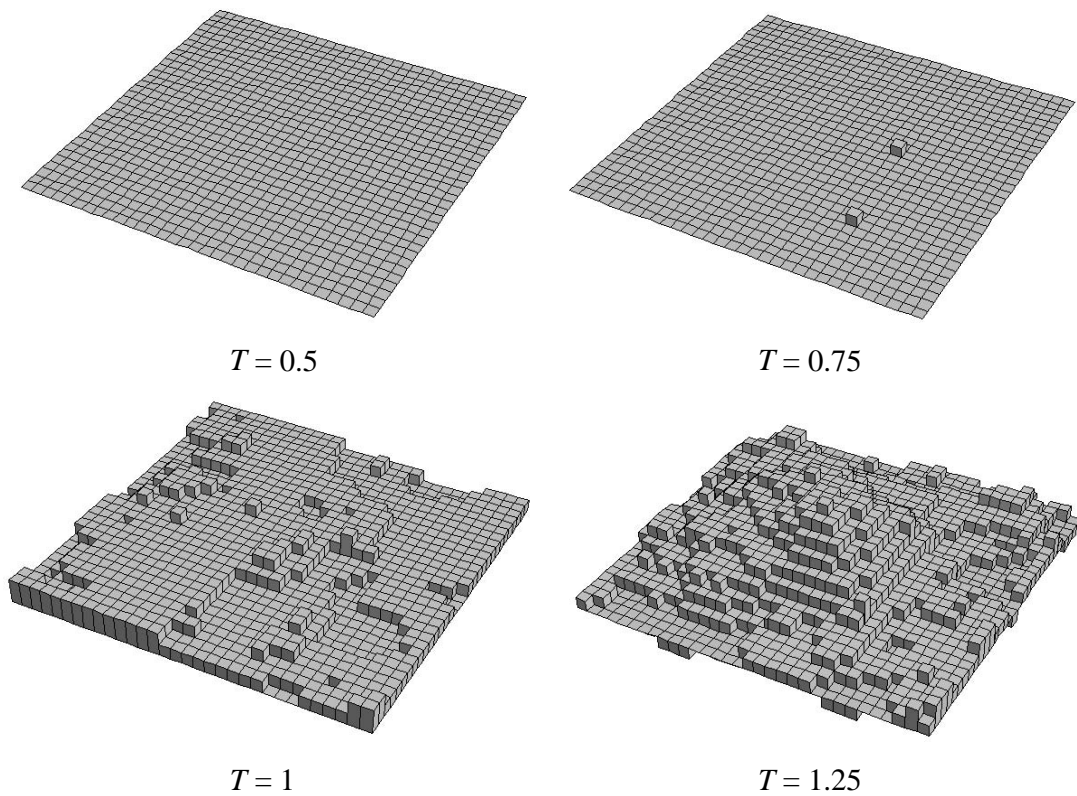


Figura 5.1: Perfiles de la superficie obtenidas mediante simulaciones numéricas de la ecuación (5.3) por encima y por debajo de la temperatura de rugosidad $T_R \approx 1$ (véase la sección 5.4). Para la figura se ha tomado la parte entera de $h(\mathbf{r}, t)$ en cada punto a fin de representar el carácter discreto.

5.3.1. Transición de rugosidad traslacional

En las secciones previas hemos discutido ejemplos teóricos y experimentales de la dinámica de crecimiento de cristales. Como consecuencia de la aleatoriedad en el sistema, la superficie se vuelve rugosa. Sin embargo, la superficie también puede desarrollar estas morfologías cuando se encuentra en equilibrio con el vapor y no hay depósito de átomos. En este caso la aleatoriedad proviene de las fluctuaciones térmicas debidas a que la muestra se encuentra a cierta temperatura. Si la superficie es plana inicialmente, a bajas temperaturas la energía térmica es muy pequeña como para conseguir que un átomo rompa sus enlaces con sus vecinos y salte a otra capa. A medida que subimos la temperatura, dicho proceso, al estar activado térmicamente, es más probable, lo que hace que la superficie se vuelva rugosa. En un artículo histórico, Burton, Cabrera y Frank [33], basándose en un argumento a partir del modelo de Ising, sugirieron que entre estas dos fases debería existir una verdadera transición termodinámica que denominaron *transición de rugosidad*.

Aunque estas ideas eran bien conocidas por la comunidad científica que trabajaba en el crecimiento de cristales, fue en los años 70 cuando su importancia fue reconocida por la comunidad de física de materia condensada. De este modo, se descubrió que, para el modelo (4.23), dicha transición estaba en relación con otras que tenían lugar en numerosos sistemas como el modelo XY, el gas de Coulomb o el modelo de seis vértices, todas ellas en la misma clase de universalidad.

La mejor manera de apreciar en qué consiste esta transición de rugosidad es observando las simulaciones de un modelo. En la figura 5.1 hemos representado realizaciones de la ecuación (5.3) con $F = 0$, en saturación, para temperaturas por encima y por debajo de la temperatura de rugosidad T_R . Cuando la temperatura es pequeña, el depósito de un átomo en una nueva capa (distinta de la inicial) es muy difícil, y requiere que se forme un agregado de átomos con un tamaño crítico. Sin embargo, cuando la temperatura es mayor que T_R , se pueden formar islas de tamaño arbitrario en capas diferentes.

La figura 5.1 sugiere varias maneras de caracterizar la transición. Por ejemplo, midiendo el tamaño medio de las islas de átomos que se forman en las nuevas capas, el cual debe diverger¹ cuando $T \rightarrow T_R$. También podemos pensar en términos de la energía necesaria para crear una isla de cualquier tamaño en una nueva capa, que debe ser cero cuando $T = T_R$, o la energía libre de un escalón, la cual debe tender a cero cerca de la transición de rugosidad [219]². Sin embargo, nosotros utilizaremos la rugosidad del sistema: a temperaturas bajas el sistema no puede crear capas nuevas y por tanto la rugosidad es prácticamente cero, mientras que para temperaturas altas la rugosidad es finita y escala con el tamaño del sistema. En el caso de que exista un flujo neto infinitesimal de átomos hacia la superficie (es decir, en una situación de cuasi-equilibrio), el hecho de que por encima de la transición de rugosidad la energía necesaria para que un átomo se deposite encima de una capa sea nula hará que la superficie tenga una movilidad distinta de cero, ya que los átomos que llegan pueden incorporarse a ella muy fácilmente. Para temperaturas bajas, y siempre que el potencial químico sea pequeño, dicha movilidad será aproximadamente cero, ya que el átomo tiene un coste energético no nulo para incorporarse a la superficie.

Los primeros modelos sugeridos para explicar esta transición fueron los modelos denominados SOS (Solid on Solid), en los que se supone que los átomos se encuentran en una estructura cristalina empaquetada sobre una red cuadrada. De este modo los átomos se pueden depositar encima de los otros, pero no se forman intersticios ni dislocaciones. Por tanto, la superficie queda descrita por su altura $h(\mathbf{r}, t)$ respecto a un origen, en la posición \mathbf{r} (discreta) del sustrato. Sus propiedades de equilibrio vienen dadas por el hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r}, \boldsymbol{\delta}} f[h(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta})], \quad (5.6)$$

donde la suma en $\boldsymbol{\delta}$ se extiende a los primeros vecinos de \mathbf{r} , y $h(\mathbf{r})$ puede tomar cualquier valor *entero* entre $\pm\infty$. Al elegir diferentes funciones $f(x)$ se obtienen diferentes modelos. Así, si tomamos $f(x) = |x|$ tenemos el llamado modelo ASOS (Absolute Solid on Solid), y en el caso de que $f(x) = x^2$ tenemos el modelo GD (4.23).

En estos modelos SOS, los escalones de altura mayor que la unidad son menos probables al ser energéticamente desfavorables, aunque pueden ocurrir. Si imponemos que dichos escalones no tengan lugar tenemos el modelo SOS restringido (RSOS) introducido por den Nijs y colaboradores [187, 171] y cuyo hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r}, \boldsymbol{\delta}} \delta(|h(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta})| - a_{\perp}). \quad (5.7)$$

¹En realidad tiende a N , donde $N = L/a_{\parallel}$, siendo L la longitud lateral de la muestra y a_{\parallel} el espaciado de red en el sustrato. En general, diremos que una cantidad observable de nuestro sistema diverge por encima de la temperatura de rugosidad cuando escale con el tamaño del sistema de forma que se haga infinita en un sistema infinito.

²Como vimos antes, en aquellos sistemas en los que existe una transición de prerrugosidad la energía libre de un escalón se anula en T_{PR} , y no la de dos escalones. Por tanto este criterio sólo determina T_R en sistemas en los que las energías de crear uno, dos o cualquier número de escalones se anula en el mismo punto.

En trabajos posteriores también se incluyeron interacciones a segundos próximos vecinos, lo cual produce un diagrama de fases más rico en el que aparecen fases nuevas y una transición de prerrugosidad. De entre los modelos continuos propuestos en la literatura para explicar la transición de rugosidad, probablemente el más conocido es el de sG definido por la ecuación (5.5) con $F = 0$.

La mejor evidencia de que un modelo teórico presenta una transición de rugosidad proviene de la comparación de dicho modelo con otros que poseen esa transición de fase y cuyas propiedades son ya conocidas. Chui y Weeks consideraron el modelo GD y mostraron que existe una transformación de dualidad entre la función de partición de este modelo y la de un Gas de Coulomb (GC) en 2 dimensiones (ver apéndice B). Previamente, Kosterlitz, utilizando el grupo de renormalización, había establecido que el GC tenía una transición entre una fase de bajas temperaturas dieléctrica y otra de altas temperaturas metálica con cargas libres y apantallamiento. Las propiedades de esta transición se pueden relacionar directamente con las del modelo GD, con el resultado de que dicha transición es diferente de la del modelo de Ising en 2D. La mayor diferencia se observa en el comportamiento de la longitud de correlación ξ . De manera general, ξ diverge cuando $T \geq T_R$, siendo la manera en la que diverge cuando $T \rightarrow T_R$, o para $T > T_R$ cuando $L \rightarrow \infty$, lo que diferencia el carácter de las transiciones. En este caso, Chui y Weeks, utilizando los resultados de Kosterlitz, encontraron que si $T \leq T_R$

$$\xi \propto \exp \left[\frac{c}{(T_R - T)^{1/2}} \right], \quad (5.8)$$

para un sistema de tamaño infinito. Por otro lado,

$$\xi \sim \ln L, \quad (5.9)$$

cuando $L \rightarrow \infty$ y $T > T_R$. La parte divergente de la energía libre cerca de la temperatura de transición es:

$$\mathcal{F} \propto \exp \left[\frac{c'}{|T - T_R|^{1/2}} \right]. \quad (5.10)$$

De este modo, la energía libre no es analítica cerca de T_R , aunque la singularidad es muy débil, siendo nulas todas las derivadas de la parte singular de \mathcal{F} para $T = T_R$. Utilizando la clasificación de la transición de Ehrenfest diremos que la transición es de orden infinito. En particular, una propiedad característica de esta transición es que el calor específico no diverge en el punto crítico. Usualmente en la literatura, se suele denominar *transición de Kosterlitz-Thouless* (KT).

Del mismo modo, utilizando una transformación en la función de partición, se puede relacionar el modelo GD con el modelo sG (veáse también el apéndice B). En este último se pueden aplicar las técnicas de renormalización, obteniéndose una transición de fase de KT en el mismo punto que predice la equivalencia anterior.

Otro modelo que puede estudiarse de forma exacta es el BCSOS. van Beijeren [18] mostró que el caso isótropo de este modelo es isomorfo al modelo de seis vértices [16], en el caso del llamado modelo F , que se puede aplicar para describir el crecimiento superficies fcc(100) y bcc(100). Como las expresiones exactas de la energía libre en el modelo de seis vértices se conocen [16], se observa que existe una transición de KT caracterizada por relaciones como (5.8)-(5.10). Por último, la existencia de una transición de tipo KT en el modelo ASOS ha sido demostrada por Frölich y Spencer [68]. Numerosas simulaciones numéricas confirman estos resultados. En la tabla 5.1 hemos resumido las propiedades de la transición para alguno de estos modelos discretos, el modelo continuo sG, y el modelo continuo xMBE que veremos en el siguiente apartado.

| Modelo | \mathcal{H} | T_R | Clase de universalidad | |
|--------|---|--------------------------------|--------------------------|---------------------|
| ASOS | $\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r}, \delta} h(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r} + \delta) $ | $h(\mathbf{r}) \in \mathbb{Z}$ | $k_B T_R = 1,24J$ | Kosterlitz-Thouless |
| GD | $\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r}, \delta} (h(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r} + \delta))^2$ | $h(\mathbf{r}) \in \mathbb{Z}$ | $k_B T_R = 1,48J$ | Kosterlitz-Thouless |
| BCSOS | | | $k_B T_R = 1,44J$ | Kosterlitz-Thouless |
| RSOS | $\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r}, \delta} \delta(h(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r} + \delta) - 1)$ | $h(\mathbf{r}) \in \mathbb{Z}$ | $k_B T_R = 0,74J$ | Kosterlitz-Thouless |
| sG | $\sum_{\mathbf{r}} [\frac{\nu}{2} (\nabla h(\mathbf{r}))^2 - V_0 \cos 2\pi h(\mathbf{r})]$ | $h(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}$ | $k_B T_R = 0,64\nu$ | Kosterlitz-Thouless |
| xMBE | $\sum_{\mathbf{r}} [\frac{\kappa}{2} (\nabla^2 h(\mathbf{r}))^2 - V_0 \cos 2\pi h(\mathbf{r})]$ | $h(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}$ | $k_B T_R \approx \kappa$ | Segundo orden |

Cuadro 5.1: Temperaturas de transición de rugosidad para los diferentes modelos SOS propuestos en la literatura. En todos los casos δ son los vectores a los primeros vecinos.

Experimentalmente, existen varias maneras de observar una transición de rugosidad. Básicamente las técnicas son las mismas que vimos en la sección 4.4, es decir medidas de difracción y microscopía a escala atómica. En ambas se pretende medir directa o indirectamente la rugosidad o la función de correlación espacial, la cual como sabemos diverge con \mathbf{r} por encima de T_R . Los materiales más estudiados han sido los metales [143]. Sin embargo, debido a que la transición de rugosidad se encuentra cerca de la de fusión, en muchos de los casos es difícil discernir claramente la transición. El ejemplo más claro lo encontramos en el estudio mediante difracción del Pb(110) llevado a cabo por Yang *et al.* [245] a una temperatura de $T_R = 415\text{K}$ siendo $T_m = 600\text{K}$ la de fusión. Por encima de T_R las correlaciones en altura del sistema son logarítmicas, tal y como predicen los modelos presentados en este apartado.

5.3.2. Transición de rugosidad orientacional

La transición de rugosidad orientacional fue introducida por primera vez en el contexto de las transiciones sólido-líquido o de fusión en dos dimensiones. En dicha transición, a bajas temperaturas tenemos un sólido cristalino, mientras que a altas temperaturas tenemos un fluido isótropo. Halperin, Nelson y Young [85, 255] desarrollaron una teoría basándose en las ideas de Kosterlitz y Thouless [130]. Esta teoría, conocida como de Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTHNY) predice que la transición de fusión es diferente en dos dimensiones respecto a la ordinaria que tiene lugar en $d = 3$, que puede ser descrita por campo medio. En esta teoría la transición se produce por medio de la sucesiva disociación de dos tipos de defectos: dislocaciones y disclinaciones. Estas disociaciones se corresponden con dos transiciones de tipo Kosterlitz-Thouless que tienen lugar para dos temperaturas T_m y T_i diferentes. Entre estas dos temperaturas existen una fase, denominada *hexática* en la que el orden orientacional decae algebraicamente en vez de exponencialmente debido a que las dislocaciones interactúan entre ellas con un potencial apantallado por las disclinaciones libres. Esta teoría sirve para explicar experimentos de electrones en la superficie de helio líquido, gases absorbidos en la superficie de grafito, coloides de esferas de poliestireno, cristales líquidos o simulaciones bidimensionales de discos duros o electrones [211, 34].

Sin embargo, existen evidencias experimentales, computacionales y teóricas de que en determinados sistemas dicha transición se produce mediante una única transición de primer orden. Dos simulaciones recientes de partículas que interactúan mediante un potencial repulsivo ilustran esta discusión: en [10] se estudió mediante dinámica molecular y método de Monte Carlo un sistema formado por 65536 partículas con interacción repulsiva del tipo r^{-12} , y se encontró que la transición de fusión viene descrita por la teoría KTHNY, aunque como reconocen los autores la fase hexática es difícil de equilibrar y por tanto

no pueden obtener información sobre ella. Por otro lado, en [236] se simuló mediante el método de Monte Carlo canónico un sistema de hasta 16384 discos duros, y se encontró que la transición es de primer orden. La diferencia entre ambos sistemas es el potencial de interacción, y parece que, cuando el potencial es más suave, la transición tiene lugar de manera más continua, con lo que la teoría KTNHY es válida. De todos modos la discusión sobre si la transición en estos sistemas bidimensionales y en los mencionados anteriormente es descrita por la teoría KTNHY o es de primer orden continúa hoy en día entre diversos grupos teóricos.

Uno de los modelos propuestos para explicar esta transición es el que formuló Nelson en 1982 [170]. En dicho modelo, se supone que a temperaturas bajas las disclinaciones están ligadas en dislocaciones, e interactúan con un potencial de la forma

$$\mathcal{H} \sim \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} q(\mathbf{r})q(\mathbf{r}') |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \ln \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{a_{\parallel}}, \quad q(\mathbf{r}) \in \mathbb{Z}, \quad (5.11)$$

donde $q(\mathbf{r})$ es la carga de la disclinación³. Suponiendo una estructura de dislocaciones éstas interactúan entre sí mediante un hamiltoniano efectivo

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} \sim K_A(T) \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} q(\mathbf{r})q(\mathbf{r}') \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|. \quad (5.12)$$

en la fase denominada hexática (véase figura 5.2). Según la teoría KTNHY la constante $K_A(T)$ que se denomina constante de Frank, diverge cuando $\tilde{T} \rightarrow T_m$, mientras que es finita y distinta de cero en la fase hexática $T_i > \tilde{T} > T_m$. Por último $K_A = 0$ en la fase líquida.

Mediante una transformación de dualidad, el modelo (5.11) es equivalente al hamiltoniano (5.4), aunque sobre un retículo triangular (véase el apéndice B). Dado que el modelo (5.11) presenta una transición de tipo KTNHY, Nelson sugiere la existencia de dos transiciones en el modelo laplaciano discreto [170]. Es interesante observar que las predicciones de Nelson para este modelo incluyen una fase intermedia en la que la superficie es rugosa traslacional aunque no orientacionalmente. Más aún, el hamiltoniano efectivo en dicha fase hexática dado por la ecuación (5.12) no es más que el del gas de Coulomb, es decir que, en el lenguaje de las superficies, tendríamos un intervalo de temperaturas en el que el hamiltoniano efectivo es el GD. Una consecuencia muy importante de esto es que, aunque una superficie no tenga inicialmente tensión superficial, existe (al menos) una fase donde las interacciones generan dicha propiedad de la superficie. La equivalencia entre las distintas transiciones la hemos esquematizado en la figura 5.2. Según el modelo de Nelson, en la fase plana tanto la rugosidad w^2 como la pendiente total s^2 (la suma de las pendientes locales) son constantes. En la fase rugosa orientada, la rugosidad diverge (tal y como lo hace en el modelo de EW) con el tamaño del sistema, mientras que la pendiente total es todavía una constante. Por último en la fase rugosa no orientada tanto la rugosidad como la pendiente total divergen con el tamaño del sistema (tal y como lo hacen en el modelo LMBE). En la fase hexática la pendiente total no diverge debido a una tensión superficial efectiva.

De este modo, la transición de rugosidad en el modelo laplaciano discreto de Nelson tiene lugar en dos pasos desde una fase plana hasta una fase rugosa. Obsérvese que el hamiltoniano en (5.4) tiene dos simetrías discretas. La primera de ellas es que el hamiltoniano es invariante

³La carga se define como la diferencia entre el número de enlaces que tiene un átomo en una posición de la red \mathbf{r} , y los que debería tener atendiendo a la estructura cristalina. Por ejemplo, en una red triangular un nodo de la red tiene seis vecinos, con lo que si un átomo tiene siete vecinos tenemos una disclinación de carga $q(\mathbf{r}) = +1$ [211].

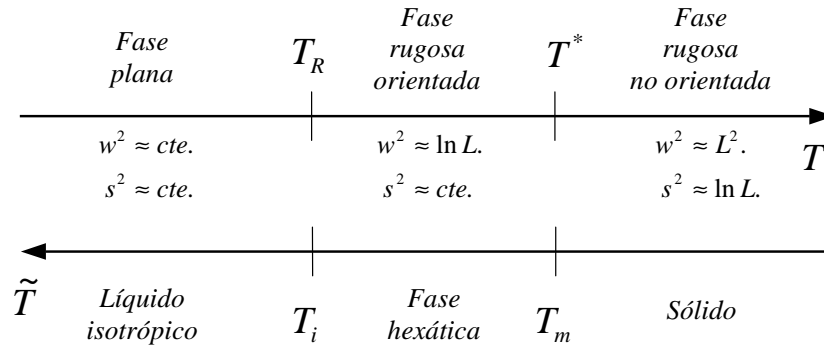


Figura 5.2: Relación entre las transiciones de rugosidad en la superficie y el modelo dual de fusión dados por las ecuaciones (5.4) y (5.11). También se muestran los valores de la rugosidad w^2 y de la pendiente total s^2 (véase el apartado 5.4) para la superficie según las predicciones de Nelson [170].

respecto al cambio $h \rightarrow h + na_{\perp}$ donde $n \in \mathbb{Z}$. Esta simetría es la misma que posee el modelo GD y nos dice que el sistema es invariante bajo traslaciones de un número entero de constantes de red vertical. Por tanto existen infinitos estados de energía cero en los que $h = na_{\perp}$, $n \in \mathbb{Z}$. Sin embargo el hamiltoniano (5.4) también es invariante respecto al cambio $h \rightarrow h + \frac{1}{2\pi} \mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}$ (donde \mathbf{q}_{\parallel} es un vector de la red recíproca), es decir respecto a cambios de pendiente entera y constante, con lo que también existen infinitos estados de energía cero en los que la superficie es plana pero orientada con un ángulo respecto a la horizontal y con pendiente entera. La presencia en el modelo de estas dos simetrías (traslacional y orientacional) y el hecho de que para temperaturas muy altas esperamos (del mismo modo que para el modelo GD) que el carácter discreto de la altura no tenga importancia, sugiere la posibilidad de que haya dos transiciones de fase: una asociada al hecho de que la superficie se orientada en una cierta dirección aunque no toma un valor constante (fase hexática) y otra a menor temperatura en la altura en todos los puntos toma el mismo valor (fase plana).

Las predicciones de Nelson fueron estudiadas numéricamente por K. Strandburg *et al.* [210] en la red triangular y por D. Bruce [32] en la cuadrada: ambos grupos de autores encontraron que la transición de rugosidad puede ser explicada mediante la teoría KTHNY. Estudiando las funciones de correlación de alturas y pendientes encontraron una fase en la que las alturas estaban descorrelacionadas, mientras que las pendientes no. Sin embargo, existe otro grupo de trabajos de W. Janke *et al.* que muestran que el mismo sistema presenta una transición de primer orden tanto en la red triangular [105] como en la cuadrada [104]. Hay dos posibles explicaciones a estas diferencias: la primera es que en [104] no se estudia numéricamente el modelo (5.4) sino una aproximación. La otra explicación es, como dice Strandburg [211], que Janke y colaboradores no resuelven suficientemente el pico del calor específico, razón a la que atribuyen una supuesta dependencia del máximo con el volumen del sistema. Pese a ello, la discusión no está resuelta, ya que en [105] se observan efectos de metaestabilidad en los diferentes parámetros de orden en ambas fases por debajo de la temperatura de transición lo que es un indicio de que la transición es de primer orden. El autor de esta memoria no conoce ninguna referencia en donde se haya zanjado esta discusión, lo que indica la importancia de realizar simulaciones del modelo laplaciano discreto para tamaños suficientemente grandes.

Como se puede ver en el apéndice B, el modelo sG y el GD están también relacionados por una transformación de dualidad. Esta dualidad se ha comprobado desde el punto de

| Modelo discreto, $h(\mathbf{r})/a_{\perp} \in \mathbb{Z}$ | Gas de Coulomb $q(\mathbf{r}) \in \mathbb{Z}$ | Modelo continuo $h(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}$ |
|---|--|--|
| $\frac{\nu}{2} \sum_{\mathbf{r}} [\nabla h(\mathbf{r})]^2$ | $\frac{\nu'}{2} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} q(\mathbf{r})q(\mathbf{r}') \ln \mathbf{r} - \mathbf{r}' $ | $\frac{\nu}{2} \sum_{\mathbf{r}} \{[\nabla h(\mathbf{r})]^2 - V_0 \cos\left(\frac{2\pi h(\mathbf{r})}{a_{\perp}}\right)\}$ |
| $\frac{\kappa}{2} \sum_{\mathbf{r}} [\nabla^2 h(\mathbf{r})]^2$ | $\frac{\kappa'}{2} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} q(\mathbf{r})q(\mathbf{r}') \mathbf{r} - \mathbf{r}' ^2 \ln \mathbf{r} - \mathbf{r}' $ | $\frac{\kappa}{2} \sum_{\mathbf{r}} \{[\nabla^2 h(\mathbf{r})]^2 - V_0 \cos\left(\frac{2\pi h(\mathbf{r})}{a_{\perp}}\right)\}$ |
| | | $\frac{\kappa}{2} \sum_{\mathbf{r}} \{[\nabla^2 h(\mathbf{r})]^2 - V_0 \sum_{i=1}^2 \cos\left(\frac{2\pi}{a_{\perp}} \mathbf{e}_i \cdot \nabla h(\mathbf{r})\right)\}$ |

Cuadro 5.2: Hamiltonianos de los diferentes modelos presentados en la sección 5.3.2. Los modelos de una misma fila están relacionados por transformaciones de dualidad. Aparte del cambio en la forma del hamiltoniano, entre la primera y segunda columna hay también un cambio en la definición de la temperatura: $T_{\text{Discreto}} = T_{\text{Coulomb}}^{-1}$. En el caso del Gas de Coulomb existen también condiciones de neutralidad de las cargas $q(\mathbf{r})$ (véase el apéndice B). Por último, \mathbf{e}_i son los vectores de la celda unidad en una red cuadrada.

vista analítico, utilizando el grupo de renormalización para el modelo sG y para el Gas de Coulomb dual del GD y obteniendo las mismas ecuaciones de flujo. Del mismo modo las simulaciones numéricas predicen la misma temperatura y el mismo tipo de transición de KT. Pero, ¿existe este mismo estudio en el caso del modelo laplaciano discreto?. La respuesta a esta pregunta pasa por responder a la siguiente: ¿es (5.3) el modelo continuo dual del modelo (5.4)? Si esto es así, entonces podemos decir que nuestro modelo posee las mismas propiedades que el de Nelson. En el apéndice B veremos que, bajo ciertas aproximaciones se puede responder afirmativamente a esta pregunta. Pero no es la única respuesta: en 1990 Levin y Dawson mostraron que el modelo

$$\mathcal{H} \sim \sum_{\mathbf{r}} \left\{ [\Delta h(\mathbf{r})]^2 + V_0 \sum_{i=1}^3 \cos\left[\frac{2\pi}{a_{\perp}} \mathbf{e}_i \cdot \nabla h(\mathbf{r})\right] \right\}, \quad h(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}, \quad (5.13)$$

donde \mathbf{e}_i son los vectores de la celda unidad en la red triangular, es dual del modelo de Nelson en una red triangular. Sin embargo, para llegar a (5.13) se realizaron ciertas aproximaciones [147] distintas de las utilizadas en el apéndice B. Utilizando técnicas del grupo de renormalización los autores mostraron que (5.13) da las mismas ecuaciones de flujo que el el hamiltoniano (5.11). Así pues, utilizando diferentes aproximaciones se llegan a diferentes modelos continuos a partir del modelo discreto.

Para resumir esta sección hemos visto tres tipos de modelos que se pueden relacionar entre ellos y que reflejamos en la Tabla 5.2. Argumentos de tipo analítico (grupo de renormalización) como simulaciones numéricas ratifican esta relación en el caso del modelo GD. Sin embargo, no existe tal consenso en el modelo laplaciano discreto de Nelson. De ahí que tanto el estudio numérico de este modelo como el de una de sus aproximaciones (la ecuación (5.3) que hemos propuesto) sea importante no sólo por su papel en el crecimiento de superficies, sino para determinar el tipo de transición que tiene lugar y su relación con el modelo de Nelson.

5.4. Resultados numéricos

Para describir nuestro sistema utilizaremos varios observables cuyo valor calcularemos a partir de las simulaciones de Langevin de la ecuación xMBE. Parte de este estudio pode-

mos encontrarlo en [161]. La elección de dichos observables está encaminada a resolver las siguientes preguntas:

- En el problema de equilibrio, ¿existe una verdadera transición de rugosidad traslacional?
- Si existe, ¿cuál es el comportamiento asintótico de la fase de altas temperaturas?
- Al igual que sucede en el modelo laplaciano discreto en una red cuadrada, ¿existe una transición orientacional?
- Cuando el sistema está fuera de equilibrio, ¿cómo se modifican dichas transiciones?

En este apartado la respuesta a las preguntas anteriores está condicionada por los problemas intrínsecos a las simulaciones numéricas como, por ejemplo, el tamaño finito de la superficie, los generadores de números aleatorios, la precisión del algoritmo de integración, etc. Pese a ello, podemos establecer que nuestro sistema *posee una verdadera transición de rugosidad traslacional*, siendo el comportamiento de altas temperaturas el descrito por la ecuación LMBE, es decir, $w^2 \sim L^2$. Aparte de ésta, existen indicios de una transición orientacional de rugosidad, análoga a la que se encuentra en las simulaciones Monte Carlo del modelo (5.4). Fuera del equilibrio, para temperaturas mayores que la de transición de rugosidad la superficie sigue siendo rugosa del mismo modo que LMBE, pero aparece una nueva fase para temperaturas más bajas que la de transición en la que la rugosidad es distinta de cero.

Para las simulaciones hemos tomado los siguientes tamaños: $L = 8, 16, 24, 32, 48, 64$ y 96 . El esquema de integración es de segundo orden en Δ_t , cuyo valor en las simulaciones ha sido $\Delta_t = 0,005$. El número de realizaciones utilizadas ha sido de 10 para $L = 96$, y del orden de 100 para tamaños más pequeños. Una vez alcanzado el tiempo para el que saturan los observables (principalmente la rugosidad), t_\times , cada observable se promedia durante un tiempo $t_\times/2$.⁴ Para temperaturas lejos de la transición de rugosidad no es necesario simular la ecuación a tiempos tan largos, especialmente a temperaturas bajas, ya que los observables saturan antes.

5.4.1. Observables

Para estudiar numéricamente nuestro modelo, definimos ciertos observables para el modelo (5.3). En todas las simulaciones hemos tomado $a_\perp = a_\parallel = V_0 = \kappa = k_B = 1$. En un primer grupo consideramos cantidades locales, como la *rugosidad*, definida como

$$w^2 = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{r}} (h(\mathbf{r}, t) - \bar{h})^2 \right\rangle, \quad (5.14)$$

donde $\bar{h} = \langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{r}} h(\mathbf{r}, t) \rangle$ es la altura media de la superficie, y la pendiente total, dada por la expresión

$$s^2 = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla h(\mathbf{r}, t))^2 \right\rangle. \quad (5.15)$$

Estos observables están destinados a determinar si existen una transición de rugosidad traslacional y orientacional respectivamente. Para ello también medimos la energía media

⁴Con $\Delta_t = 5 \times 10^{-3}$ y $L = 64$, el promedio se realiza sobre 5 millones de pasos temporales.

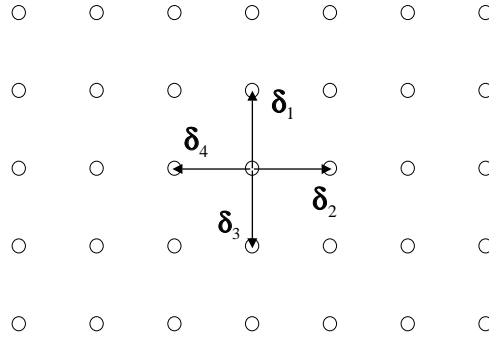


Figura 5.3: Esquema de la red cuadrada y los vectores δ_j a los primeros vecinos.

del sistema

$$E = \frac{1}{L^2} \langle \mathcal{H} \rangle. \quad (5.16)$$

Al igual que Strandburg *et al.* [210], definimos el siguiente parámetro de orden

$$\tau^2 = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{r}} \left[\sum_{\delta_j} (-1)^j h(\mathbf{r} + \delta_j) \right]^2 \right\rangle, \quad (5.17)$$

que se denomina *parámetro de fluctuación*, y donde la suma en δ_j se extiende a los primeros vecinos tal y como hemos representado en la figura 5.3. Strandburg *et al.* argumentan que este parámetro de orden es nulo en la fase plana y hexática, y distinto de cero en la rugosa. Como veremos después, está relacionado con la correlación pendiente-pendiente a distancias cortas.

Además de la energía del sistema medimos la energía de un escalón, definida como

$$E_{st} = (\mathcal{H} - \mathcal{H}_1)/L, \quad (5.18)$$

donde \mathcal{H}_1 es la energía de la superficie cuando en ella tenemos un escalón que se mantiene mediante condiciones de contorno.

En un segundo bloque, hemos medido también las funciones de correlación en el espacio real y el recíproco. Estas son la correlación altura-altura

$$C(r) = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{s}} [h(\mathbf{s} + \mathbf{r}) - h(\mathbf{s})]^2 \right\rangle, \quad (5.19)$$

la correlación pendiente-pendiente

$$G(r) = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{s}} [\nabla h(\mathbf{s} + \mathbf{r}) - \nabla h(\mathbf{s})]^2 \right\rangle, \quad (5.20)$$

y el factor de estructura

$$S(\mathbf{q}_{\parallel}) = \langle \hat{h}(\mathbf{q}_{\parallel}) \hat{h}^*(\mathbf{q}_{\parallel}) \rangle, \quad (5.21)$$

donde $\hat{h}(\mathbf{q}_{\parallel})$ es la transformada de Fourier de $h(\mathbf{r})$. Si desarrollamos la suma sobre j en (5.17) tenemos que (véase figura 5.3)

$$\tau = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{r}} \{ ([h(\mathbf{r} + \delta_1) - h(\mathbf{r} + \delta_2)] - [h(\mathbf{r} + \delta_4) - h(\mathbf{r} + \delta_3)])^2 \} \right\rangle \simeq G(\delta_1 - \delta_4), \quad (5.22)$$

| Modelo | w^2 | s^2 | $C(r)$ | $G(r)$ | $S(\mathbf{q}_{\parallel})$ |
|-----------------|--------------|--------------------|--------------------|--------------------|-----------------------------|
| MBE, Eq. (4.12) | $\sim L^2$ | $\sim \ln L$ | $\sim r^2 \ln L/r$ | $\sim \ln r$ | $\sim q^{-4}$ |
| EW, Eq. (4.16) | $\sim \ln L$ | $\sim \text{cte.}$ | $\sim \ln r$ | $\sim \text{cte.}$ | $\sim q^{-2}$ |

Cuadro 5.3: Dependencia de los diferentes observables medidos para las ecuaciones (4.12) y (4.16) respecto a la distancia r o el tamaño del sustrato L , cuando $r \ll L$, $L \gg 1$ y $q_{\parallel} \ll 1$.

luego τ mide la correlación entre pendientes a cortas distancias.

Por último, en un tercer bloque de observables hemos medido las susceptibilidades de todos los observables locales anteriores. En particular, presentaremos los resultados de la susceptibilidad de la energía⁵ (o calor específico)

$$\chi_E \equiv \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{L^2 k_B T} = \frac{\partial E}{\partial T} \quad (5.23)$$

y la del parámetro de fluctuación

$$\chi_{\tau} = \frac{\langle \tau^2 \rangle - \langle \tau \rangle^2}{L^2 k_B T}. \quad (5.24)$$

En el caso de las teorías lineales EW y LMBE todas las cantidades anteriores pueden evaluarse exactamente para un sistema de tamaño $L \times L$, con los resultados que pueden encontrarse en el apéndice A. Prescindiendo de efectos de tamaño finito, en la tabla 5.3 hemos resumido el comportamiento de dichas cantidades para un sustrato de dimensión $d = 2$ y tamaño $L \times L$, con $L \gg 1$.

Existen algunas relaciones entre estas cantidades. Así, se tiene que

$$\begin{aligned} C(r) &= 2w^2 - 2 \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{s}} h(\mathbf{r} + \mathbf{s}) h(\mathbf{s}) \right\rangle, \\ G(r) &= 2s^2 - 2 \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{s}} \nabla h(\mathbf{r} + \mathbf{s}) \cdot \nabla h(\mathbf{s}) \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Cuando $r \rightarrow \infty$, tenemos que $C(r) \rightarrow 2w^2$ y $G(r) \rightarrow 2s^2$.

Por último, en el caso de no equilibrio hemos medido también la movilidad del sistema, definida como

$$\mu = \frac{1}{F} \frac{d\langle h(\mathbf{r}, t) \rangle}{dt}, \quad (5.26)$$

donde F es el flujo medio de partículas hacia la superficie.

5.4.2. Resultados en equilibrio

En la figura 5.4 hemos representado los resultados de las simulaciones para los observables locales de la ecuación (5.3). Como vemos en el panel (b), a temperaturas bajas la rugosidad es pequeña e independiente del tamaño del sustrato. Para temperaturas altas, la rugosidad escala con el tamaño del sistema, y además, su valor tiende al valor obtenido para LMBE, lo que indica que a altas temperaturas el potencial es nulo de manera efectiva. En

⁵La segunda igualdad en (5.23) es válida tan sólo cuando el sistema se encuentra en equilibrio.

el panel (e) hemos representado los valores del exponente $\alpha(T)$ obtenido suponiendo que $w^2 \sim L^{2\alpha}$ para cada temperatura.⁶ Para $T > 1,2$ el sistema es por tanto rugoso y escala como describe la ecuación LMBE, concluyendo que existe una transición de rugosidad a una temperatura menor o igual que $T = 1,2$. Una prueba más de esto la constituye las medidas de la energía libre de un escalón la cual se hace cero para temperaturas mayores que T_R como podemos ver en el panel (f) de la figura 5.4.

El resto de observables locales muestran el mismo comportamiento que la rugosidad. Además, a temperaturas altas ($T \geq 1,5$) se observa un acuerdo completo entre los resultados numéricos y las expresiones exactas de alta temperatura para el modelo LMBE, lo cual es una prueba más de la precisión de nuestras simulaciones. En el caso de la energía, para temperaturas altas $T \geq 2$ deberíamos esperar que $E \simeq k_B T/2 + V_0$, ya que el modelo LMBE es gaussiano. Sin embargo como vemos en el panel (a) de la figura 5.4 hay una diferencia entre el resultado numérico y $k_B T/2 + V_0$. Como se puede ver en el apéndice C ello se debe a aunque la superficie escale como el modelo LMBE (y por tanto el potencial ha sido renormalizado de manera efectiva a cero), aparecen correcciones a los observables debido a que $V_0 \neq 0$.

En el mismo espíritu que los estudios sobre el modelo GD [194, 219, 220, 206] ó sG [200, 62], estudiamos las funciones de correlación de nuestro modelo xMBE para determinar el punto donde se produce la transición. En la figura 5.5 hemos representado los resultados numéricos para las funciones de correlación en alturas y pendientes [paneles (a) y (b)]. A bajas temperaturas ($T \leq 1$) la longitud de correlación es muy pequeña y las funciones de correlación tienden a un valor constante cuando $r \rightarrow L$. A medida que T aumenta, dicha longitud crece hasta que a temperaturas suficientemente altas ($T \simeq 2$) la función de correlación coincide con la del modelo LMBE, es decir, la longitud de correlación es igual al tamaño del sistema y el potencial ha sido renormalizado a cero. Observando ambos paneles es evidente que la transición tiene lugar entre $1 \leq T_R \leq 1,25$. En un sistema infinito $C(r), G(r) \rightarrow \infty$ cuando $r \rightarrow \infty$ por encima de la temperatura de transición, mientras que $C(r), G(r) \rightarrow \text{cte.}$ por debajo de la temperatura de transición. A partir de las expresiones (5.25) este criterio coincide con suponer que la rugosidad y pendiente total divergen por encima de la transición y tienden a una constante por debajo de ella. En un sistema finito es difícil determinar esta temperatura ya que las funciones $C(r)$ y $G(r)$ poseen efectos de tamaño finito para $r > L/2$ y es difícil decidir cuándo éstas divergen o no. Para solucionar en parte este problema, en la figura 5.5 [paneles (c) y (d)] hemos representado estas mismas funciones de correlación en función de los valores que toman para el modelo LMBE, que denotamos como $C_0(r)$ y $G_0(r)$, y cuyas expresiones pueden encontrarse en el apéndice A. Para $T < 1$, la función de correlación en alturas converge a una constante, mientras que para $1 < T < 1,25$ diverge aunque no como LMBE. Esto último se cumple para $T > 1,25$ aproximadamente. El comportamiento de la función de correlación en pendientes es el mismo, pero el punto donde se produce la transición es diferente. Por ejemplo, para $T = 1,05$, $C(r)$ parece diverger, mientras que $G(r)$ no. Esto nos dice que la transición tiene lugar en dos etapas y que probablemente hay dos transiciones de fase, tal y como predice la teoría KTNHY. Es difícil con los datos disponibles poder determinar sin ninguna duda la existencia de estas dos transiciones de fase y la existencia de una fase hexática en la que la superficie sea rugosa en alturas ($w^2 \rightarrow \infty$), pero ordenada en pendientes ($s^2 \rightarrow \text{cte.}$). De todos modos, podemos obtener más evidencias a partir del factor de estructura que hemos

⁶A altas temperaturas parece haber un decaimiento en el valor del exponente. Este comportamiento se debe a que, en la regresión, se utilizan los valores de $L = 8$ y $L = 16$ para los cuales el comportamiento asintótico $w^2 \sim L^2$ no es del todo válido. De hecho, utilizando los valores exactos para la ecuación LMBE para $L = 8, 16, 32$ y 64 el exponente que sale de la regresión es $2\alpha = 1,897 \pm 0,022$.

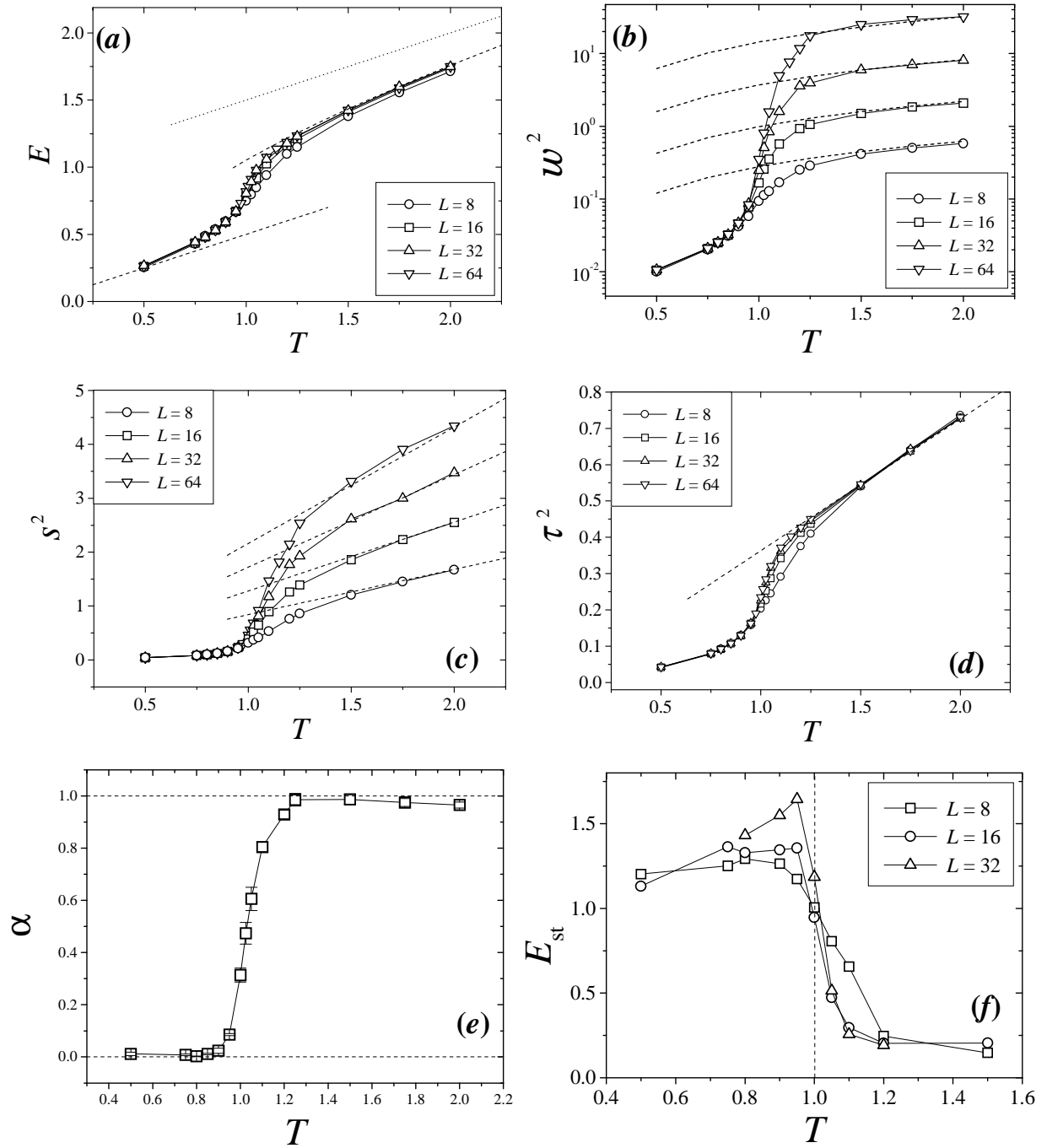


Figura 5.4: Valores de los observables locales para distintas temperaturas y tamaños del sistema. **Panel (a):** Energía del sistema [Eq. (5.16)]. **Panel (b):** Rugosidad [Eq. (5.14)]. Notar que el eje de ordenadas está en escala logarítmica. **Panel (c):** Pendiente total [Ec. (5.15)]. **Panel (d):** Parámetro de fluctuación [Ec. (5.17)]. **Panel (e)** Valor del exponente α obtenido a partir del ajuste $w^2 \sim L^{2\alpha}$. **Panel (f)** Energía de un escalón en función de la temperatura. La línea vertical marca la temperatura de rugosidad que luego identificaremos como $T_R \simeq 1$. En los paneles (a)-(d) las líneas a trazos son las aproximaciones de alta y baja temperatura (véanse apéndices A y C). La línea a puntos en el panel (a) es la aproximación $E \simeq k_B T/2 + V_0$. En todos los paneles las líneas continuas son meras ayudas visuales.

representado en la figura 5.5 [panel (e)]. Como vemos, para $T = 1,05$ el factor de estructura escala como q^{-4} para los modos altos, mientras que va como q^{-2} para los bajos, lo que indica que, a grandes escalas, el sistema escala tal y como predice el modelo de EW. A partir de estos datos, podemos concluir que existen dos temperaturas T_R y T^* de manera que (ver figura 5.2)

- Para $T < T_R$ la superficie es plana en alturas y pendientes.
- Para $T_R < T < T^*$ la superficie es rugosa (desordenada en alturas), aunque las pendientes están correlacionadas, tal y como predice el modelo de EW. Esta fase *hexática* coincide con la predicha por Nelson en la que el hamiltoniano efectivo es el dado por (5.12) que no es más que el Gas de Coulomb, dual del modelo GD cuya fase de altas temperaturas coincide con el modelo de EW.
- Para $T^* < T$ las pendientes se desordenan también y las propiedades de la superficie son las mismas que las del modelo LMBE.

Para determinar de manera cuantitativa T_R y T^* , utilizamos el *radio asimétrico*, r_{asim} introducido por Strandburg *et al.* en el estudio del modelo laplaciano discreto de Nelson [210] y que se define como el menor valor de r para el cual $|C(r) - C(r_0)| < \varepsilon$ donde ε toma un valor pequeño [en nuestros cálculos ε es el 1% de $C(r_0)$] y $r_0 \gg 1$ es una distancia fija. Cuando $C(r)$ satura a una constante entonces $r_{asim} \ll r_0$, mientras que cuando la función de correlación divergen entonces $r_{asim} \simeq r_0$. En la figura 5.5 [panel (f)] hemos representado r_{asim} para las dos funciones de correlación y observamos que la temperatura a la que las funciones de correlación cambian de comportamiento es diferente. De manera cuantitativa identificamos $T_R = 1 \pm 0,025$ y $T^* = 1,125 \pm 0,025$. Estas predicciones no dependen del valor de r_0 siempre que éste sea suficientemente grande.

Sin embargo, para establecer estos resultados de manera más concluyente necesitaríamos ir a tamaños mucho más grandes de los que utilizamos, algo que está fuera de nuestra actual potencia de cálculo.

Para determinar el orden de la transición procedemos a estudiar los efectos de tamaño finito en el máximo del calor específico. En la figura 5.6 [panel (a)] podemos ver que el calor específico tiene un solo máximo y éste escala como [183]

$$\chi_E^{\text{máx}} \sim L^{\alpha_E/\nu_E}, \quad (5.27)$$

donde $\alpha_E/\nu_E \approx 0$,⁷ es decir escala de manera logarítmica. Aunque pequeña, esta dependencia excluye totalmente posibilidad de que la transición sea de Kosterlitz-Thouless, en la cual no existe una dependencia del pico con el tamaño del sistema⁸. Suponiendo hiperescalado [102], es decir $2\nu_E = d - \alpha_E$, tenemos que $\nu_E \approx 1$. Esta predicción se puede corroborar utilizando la relación entre la temperatura del máximo de la susceptibilidad para cada tamaño L [que denotamos $T_R(L)$] y el tamaño del sistema

$$T_R(L) - T_R \sim L^{-1/\nu_E}. \quad (5.28)$$

⁷No confundir el exponente α_E con el de rugosidad. Los exponentes α_E y ν_E vienen definidos por las relaciones $C(t) \sim |t|^{-\alpha_E}$ para el calor específico y $\xi(t) \sim |t|^{-\nu_E}$ para la longitud de correlación en un *sistema infinito* y donde $t = (T - T_R)/T_R$ es la temperatura reducida. La ecuación (5.27) es cómo escala el calor específico para un sistema de *tamaño finito*.

⁸Al menos para los tamaños que estamos considerando, ya que en algunos modelos que tienen una transición de KT existen correcciones logarítmicas muy pequeñas [120].

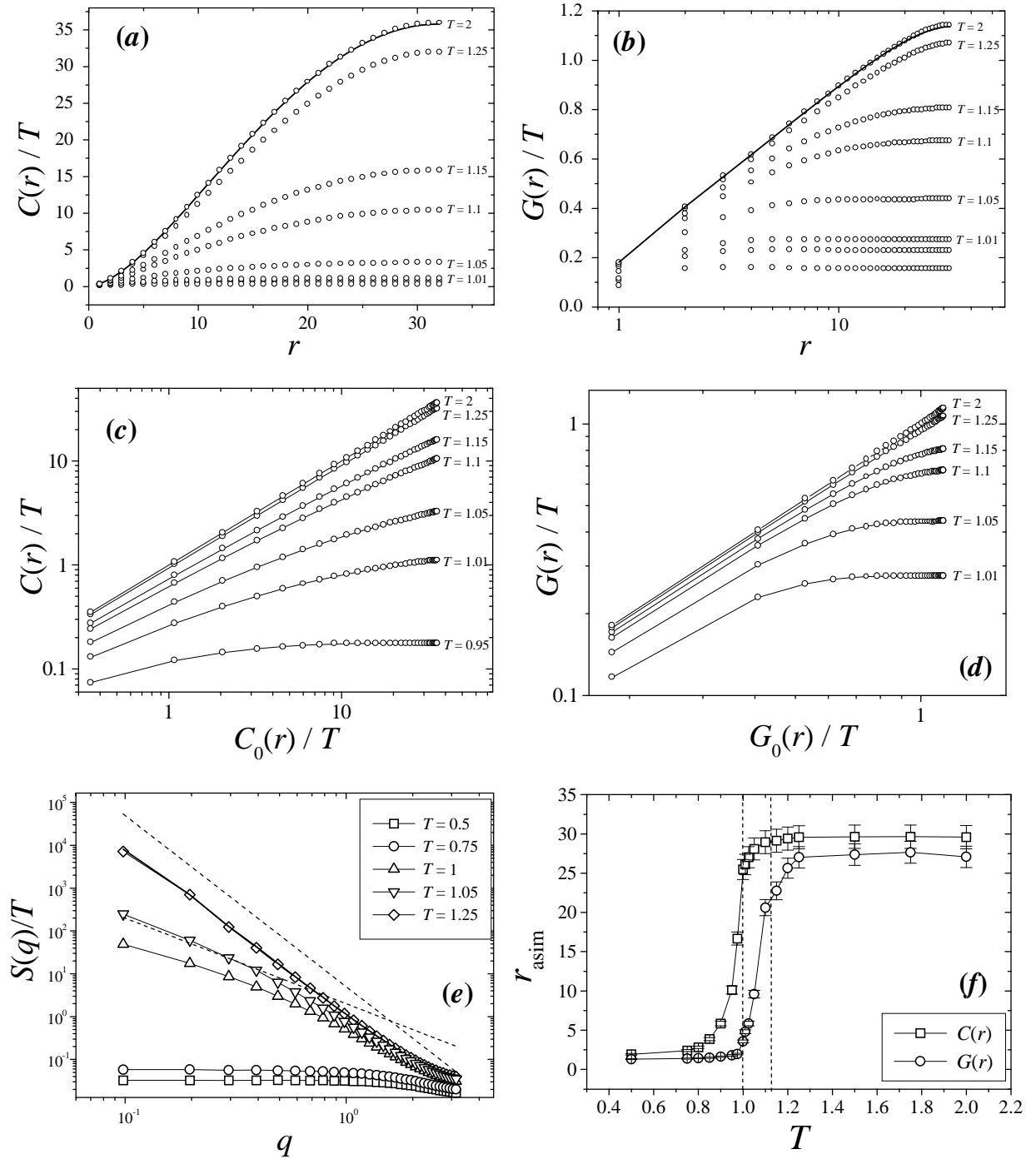


Figura 5.5: Valores de las funciones de correlación. **Panel (a):** Función de correlación altura-altura para $L = 64$ [Ec. (5.19)]. La línea gruesa es la aproximación para temperatura alta. **Panel (b):** Función de correlación pendiente-pendiente para $L = 64$ [Ec. (5.20)]. La línea gruesa es la aproximación para temperatura alta. **Panel (c) y (d):** Comparación de las funciones de correlación para el modelo xMBE en función de las mismas funciones para el modelo LMBE. **Panel (e):** Factor de estructura para diferentes temperaturas [Ec. 5.21]. Las líneas a trazos corresponden a las leyes de potencias q^{-4} y q^{-2} . **Panel (f):** Radio asimétrico para distintas temperaturas, $L = 64$ y $r_0 = 32$. En todos los paneles las líneas continuas son meras ayudas visuales.

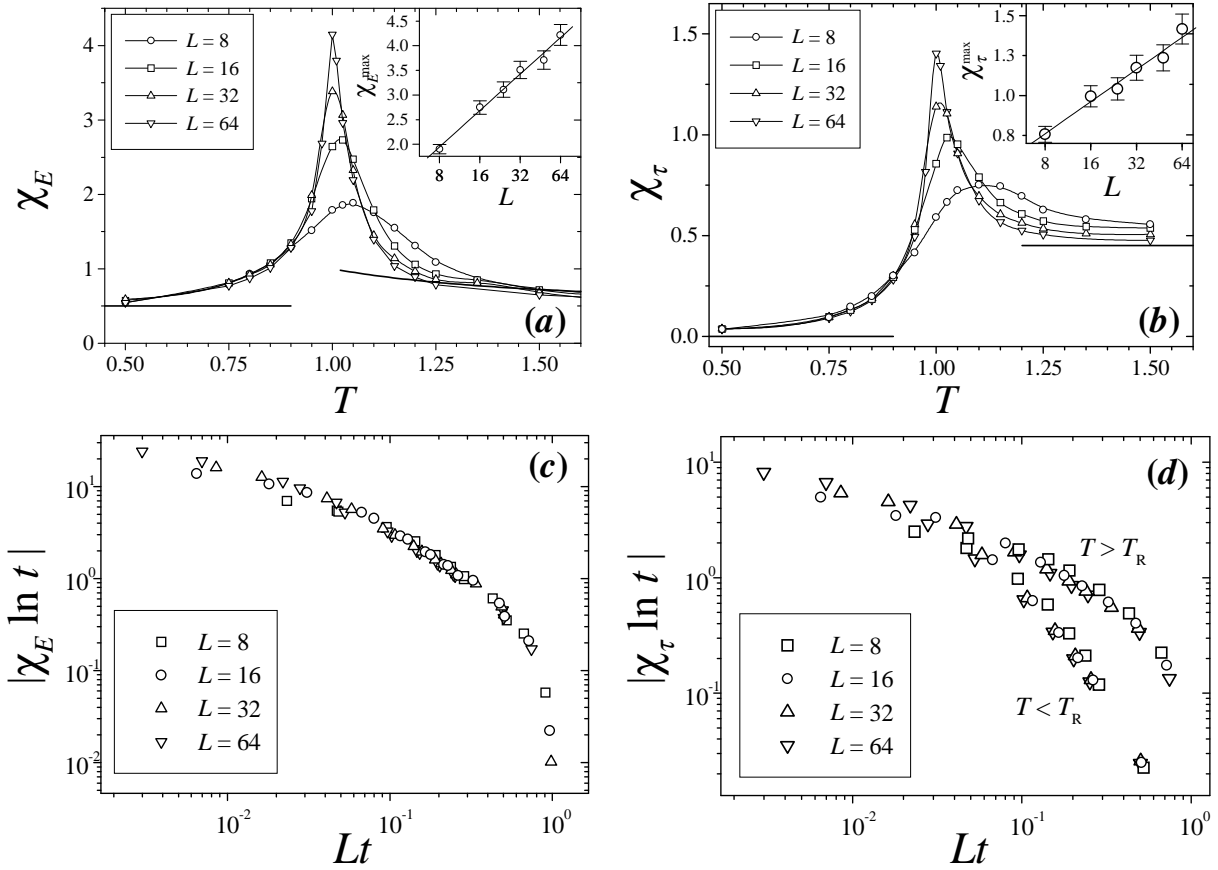


Figura 5.6: Valores de las susceptibilidades. **Panel (a):** susceptibilidad de la energía. Las líneas gruesas corresponden a las aproximaciones de baja y alta temperatura, mientras que las líneas finas son meras ayudas visuales. **Panel (b):**, susceptibilidad del parámetro de fluctuación. Las líneas gruesas corresponden a las aproximaciones de alta y baja temperatura. **Paneles (c) y (d):** colapso de las susceptibilidades utilizando los exponentes α y ν obtenidos numéricamente.

En esta relación existe un parámetro ajustable más que es T_R , definida como $T_R(L \rightarrow \infty)$. Haciendo un ajuste no lineal utilizando la relación anterior obtenemos $\nu_E = 1,10 \pm 0,35$ y $T_R = 0,996 \pm 0,082$. El valor de ν es compatible con el obtenido mediante la relación de hiperescalado; por ello, utilizamos el valor $\nu_E = 1$ para obtener T_R de forma más precisa y así $T_R = 0,995 \pm 0,025$. Estos exponentes suponen que el calor específico escala como

$$\chi_E(L, t) = (\ln t)^{-1} f\left(\frac{L}{\xi(t)}\right), \quad (5.29)$$

donde $t = (T_R(L) - T)/T_R(L)$ es la temperatura reducida, $f(x)$ es la función de escalado y

$$\xi(t) \sim t^{-\nu_E}, \quad (5.30)$$

es la longitud de correlación. La manera en la que la longitud de correlación diverge en nuestro sistema (es decir, el valor $\nu_E = 1$ en dimensión $d = 2$) es la misma que en el modelo de Ising [183]. Una comprobación adicional de estos resultados proviene de utilizar la relación (5.29) para colapsar los valores de la susceptibilidad para diferentes tamaños: como podemos observar en la figura 5.6, el acuerdo es muy bueno. Todo ello nos lleva a asociar este máximo en el calor específico y su divergencia logarítmica cuando $L \rightarrow \infty$ con la transición de rugosidad en T_R .

Para observar la segunda transición, al principio de esta sección definimos el parámetro τ que, como vimos, está relacionado con las correlaciones de las pendientes a corta distancia. Por ello, procedemos a estudiar su susceptibilidad. Utilizando la relación análoga de (5.27), $\chi_\tau^{\max} \sim L^{\alpha_\tau/\nu_\tau}$, e hiperescalado ($2\nu_\tau = 2 - \alpha_\tau$) obtenemos que $\alpha_\tau/\nu_\tau = 0,008 \pm 0,003$ (es decir, logarítmico) y $\nu_\tau = 0,52 \pm 0,03$. Con este valor de ν_τ y la relación (5.28) obtenemos $T_R = 1,007 \pm 0,009$. De este modo la transición de fase determinada por este parámetro de orden se produce también en T_R . Sin embargo τ no es un buen parámetro de orden para la fase hexática, ya que en dicha fase las pendientes están correlacionadas a largas distancias. Por tanto la fase hexática sólo se puede estudiar observando $G(r)$ cuando $r \rightarrow \infty$, y contrariamente a lo que supone Strandburg *et al.*, las divergencias en el calor específico y en el parámetro τ se deben a la misma transición, la de rugosidad.

Resumiendo esta sección, hemos encontrado una transición de rugosidad en $T_R = 1 \pm 0,025$ que es de segundo orden, al contrario que la transición de rugosidad del modelo sG. El estudio de las funciones de correlación refleja dicha transición traslacional y, además, una posible segunda transición en $T^* = 1,125 \pm 0,025$ en la cual desaparece el orden orientacional y la superficie se vuelve rugosa y desorientada. El criterio utilizado para determinar cuantitativamente esta segunda transición es el mismo que el utilizado por Strandburg *et al.* [210]. Aunque existen otras evidencias en el factor de estructura, necesitaríamos irnos a tamaños mucho más grandes que los estudiados para determinar sin ninguna ambigüedad la existencia de esta segunda transición en T^* .

5.4.3. Resultados fuera del equilibrio

En este apartado presentamos los resultados de las simulaciones de nuestro modelo cuando $F \neq 0$. Este estudio está basado en las mismas ideas que el realizado por Nozières y Gallet para el modelo de sG [173]. En la figura 5.7 [panel (a)] hemos representado la movilidad de nuestro sistema para varios flujos. Cuando $F \rightarrow 0$ la movilidad es nula para $T < T_R$, mientras que es distinta de cero para $T \geq T_R$. Como dijimos al principio del capítulo, ello se debe a que por encima de T_R la superficie es rugosa y los átomos que llegan a ella pueden adherirse con facilidad debido al gran número de vecinos. Al igual que sucede

con el modelo sG [200], cuando $F \neq 0$ la movilidad (y por tanto la velocidad de crecimiento) del sistema es siempre distinta de cero, y depende de manera no lineal del flujo medio de partículas. Ello se debe a la existencia de tres regímenes en función de la temperatura y que, por ejemplo, podemos ver en el caso $F = 0,5$

- *Régimen de nucleación homogénea:* Para temperaturas $T \ll T_R$, la energía de una isla de radio r y altura una monocopa es $\mathcal{F} = 2\pi r\epsilon - \pi r^2 F a_\perp$, donde ϵ es la energía del borde de la isla (que depende de κ). De este modo tenemos un radio crítico $r_c = \epsilon / F a_\perp$ de forma que islas con $r < r_c$ se vuelven inestables y desaparecen, mientras que las islas con $r > r_c$ son estables y tienden a crecer completando una monocapa. Las islas de radio crítico tienen una energía $\mathcal{F}_c = \pi\epsilon^2 / F a_\perp$. Si la longitud de correlación ξ es mucho menor que r_c , entonces estamos en el régimen de nucleación, en el que la probabilidad de que aparezca una isla de tamaño r_c es proporcional a $\exp(-\mathcal{F}_c/T)$. Una vez formada, dicha isla crece y puede coalescer con otras. Ello se traduce en que las capas de la superficie se van cubriendo a una velocidad que depende de manera no lineal con los diversos parámetros del sistema [173, 12]. La expresión para la movilidad en esta teoría es

$$\mu \simeq A F^{1/3} \exp\left(-\frac{B}{F k_B T}\right) \quad (5.31)$$

donde A y B son parámetros. Es difícil comparar esta expresión con nuestras simulaciones ya que para su derivación analítica se utilizan diversos parámetros fenomenológicos como la movilidad de un escalón o el tiempo medio de decaimiento de una isla. A pesar de ello, la expresión anterior supone que la movilidad depende no linealmente de F y T y que es prácticamente nula para temperaturas pequeñas. La ecuación (5.31) deja de tener sentido cuando $\mu \geq 1$. En la figura 5.7 podríamos decir que este régimen tiene lugar en $0 \leq T \leq 0,75$ para $F = 0,5$. Dado que en este régimen la superficie apenas crece o, si lo hace, lo hace capa a capa, diremos que la superficie es plana.

- *Régimen no lineal:* Si $\xi \geq r_c$, debido a las fluctuaciones térmicas se pueden formar islas del tamaño crítico en nuestro sistema (ya que $\mathcal{F}_c \leq k_B T$) y por tanto la superficie se vuelve rugosa incluso por debajo de T_R . En este régimen la movilidad depende de manera no lineal respecto a F y a T . En la figura 5.7 este régimen tiene lugar en $0,75 < T < T_R \simeq 1$ para $F = 0,5$.
- *Régimen lineal:* por último, cuando $T \geq T_R$ siempre se cumple que $\xi \gg r_c$ y por tanto la superficie es rugosa. Pero además, como el potencial ha sido renormalizado a cero de manera efectiva, la superficie escala como la ecuación LMBE. En este régimen la movilidad depende linealmente de F y es casi independiente de T . Sin embargo, en nuestro modelo, y debido a los parámetros que estamos utilizando se observa una diferencia en la movilidad de la superficie al variar F y T para $T \geq T_R$. Ello es debido a que, aunque el potencial se anule de manera efectiva, el promedio $\langle \cos \frac{2\pi V_0}{a_\perp} \rangle$ no es nulo, y por tanto la movilidad $\mu = \frac{1}{F} \langle \frac{\partial h}{\partial t} \rangle = 1 - \frac{2\pi V_0}{a_\perp F} \langle \cos \frac{2\pi V_0}{a_\perp} \rangle$ depende de este promedio. Este efecto es el mismo que vimos en el apartado anterior en la energía en equilibrio (véase el apéndice C).

Cuando $F \gg 2\pi V_0 / a_\perp$, tenemos que $r_c \simeq 0$ y desaparece el régimen de nucleación. Este es el caso de $F = 7, 10$ en la figura 5.7. Cuando $T \rightarrow 0$ el valor del flujo para el que desaparece este régimen es $F_{\text{th}}(T = 0) = \frac{2\pi V_0}{a_\perp}$ y la movilidad es $\mu = [F - F_{\text{th}}(T = 0)]^{1/2}$ para $F \geq F_{\text{th}}(T = 0)$. De hecho, a medida que F crece el potencial es más irrelevante, y esperamos que para $F \rightarrow \infty$ el escalado del modelo xMBE sea el mismo que el de LMBE

para cualquier T . Por ejemplo, en la figura 5.7 [panel (c)] vemos que la rugosidad para $F = 10$ coincide con la del modelo LMBE para cualquier T .

En el resto de los observables locales [véase figura 5.7, paneles (b), (c), (d) y (e)] vemos que, como resultado de la aparición de una fase no lineal, tanto la movilidad, la rugosidad, la pendiente total y el parámetro de fluctuación de la superficie son distintos de cero para $T < T_R$. Como hemos dicho, esperamos que cuando $F \rightarrow \infty$ y/o cuando $T \geq T_R$ el potencial sea irrelevante y el sistema se comporte de manera efectiva como LMBE. Sin embargo, como podemos ver en la figura (5.7) [paneles (b), (c), (d) y (e)], los valores que toman los observables cuando $F \geq F_{\text{th}}(T = 0)$ no coinciden con los que toman cuando $F < F_{\text{th}}(T = 0)$ para $T \geq T_R$. Por ejemplo, para la energía [panel (b)] tenemos que en el modelo de LMBE, $E = k_B T/2 + V_0$. Sin embargo, como vimos en el apartado anterior (véase apéndice C), cuando $T \geq T_R$ la energía del sistema es $E^* \equiv k_B T/2 + V_0 - V_0^2/2T + \dots$, donde aparece una corrección debido a que en nuestro modelo $V_0 \neq 0$ aunque para $T \geq T_R$ el sistema se comporte efectivamente como si $V_0 = 0$. Esto es lo que sucede fuera del equilibrio cuando $F < F_{\text{th}}(T = 0)$ y $T \geq T_R$ en el que $E \rightarrow E^* < k_B T/2 + V_0$. Sin embargo, cuando $F \rightarrow \infty$ el potencial es más irrelevante y como vemos en la figura 5.7 $E \rightarrow k_B T/2 + V_0$. En el resto de observables tenemos el mismo efecto.

La movilidad, aunque pequeña no es nula para ningún valor de T si $F \neq 0$. Sin embargo en la fase plana es muy pequeña y, de manera efectiva, podemos considerar que la superficie no crece. De este modo podemos definir para cada temperatura un $F_{\text{th}}(T)$ por debajo del cual la superficie no crece y que identificaremos como aquel valor del flujo para el que $\mu = 10^{-2}$. Podríamos considerar $F_{\text{th}}(T)$ como el punto en el que la superficie pasa de ser plana y con movilidad nula a ser rugosa y con movilidad distinta de cero.

Al igual que hicimos en el caso de equilibrio es posible medir, para cada flujo externo, la temperatura T_c a la que diverge la función de correlación altura-altura o pendiente-pendiente mediante el radio asimétrico. Esta temperatura marca la transición entre una fase plana y una rugosa, aunque en ésta la superficie no escale como LMBE y por tanto $T_c \neq T_R$. Solamente en equilibrio esperamos que $T_c = T_R$. En la figura 5.7 [panel (f)] hemos representado para un valor fijo de F tanto la temperatura $T_c(F)$ como el valor de la temperatura para el que $F = F_{\text{th}}(T)$, observando que ambos criterios dan aproximadamente el mismo resultado; por tanto podemos utilizar cualquiera de ellos para distinguir entre el punto en el que se produce el cambio de la fase plana a la fase rugosa no lineal. Por último, utilizando también el radio asimétrico es posible calcular la temperatura en la cual las pendientes se desordenan, que también hemos representado en el panel (f) de la figura 5.7. Como vemos dicha temperatura es siempre mayor que T_c y coincide con ella para $F = F_{\text{th}}(T = 0)$. En el caso fuera del equilibrio es incluso más difícil distinguir la fase hexática, si es que existe.

Finalmente en el régimen no lineal mencionado antes, aunque la superficie es rugosa cuando $t \rightarrow \infty$, existe inicialmente una etapa en la que la superficie crece capa a capa por nucleación. En esta zona la rugosidad oscila con el tiempo hasta un punto en el que deja de oscilar y crece de manera monótona. Estas oscilaciones las trataremos en el capítulo 7 y están relacionadas con las oscilaciones RHEED que se observan experimentalmente. Por ello este régimen es parecido al de Frank-van der Merwe. Como veremos en el capítulo 7, el decaimiento de las oscilaciones depende de la temperatura, de manera que a menor temperatura, más tiempo tardan en decaer las oscilaciones. Por eso cuando $F \geq F_{\text{th}}(T = 0)$ y $T \rightarrow 0$ el sistema crece en el modo de Stranski-Krastanov. En el régimen lineal, $T \geq T_R$ no se observan dichas oscilaciones y la superficie se vuelve rugosa desde el principio, que es lo mismo que se observa en el modo de crecimiento de Volmer-Weber o 3D. Por último, en

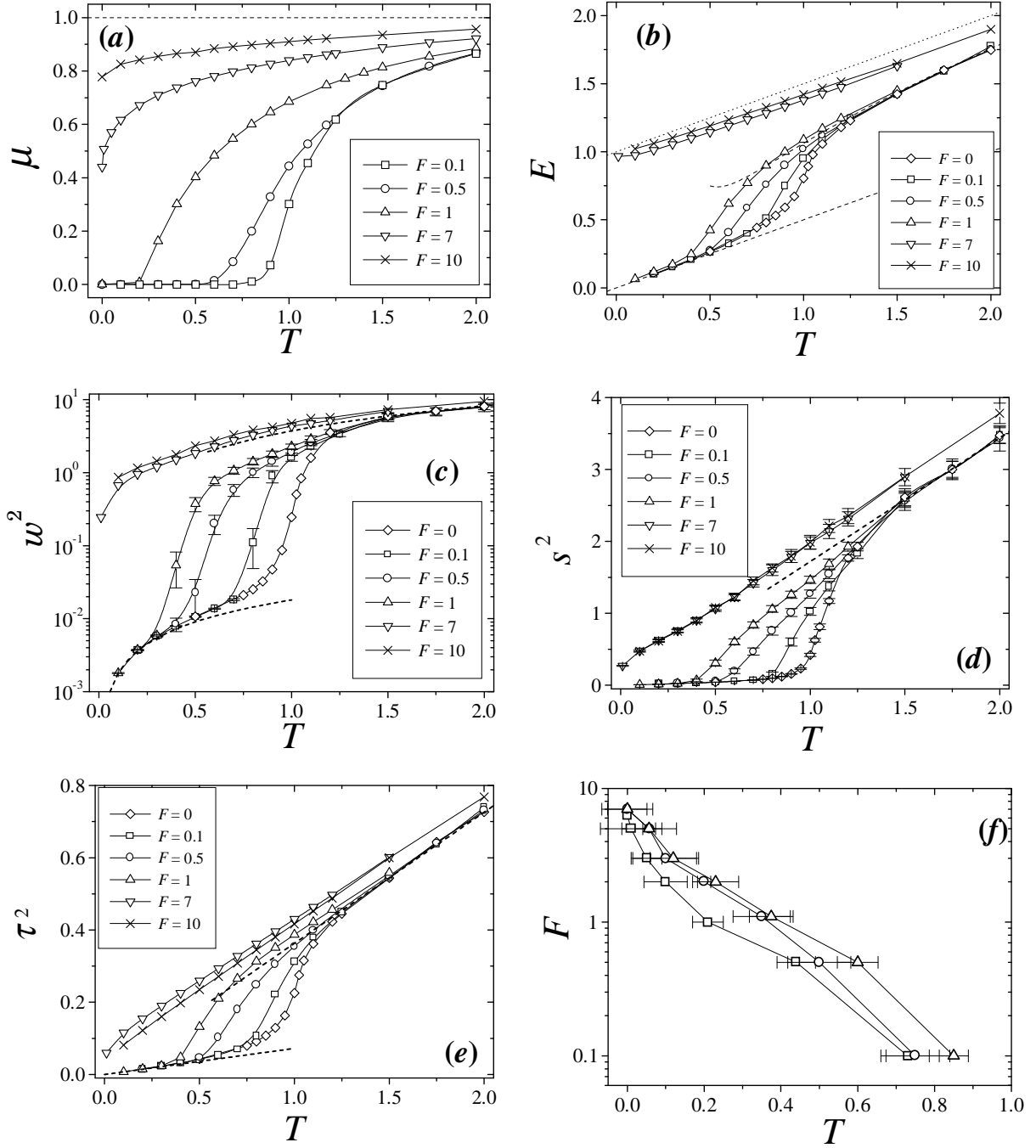


Figura 5.7: Valores de los observables locales para distintas temperaturas y flujos incidentes, y $L = 32$. **Panel (a):** Movilidad del sistema [Ec. (5.26)]. **Panel (b):** Energía [Ec. (5.16)]. **Panel (c):** Rugosidad [Ec. 5.14]. **Panel (d):** Pendiente total [Ec. (5.15)]. **Panel (e):** Parámetro de fluctuación [Ec. (5.17)]. En los paneles (b)-(e) las líneas a trazos son las aproximaciones de alta y baja temperatura y la línea de puntos en el panel (b) es la aproximación $E = k_B T/2 + V_0$. **Panel (f)** Valores de la temperatura crítica T_c para la correlación altura-altura (círculos) y pendiente-pendiente (cuadrados) en función del flujo F . Los cuadrados son los valores de la temperatura para los que $F = F_{th}(T)$. Los ejes de la gráfica están invertidos. En todos los paneles las líneas continuas son meras ayudas visuales.

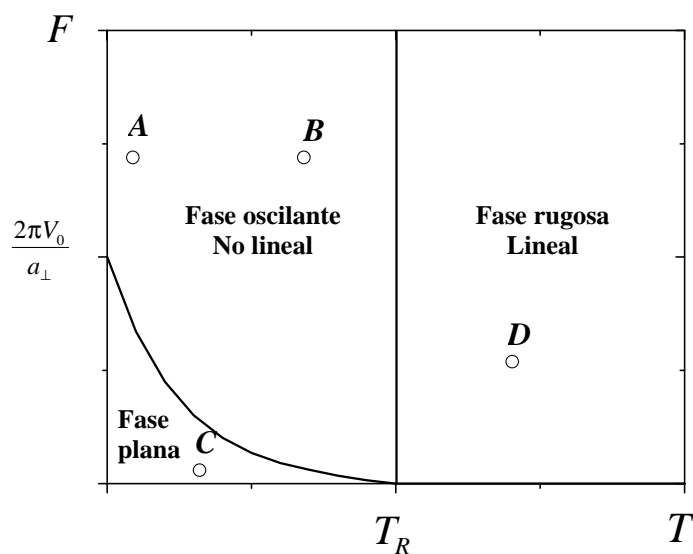


Figura 5.8: Esquema de los distintos regímenes para el modelo xMBE en función del flujo incidente y la temperatura. Los puntos marcados corresponden a los casos estudiados en la figura 5.9.

la fase plana, debido a que la movilidad es prácticamente nula la superficie no crece y la rugosidad satura a un valor constante. Todos estos comportamientos los hemos representado cualitativamente en las figuras 5.8 y 5.9.

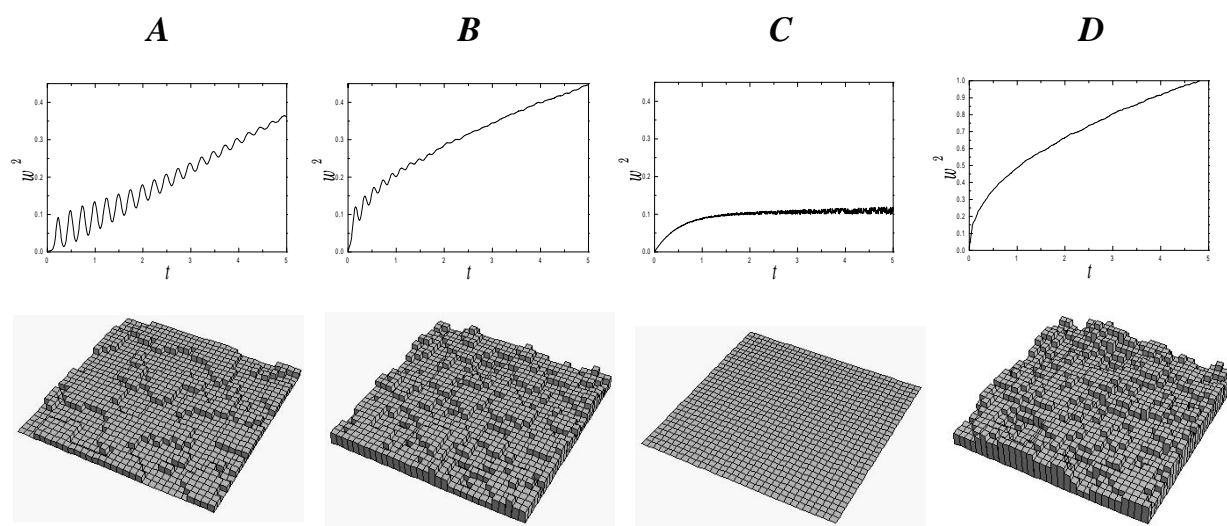


Figura 5.9: Evolución temporal de la rugosidad y perfiles de la superficie (cuando $t = 5$) para diferentes parámetros marcados con puntos en la figura 5.8.

Capítulo 6

Aproximaciones analíticas

Se estudia el modelo xMBE mediante técnicas variacionales autoconsistentes y grupo de renormalización.

6.1. Introducción

En la sección anterior estudiamos el modelo xMBE desde un punto de vista numérico. Las simulaciones numéricas de un sistema estadístico están sometidas a ciertas dificultades: La primera (y obvia) es la capacidad de cálculo, que determina el número de grados de libertad máximo que podemos estudiar. Aunque normalmente el comportamiento asintótico puede obtenerse a tamaños suficientemente pequeños de los sistemas, existen sistemas en los que se observan *crossovers* en función de N que sitúan el comportamiento asintótico en tiempos muy largos de simulación. Otro problema es el de los errores propios de los algoritmos de integración y de los generadores de números aleatorios. En esta sección intentaremos caracterizar la transición de rugosidad en el modelo xMBE utilizando técnicas analíticas. El primer grupo de ellas las denominamos autoconsistentes, e incluyen técnicas variacionales y la aproximación gaussiana. En estas técnicas se supone una forma funcional para las principales propiedades del sistema. Los parámetros ajustables de estas funciones se obtienen minimizando la energía libre total como función de dichos parámetros. Es bien sabido que estas técnicas no reproducen el comportamiento de los sistemas termodinámicos cuantitativamente, pero suponen una primera herramienta para explorar algunas de las propiedades más fundamentales. El hecho de que estas técnicas variacionales hayan sido aplicadas con éxito a la transición de rugosidad traslacional en el modelo sG [193, 192] y de prerrugosidad en otros modelos [228], nos ha llevado a utilizarlas para el estudio del modelo (5.3).

Otro tipo de técnicas analíticas son las basadas en el Grupo de Renormalización (GR). En este caso, la resumación de las series perturbativas utilizando algún tipo de suposición (normalmente que la longitud de correlación es infinita) nos permite conocer los llamados

puntos fijos del GR, que son conjuntos de parámetros de nuestro sistema para los cuales el sistema se encuentra en un punto crítico con invariancia de escala. Estas técnicas son también aproximadas, aunque se tiene una mayor control sobre el tipo de aproximaciones lo que permite conocer el grado de precisión de los resultados.

6.2. Técnicas variacionales

La técnica variacional consiste en buscar un hamiltoniano \mathcal{H}^* que refleje en su forma funcional con la mayor precisión posible cómo es la superficie en equilibrio. Es decir, intentar aproximar el hamiltoniano \mathcal{H} por otro de la forma más exacta posible. De este modo, la energía libre del sistema se puede acotar superiormente mediante la desigualdad de Bogoliubov [192]

$$\mathcal{F} \leq \mathcal{F}_V = \mathcal{F}^* + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}^* \rangle_{\mathcal{H}^*}, \quad (6.1)$$

donde $\langle \dots \rangle_{\mathcal{H}^*}$ significa promedio respecto a la distribución de probabilidad $e^{-\mathcal{H}^*/T}$, y \mathcal{F}^* es la energía libre del hamiltoniano \mathcal{H}^* . Para que esta aproximación sea útil, se elige un hamiltoniano \mathcal{H}^* cuyas propiedades sean conocidas, a ser posible, analíticamente. La manera usual de hacerlo es suponer que es un hamiltoniano gaussiano cuya forma funcional exacta no se conoce (normalmente será función de varios parámetros). Minimizando la cota a la energía libre \mathcal{F}_V respecto a dicha forma funcional, determinamos completamente el hamiltoniano \mathcal{H}^* y, por tanto, tenemos una aproximación a las propiedades de nuestro sistema. Supongamos, por tanto, que el hamiltoniano que utilizamos para aproximar nuestro sistema se puede escribir como

$$\mathcal{H}^* = \frac{k_B T}{2} \int d\mathbf{q} S^{-1}(\mathbf{q}_{\parallel}) h(\mathbf{q}_{\parallel}) h(-\mathbf{q}_{\parallel}), \quad (6.2)$$

donde $S(\mathbf{q}_{\parallel}) = \langle \hat{h}(\mathbf{q}_{\parallel}) \hat{h}^*(\mathbf{q}_{\parallel}) \rangle$ es el factor de estructura. Introduciendo (6.2) en la expresión de \mathcal{F}_V y utilizando (6.1) y (6.2) obtenemos

$$\mathcal{F}_V = \text{cte.} - \frac{k_B T}{8\pi^2} \int d\mathbf{q}_{\parallel} \ln S(\mathbf{q}_{\parallel}) + \frac{k_B T}{8\pi^2} \int d\mathbf{q}_{\parallel} \kappa S_0^{-1}(\mathbf{q}_{\parallel}) S(\mathbf{q}_{\parallel}) - V_0 e^{-2\pi^2 g_0}, \quad (6.3)$$

donde $S_0(\mathbf{q}_{\parallel}) = T/(\kappa \mathbf{q}_{\parallel}^4)$ es el factor de estructura del hamiltoniano libre, $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}(V=0)$, y donde g_0 es

$$g_0 = \frac{1}{4\pi^2 a_{\perp}^2} \int d\mathbf{q}_{\parallel} S(\mathbf{q}_{\parallel}). \quad (6.4)$$

Minimizando \mathcal{F}_V respecto a la forma funcional de $S(\mathbf{q}_{\parallel})$ obtenemos la ecuación:

$$S^{-1}(\mathbf{q}_{\parallel}) = S_0^{-1}(\mathbf{q}_{\parallel}) + \frac{4\pi^2 V_0}{k_B T a_{\perp}^2} e^{-2\pi^2 g_0}. \quad (6.5)$$

De esta ecuación podemos obtener la forma funcional de $S(\mathbf{q}_{\parallel})$. Dado que el segundo término de la ecuación (6.5) es independiente de \mathbf{q}_{\parallel} y que el primero es proporcional a \mathbf{q}_{\parallel}^4 , podemos reescribir (6.5) de la forma

$$S(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{k_B T}{\kappa(q^4 + \xi^{-4})}, \quad (6.6)$$

donde ξ es la longitud de correlación. Como g_0 depende de $S(\mathbf{q}_{\parallel})$, la ecuación (6.5) permite calcular ξ de forma autoconsistente

$$\kappa \xi^{-4} = 4\pi^2 V_0 a_{\perp}^{-2} e^{-2\pi^2 g_0}. \quad (6.7)$$

Suponiendo que nuestro sistema tiene tamaño lateral L con espaciado de red a_{\parallel} , podemos evaluar g_0 con el resultado

$$g_0 = \frac{k_B T \xi^2}{4\pi a_{\perp}^2 \kappa} \left[\tan^{-1} \left(\frac{\pi \xi}{a_{\parallel}} \right)^2 - \tan^{-1} \left(\frac{2\pi \xi}{L} \right)^2 \right], \quad (6.8)$$

expresión que podemos reescribir como

$$\gamma^2 \ln \left(\frac{\kappa a_{\perp}^2}{4\pi^2 V_0} \right) - 4\gamma^2 \ln \gamma = -\frac{\pi k_B T}{2\kappa a_{\perp}^2} \left[\tan^{-1} \left(\frac{\pi}{a_{\parallel} \gamma} \right)^2 - \tan^{-1} \left(\frac{2\pi}{L \gamma} \right)^2 \right], \quad (6.9)$$

donde $\gamma = \xi^{-1}$. Existen tres soluciones de la ecuación anterior, que denotaremos $\xi_0 = \infty$, ξ_1 y ξ_2 . Las dos últimas, que son finitas, existen sólo para $T < T_1 \approx 2,25$. La longitud de correlación física para cada temperatura es aquella solución de (6.9) que minimiza \mathcal{F}_V . En la figura 6.1 hemos representado la diferencia de energía libre $\Delta \mathcal{F}_V(\xi_i) = \mathcal{F}_V(\xi_i) - \mathcal{F}_V(\xi_0)$ para las dos raíces finitas ξ_i , $i = 1, 2$. Observamos que para $T < T_R \approx 1,44$ la longitud de correlación física es $\xi_2 \leq \infty$. Por encima de dicha temperatura el sistema tiene longitud de correlación infinita.

El argumento variacional predice pues una transición de rugosidad para $T_R \approx 1,44$. Sin embargo, no es capaz de determinar el orden de la transición ni los exponentes críticos. Dado que cuando $T \geq T_R$ la longitud de correlación diverge, de (6.6) tenemos que $S(\mathbf{q}_{\parallel}) = S_0(\mathbf{q}_{\parallel})$ y tanto la rugosidad como la pendiente total divergen. Por ello podemos decir que T_R marca el punto donde se producen la transición de rugosidad traslacional y la orientacional. Para conocer los exponentes críticos de la transición deberíamos conocer cómo diverge la longitud de correlación a medida que $T_R - T \rightarrow 0$. Sin embargo, se obtiene que la longitud de correlación es infinita para $T \geq T_R$ y es finita para $T < T_R$, siendo los límites por la derecha y por la izquierda de T_R diferentes. El hecho de que la energía libre sea continua en T_R nos puede hacer pensar que la transición es continua, aunque no es posible calcular su orden ya que la longitud de correlación no es analítica en T_R .

La técnica variacional que hemos visto puede también entenderse como la aproximación gaussiana a nuestro problema. En esta aproximación se supone que la distribución de alturas $h(\mathbf{r}, t)$ es gaussiana. Como veremos ahora, esta interpretación permite una generalización de la técnica variacional a situaciones de no equilibrio ($F \neq 0$), recuperándose los resultados anteriores en el caso de que $F = 0$. Así, si suponemos una distribución de alturas gaussiana, todos los momentos centrados son distintos de cero salvo los dos primeros. Utilizando la fórmula de Itô 2.65 y a partir de la ecuación de Langevin para el modelo xMBE (5.3), las ecuaciones que verifican esos primeros momentos son:

$$\frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} = F - \frac{2\pi V_0}{a_{\perp}} \left\langle \sin \left(\frac{2\pi h}{a_{\perp}} \right) \right\rangle, \quad (6.10)$$

$$\frac{\partial S(\mathbf{q}_{\parallel}, t)}{\partial t} = -2k_B T S(\mathbf{q}_{\parallel}, t) \left[S_0^{-1}(\mathbf{q}_{\parallel}) - S^{-1}(\mathbf{q}_{\parallel}, t) + \frac{4\pi^2 V_0}{a_{\perp}^2 k_B T} \left\langle \cos \left(\frac{2\pi h}{a_{\perp}} \right) \right\rangle \right], \quad (6.11)$$

donde ahora $S(\mathbf{q}_{\parallel}, t) = \langle \hat{h}(\mathbf{q}_{\parallel}, t) \hat{h}(-\mathbf{q}_{\parallel}, t) \rangle$. Utilizando que para una variable aleatoria gaussiana x $\langle e^x \rangle = e^{\langle x \rangle + \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle / 2}$, podemos evaluar los promedios del seno y del coseno con el

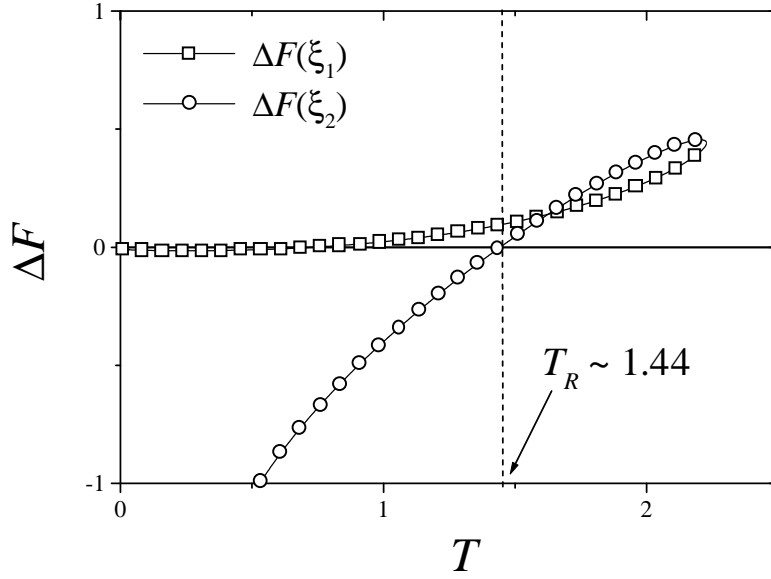


Figura 6.1: Variación con la temperatura de la diferencia de energía libre variacional entre las diferentes soluciones de la ecuación (6.9). Para $T > T_1 \simeq 2,25$, las dos raíces finitas desaparecen.

resultado

$$\left\langle \sin \left(\frac{2\pi h}{a_{\perp}} \right) \right\rangle = e^{-2\pi^2 g_0} \sin \left(\frac{2\pi \langle h \rangle}{a_{\perp}} \right), \quad (6.12)$$

$$\left\langle \cos \left(\frac{2\pi h}{a_{\perp}} \right) \right\rangle = e^{-2\pi^2 g_0} \cos \left(\frac{2\pi \langle h \rangle}{a_{\perp}} \right), \quad (6.13)$$

donde

$$g_0 = \frac{1}{4\pi^2 a_{\perp}^2} \int d\mathbf{q}_{\parallel} S(\mathbf{q}_{\parallel}, t). \quad (6.14)$$

En el caso en el que $F = 0$ tenemos que $\langle h \rangle = 0$, con lo que (6.11) tiene una solución estacionaria que coincide con la ecuación (6.5), y se recupera el análisis anterior para el equilibrio. En el caso de que $F \neq 0$, las soluciones de las ecuaciones (6.10) y (6.11) oscilan en el tiempo. Como nuestro mayor interés se centra en conocer los efectos del flujo en la transición de rugosidad, podemos ignorar este efecto y suponer que $S(\mathbf{q}_{\parallel}, t)$ toma el valor en equilibrio dado por (6.5) siendo ξ la longitud de correlación que minimiza \mathcal{F}_V para cada temperatura. Esta suposición es válida para $T > T_R$ ya que entonces $\xi \rightarrow \infty$, siendo tan sólo una aproximación para temperaturas menores que T_R . Substituyendo $S(\mathbf{q}_{\parallel}, t)$ de (6.5) en la ecuación (6.10) obtenemos

$$\frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} = F - \frac{2\pi V_0}{a_{\perp}} e^{-2\pi^2 g_0} \sin \left(\frac{2\pi \langle h \rangle}{a_{\perp}} \right), \quad (6.15)$$

donde g_0 viene dado por (6.8). Esta ecuación supone que $\langle h \rangle$ aumenta con el tiempo siempre que $F > F_{\text{th}} = 2\pi V_0 / a_{\perp} e^{-2\pi^2 g_0}$. Por encima de dicho flujo, $\langle h \rangle$ oscila con un periodo

$$P = (F^2 - F_{\text{th}}^2)^{-1/2}, \quad (6.16)$$

mientras que para $F < F_{\text{th}}$ la altura media tiende a un valor constante. Al igual que hicimos en el capítulo 5, para distinguir entre los regímenes $F < F_{\text{th}}$ y $F > F_{\text{th}}$ utilizamos

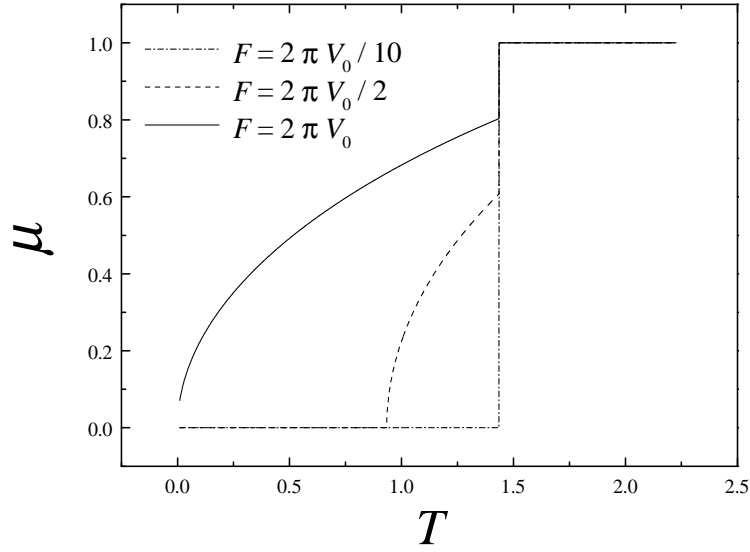


Figura 6.2: Dependencia de la movilidad en función de la temperatura para diversos flujos. En cada caso, la movilidad sólo es distinta de cero cuando $F > F_C$.

la movilidad μ . De (6.15) tenemos que $\mu = 0$ si $F \leq F_{\text{th}}$ y que si $F > F_{\text{th}}$ entonces

$$\mu = \frac{1}{F} \frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} = \left(1 - \frac{F_{\text{th}}^2}{F^2} \right)^{1/2}. \quad (6.17)$$

En la figura 6.2 hemos representado la movilidad en función de la temperatura para varios F por debajo y por encima de F_{th} . La transición entre la fase de bajas temperaturas ($\mu \neq 1$) y la de altas temperaturas ($\mu = 1$) no es suave, debido a que la longitud de correlación no es una función continua de la temperatura en $T = T_R$.

Para resumir, las técnicas autoconsistentes que hemos utilizado sugieren que el diagrama de fases que obtuvimos a raíz de las simulaciones numéricas es cualitativamente correcto: hay una transición de rugosidad en equilibrio a temperatura $T_R \simeq 1,44$ en la que tanto la rugosidad como la pendiente total divergen y que está cerca de $T_R \simeq 1,025 \pm 0,025$ que es la temperatura de rugosidad obtenida en el capítulo 5 mediante simulaciones numéricas del modelo xMBE. También vemos que fuera del equilibrio la superficie crece cuando F está por encima de un valor umbral F_{th} que depende de la temperatura, al igual que en nuestras simulaciones del modelo (5.3).

Sin embargo, dichas aproximaciones no dan una descripción cuantitativamente correcta de la transición. En primer lugar la temperatura de rugosidad obtenida en este capítulo difiere respecto a la obtenida numéricamente en el capítulo 5. Del mismo modo, la transición tiene lugar en un mismo punto para las pendientes y para las alturas, lo que no nos permite una comparación o predicción de la posible segunda transición en el modelo xMBE. Por último, la gráfica 6.2 no es completamente idéntica al panel (a) de la figura 5.7. Como vemos en esta última, la movilidad varía de forma continua al contrario que en el cálculo variacional donde, debido a que la ξ^{-1} no varía de manera continua al pasar por T_R . De esta manera, debemos interpretar los resultados anteriores como indicadores de que la física del sistema es diferente para temperaturas por debajo y por encima de T_R , aunque no nos permitan describir de forma exacta el comportamiento de las superficies cerca de la temperatura de rugosidad.

6.3. Grupo de renormalización

El grupo de renormalización (GR) es una técnica utilizada para obtener el comportamiento a grandes escalas del sistema para sistemas que presentan invariancia de escala. Al igual que las técnicas autoconsistentes su aplicabilidad está restringida por las aproximaciones utilizadas. Si inicialmente la superficie puede caracterizarse por un cierto número de parámetros (tensión superficial, curvatura, temperatura, etc.) la técnica del GR se basa en la sucesiva eliminación de las fluctuaciones de momentos más altos, tras la cual la superficie se puede caracterizar por los mismos parámetros (aunque modificados) u otros nuevos. Normalmente dicha eliminación se produce utilizando desarrollos perturbativos en los parámetros de las no-linealidades. Aunque el grupo de renormalización nació en la teoría cuántica de campos, su aplicación a problemas de física estadística se debe a Wilson, donde ha sido utilizado con éxito en multitud de problemas.

Inicialmente el GR fue desarrollado para estudiar sistemas en equilibrio cerca de transiciones de fase de segundo orden[153]. Más tarde fue generalizado para estudiar la dinámica de estos sistemas en el límite hidrodinámico [95] y después para sistemas fuera del equilibrio para los que no existe un hamiltoniano, aunque estacionarios [67, 116], siempre que éstos estén descritos por una ecuación de Langevin. Por tanto, el GR puede aplicarse en principio a sistemas descritos por una ecuación de Langevin del tipo

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \mathcal{L}h + V_0 \mathcal{N}[h] + \xi, \quad (6.18)$$

donde \mathcal{L} es un operador espacial lineal y \mathcal{N} es un término no lineal. Transformando Fourier la ecuación anterior, obtenemos su solución de manera implícita

$$\hat{h}(\mathbf{k}, \omega) = G_0(\mathbf{k}, \omega) \hat{\xi}(\mathbf{k}, \omega) + V_0 \hat{\mathcal{N}}[\hat{h}(\mathbf{k}, \omega)], \quad (6.19)$$

donde $\hat{h}(\mathbf{k}, \omega)$ es la transformada de Fourier espacial y temporal de $h(\mathbf{r}, t)$, $\frac{2\pi}{L} < \mathbf{k} < \Lambda = \frac{2\pi}{a_{\parallel}}$ son los modos espaciales G_0 es el propagador libre obtenido a partir de \mathcal{L} y L es el tamaño del sistema. En el caso del modelo xMBE tenemos que $G_0(\mathbf{k}, \omega) = (\kappa \mathbf{k}^4 + i\omega)^{-1}$ y $\mathcal{N}[h] = \sin \frac{2\pi h}{a_{\perp}}$. La ecuación anterior puede ser resuelta de manera iterativa, con lo que $\hat{h}(\mathbf{k}, \omega)$ puede expresarse como una serie de potencias de V_0 . Si la ecuación para $V_0 = 0$ está bien definida, uno espera que dicho desarrollo nos ayude a extraer información de cómo escala $h(\mathbf{r}, t)$. Sin embargo, las series obtenidas suelen ser asintóticas y divergentes, por lo que necesitamos otra manera de extraer información de la ecuación (6.19).

Las transformaciones del GR son exactamente lo que necesitamos y constan de dos procesos:

- En el primero, dado que en el punto (o puntos) críticos el escalado de la ecuación viene determinado por los modos de Fourier más bajos, integramos parte de los grados de libertad correspondientes a los modos de Fourier más altos en un intervalo infinitesimal $\Lambda e^{-\epsilon} < k < \Lambda$. Este proceso se denomina promedio sobre grano grueso (*coarse-graining*). En este proceso, y debido a las no-linealidades, pueden aparecer términos de mayor o igual relevancia que los considerados inicialmente. Por ello, la ecuación inicial ha de escogerse de manera “correcta” en el sentido de que incluya todos los términos relevantes bajo el flujo de renormalización¹.

¹Por término relevante bajo el flujo de renormalización entenderemos aquel operador cuyo coeficiente no tienda a cero a medida que realizamos las transformaciones.

- En el segundo, *reescalamos* las variables dependientes e independientes de manera que $\Lambda e^{-\varepsilon} \rightarrow \Lambda$ y por tanto recuperamos el sistema inicial. Para un sistema con invariancia de escala, la ecuación resultante tendrá la misma forma que la inicial (6.18), pero con unos parámetros distintos.

Estas dos transformaciones pueden iterarse considerando en cada paso un ε infinitesimal, de manera que dan lugar a las ecuaciones diferenciales para los parámetros de la ecuación que definen el llamado flujo de renormalización. Bajo ese flujo, los parámetros pueden ir a cero (y por tanto el término correspondiente en (6.18) es irrelevante) o no. Los puntos fijos del GR son los puntos críticos del sistema, ya que en ellos las transformaciones anteriores no tienen ningún efecto. La manera de obtener estas ecuaciones diferenciales será discutida con más detalle en las siguientes secciones.

El cálculo de las ecuaciones de flujo suele requerir uno o más términos de la serie perturbativa en V_0 . A medida que tomamos más términos el cálculo se hace más complicado. Sin embargo, la situación puede ser intratable si la ecuación de partida contiene infinitos términos no lineales relevantes, como en el caso del seno. El esquema que permite tratar con estos infinitos términos de una manera más fácil se debe a Nozières y Gallet (NG) [173], fue propuesto inicialmente para estudiar el comportamiento crítico de la ecuación de sG [Ec. (5.5)], y va a ser el que utilizemos para nuestro modelo xMBE. El esquema original de NG incluye una versión estática y una dinámica. La versión estática tiene algunos problemas derivados de las suposiciones utilizadas. En particular las integrales obtenidas en el grupo de renormalización divergen para ciertos valores de los parámetros. En el apéndice D puede verse cómo en el caso del modelo xMBE, el esquema estático también tiene esos problemas y por tanto utilizaremos el esquema dinámico, aunque sólo lo aplicaremos al problema de equilibrio. En éste partimos de la ecuación de nuestro modelo:

$$\mu^{-1} \frac{\partial h}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t)] + \frac{2\pi V}{a_{\perp}} \sin\left(\frac{2\pi h}{a_{\perp}}\right) + (2D\mu^{-1})^{1/2} \eta(\mathbf{r}, t), \quad (6.20)$$

donde hemos introducido la movilidad μ explícitamente y D es otro parámetro que vale $D = k_B T$. Como se puede ver en el apéndice D, después del *coarse-graining* y a segundo orden de perturbaciones en V vemos que aparece un término laplaciano en las ecuaciones de flujo y por tanto una tensión superficial efectiva no nula. Dado que este término es relevante frente a $\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t)]$, debemos modificar nuestra ecuación de Langevin de partida y considerar

$$\mu^{-1} \frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) - \kappa \nabla^2 [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t)] + \frac{2\pi V}{a_{\perp}} \sin\left(\frac{2\pi h(\mathbf{r}, t)}{a_{\perp}}\right) + (2D\mu^{-1})^{1/2} \eta(\mathbf{r}, t). \quad (6.21)$$

Este modelo es más general que el inicialmente planteado, el de xMBE. En particular contiene el caso del modelo de sG, que es aquél cuyas condiciones iniciales para el flujo de renormalización son $\nu \neq 0$, $\kappa = 0$ y $V \neq 0$, mientras que $\nu = 0$, $\kappa \neq 0$, $V \neq 0$ son las condiciones iniciales para el flujo de xMBE. Por último, recordemos que en el caso lineal de la ecuación (6.21), es decir, cuando $V = 0$, las propiedades asintóticas de la superficie vienen determinadas por la tensión superficial siempre que $L > L_{\times} = (\kappa/\nu)^{1/2}$.

Para estudiar el flujo, introducimos las siguientes variables adimensionales:

$$x = \frac{2a_{\perp}^2}{\pi T} (\nu + \kappa \Lambda^2), \quad y = \frac{4\pi V}{T \Lambda^2}, \quad K = \frac{\kappa a_{\perp}^2 \Lambda^2}{\pi T}, \quad (6.22)$$

donde $\Lambda = 2\pi/a_{\parallel}$ es el *cut-off* superior en momentos. Las ecuaciones de flujo después del *coarse-graining* y el reescalado de la ecuación (6.21) (cuya derivación podemos encontrar en

el apéndice D) quedan, hasta orden V^2

$$\frac{dx}{dl} = -4K + \frac{2y^2}{x^2} \left[\tilde{B}^{(2)}(x, K) - \frac{1}{16} \tilde{B}^{(4)}(x, K) \right], \quad (6.23)$$

$$\frac{dy}{dl} = 2y \left(1 - \frac{1}{x} \right), \quad (6.24)$$

$$\frac{dK}{dl} = -2K - \frac{1}{16} \frac{y^2}{x^2} \tilde{B}^{(4)}(x, K), \quad (6.25)$$

donde hemos supuesto que el sistema verifica hiperescalado (es decir que $z - 2\alpha = d = 2$) y

$$\tilde{B}^{(n)}(x, K) = \frac{x}{4} \int_0^\infty d\tilde{\rho} \tilde{\rho}^{n+1} J_0(\tilde{\rho}) \left[e^{-2\tilde{\phi}(\tilde{\rho}, 0, x, K)} - \int_0^\infty d\tau e^{-\tau} e^{-2\tilde{\phi}(\tilde{\rho}, \tau, x, K)} \right] \quad (6.26)$$

con

$$\tilde{\phi}(\tilde{\rho}, \tau, x, K) = \int_{a_\parallel/L}^1 \tilde{k} d\tilde{k} \frac{1 - J_0(\tilde{k}\tilde{\rho}) e^{-\frac{2\tau}{x}[(x/2-K)\tilde{k}^2 + K\tilde{k}^4]}}{(x/2 - K)\tilde{k}^2 + K\tilde{k}^4}, \quad (6.27)$$

donde L es el tamaño del sistema.

Además de estas ecuaciones para los parámetros del potencial, la difusión y la tensión superficial, tenemos que el espaciado vertical varía como

$$\frac{da_\perp}{dl} = -\alpha a_\perp. \quad (6.28)$$

Las ecuaciones anteriores deben integrarse hasta un tamaño $e^l \simeq L$ con las condiciones iniciales $\nu(0), \kappa(0), V(0)$, que son los parámetros que aparecen en la ecuación (6.21). En estas variables adimensionales, la tensión superficial es proporcional a $x - 2K$. Mientras que la integral $\tilde{B}^{(2)}(x, K)$ converge para cualquier valor de x y K , $\tilde{B}^{(4)}(x, x/2)$ no está definida para $x > 1$, ya que el integrando oscila. Por último se tiene que si $x = 2K$ entonces $\tilde{\phi} \sim \ln L/a_\parallel$.

Las ecuaciones anteriores tienen una línea de puntos fijos en la que $(x, y, K) = (x, 0, 0)$, que se corresponden con aquellos valores de los parámetros iniciales para los que la superficie es invariante (al menos hasta orden V^2). En ese caso $\nu \sim x - 2K \neq 0$ y $\kappa = 0$ por lo que el escalado de la ecuación es el mismo que el de EW. En esta línea hay dos puntos importantes

1. En primer lugar tenemos el punto $(0, 0, 0)$. Para que las condiciones iniciales sean éstas necesariamente tenemos que tomar $\nu(0) = \kappa(0) = V(0) = 0$, es decir un crecimiento aleatorio.
2. Por otro lado, tenemos el punto $(1, 0, 0)$. Este punto es importante pues marca el valor de x para el que el flujo de y es inestable ($x > 1$) o estable ($x < 1$) frente a pequeñas perturbaciones alrededor de $y = 0$ [véase ecuación (6.24)]. Este punto es el mismo que el del modelo de sG y determina la temperatura de transición mediante la igualdad $x = 1$, es decir, $T_R^{sG} = 2a_\perp^2 \nu / \pi$.

Con estos datos, nuestro objetivo en esta sección es calcular a cuál de los puntos fijos de la recta $(x, 0, 0)$ tiende el modelo (6.21). En otras palabras, para unas condiciones iniciales cualesquiera $x(0), y(0), K(0)$, cuál es el comportamiento asintótico a grandes escalas de la ecuación (6.21). Estudiaremos dos tipos de condiciones iniciales: el primero de ellas será el modelo xMBE, en el que $\nu(0) = 0$ o, equivalentemente, $x(0) = 2K(0)$ e $y \neq 0$. El segundo tipo es cuando $\nu(0), \kappa(0) \neq 0$ lo que nos permitirá estudiar el efecto de una pequeña difusión superficial sobre la transición de Kosterlitz-Thouless en el modelo de sG.

Modelo xMBE

Para el modelo xMBE, las condiciones iniciales son $x(0) = 2K(0)$, $y(0) \neq 0$. En ese plano, debido a que $\phi \sim \ln a_{\parallel}/L$, las integrales $\tilde{B}^{(n)}(x, K)$ se anulan para cualquier l en el límite $L \rightarrow \infty$. En ese caso $x - 2K$ es una constante bajo el flujo de renormalización. Esto permite resolver las ecuaciones de flujo para obtener

$$K(l) = K(0)e^{-2l}, \quad x(l) = 2K(l), \quad y(l) = y(0) \exp\left(l - \frac{1}{4K(0)}[e^{2l} - 1]\right). \quad (6.29)$$

En el límite $l \rightarrow \infty$ tenemos que $K(l), x(l), y(l) \rightarrow 0$ para cualquier $K(0)$ y $V(0)$, aunque $x(l)/K(l) = 2$ y $x(l) - 2K(l) = 0 \forall l$. Por tanto para cualquier condición inicial en el plano $x = 2K$ el sistema tiende al punto $(0, 0, 0)$. Sin embargo, esto no quiere decir que el sistema se comporte asintóticamente como un mero crecimiento aleatorio, ya que las ecuaciones (6.29) cuando $l \gg 1$ son compatibles con $\kappa \neq 0$, $\nu = 0$ y $\alpha = 1$, es decir, $a_{\perp}(l) = a_{\perp}(0)e^{-l}$. Por tanto, cuando $l \gg 1$ el sistema escala asintóticamente como LMBE independientemente de nuestras condiciones iniciales (en particular de la temperatura). La principal consecuencia de esto es que si $L \rightarrow \infty$ el sistema es siempre rugoso a grandes escalas para cualquier temperatura y no existe una transición de rugosidad traslacional.

Sin embargo, existen ciertos hechos que nos hacen esperar que el movimiento para un sistema finito ($L < \infty$) vaya a tener lugar también fuera del plano:

- El plano $x = 2K$ es inestable frente a pequeñas perturbaciones $\tau = x - 2K \neq 0$. Para ello observamos que

$$\frac{d\tau}{dl} = \frac{2y^2}{x^2} \tilde{B}^{(2)}(x, K), \quad (6.30)$$

donde la integral $\tilde{B}^{(2)}(x, K)$ es positiva si $\tau \neq 0$.

- Por último, $\tilde{B}^{(n)}(x, x/2) \neq 0$ para cualquier $L < \infty$. Este hecho está relacionado con que la teoría libre de nuestro modelo xMBE está mal definida, ya que cuando τ es pequeño, $\tilde{\phi}(\tilde{\rho}) \simeq C(\tilde{\rho})$, donde $C(r)$ es la función de correlación altura-altura del modelo libre LMBE. Como podemos ver en el apéndice A las funciones de correlación altura-altura están definidas para cualquier L y van como $C(r) \sim r^2 \ln(L/r)$. Sin embargo, en el límite $L \rightarrow \infty$, $C(r) \rightarrow \infty$ para cualquier r y por tanto $\tilde{\phi}(\tilde{\rho}) \rightarrow \infty$ independientemente de $\tilde{\rho}$.

Por todo ello podemos esperar que, en el caso de un sistema finito, que el flujo del grupo de renormalización no quedará restringido al plano $x \neq 2K$ y saldrá de él. Esto significa que se genera una tensión superficial finita en nuestro sistema. En ese caso $x > 2K$ y, como vemos en la figura 6.3, el flujo se separa del plano $x = 2K$ y tiende a alguno de los puntos de la recta $(x, 0, 0)$.

En la figura 6.4 hemos representado los tres comportamientos que se pueden observar para las ecuaciones de flujo de un sistema con tamaño $L = 1024$.

1. Cuando la temperatura es suficientemente grande, $x, K, y \ll 1$ y, aunque el sistema tiende a separarse del plano con una velocidad proporcional a $y^2/x^2 \tilde{B}^{(2,0)}(x, K)$ [véase ecuación (6.30)], esta separación es muy pequeña, de manera que $L_x = [\kappa(l \rightarrow L)/\nu(l \rightarrow L)]^{1/2} \gg L$. Dado que $\nu \sim x - 2K$ es muy pequeño, el movimiento se produce casi en el plano y el sistema tiende al punto $(0,0,0)$ de la forma que predice la teoría lineal LMBE. Este comportamiento corresponde a la trayectoria 1 en la figura 6.4.

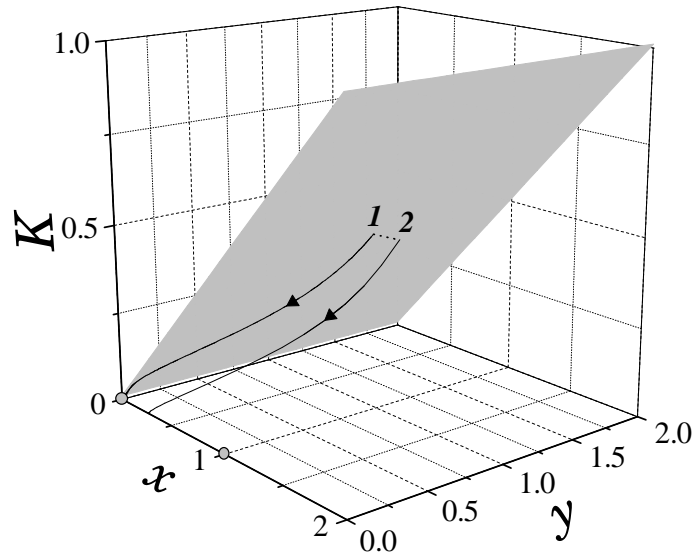


Figura 6.3: Diagrama de fases de nuestro flujo de renormalización (6.23)-(6.25) para tamaño $L \rightarrow \infty$. El plano corresponde a la ecuación $x = 2K$ y las curvas son los flujos calculados numéricamente para dos casos: (1) $x = 2K$ y (2) $x > 2K$. Los círculos marcan el punto fijo $x = K = y = 0$ y el punto $x = 1, K = y = 0$.

2. Para valores intermedios de x, K e y , $y^2/x^2 B^{(2,0)}(x, K)$ es mayor y también el valor de ν que obtenemos asintóticamente. En ese caso el sistema tiende a la línea de puntos fijos $(x, 0, 0)$ con $x \neq 0$ y por tanto escala como la ecuación de EW. Este comportamiento corresponde a la trayectoria 2 en la figura 6.4.
3. Para valores superiores de x, K e y la separación es muy grande y dado que $K \rightarrow 0$ el sistema cae al plano x, y con $x > 1$; por tanto, y crece indefinidamente, por lo que nos encontramos con una fase de bajas temperaturas en la que el potencial domina y la superficie es plana. Este comportamiento corresponde a la trayectoria 3 en la figura 6.4.

Tanto la fase de baja como la de alta temperatura coinciden con las simulaciones numéricas del capítulo anterior. La fase de temperaturas intermedias tiene las mismas propiedades que la fase hexática sugerida por comparación con los modelos de fusión. Sin embargo, para comparar los resultados del flujo de renormalización con las simulaciones del capítulo (4) tendríamos que tomar como condiciones iniciales $a_{\parallel} = a_{\perp} = V = \kappa = 1$ con lo que $x(0) = 8\pi/T$ y $V(0) = 1/\pi T$. Dado que $x > 1$ para las temperaturas donde se produce la transición numéricamente, y que $K \rightarrow 0$ rápidamente, el flujo nos lleva a una zona [la recta $(x, 0, 0)$] donde las integrales no convergen y por tanto no es posible el estudio mediante el grupo de renormalización del modelo xMBE para estos valores de los parámetros.

En el caso de que las condiciones iniciales hagan que $x, y, K \simeq 1$ sí es posible aplicar las ecuaciones del grupo de renormalización, que es el caso que hemos representado en la figura 6.4. En este caso, y análogamente a sG, se puede definir una temperatura de transición determinada por la separatriz entre los comportamientos (2) y (3) que vimos antes. Cerca del punto $(1, 0, 0)$ esa separatriz es de manera aproximada, como en el caso de sG, el punto $x = 1$, lo que significa que la temperatura de la transición es $T_R = 8a_{\perp}^2 \kappa \pi$. Más difícil es poder determinar para qué valores de la temperatura el sistema pasa de estar descrito a grandes escalas por una difusión superficial en vez de una tensión superficial, ya que el cambio es continuo.

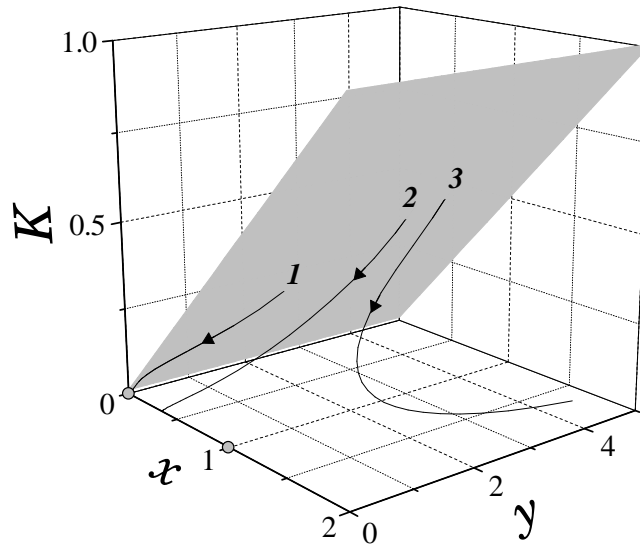


Figura 6.4: Trayectorias del flujo de renormalización para el modelo xMBE y para tamaño $L = 1024$ obtenidas mediante integración numérica de las ecuaciones (6.23)-(6.25). Las trayectorias corresponden a los tres tipos de comportamientos en función de la temperatura: (1) fase de alta temperatura y $w^2 \sim L^2$, (2) fase de temperaturas intermedias y $w^2 \sim L^2$ y (3) fase de bajas temperaturas y $w^2 \simeq 0$.

En resumen, y siempre que el sistema sea finito, existe una temperatura de transición de rugosidad. Cuando las condiciones iniciales de nuestro flujo están cerca del punto $x = 1$ tenemos que $T_R = 8a_{\perp}^2 \kappa \pi$. Debido a que las simulaciones realizadas en el capítulo 5 tienen como condición inicial $x = 8\pi/T \simeq 25$, y a que para valores tan grandes de los parámetros el flujo de renormalización (6.23)-(6.25) no sea válido, no podemos comparar cuantitativamente los resultados aquí presentados con estas simulaciones. Sin embargo, dentro de las aproximaciones realizadas, el acuerdo es cualitativo.

Modelo sG con difusión superficial

En segundo lugar, estudiamos el modelo de sG cuando existe una pequeña difusión superficial $\kappa \neq 0$. Las ecuaciones (6.23)-(6.24) son el siguiente orden de aproximación de las obtenidas por Nozières y Gallet [173] en el sentido de que incluyen la posibilidad de que se genere una difusión superficial. En particular, si suponemos que $\kappa(l) = 0$, $\alpha = 0$ y $B^{(4)}(x, K) = 0$ para todo l , recuperamos las ecuaciones para el flujo de sG derivadas por Nozières y Gallet y ecuaciones del flujo de sG puro. En la figura 6.5 hemos representado la proyección sobre el plano x, y del flujo total para varios valores de $\kappa(0)$. Cuando $\kappa(0) = 0$ el flujo es muy parecido al de sG puro, ya que la difusión superficial que se genera es prácticamente nula. Para temperaturas altas $x \ll 1$, el flujo tiende hacia el eje $y = 0$ y por tanto el sistema se comporta como la teoría libre de EW, mientras que para temperaturas altas $y \rightarrow \infty$ y el potencial domina, obteniéndose una fase plana. Integrando las ecuaciones del flujo, existe una separatriz que separa el comportamiento del flujo dependiendo de la condición inicial. Integrando numéricamente las ecuaciones de flujo (6.23)-(6.25) para $L \rightarrow \infty$ podemos calcular que la condición inicial que divide estas dos zonas es $x_R = 0,87$, es decir $T_R^{sG} \simeq 0,725 \pm 0,05$ cuando $V_0 = 1$, $a_{\perp} = 1$, $\nu = 1$, que coincide con el valor obtenido integrando las ecuaciones del modelo de sG puro [174]. Este valor lo debemos comparar con la predicción analítica cuando la condición inicial está próxima al punto fijo $(1, 0, 0)$ que es

el resultado clásico $x_R = 1$, es decir $T_R^{sG} = 2/\pi \simeq 0,64$.

Como vemos en la figura 6.5 el efecto de una pequeña tensión superficial ($\kappa \neq 0$) es el de retrasar la transición, que se produce para una temperatura $T_R(\kappa) > T_R^{sG}$. Esto se debe a que, como vimos antes, cuando $\nu, \kappa \neq 0$ existe un tamaño L_\times a partir de cual domina el laplaciano y el sistema a grandes escalas viene determinado únicamente por la tensión superficial. De este modo, el flujo de renormalización para l pequeño está dominado por κ . Una vez que $b = e^l \simeq L_\times$, κ es renormalizado a cero y el flujo cae al plano (x, y) con un valor de la tensión superficial ν que es distinto de la condición inicial. A partir de ese instante, el flujo de renormalización es de manera efectiva el de sG. Como vemos en la figura 6.5, el valor para el que se produce la transición es siempre mayor que cuando no hay inicialmente difusión superficial. Para comprobar este resultado hemos realizado simulaciones de la ecuación (6.21) para diferentes tamaños, que hemos resumido en la figura (6.5) [panel (d)]. En esta figura hemos representado el calor específico para el modelo sG (obsérvese que el pico no escala con el tamaño del sistema) y para el modelo (6.21) con $\nu = 1$ y $\kappa = 0,5$, observando cómo la transición se desplaza a temperaturas mayores que la de sG. Integrando el flujo del grupo de renormalización (6.23)-(6.25) para $L \rightarrow \infty$, obtenemos que $T_R^{sG}(\kappa = 0,5) \simeq 1,35 \pm 0,05$. Obsérvese que, como sucede en el caso de sG puro, el pico del calor específico tiene lugar para una temperatura menor que la de rugosidad [219, 220]. En resumen, en presencia de una pequeña difusión superficial, la transición de rugosidad en el modelo sG se retrasa respecto a la obtenida cuando no existe dicho proceso de relajación.

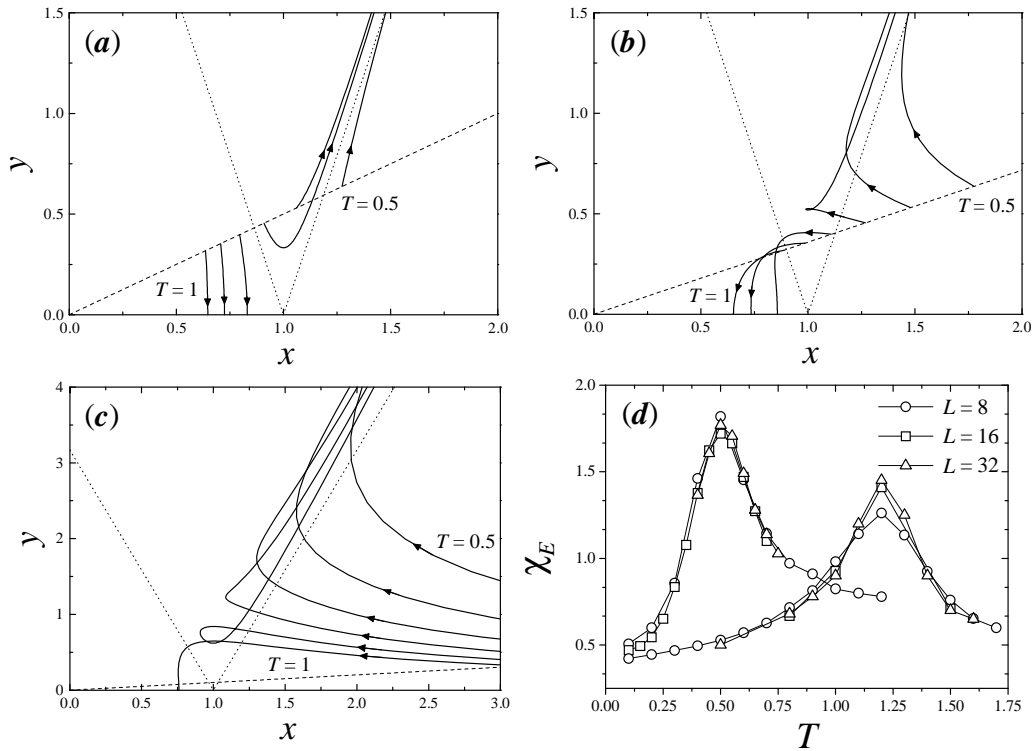


Figura 6.5: Paneles (a)-(c): Proyección del flujo [(6.23)-(6.25), $L \rightarrow \infty$] del grupo de renormalización para el modelo (6.21) sobre el plano (x, y) para $\nu = V_0 = a_{\perp} = 1$ y (a) $\kappa = 0$, (b) $\kappa = 10^{-2}$ y (c) $\kappa = 10^{-1}$. En todos los casos la línea a trazos es la recta de condiciones iniciales y la de puntos es la separatriz obtenida mediante el flujo de sG puro cerca de $x = 1$ por Nozières y Gallet [174]. Las líneas continuas corresponden a temperaturas $T = 0,5, 0,6, \dots, 1$ de izquierda a derecha en los paneles (a) y (b) y de arriba a abajo en el panel (c). **Panel (d):** Calor específico para el modelo sG (curvas de la izquierda) y para el modelo (6.21) con $\nu = 1$ y $\kappa = 0,5$ (curvas de la derecha) para diferentes tamaños de la superficie.

Capítulo 7

Oscilaciones RHEED

Utilizando un modelo continuo explicamos algunos de los patrones temporales observados mediante la técnica RHEED en MBE y los caracterizamos usando diferentes modelos de crecimiento.

7.1. Introducción

En el capítulo (5.3) vimos que existe una zona del plano de fases del modelo xMBE en la que la rugosidad oscila debido a que, en las primeras fases del crecimiento, la superficie crece capa a capa (lo que denominamos modo de Stranski-Krastanov). Este modo de crecimiento también se observa experimentalmente como oscilaciones temporales de la intensidad difractada en medidas de difracción de electrones por la superficie mediante la técnica de RHEED. El objetivo de este capítulo es relacionar las oscilaciones en la rugosidad con las de la intensidad RHEED y caracterizar sus principales parámetros, como el período, el tiempo de decaimiento, etc. Nuestro estudio analítico y numérico del modelo xMBE se completa estudiando otros modelos continuos, como el de sG y csG (que introduciremos después) relevantes para MBE. Dicho estudio es importante pues permite una comparación directa con los experimentos y discernir cuál es el modelo que se aplica mejor en cada situación experimental. Evidentemente las oscilaciones dependerán de procesos tales como la difusión a lo largo de la superficie, el flujo incidente o la temperatura del sustrato. Por eso, estudiando esa dependencia lo que pretendemos es llegar a responder a la siguiente pregunta: observando las oscilaciones RHEED, ¿podemos ser capaces de determinar los mecanismos que tienen lugar en el crecimiento de la superficie? Así, en la sección siguiente repasaremos la técnica experimental de RHEED. A continuación describiremos las propiedades de las oscilaciones RHEED en la sección 7.3. Para estudiar dichas oscilaciones en nuestro modelo necesitaremos una teoría que relacione la morfología de la superficie con la intensidad reflejada, tal y como veremos en la sección 7.4. Por último, en la sección 7.5, mediante aproximaciones analíticas y numéricas cuantificamos los parámetros más importantes de las oscilaciones para los principales modelos continuos, incluyendo el propuesto en el capítulo 5.

7.2. La técnica RHEED

Una de las técnicas *in situ* más usadas para controlar los procesos de crecimiento en MBE es la de RHEED. El sistema típico de medición está compuesto por un cañón de electrones, una pantalla fluorescente y un equipo de procesamiento de imágenes. En esta técnica la superficie es iluminada con un flujo de electrones de alta energía, los cuales son focalizados para asegurar que incidan sobre la superficie de una manera homogénea y que la difracción de los electrones sea pequeña de modo que la mayoría de ellos alcancen la pantalla fluorescente. En el caso ideal el flujo de electrones consiste en partículas de la misma energía y que se propagan en la misma dirección. Los voltajes de aceleración de los electrones suelen ser de 10-30 keV. Esta energía tan alta es necesaria para monitorizar un área suficientemente grande de la zona de Brillouin en un ángulo sólido muy pequeño de la pantalla fluorescente. Tiene la ventaja adicional de disminuir el efecto sobre el haz de electrones de los campos residuales presentes en la cámara MBE debidos a los servomotores, los calentadores eléctricos, etc.

El flujo de electrones incide sobre la superficie bajo un ángulo que es típicamente de 0.5 a 2.5 grados, para que el método sea sensible a la estructura de la superficie como veremos después. La intensidad difractada se convierte a luz visible mediante la pantalla fluorescente y es almacenada en el ordenador mediante una cámara CCD. Mediante esta medida podemos extraer información, por ejemplo, de la rugosidad o la distribución de escalones en la superficie. Hay que resaltar que, como dijimos en el capítulo 4, la relación entre esta medida experimental y la morfología de la superficie no es directa, sino que requiere una teoría que explique la difracción de los electrones. Normalmente dichas teorías suelen ser aproximaciones más o menos válidas en las condiciones experimentales que nos encontramos. A las energías que se trabaja normalmente, los efectos relativistas son sólo de un 3%, lo que permite un tratamiento clásico de la difracción. En RHEED, y a energías de 20 keV, el momento de los electrones tiene un valor de $q = 78,5 \text{ \AA}^{-1}$, lo que supone una longitud de penetración en el material de 67 veces la constante de red en GaAs, por ejemplo. Sin embargo, dada la geometría del sistema, la componente perpendicular a la superficie suele tener tan sólo cientos de eV, lo que hace que la difracción observada sólo dependa de las primeras capas de la superficie, por lo que esta técnica es comparable a otras como LEED (Low-Energy Electron Diffraction).

En el modo de crecimiento capa a capa se observa que la intensidad RHEED oscila. Este patrón temporal es el objeto de estudio en el presente capítulo. Sin embargo, como vimos en el capítulo 4 la intensidad RHEED también se utiliza para medir como crece la rugosidad en el modo de Volmer-Weber, lo que ha reactivado en cierta medida el uso de esta técnica.

7.3. Oscilaciones RHEED

Desde su primera observación en 1980 [88], las oscilaciones RHEED han sido estudiadas en detalle porque dan información *in-situ* y en tiempo real sobre la dinámica del crecimiento MBE. Esto permite no sólo que sean utilizadas como una herramienta de observación, sino también como una manera de controlar el crecimiento mediante técnicas como la denominada *phase-locked epitaxy* [28]. Las oscilaciones RHEED son utilizadas normalmente para determinar la velocidad de crecimiento, la rugosidad de la superficie y las composiciones de las aleaciones, dado que está bien establecido, mediante la comparación con otros métodos, que un período de las oscilaciones corresponde al crecimiento de una monocapa [168]. Aunque estas oscilaciones en la intensidad difractada fueron observadas inicialmente en RHEED,

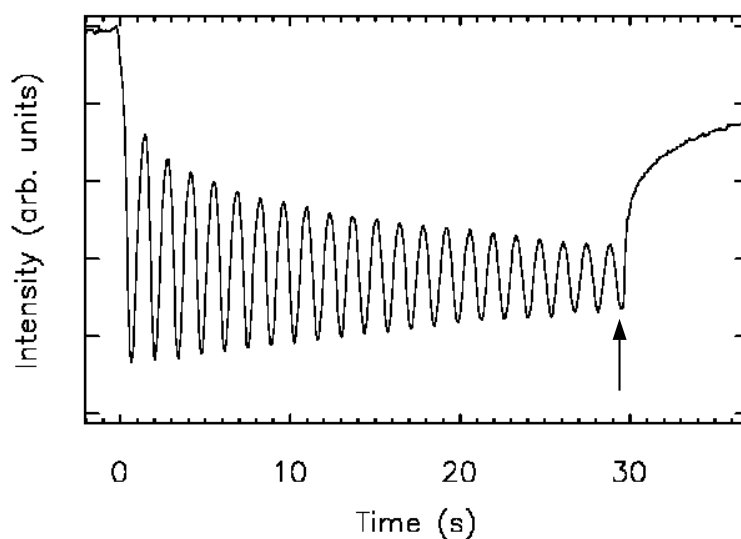


Figura 7.1: Oscilaciones RHEED típicas para el crecimiento GaAs en GaAs (001). El ángulo de incidencia es de 0.9 grados y la energía de los electrones es de 20 keV. A tiempo $t = 30$ s. se ha desconectado el flujo incidente de material y por tanto el crecimiento, indicado por la flecha. Reproducida de [26].

también lo han sido en otras técnicas de difracción como la de *scattering* de átomos de He [78].

Observando una medida de las oscilaciones RHEED como la de la figura 7.1, vemos que hay varios parámetros que caracterizan dicha curva y que pueden ser extraídos y analizados: el período de las oscilaciones, el tiempo de decaimiento y el tiempo de recuperación una vez interrumpido el crecimiento¹. En muchos casos el estudio de estos parámetros permite el análisis de los mecanismos de crecimiento. Veamos cada uno de estos parámetros:

- Aunque en la sección 7.4 se establece una relación precisa entre la intensidad RHEED y la rugosidad del sistema, esta relación era conocida desde hace bastante por los físicos experimentales que trabajaban en crecimiento capa a capa de cristales (sobre todo de semiconductores). Si la superficie es plana, $w^2 = 0$, con lo que la intensidad especular tiene un máximo (una vez normalizada, vale 1), mientras que cuanto mayor sea la rugosidad, menor es la intensidad especular. En el modo de crecimiento capa a capa (o Frank-van der Merwe), el crecimiento de la primera capa se debe a la sucesiva nucleación de islas de altura igual a una monocapa, lo que lleva a que la intensidad decaiga hasta que se alcanza un recubrimiento de media monocapa. Las islas coalescen y se vuelve a formar una superficie plana con lo que la intensidad especular vuelve a tomar su valor máximo. La oscilación es pues debida a una transición cíclica entre una superficie suave y una superficie rugosa. Numerosos experimentos sobre oscilaciones RHEED en distintos materiales como GaAs [168], AlGaAs [168], InGaAs [148], Ge [169] o Si [196] muestran que el período de las oscilaciones corresponde exactamente al crecimiento de una monocapa (o bicapa en el caso heteroepitaxial).
- Sin embargo, las oscilaciones presentan un decaimiento en amplitud debido a que el crecimiento capa a capa no es perfecto: a cierta temperatura, es posible que crezcan

¹Hay otros parámetros que se pueden medir, como la fase de las oscilaciones, el comportamiento antes del crecimiento, etc. En el caso de heteroepitaxia, esas cantidades dan información, por ejemplo, de la formación de defectos en la estructura cristalina [26].

varias capas a la vez, lo que introduce decoherencia en la intensidad difractada y lleva por tanto a un decaimiento de la misma. Dado que la rugosidad del sistema crece con el tiempo, esto supone un progresivo decaimiento de la señal. En el límite asintótico, la rugosidad será finita, aunque suficientemente grande como para que no se observen las oscilaciones. Por tanto, el decaimiento de las oscilaciones es consecuencia de la rugosidad, o dicho de otro modo, de que a medida que la muestra crece el número de capas que crecen simultáneamente es mayor. Este hecho ha sido confirmado tanto por experimentos [214, 13, 115] como por simulaciones de modelos teóricos [112, 40, 175]. El decaimiento de las oscilaciones puede ser muy rápido. Sin embargo, en condiciones típicas de crecimiento, se pueden observar del orden de 40 a 60 oscilaciones, aunque este número suele ser uno o dos órdenes de magnitud menor que el espesor típico de un cristal semiconductor. Por ello las oscilaciones RHEED no se pueden utilizar, en general, para monitorizar la secuencia completa de crecimiento de un dispositivo.

- Por último, una vez que paramos el crecimiento la superficie se suaviza en general hasta alcanzar el estado de equilibrio, proceso que depende de la difusión en la superficie y del punto del ciclo de crecimiento en el que paramos. La difusión determina la velocidad con la que cambia la señal, mientras que el instante de parada nos da la rugosidad inicial.

En otras situaciones experimentales, como el caso de superficies vecinales, el esquema anterior es diferente. Cuando la superficie crece mediante un flujo de escalones perfecto, la intensidad RHEED no oscila, sino que permanece constante. A medida que disminuimos la temperatura, la difusión de los átomos es menor, con lo que se pueden formar islas encima de los escalones. Esto da lugar a cierta rugosidad y a un decaimiento de la intensidad. El proceso es cíclico, pues al seguir depositándose átomos, se forman agregados cada vez más grandes hasta llenar el escalón, con lo que la intensidad vuelve a ser máxima [40]. Así pues, mientras que a una temperatura fija una superficie singular que crezca capa a capa da lugar a oscilaciones en la intensidad, no las observaremos si el crecimiento es debido a un flujo de escalones en una superficie vecinal.

Como vimos antes, en una superficie singular la rugosidad determina cómo decaen las oscilaciones. La rugosidad en una superficie puede deberse a varias circunstancias, como la existencia de barreras de difusión (barreras de Schwoebel) o las fluctuaciones en la intensidad del flujo depositado o la temperatura. La primera de ellas da lugar a un crecimiento inestable predicho por Villain [233] y su efecto sobre las oscilaciones RHEED ha sido estudiado recientemente [13]. En este capítulo vamos a tratar tan sólo el segundo grupo de circunstancias, es decir, cuando la rugosidad es debida a fluctuaciones en el flujo o en la temperatura del sustrato y se desarrolla de manera cinética. El propósito que nos planteamos en este capítulo es intentar relacionar las principales características de las oscilaciones RHEED con los parámetros que determinan el crecimiento de la superficie. Las ventajas de este estudio es que, desde el punto de vista experimental, las oscilaciones son fácilmente reproducibles y tienen lugar al principio del crecimiento. De este modo con sólo observar cómo han crecido unas cuantas monocapas del cristal podremos conocer los procesos que tienen lugar en la superficie.

7.4. Teoría cinemática de la difracción

Para realizar este estudio, debemos establecer en primer lugar una relación entre la superficie y el patrón de intensidad que se observa en los experimentos. Aunque ya existían

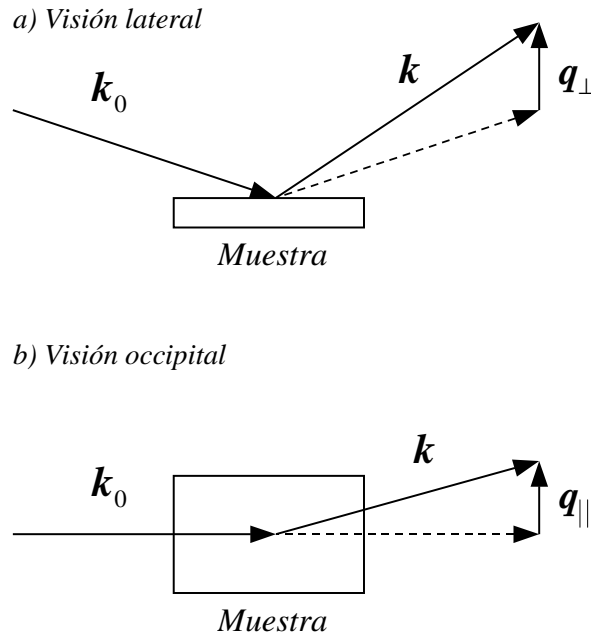


Figura 7.2: Geometría del proceso de *scattering* por RHEED.

teorías para interpretar las oscilaciones RHEED que tienen lugar en superficies vecinales, en los años 90 se desarrollaron otras para superficies rugosas y autosemejantes, es decir, para aquéllas en las que la rugosidad crece de forma cinética. De manera rigurosa, las teorías existentes hasta esa fecha no se podían aplicar al crecimiento de superficies rugosas, ya que una de las aproximaciones que utilizaban era el hecho de que la difracción se debía a las primeras capas de la superficie [139, 91]. Cuando la superficie es rugosa el número de capas involucradas en el crecimiento puede ser muy grande y es de esperar que estas teorías fallen. En 1987 Sinha *et al.* [207] propusieron una teoría capaz de tratar la difracción proveniente de una superficie rugosa autosemejante aunque infinitamente continua (es decir, cuando $a_{\parallel} = 0$). Después, Yang *et al.* [246] y Villain *et al.* [231] aclararon que, cuando se tiene en cuenta el carácter discreto de la superficie, la teoría propuesta por Sinha es tan sólo una aproximación.

La manera de relacionar la intensidad con la morfología de la superficie es simple. Utilizando la teoría del *scattering* en la aproximación de Born, obtenemos que el factor de estructura de la difracción (que es directamente proporcional a la intensidad de la difracción) es [17]

$$S(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t) = \int d^2\mathbf{r} \exp(i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}) H_{\phi}(\mathbf{r}, t), \quad (7.1)$$

donde \mathbf{q} es el vector diferencia entre la radiación entrante, \mathbf{k}_0 , y saliente \mathbf{k} (ver figura 7.2) y

$$H_{\phi}(\mathbf{r}, t) = \langle \exp\{i\phi[h(\mathbf{r}, t) - h(0, t)]\} \rangle, \quad (7.2)$$

siendo $\phi = q_{\perp} a_{\perp}$ la condición de difracción. Para evaluar la función de correlación H_{ϕ} , la aproximación que se hace es suponer que la distribución de alturas es gaussiana. De este modo tenemos que

$$H_{\phi}(\mathbf{r}, t) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\phi]^2 C(\mathbf{r}, t) \right\}, \quad (7.3)$$

donde

$$C(\mathbf{r}, t) = \langle [h(\mathbf{r}, t) - h(\mathbf{r}, 0)]^2 \rangle, \quad (7.4)$$

es la función de correlación altura-altura, y $[\phi]$ es el valor de ϕ módulo 2π . Si la superficie es autosemejante, como vimos en el capítulo 3 tenemos que

$$C(\mathbf{r}, t) = 2w^2(t)g\left(\frac{r}{\xi(t)}\right), \quad (7.5)$$

donde $\xi(t)$ es la longitud de correlación. Combinando las ecuaciones (7.5) y (7.3) con (7.1) y desarrollando ésta última respecto a $[\phi]^2 w^2(t)[1 - g(r/\xi)]$, obtenemos

$$S(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t) \sim e^{-\Delta(t)^2} \delta(\mathbf{q}_{\parallel}) + S_{\text{diff}}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t), \quad (7.6)$$

con

$$S_{\text{diff}}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t) \sim \xi^2 e^{-\Delta(t)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta(t)^n}{n!} \int_0^{\infty} x dx [1 - g(x)]^n J_0(q_{\parallel} x \xi), \quad (7.7)$$

y donde $\Delta(t) = [\phi]^2 w^2(t)$ y $J_0(x)$ es la función de Bessel de orden cero. Por tanto la intensidad reflejada se puede dividir en dos partes: un pico centrado en $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ y una componente difusiva que es distinta de cero para $\mathbf{q}_{\parallel} \neq 0$. Por último, cuando $\Delta(t) \gg 1$ la intensidad difractada es únicamente debida a la componente difusiva, y en ese límite se obtiene que [246, 247]

$$S(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t) \simeq S_{\text{diff}}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t) \sim ([\phi]^{-1/\alpha})^2 F_{\alpha}(\mathbf{q}_{\parallel} \xi \Delta^{-1/2\alpha}), \quad (7.8)$$

donde $F_{\alpha}(y) = \int_0^{\infty} x dx e^{-x^{2\alpha}} J_0(xy)$. De este modo, $S(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t)$ es una función independiente del tiempo debido a que depende tan sólo de la función de correlación altura-altura a distancias cortas, donde se supone que la superficie es autosemejante.

Las ecuaciones (7.6) y (7.8) nos permiten conocer los exponentes α y β del crecimiento de una superficie cuando el modo de crecimiento es el de Volmer-Weber o cuando las oscilaciones han desaparecido. Para conocer β , basta estudiar la intensidad difractada en condiciones casi especulares o en fase, en las que $[\phi] \simeq 0$ y por tanto $\Delta \ll 1$. De este modo, la ecuación (7.6) supone

$$S(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t) \propto e^{-[\phi]^2 w^2(t)} \delta(\mathbf{q}_{\parallel}), \quad (7.9)$$

con lo que monitorizando el pico de la intensidad especular en función del tiempo tenemos cómo varía $w^2(t)$. Por otro lado, en el límite $\Delta \gg 1$, y utilizando la ecuación (7.8) tenemos que la anchura total a media altura, σ_{\parallel} , en función de $[\phi]$ verifica la ecuación

$$\sigma_{\parallel} \sim [\phi]^{1/\alpha}, \quad (7.10)$$

que puede utilizarse para calcular el exponente α y que se conoce como *rocking-curve*. Para que $\Delta(t) \gg 1$ se suelen utilizar condiciones *fuera de fase*, es decir, $[\phi] \geq 1$ o bien esperar a que $w^2(t) \gg 1$.

Como resumen, debemos recordar las aproximaciones realizadas para obtener las relaciones (7.9) y (7.10): ambas son los límites de la expresión (7.6) cuando $\Delta \ll 1$ y $\Delta \gg 1$ respectivamente y, además, suponen una aproximación gaussiana respecto a la distribución de alturas.

Por último, las ecuaciones (7.1) y (7.2) proporcionan una relación entre la morfología de la superficie y la intensidad reflejada en los experimentos, que es la que vamos a utilizar para estudiar las oscilaciones RHEED en nuestro modelo.

7.5. Estudio de las oscilaciones en modelos continuos

Básicamente, podemos dividir en dos grupos las teorías continuas que explican el crecimiento capa a capa inicial: Aquéllas en las que las condiciones de crecimiento involucran procesos de evaporación-condensación, y otras en las que la difusión a lo largo de la superficie y el aporte de material son los principales procesos físicos. Al primero de los grupos pertenecen aquellas teorías en las que la relajación de la superficie es la misma que la de EW [55], como el modelo sG, que recordamos es

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - \frac{2\pi V_0}{a_\perp} \sin\left(\frac{2\pi h}{a_\perp}\right) + F + \eta(\mathbf{r}, t). \quad (7.11)$$

Las oscilaciones de la rugosidad en el crecimiento fueron estudiadas de manera numérica [200] y analítica [251], aunque sólo de manera cualitativa en la aproximación lineal que luego veremos. Al otro grupo de teorías pertenece nuestro modelo xMBE del capítulo 5,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h] - \frac{2\pi V_0}{a_\perp} \sin\left(\frac{2\pi h}{a_\perp}\right) + F + \eta(\mathbf{r}, t). \quad (7.12)$$

Como ya dijimos en el capítulo 4, existen otras situaciones experimentales, como por ejemplo la deposición epitaxial de Si, en las que el número de átomos desorbidos es muy pequeño. En este caso, la ecuación debe ser conservativa como, por ejemplo, la ecuación sG conservada (csG)

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 [\nabla^2 h] - \frac{2\pi V_0}{a_\perp} \nabla^2 \sin\left(\frac{2\pi h}{a_\perp}\right) + F + \eta(\mathbf{r}, t). \quad (7.13)$$

Este modelo también presenta oscilaciones RHEED que han sido estudiadas de manera numérica [112] y analítica en la aproximación lineal [251] o utilizando el grupo de renormalización [189]. Como en el caso de sG, dicho estudio ha sido tan sólo cualitativo o centrado en aspectos como la relación entre el tiempo de decaimiento y la longitud de coherencia en una capa, o la relación entre modelos discretos y sus correspondientes aproximaciones continuas [112].

En todos estos modelos supondremos que $\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B D \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$. En general, D depende del flujo y la temperatura, pero en nuestro estudio será en principio un parámetro arbitrario. La condición de difracción que utilizaremos es $\phi = \pi$, la misma que se utiliza en los experimentos para que el decaimiento del pico sea más nítido.

Resumamos algunas de las propiedades que conocemos de estos modelos: tanto sG como xMBE poseen una transición de rugosidad para $D_R = \pi/2$ y $D_R \simeq 1$ respectivamente [en las mismas unidades de las ecuaciones (7.11) y (7.12)]. Por encima de D_R , la superficie es rugosa y sus propiedades de escalado vienen determinadas únicamente por el término lineal correspondiente, es decir, escalan como EW y LMBE respectivamente. Sin embargo, csG *no* tiene una transición de rugosidad, y la superficie siempre es rugosa con las mismas propiedades que LMBE. Por otro lado, los modelos sG y xMBE son no conservativos, es decir, en ellos la movilidad de la superficie no es igual al flujo incidente de partículas $\mu \neq F$. Además para ellos existe un valor umbral del flujo incidente F_{th} a partir del cual se produce un crecimiento neto (o sea, $\mu \neq 0$). En general, F_{th} depende de F y D de forma que $F_{\text{th}} \rightarrow \frac{2\pi V_0}{a_\perp}$ cuando $D \rightarrow 0$. En el caso de csG, el modelo es conservativo y por tanto $\mu = F$ en todo momento.

Para comparar con los experimentos mediremos la intensidad normalizada del pico (que

se conoce como *intensidad de Bragg*)

$$I(t) \equiv \frac{\int d^2 \mathbf{q}_{\parallel} [S(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t) - S_{\text{diff}}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t)]}{\int d^2 \mathbf{q}_{\parallel} S(\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\perp}, t)}, \quad (7.14)$$

y que puede aproximarse en la aproximación gaussiana por

$$I(t) \simeq e^{-[\phi]^2 w^2(t)}. \quad (7.15)$$

Desde el punto de vista teórico nos interesan dos cantidades que son fácilmente medibles en un experimento: el período de las oscilaciones, P , y el tiempo de decaimiento de las mismas, τ . Este último se define como el tiempo transcurrido hasta que la intensidad reflejada es

$$I(\tau) = I_0/e, \quad (7.16)$$

donde $I_0 = I(t = 0)$. Si un período de las oscilaciones corresponde al crecimiento de una monocapa, el período de las oscilaciones puede obtenerse midiendo la velocidad de crecimiento $v = \frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t}$ en función del tiempo,² donde la barra significa promedio para tiempos largos. De manera explícita se tiene que

$$P = a_{\perp} v^{-1}. \quad (7.17)$$

El tiempo de decaimiento puede obtenerse si se conoce cómo crece la rugosidad en función del tiempo, ya que, utilizando (7.15) y (7.16), τ puede definirse de manera implícita a través de la relación:

$$[\phi]^2 w^2(\tau) = 1. \quad (7.18)$$

La ecuación anterior tiene un significado físico muy claro: las oscilaciones se atenúan cuando la rugosidad es igual o mayor que la constante de red vertical a_{\perp} [189]. Si conociéramos la forma exacta de $w^2(t)$, tendríamos el valor de τ para los distintos parámetros. Sin embargo, dado que los modelos xMBE y sG son no lineales, no es posible conocer la forma exacta de $w^2(t)$. Por eso en el siguiente apartado obtendremos una aproximación de τ linealizando las ecuaciones (7.11) y (7.12).

7.5.1. Aproximación lineal

La aproximación lineal, consiste en aproximar las ecuaciones despreciando el término no lineal (es decir, haciendo $V_0 = 0$). En ese caso, la rugosidad crece como

$$w^2(t) \sim \begin{cases} Dt & t \ll 1, \\ D\kappa^{-1}t^{2\beta} & t \geq 1, \end{cases} \quad (7.19)$$

con $\beta = 1/4$ en el caso de xMBE y csG y $\beta = 0$ en el caso de sG (entendiéndose como dependencia logarítmica). Si suponemos que $\tau \geq 1$, entonces de (7.18) se tiene que

$$\tau(F, D) \sim \begin{cases} \kappa^2 D^{-2} & \text{xMBE, csG,} \\ \exp(\nu/D) & \text{sG.} \end{cases} \quad (7.20)$$

La ecuación anterior supone en particular que el tiempo de decaimiento de las oscilaciones no depende del flujo directamente, sino a través de D . Por otro lado, la velocidad de crecimiento en la aproximación lineal es $v = F$, con lo que

$$P = a_{\perp} F^{-1}. \quad (7.21)$$

²Con la definición de la movilidad dada en (5.26) tenemos que $v = \mu F$

Sin embargo, las oscilaciones son un fenómeno puramente no lineal (es obvio que, si $V_0 = 0$, no existirían dichas oscilaciones). Por eso esperamos que el término no lineal modifique las predicciones de la teoría lineal, algo que veremos en el siguiente apartado.

Utilizando la ecuación (7.19) y (7.15) tenemos que

$$I(t) \sim \begin{cases} e^{-Dt^{1/2}/\kappa} & \text{xMBE, csG,} \\ t^{-D/\nu} & \text{sG.} \end{cases} \quad (7.22)$$

Estas dos leyes son muy diferentes, y pueden ser fácilmente discernibles en un experimento. Por ejemplo, Yang *et al.* [251] observaron que en el crecimiento de Si/Si(111) a 275°C la intensidad de Bragg decae como $e^{-At^{1/2}}$, lo que nos dice que el crecimiento en las primeras fases está determinado por MBE, aunque la aproximación lineal no nos permite determinar si el modelo que describe estas oscilaciones es xMBE o csG.

7.5.2. Simulaciones numéricas

El objetivo de esta sección es doble: por un lado el de comprobar en qué régimen son válidas las aproximaciones lineales, ya que como vimos en el capítulo 5, los modelos xMBE y sG pueden ser descritos mediante las ecuaciones LMBE y EW respectivamente sólomente por encima de la temperatura de rugosidad. Por otro lado, pretendemos comprobar numéricamente si las aproximaciones (7.15), (7.17) y (7.18) se cumplen para los modelos continuos. Este objetivo es particularmente importante, pues (7.15) es utilizada experimentalmente para determinar la clase de universalidad a la que pertenecen diferentes procesos de crecimiento. En la literatura no se han cuestionado hasta la fecha dichas relaciones.

En el estudio numérico tomaremos siempre los siguientes valores para nuestros parámetros: $V_0 = a_{\perp} = a_{\parallel} = 1$. En estas unidades $F_{\text{th}}(D = 0) = 2\pi$. Lo primero que vamos a comprobar es la relación (7.17). Para ello medimos el período de las oscilaciones, P , mediante la transformada de Fourier de la señal $I(t)$ y lo comparamos con la velocidad de crecimiento $a_{\perp}v^{-1}$. En la figura 7.3 hemos representado el producto vP y observamos que es aproximadamente $a_{\perp} = 1$ en todos los modelos, lo que nos dice que el período de una oscilación coincide con el crecimiento de una monocapa. Así, de ahora en adelante mediremos el tiempo de decaimiento en monocapas, que denotaremos como τ_{ML} . De la discusión anterior tenemos que

$$\tau_{\text{ML}} = \tau v a_{\perp}^{-1}, \quad (7.23)$$

por lo que la aproximación lineal (7.20) queda

$$\tau_{\text{ML}}(F, D) \sim \begin{cases} F a_{\perp}^{-1} \kappa^2 D^{-2} & \text{xMBE, csG,} \\ F a_{\perp}^{-1} \exp(\nu/D) & \text{sG.} \end{cases} \quad (7.24)$$

Aunque la relación (7.17) sea válida en los modelos continuos estudiados, la velocidad de crecimiento es muy diferente en cada uno de ellos. Como vimos antes tanto xMBE como sG son no conservativos, con lo que, en general, $v \neq F$. A bajas temperaturas el efecto del potencial se traduce en un efecto de evaporación-condensación que hace que la velocidad de crecimiento sea menor que F . Este efecto lo podemos observar en la figura 7.4, en la que vemos que, sin embargo, para el modelo csG todos los átomos que llegan a la superficie se quedan en ella y por tanto $v = F$ para todo valor de D .

El siguiente paso es comprobar la relación (7.15) debido a su importancia en los experimentos. Como dijimos antes, la suposición en la que está basada esta relación es, por una parte, que la distribución de alturas es gaussiana y, por otro lado, que la superficie es autosemejante. Esto se cumple para las teorías lineales (LMBE y EW), pero no se ha comprobado

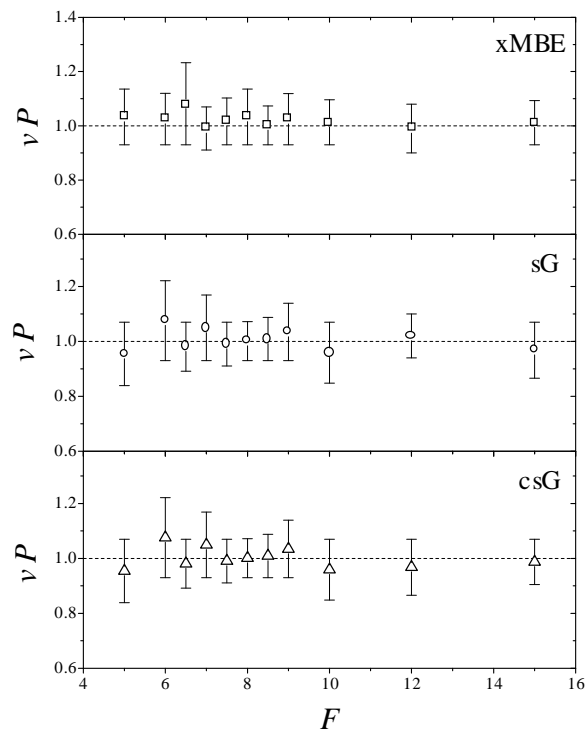


Figura 7.3: Comparación entre el período de las oscilaciones y la velocidad de crecimiento. $D = 0,5$ para xMBE y csG, y $D = 0,3$ para sG. La densidad de puntos es mayor en la zona en la que $F \simeq 2\pi$ ya que $F_{\text{th}} = 2\pi$ cuando $D \rightarrow 0$.

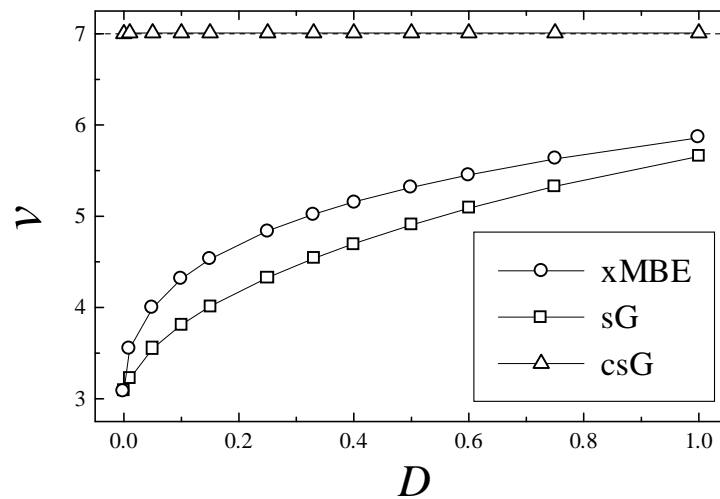


Figura 7.4: Velocidad de crecimiento en función de D para los diferentes modelos continuos estudiados. El flujo de átomos es el mismo para todos los modelos, $F = 7$. Las líneas continuas son meramente indicativas.

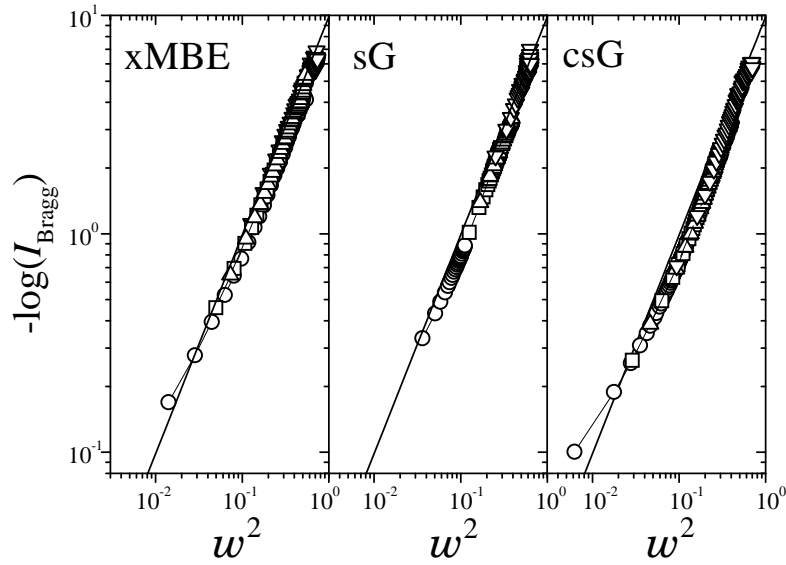


Figura 7.5: Intensidad de Bragg en función de la rugosidad para los modelos xMBE, sG y csG con, $F = 7$ y $D = 0,1$ (\circ), $D = 0,33$ (\square), $D = 0,5$ (\triangle), y $D = 1$ (∇). La línea recta es la aproximación (7.15).

si sucede lo mismo para las teorías no lineales. Este estudio lo hemos resumido en la figura 7.5. De manera no trivial, aunque está presente un término no lineal la relación (7.15) se cumple bastante bien (excepto para tiempos muy pequeños). Esto nos lleva a concluir que, si nuestros modelos son aplicables a la situación experimental, entonces podemos utilizar (7.15) para determinar cuál de ellos es el que controla la morfología de la superficie. Más aún, a través de (7.15) tenemos que la relación (7.18) es aproximadamente válida, por lo que en aproximación lineal de las ecuaciones de evolución debemos esperar que el tiempo de decaimiento siga la ley (7.24).

Veamos ahora cómo depende τ_{ML} de D y de F . En la figura 7.6 hemos representado el tiempo de decaimiento en monocapas calculado a partir de la ecuación (7.16) en función de D para F fijo. En el caso de csG la aproximación es válida para todo el rango de valores y se tiene que $\tau_{ML} \sim D^{-2}$. Este comportamiento corrobora las predicciones del grupo de renormalización, en el que se observa que la aproximación lineal para τ_{ML} en el modelo csG no se modifica cuando tenemos en cuenta el término no lineal [189]. Para el modelo xMBE, la aproximación lineal $\tau_{ML} \sim D^{-2}$ es válida solamente cuando D es suficientemente grande. Desgraciadamente, esto sucede cerca de D_R ; recordemos que para $D \geq D_R$ el potencial renormaliza a cero y por tanto no se observan oscilaciones en la rugosidad, con lo que la intensidad decae a cero de forma monótona. En el caso del modelo sG, que incluye tensión superficial, el comportamiento es parecido al modelo xMBE, aunque la aproximación $\tau_{ML} \sim e^{1/T}$ es válida para un intervalo de D mayor.

Con respecto a la dependencia de τ_{ML} con respecto a v ,³ en la figura 7.7 vemos que dicha dependencia es una ley de potencias cuando D permanece fijo. Estas dependencias son $\tau_{ML} \sim v^{1,51 \pm 0,01}$ para el modelo xMBE, $\tau_{ML} \sim v^{1,83 \pm 0,03}$ para sG y $\tau_{ML} \sim v^{0,98 \pm 0,02}$ para csG. Exceptuando el caso de csG en el que la dependencia viene dada por la aproximación lineal, estas leyes de potencias son no triviales y para su justificación es necesario acudir a técnicas de perturbaciones como por ejemplo el grupo de renormalización. Es interesante

³Estudiamos la dependencia de τ_{ML} con respecto a v ya que, experimentalmente es más fácil de medir la velocidad de crecimiento que el flujo incidente de material.

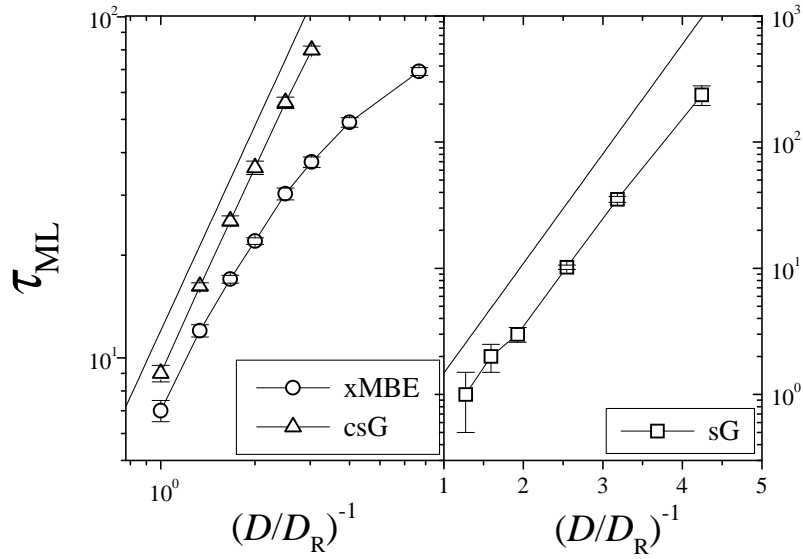


Figura 7.6: Dependencia de τ_{ML} en función de D para $F = 10$. Las líneas rectas corresponden a la aproximación lineal (7.24). Nótese que el panel de la izquierda es log-log, mientras que el de la derecha es lineal-log. Las líneas entre símbolos son meras ayudas visuales.

observar que el tiempo de decaimiento en monocapas depende de v con un exponente mayor que la unidad para los modelos sG y xMBE. Esto se debe al efecto del potencial, ya que, cuando éste no ha renormalizado a cero, la rugosidad crece con el tiempo más despacio que cuando no está presente. Es decir, cuando $V_0 \neq 0$ tenemos que $w^2(t) \simeq t^{\beta'}$ donde $\beta' \leq \beta$. Solamente cuando $D \geq D_R$ tenemos que $\beta' = \beta$. Pero, como dijimos antes, en ese caso ya no se observan oscilaciones en la intensidad de RHEED. Además de este efecto, el potencial también modifica la velocidad de crecimiento tal y como vimos en la figura 7.4, lo que también influye en las anteriores leyes de potencias.

En resumen, hemos estudiado las oscilaciones RHEED para diversos modelos continuos. Exceptuando el caso de csG en el que la aproximación lineal es suficiente para describir el comportamiento observado, cuando el modelo incluye algún término no lineal relevante éste determina la dependencia de los principales parámetros de dichas oscilaciones respecto a la velocidad de crecimiento o el parámetro del ruido por debajo de la transición de rugosidad. Por último, dado que la dependencia de τ_{ML} con v ó D es muy diferente para los distintos modelos estudiados en este capítulo, puede ser posible distinguir entre ellos en un experimento.

Para terminar esta sección comparamos nuestro estudio con un experimento reciente de crecimiento de láminas delgadas de Fe en un sustrato de Cr(001)/Nb(001)/Al₂O₃(1 $\bar{1}$ 02) llevado a cabo por K. Theis-Bröhl y colaboradores [222]. Estos investigadores encontraron que τ_{ML} en función de la temperatura varía como

$$\tau_{ML} \sim e^{A/T}, \quad (7.25)$$

donde $A = 970 \pm 250K$ y T es la temperatura del sustrato. Si despreciamos los efectos debidos a la aleatoriedad en el proceso de crecimiento, y tomamos $D = k_B T$, la ecuación anterior coincide con (7.24) para el modelo de sG. Esto nos dice que en este experimento el transporte de materia a lo largo de la superficie tiende a minimizar la tensión superficial. Más aún, K. Theis-Bröhl *et al.* también midieron τ_{ML} en función de la velocidad de crecimiento, con el resultado de que

$$\tau_{ML} \sim v^B, \quad (7.26)$$

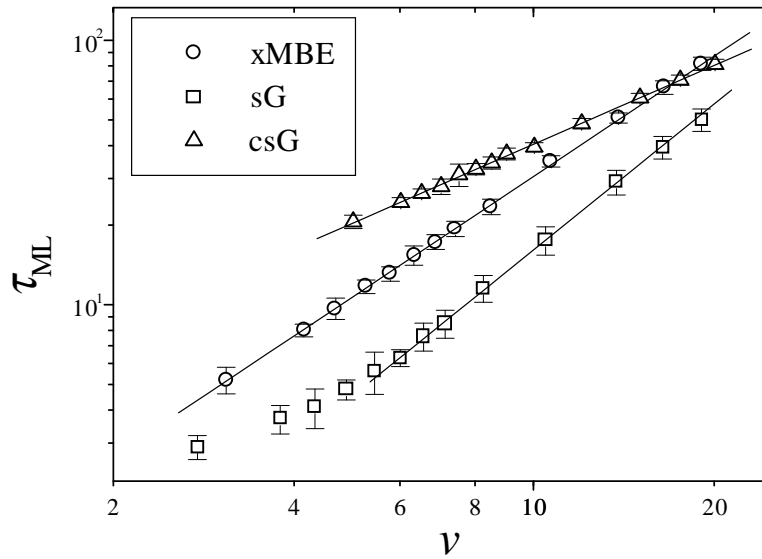


Figura 7.7: Variación de τ_{ML} en función de ν para $D = 0,1$ fijo. Las líneas sólidas corresponden a ajustes a una ley de potencias cuyos valores pueden encontrarse en el texto.

donde $B = 0,14 \pm 0,11$ Å/s. Aunque con valores diferentes de B , tanto los resultados experimentales como las simulaciones del modelo de sG dan lugar a una ley de potencias para la relación entre τ_{ML} y ν . Pese a que la medición del tiempo de decaimiento en función de los parámetros del sistema es muy fácil, no existen en la literatura (aparte del anterior) experimentos en los que se estudie de forma sistemática τ_{ML} .

El hecho de que el modelo de sG pueda describir el crecimiento de MBE puede parecer sorprendente. Sin embargo, es bien conocido (véase el capítulo 4) que muchos modelos discretos y continuos propuestos inicialmente para describir MBE son asintóticamente descritos por EW [124, 180]. En el experimento anterior parece que dicha asintótica la estamos viendo mucho antes y se muestra en el crecimiento de las primeras capas.

Parte III

Colectividades de osciladores acoplados

Capítulo 8

Colectividades de osciladores acoplados

Introducimos el concepto de colectividad de osciladores acoplados y las diferentes derivaciones de las ecuaciones de su dinámica. En especial tratamos la aproximación de campo medio de alguna de ellas y su relación con los modelos presentados en la parte II.

8.1. Introducción

En la primera parte de esta memoria hemos visto sistemas extendidos espacialmente que responden a una descripción en términos de sistemas de muchos grados de libertad acoplados y fuera del equilibrio. Estas características, que allí usamos en relación con modelos de procesos de crecimiento, son en realidad mucho más generales. En particular, la dinámica de sistemas tan variados como ecuaciones de reacción-difusión, colectividades biológicas, redes neuronales, etc., puede reducirse a un conjunto de ecuaciones diferenciales estocásticas acopladas entre sí y fuera del equilibrio. El problema matemático es inabordable incluso en esta aproximación, lo que hace que se tengan que utilizar teorías como las de campo medio o aproximaciones perturbativas a las soluciones. De entre las posibles soluciones, las más interesantes desde el punto de vista macroscópico son las colectivas, es decir, aquellas en las que la dinámica del sistema se reduce a la de un sólo grado de libertad cuyas variaciones son observables a nivel macroscópico. Un ejemplo particular corresponde a oscilaciones colectivas de sistemas formados por gran cantidad de osciladores diferentes. Este tipo de oscilaciones puede observarse en los ciclos biológicos de ciertas especies [242], en las células marcapasos en el corazón o en el sistema nervioso [213], en reacciones químicas como la de Belousov-Zhabotinskii [137, 167] o por ejemplo en los destellos periódicos de una colonia de luciérnagas [213, 59].

En este capítulo estudiaremos estas colectividades de osciladores acoplados entre si y las condiciones bajo las cuales se producen dichas oscilaciones colectivas. Por semejanza con los sistemas estadísticos (análogos a los que vimos en la primera parte) nos interesamos particularmente por las condiciones o parámetros para los que existe dicha fase sincronizada.

En el apartado siguiente introduciremos alguno de los modelos donde se observa esta fase y una transición a una fase desincronizada a la vez que presentaremos la aproximación de campo medio, la cual facilita su estudio analítico. En el apartado 8.3 veremos algunos de los sistemas cuya dinámica puede reducirse a una colectividad de osciladores de tipo ciclo límite acoplados entre sí. En particular, veremos como los modelos xMBE y sG que vimos en la primera parte son equivalentes en la aproximación de campo medio a una colectividad de osciladores acoplados en la fase sincronizada. Por último, en el apartado 8.4 deduciremos una ecuación determinista para la densidad de probabilidad de cada uno de los osciladores que ha sido el punto de partida para el tratamiento analítico de estos modelos en los últimos años.

8.2. Sincronización de osciladores

Las oscilaciones autosostenidas se observan comúnmente en sistemas fuera del equilibrio tales como sistemas químicos u organismos fisiológicos o neuronales de mamíferos. Estas oscilaciones pueden entenderse como resultado de la sincronización entre unidades locales, cada una de las cuales tiene oscilaciones de tipo ciclo límite cuando se desacopla del resto. Cuando el acoplamiento entre las unidades es lo suficientemente grande para compensar el efecto de desincronización debida a que los osciladores poseen diferentes frecuencias intrínsecas, podemos observar colectividades macroscópicas de estos osciladores que oscilan con la misma frecuencia, lo que da lugar a coherencia en el sistema. A pesar de su larga historia, el estudio de la sincronización de osciladores acoplados se había restringido a dos, o pocos más, osciladores.¹ En 1967 Winfree publicó un artículo histórico [242] en el que resaltaba no sólo la importancia de la sincronización de colectividades de osciladores en el entendimiento de los ciclos biológicos, sino también el parecido de este fenómeno con el de las transiciones de fase típicas de los sistemas termodinámicos. A continuación, en 1975 Kuramoto [137] propuso un modelo de N osciladores de tipo ciclo límite que estaban acoplados entre ellos mediante una interacción de tipo campo medio, en la que cada oscilador está acoplado con el resto. Esta propiedad hace que en el límite termodinámico, es decir cuando $N \rightarrow \infty$, el modelo pueda ser resuelto exactamente, mostrando una transición entre una fase desordenada y otra fase en la que los osciladores se sincronizan y oscilan con la misma frecuencia². La analogía con los fenómenos críticos en problemas de mecánica estadística se ve reforzada por el hecho de que los exponentes con los que escala el parámetro crítico son los típicos de una teoría de campo medio [20]. A pesar del enorme esfuerzo teórico dedicado a este modelo, tan solo recientemente se ha encontrado una posible realización experimental del mismo en redes de uniones Josephson [240]. Otras generalizaciones del modelo de Kuramoto se han venido estudiando durante los últimos años, de manera numérica y analítica: modelos con interacciones de corto alcance [45], con acoplos aleatorios con y sin frustración [46, 23], con efectos de inercia [221, 2], con acoplos estocásticos [126] o con retardo temporal [127], etc.

Muchos de los estudios teóricos de estos modelos tienen que ver con las aproximaciones de fase, en las que cada oscilador viene determinado mediante un sólo grado de libertad, su fase, y cuya dinámica viene dada por el sistema de ecuaciones diferenciales estocásticas

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + \sum_{j=1}^N \Gamma_{ij}(\phi_i - \phi_j) + f_i(\phi_i) + \sigma\eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (8.1)$$

¹En el caso de dos osciladores sabemos que el movimiento es la suma de dos oscilaciones con frecuencia igual a la suma y resta de las frecuencias de cada uno.

²A estas dos fases se les suele llamar también incoherente y coherente

donde ϕ_i es la fase de cada oscilador, ω_i es su frecuencia intrínseca [cuya distribución de probabilidad es $g(\omega)$], $f_i(\phi_i)$ es una función periódica de ϕ_i , $\Gamma_{ij}(\phi)$ es la función de acoplamiento entre osciladores y $\eta_i(t)$ es un ruido blanco. Por último, i es un índice discreto que ordena a los osciladores aunque también puede ser la posición sobre una variedad de dimensión d .

Desde el punto de vista teórico, considerar acoplamiento de campo medio es muy útil, pues permite un tratamiento analítico. En tal caso el sistema de ecuaciones anterior queda

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N \Gamma(\phi_i - \phi_j) + f_i(\phi_i) + \sigma \eta_i(t). \quad (8.2)$$

El modelo de Kuramoto es un caso particular de la ecuación anterior en el que $\Gamma(\phi) = \sin(\phi)$, $f_i(\phi_i) = 0$ y $\sigma = 0$. En este caso el comportamiento de las soluciones de (8.2) cuando $N \rightarrow \infty$ viene determinado por dos funciones: el acoplamiento $\Gamma(\phi)$ y $g(\omega)$, la función de distribución de las frecuencias. De manera general, la dispersión $g(\omega)$ en frecuencias ω_i y el ruido $\eta_i(t)$ son los dos factores que hacen que los osciladores tiendan a desincronizarse cuando $\kappa = 0$. Sin embargo, cuando el acoplamiento κ es suficientemente grande las fases de los osciladores tienden a ser iguales y aparece el movimiento cooperativo.

Los modelos del tipo (8.2) pueden entenderse como la aproximación de campo medio de sistemas más complejos, del mismo tipo que las teorías de campo medio utilizadas en mecánica estadística de equilibrio para estudiar las transiciones de fase [20]. Pero también existen sistemas reales para los que (8.2) es la ecuación que modela la dinámica, como en sistemas vivos en los que la comunicación entre células es mediada por una corriente eléctrica o secreción hormonal, en los que la interacción entre dichas unidades es de largo alcance.

Como muchas de las ideas utilizadas en su tratamiento analítico nos van a ser útiles durante este capítulo y el siguiente, vamos a revisar algunas propiedades del modelo de Kuramoto [137]³. Para empezar, el parámetro de orden para distinguir la transición entre la fase sincronizada y desincronizada es

$$\rho e^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\phi_j}. \quad (8.3)$$

Cuando $\rho \simeq 0$ las fases de los osciladores están distribuidas de forma uniforme en el círculo unidad, mientras que cuando $\rho \simeq 1$ los osciladores están casi en fase. En el límite $N \rightarrow \infty$, utilizando una identidad trigonométrica la ecuación de Kuramoto se puede escribir como

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + \kappa \rho \sin(\psi - \phi_i). \quad (8.4)$$

Utilizando varias relaciones autoconsistentes se observa que, si $g(\omega)$ es una función simétrica entorno a $\omega = \omega_0$, el sistema presenta una transición entre las dos fases para $\kappa_c = 2/\pi g(\omega_0)$, con $\rho \sim (\kappa - \kappa_c)^{1/2}$ cerca del punto crítico. El exponente es el típico de las teorías de campo medio, aunque como veremos después esto es debido a la forma particular del acoplamiento. En su desarrollo teórico, Kuramoto utilizó la suposición de que $\rho(t)$ es una función que depende del tiempo, pero que es determinista. Evidentemente, ya que ρ se puede obtener como suma de N variables, cuando $N \rightarrow \infty$ esperamos que $\rho(t)$ sea una cantidad que fluctúe alrededor del valor determinista con varianza $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ por la ley de los grandes números

³Una buena introducción y estudio del modelo de Kuramoto se puede encontrar en [213].

que vimos en el capítulo 2. Más aún, en este límite Kuramoto supuso que la densidad de probabilidad $P(\phi, t)$, definida como la probabilidad de que la fase del oscilador sea ϕ , es decir,

$$P(\phi, t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \delta(\phi - \phi_j), \quad (8.5)$$

es una función suficientemente suave de manera que

$$\rho e^{i\psi} = \int_0^{2\pi} d\phi P(\phi, t) e^{i\phi}. \quad (8.6)$$

La fase desincronizada corresponde al caso en el que dicha densidad es $P_0 = 1/2\pi$, donde suponemos que está normalizada

$$\int_0^{2\pi} P(\phi, t) d\phi = 1. \quad (8.7)$$

A pesar de los esfuerzos teóricos para demostrar que existe la densidad de probabilidad $P(\phi, t)$ para un problema concreto, en general, en la literatura se utilizan argumentos heurísticos para justificar su uso [202, 212]. En el apartado 8.4 veremos que dicha densidad existe cuando se supone que las correlaciones entre los osciladores tienden a cero cuando $N \rightarrow \infty$. Bajo esta hipótesis, se puede plantear una ecuación de Liouville para la dinámica de $P(\phi, t)$, lo que ha permitido, desde el punto de vista analítico, estudiar la estabilidad de las fases sincronizada y desincronizada en el modelo de Kuramoto, con el resultado de que la solución P_0 es inestable para $\kappa < \kappa_c$, mientras que es neutralmente estable para $\kappa \geq \kappa_c$.

En el modelo (8.4) es la diversidad de frecuencias la que produce la desincronización entre los osciladores. En la Naturaleza podemos encontrar otros factores, como el ruido externo o las fluctuaciones térmicas, que dan lugar al mismo efecto. Si incluimos dicho ruido, la ecuación de Kuramoto queda

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \omega_i + \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\phi_j - \phi_i) + \eta_i(t), \quad (8.8)$$

con $\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t - t')$. Esta ecuación también fue tratada por Kuramoto [137] en el caso de que $g(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$. De nuevo, utilizando la ecuación de Fokker-Planck para el sistema (8.8) es posible escribir una ecuación de evolución para la densidad $P(\phi, t)$ siempre que se suponga que las correlaciones entre los osciladores son nulas, como veremos en el apartado 8.4. La estabilidad de la solución incoherente nos dice que la transición entre la fase sincronizada y desincronizada se produce para $\sigma^2 = \kappa$. En este caso también $\rho \sim (\kappa - \kappa_c)^{1/2}$ para σ fija, o bien $\rho \sim (\sigma - \sigma_c)$ para κ fija. Se puede ver este estudio en el apéndice E para un modelo particular.

En el caso más general, o sea, cuando tenemos ruido externo y las frecuencias de los osciladores son diferentes para el modelo de Kuramoto, el punto donde se produce la transición tiene la siguiente expresión [212]

$$\kappa = \sigma^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(\omega) d\omega}{1 + 4\omega^2/\sigma^4} \right]^{-1}, \quad (8.9)$$

donde hemos supuesto, sin pérdida de generalidad, que $g(\omega)$ está distribuida de manera simétrica alrededor de $\omega = 0$. El parámetro de orden escala cerca de la transición como antes.

Aunque el exponente $1/2$ con el que escala ρ es típico de campo medio, Daido demostró que si la función de acoplamiento $\Gamma(\phi)$ tiene un segundo armónico, es decir, $\Gamma(\phi) = \sin(\phi) + \gamma \sin(2\phi)$, y $\sigma = 0$, entonces $\rho \sim (\kappa - \kappa_c)$ cerca del punto crítico [47]. Por último Crawford y Davies mostraron que, en el caso de que $\sigma \neq 0$, se recupera el comportamiento $\rho \sim (\kappa - \kappa_c)^{1/2}$, mientras que el ruido tiende a ayudar a los osciladores a sincronizarse aumentando el valor de κ_c . Estas predicciones no han sido comprobadas hasta hoy; de hecho, los mismos autores realizaron simulaciones numéricas en las que no observan este último efecto [43]. Aparte de esto, estos estudios teóricos nos demuestran que la forma del acoplamiento determina diferentes clases de universalidad y que, aunque se obtienen los exponentes típicos de campo medio para el acoplamiento de Kuramoto, en el caso más general los exponentes son distintos [44].

8.3. Modelos

En este apartado proponemos algunos modelos matemáticos en los que la dinámica del sistema se puede reducir a una colectividad de osciladores acoplados. Este ejercicio es muy útil desde el punto de vista práctico, pues permite conocer en qué sistemas tienen validez las aproximaciones y derivaciones analíticas que veremos en el siguiente capítulo. En estos sistemas la dinámica podrá reducirse a la ecuación (8.2); para llegar a ello, veremos que es necesario realizar aproximaciones: reducir la dinámica a la de la fase de las oscilaciones y/o una aproximación de campo medio en la que se supone que todos los osciladores están acoplados con todos los demás.

8.3.1. Ecuaciones de fase de oscilaciones auto-sostenidas

Supongamos que tenemos N grados de libertad, \mathbf{X}_i , acoplados entre sí y cuya dinámica obedece el siguiente sistema de ecuaciones

$$\frac{d\mathbf{X}_i}{dt} = \mathbf{f}_i(\mathbf{X}_i, \lambda) + \epsilon \mathbf{g}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N), \quad i = 1, \dots, N, \quad (8.10)$$

donde \mathbf{g}_i representa el acoplamiento entre los distintos osciladores, y $\mathbf{f}_i(\mathbf{X}_i)$ es de tal forma que cuando $\epsilon = 0$, \mathbf{X}_i oscila alrededor de un ciclo límite con frecuencia ω_i para ciertos valores del conjunto de parámetros λ . Estos distintos grados de libertad pueden ser, por ejemplo, ciertas características de los miembros de una colectividad biológica o la discretización de una función definida en un espacio de dimensión d . En ese caso i es la posición sobre una variedad de dimensión d . Por simplicidad supongamos que $\mathbf{X}_i = (x_i, y_i)$. Incluso en este caso el problema matemático (8.10) resulta imposible de tratar sin tener en cuenta algún tipo de simplificación o aproximación. Se pueden obtener resultados interesantes en el caso de que $\epsilon \ll 1$, lo que significa que los ciclos límite de cada uno de los osciladores son perturbados muy poco. Es entonces más conveniente tratar las ecuaciones en las variables $r_i^2 = x_i^2 + y_i^2$ y $\phi_i = \tan^{-1}(y_i/x_i)$:

$$\begin{aligned} \frac{dr_i}{dt} &= f_i^{(1)}(r_i, \phi_i) + \epsilon g_i^{(1)}(r_1, \dots, r_N, \phi_1, \dots, \phi_N), \\ \frac{d\phi_i}{dt} &= \omega_i + f_i^{(2)}(r_i, \phi_i) + \epsilon g_i^{(2)}(r_1, \dots, r_N, \phi_1, \dots, \phi_N) \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (8.11)$$

Si $\epsilon \ll 1$ y $\|f_i^{(j)}\| \ll 1$, la dinámica del sistema viene determinada tan sólo por el valor de la fase de cada uno de los osciladores en su ciclo límite, lo que se denomina *aproximación*

de fase [137]. En tal caso, la dinámica del sistema se puede aproximar por

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + f_i^{(2)}(\phi_i) + \epsilon h(\phi_1, \dots, \phi_N) + \mathcal{O}(\epsilon^2, \|f_i^{(2)}\|^2). \quad (8.12)$$

Cuando no tenemos acoplamiento entre osciladores, $\epsilon = 0$, el término $f_i^{(2)}$ aparece debido a que el ciclo límite es no lineal. Por último, dado que suponemos que los ciclos límite de cada uno de los osciladores son poco perturbados por el acoplamiento con el resto, podemos considerar tan sólo acoplamientos lineales, es decir

$$\mathbf{g}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N) = \sum_{j=1}^N \mathbf{A}_{ij} \mathbf{X}_j. \quad (8.13)$$

Realizando las aproximaciones anteriores, se puede probar que para este acoplamiento lineal (8.12) se reduce a [137]

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + f(\phi_i) + \epsilon \sum_{j=1}^N a_{ij} \Gamma(\phi_j - \phi_i), \quad (8.14)$$

donde tanto $f(\phi)$ como $\Gamma(\phi)$ son funciones periódicas de su argumento. En primer orden podemos considerar que $f(\phi) = \sin(\phi) + \eta(t)$, donde $\eta(t)$ es un ruido blanco⁴ y que $\Gamma(\phi) = \sin(\phi + \alpha)$, con lo que

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + a \sin \phi_i + \epsilon \sum_{j=1}^N a_{ij} \sin(\phi_j - \phi_i + \alpha) + \sigma \eta_i(t). \quad (8.15)$$

Los coeficientes a_{ij} miden el efecto del oscilador j sobre el i , de modo que este efecto es excitatorio si $a_{ij} > 0$ e inhibitorio si $a_{ij} < 0$ (antiferromagnético o ferromagnético). La situación con $\alpha \neq 0$ se obtiene, por ejemplo, cuando \mathbf{X}_i es la amplitud compleja de ecuaciones de Ginzburg-Landau acopladas [195].

Como dijimos antes, \mathbf{X}_i puede ser un grado de libertad del sistema (la fase de una luciérnaga, por ejemplo) o la discretización de una función en un retículo. Veamos ahora un ejemplo de esto último. Consideremos que la función de acoplamiento entre los osciladores proviene de la discretización del operador laplaciano en dimensión $d = 1$ (a otras dimensiones se puede generalizar sin problema):

$$\sum_{j=1}^N A_{ij} \mathbf{X}_i = \mathbf{X}_{i-1} + \mathbf{X}_{i+1} - 2\mathbf{X}_i \equiv \Delta_d \mathbf{X}_i. \quad (8.16)$$

Ahora la aproximación de fase requiere que $\epsilon \|\Delta_d \mathbf{X}_i\| \ll 1$, lo que significa que las variaciones espaciales de \mathbf{X}_i son pequeñas, siendo la longitud de onda típica de estas variaciones del orden de $\epsilon^{-1/2}$. En tal caso, la ecuación que obtenemos es [suponemos que $a = 0$ en (8.15)]

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + \epsilon [\sin(\phi_{i-1} - \phi_i + \alpha) + \sin(\phi_{i+1} - \phi_i + \alpha)] + \sigma \eta_i(t). \quad (8.17)$$

⁴Al realizar el cambio de variables $(x_i, y_i) \rightarrow (r_i, \phi_i)$, si en la ecuación (8.10) teníamos inicialmente un ruido aditivo $\boldsymbol{\eta}(t) = [\eta_x(t), \eta_y(t)]$, en la ec. (8.12) tendremos un ruido de la forma $\eta(t) = -r \cos \phi \eta_x + r \sin \phi \eta_y$, que es también un ruido blanco en la aproximación de que $r \simeq \text{cte.}$, algo que se verifica cuando $\epsilon \ll 1$ [74].

Como $\phi_{i+1} - \phi_i \sim \epsilon$, podemos desarrollar el seno en función de sus argumentos, encontrando en primer orden que

$$[\sin(\phi_{i-1} - \phi_i + \alpha) + \sin(\phi_{i+1} - \phi_i + \alpha)] \simeq \nu \Delta_d \phi + \lambda (\nabla_d \phi)^2, \quad (8.18)$$

donde $\nabla_d \phi = \phi_{i-1} - \phi_i$ es el gradiente discreto. Con ello la ecuación que verifica la fase se parece a las que encontramos en la parte II de esta memoria, es decir

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + \epsilon \nu \Delta_d \phi_i + \epsilon \lambda (\nabla_d \phi_i)^2 + \sigma \eta_i(t). \quad (8.19)$$

Aunque obtenida mediante una discretización de los operadores espaciales, la ecuación anterior también se puede derivar de manera continua, es decir, sin necesidad de utilizar la discretización en el espacio como se puede ver en [137]. En el lenguaje de los procesos de crecimiento, la ecuación anterior es la de KPZ sometida a un flujo de partículas que depende de la posición. Sin embargo, la ecuación (8.19) nos dice que la correlación espacial va como $C(n) = \langle (\phi_{i+n} - \phi_i)^2 \rangle \sim n^\chi$ donde $\chi > 0$ es el exponente de rugosidad⁵ y que la rugosidad crece de manera cinética con el tiempo para ciertos valores de los parámetros de la ecuación. En ese caso, nuestro sistema inicial no podrá tener oscilaciones sincronizadas. Solamente tendremos oscilaciones sincronizadas cuando la rugosidad de la ecuación (8.19) sea muy pequeña lo cual sucede en los primeros instantes del crecimiento o bien cuando σ es muy pequeño [80].

8.3.2. Redes de uniones Josephson

Las uniones Josephson⁶ y, en particular, las redes de uniones Josephson tienen un interés tanto teórico como industrial. Desde el punto de vista teórico, han sido utilizadas para estudiar la transición de fusión en dos dimensiones, las líneas de flujo en semiconductores de tipo II o la dinámica de estructuras no lineales en sistemas de osciladores acoplados [199, 66, 201]. Desde el punto de vista práctico las redes de uniones Josephson se utilizan, por ejemplo, para mantener el estándar U.S. Legal Volt, o para conseguir generadores de corriente con frecuencias muy grandes. Recientemente se ha mostrado que la dinámica de una red de estas uniones puede ser transformada en la del modelo de Kuramoto en el límite de acoplamiento y diversidad débiles [240]. Aunque desde el punto de vista teórico este hecho es muy importante ya que permite estudiar e implementar experimentalmente alguna de las ideas sobre sincronización, desde el punto de vista de los experimentos también lo es, ya que permite determinar de forma analítica los parámetros para los cuales tendremos una sincronización perfecta. Consideremos una red en serie de N uniones Josephson sometidas a una corriente total I_B y con una línea de carga con inductancia L , resistencia R y capacitancia C (figura 8.1). Para uniones de capacitancia despreciable, las ecuaciones del circuito son

$$\frac{\hbar}{2e r_j} \frac{d\psi_j}{dt} + I_j \sin \psi_j + \frac{dQ}{dt} = I_B, \quad j = 1, \dots, N, \quad (8.20)$$

$$L \frac{d^2 Q}{dt^2} + R \frac{dQ}{dt} + \frac{1}{C} Q = \frac{\hbar}{2e} \sum_{k=1}^N \frac{d\psi_k}{dt}, \quad (8.21)$$

donde ψ_j es la fase de la función de onda a través de la unión Josephson j [14], r_j es la resistencia de tal unión, I_j es su corriente crítica, Q es la carga en el condensador y e la

⁵Para diferenciarlo de la fase α , en este capítulo denotamos el exponente de rugosidad como χ .

⁶Por su descubrimiento, Brian D. Josephson fue premio Nobel de física en 1973, a los 33 años de edad.

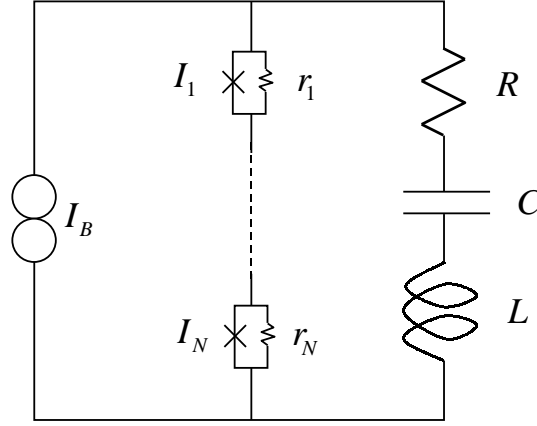


Figura 8.1: Disposición experimental de la red de uniones Josephson descritas por ecuaciones (8.20).

del electrón. Cuando no existe la línea de carga, las uniones están desacopladas y la fase en cada una de ellas oscila con una frecuencia $\omega_j = \frac{2er_j}{\hbar} \sqrt{I_B^2 - I_j^2}$. La línea de carga hace que cada una de ellas oscile con una frecuencia un poco diferente $\tilde{\omega}_j$, pero a medida que el número de uniones N es más grande, es posible que oscilen todas con una frecuencia común. Suponiendo que el desorden es pequeño, es decir

$$r_j = \bar{r}(1 + \epsilon\rho_j), \quad (8.22)$$

$$I_j = \bar{I}(1 + \epsilon\zeta_j), \quad (8.23)$$

$$\omega_j = \bar{\omega}(q + \epsilon\delta_j), \quad (8.24)$$

y utilizando la “fase natural” ϕ_j definida por

$$\frac{2er_j}{\hbar} \frac{d\phi_j}{\omega_j} = \frac{d\psi_j}{I_B - I_j \sin \psi_j}, \quad (8.25)$$

obtenemos la ecuación

$$\frac{d\phi_j}{dt} = \omega_j - \frac{\kappa}{N} \sum_{k=1}^N \sin(\phi_j - \phi_k + \alpha). \quad (8.26)$$

En otras disposiciones experimentales obtenemos otras ecuaciones que también pueden entenderse como osciladores acoplados. Por ejemplo, si la red de uniones es en paralelo, la dinámica de la fase del oscilador i viene dada por la ecuación [159]

$$\frac{d\phi_i}{dt} = -\sin \phi_i + \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N (\phi_j - \phi_i + \alpha), \quad (8.27)$$

donde α es una fase diferente de cero si el campo externo aplicado a la red es no nulo. También obtenemos (8.27) cuando tenemos una red de $L \times L = N$ uniones en presencia de un campo magnético transversal, para la que el hamiltoniano efectivo de la dinámica es [125]

$$\mathcal{H} = -\kappa \sum_{i=1}^N \sum_{\delta} \cos(\phi_i - \phi_{i+\delta} - \alpha_{ij}) - \sum_{i=1}^N \omega_i \phi_i, \quad (8.28)$$

donde de nuevo, α_{ij} es proporcional al campo magnético aplicado, δ son los vectores a los vecinos próximos, y ω_i a la intensidad de entrada en la red. Estos modelos, sobre todo en situaciones de equilibrio, son equivalentes a otros que veremos en la siguiente sección como el modelo XY o el gas de Coulomb. De hecho, en este último caso de redes de uniones Josephson se puede comprobar que, en ausencia de campo externo, existe una transición de fase de Kosterlitz-Thouless que se puede observar en la característica intensidad-voltaje [160]. En el caso de campo externo, dichas redes de uniones Josephson proporcionan una realización experimental directa del modelo XY frustrado.

8.3.3. Modelo XY

Uno de los modelos paradigmáticos de la mecánica estadística es el modelo XY. En él se estudian sistemas de espines de módulo constante y restringidos a moverse en el plano XY. El hamiltoniano del sistema viene dado por

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{i=1}^N \sum_{\delta} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\delta} = -JS^2 \sum_{i=1}^N \sum_{\delta} \cos(\phi_i - \phi_{i+\delta}), \quad (8.29)$$

donde \mathbf{S}_i son espines clásicos de módulo S y δ son los vectores a los próximos vecinos. Por tanto podemos especificar los vectores \mathbf{S} por el ángulo que forman con el eje X, $0 \leq \phi_i \leq 2\pi$. En equilibrio, este modelo presenta una transición de Kosterlitz-Thouless (KT) la cual se produce mediante la disociación de pares vórtice-antivórtice. Éstas son excitaciones locales en las que ϕ_i varía mucho de un punto a otro.

En presencia de un campo externo, el hamiltoniano de este modelo es

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{XY} + \sum_i B \cos \phi_i. \quad (8.30)$$

La dinámica del modelo puede estudiarse mediante ecuaciones de Langevin de la forma (2.126), de manera que

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -B \sin \phi_i - JS^2 \sum_{\delta} \sin(\phi_i - \phi_{i+\delta}) + \sqrt{2k_B T} \eta_i, \quad (8.31)$$

donde T es la temperatura. En el modelo XY dado por el hamiltoniano (8.29) los espines tienden a estar alineados $\phi_i = \phi_j$. Sin embargo también podemos pensar en introducir cierta frustración en el sistema de manera que el hamiltoniano sea

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sum_{\delta} \cos(\phi_i - \phi_{i+\delta} + \alpha) \quad (8.32)$$

En este caso el sistema tiene una transición de tipo KT o de Ising dependiendo del valor de α . Para temperaturas bajas, y en la aproximación de campo medio, el modelo XY frustrado tiene pues la siguiente ecuación de Langevin:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -B \sin \phi_i - JS^2 \sum_{j=1}^N \sin(\phi_i - \phi_j + \alpha) + \sigma \eta_i(t). \quad (8.33)$$

8.3.4. Ondas de densidad de carga

En 1955 Peierls demostró que en un metal unidimensional la densidad de carga electrónica no es estable a bajas temperaturas cuando se tienen en cuenta las excitaciones de la red (fonones) [83]. De este modo se crea un *gap* en el espectro de excitaciones de una sola partícula y un modo colectivo formado por electrones-hueco con vector de onda $q = 2k_F$, donde k_F es el momento de Fermi. La densidad de carga asociada es

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 + \rho_1 \cos(2\mathbf{k}_F \cdot \mathbf{r} + \phi), \quad (8.34)$$

donde al último término se le denomina *onda de densidad de carga* (Charge Density Wave, CDW). La fase ϕ tiene suma importancia pues sus derivadas temporales y espaciales están relacionadas con la corriente eléctrica. En ausencia de impurezas o amortiguamiento, la onda de densidad de carga puede dar lugar a una corriente superconductor a través del metal. Este tipo de transporte eléctrico ha sido observado en materiales como NbSe₃.

En contraste con los superconductores, el modo colectivo de transporte o CDW no tiene un *gap* de energía. Esto hace que debido a impurezas o a defectos en la superficie las CDW queden ancladas en estos defectos y por tanto no se produzca el transporte de carga. La fenomenología de este fenómeno de transporte es muy variada. Para tratar de explicar la dependencia de la conducción con la frecuencia o la amplitud del campo eléctrico, o las oscilaciones observadas en la corriente eléctrica, se han propuesto muchos modelos. Una de las aproximaciones comunes consiste en suponer que la dinámica de la fase ϕ es la importante y que el fenómeno de *pinning* es consecuencia directa del acoplamiento entre la fase y las impurezas. Despreciando efectos inerciales, podemos entonces suponer que la ecuación es

$$\frac{1}{\tau} \frac{d\phi(\mathbf{r})}{dt} = -\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\phi} + \frac{k_F e E}{m^*}, \quad (8.35)$$

donde τ es el tiempo de relajación, m^* es la masa efectiva de la banda, E es el campo eléctrico aplicado y \mathcal{H} es el hamiltoniano efectivo que contiene el efecto de las impurezas. En el límite de densidad de impurezas muy pequeña podemos considerar que $\mathcal{H} = \omega_0^2 \cos(\phi(\mathbf{r}) + \beta(\mathbf{r}))$ y por tanto la ecuación es

$$\frac{1}{\tau} \frac{d\phi(\mathbf{r})}{dt} = -\omega_0^2 \sin(\phi(\mathbf{r}) + \beta(\mathbf{r})) + \frac{k_F e E}{m^*}, \quad (8.36)$$

donde $\beta(\mathbf{r})$ y $\omega_0(\mathbf{r})$ son fases y amplitudes aleatorias debidas a la diferente atracción entre la fase y cada una de las impurezas. El modelo anterior se conoce como modelo de una sola partícula de Grüner-Zadowski-Chaikin [82]. Puede entenderse como la aproximación a la dinámica de la fase cuando la longitud de correlación del sistema sea muy pequeña. En el caso de que no lo sea, podemos incluir un operador que tenga en cuenta las variaciones espaciales de $\phi(\mathbf{r})$, y así

$$\frac{1}{\tau} \frac{d\phi(\mathbf{r})}{dt} = \Delta\phi(\mathbf{r}) - \omega_0^2 \sin(\phi(\mathbf{r}) + \beta(\mathbf{r})) + \frac{k_F e E}{m^*}. \quad (8.37)$$

Este modelo se conoce como el de Fukuyama-Lee-Rice [69]. Por último, pueden incluirse los efectos de la temperatura mediante un término de ruido blanco. La aproximación de campo medio de este problema ha sido estudiada en el caso $T = 0$ [65] o bien cuando $\omega_0(\mathbf{r})$ y $\beta(\mathbf{r})$ son constantes [22] y $T \neq 0$. En el siguiente apartado veremos cómo se realiza dicha aproximación de campo medio.

8.3.5. Crecimiento de superficies

En este apartado vamos a discutir la aproximación de campo medio para los modelos presentados en la parte II de la memoria, aunque los resultados sólo dependen del operador utilizado y por tanto pueden ser extendidos a otros modelos. En estos modelos aparece un operador espacial que es el laplaciano en el caso de sG y el bilaplaciano en xMBE. Si discretizamos dicho operador en $d = 2$, y suponiendo que el espaciado de la red cuadrada es $a_{\parallel} = 1$ obtenemos las siguientes expresiones de los operadores a primer orden:

$$\nabla_d^2 \phi = \begin{bmatrix} & \phi_{i,j-1} & \\ \phi_{i-1,j} & -4\phi_{i,j} & \phi_{i+1,j} \\ & \phi_{i,j+1} & \end{bmatrix}, \quad (8.38)$$

y

$$\nabla^2[\nabla^2 \phi] = \begin{bmatrix} & & \phi_{i,j-2} & & \\ & 2\phi_{i-1,j-1} & -8\phi_{i,j-1} & 2\phi_{i+1,j-1} & \\ \phi_{i-2,j} & -8\phi_{i-1,j} & 20\phi_{i,j} & -8\phi_{i+1,j} & \phi_{i+2,j} \\ & 2\phi_{i-1,j+1} & -8\phi_{i,j+1} & 2\phi_{i+1,j+1} & \\ & & \phi_{i,j+2} & & \end{bmatrix}. \quad (8.39)$$

La expresión (8.38) puede escribir como

$$\Delta_d \phi = \sum_{\delta} (\phi_{i+\delta} - \phi_i), \quad (8.40)$$

donde como siempre la suma en δ se extiende a los primeros vecinos. Esta expresión para el laplaciano es independiente de la dimensión d siempre que la suma se extienda sobre vecinos próximos. La aproximación de campo medio consiste en sustituir la suma sobre primeros vecinos por la suma sobre todo el sistema

$$\Delta_d \phi = \sum_{j=1}^N (\phi_j - \phi_i). \quad (8.41)$$

Cuando la dimensión de nuestro problema es $d = 2$ el número de vecinos es 4 (en la red cuadrada). En general, el número de coordinación en dimensión d es $2d$, con lo que cuando $d \rightarrow \infty$ esperamos que la aproximación de campo medio sea válida. Desde el punto de vista de fenómenos críticos existe una dimensión d_c , denominada *dimensión crítica superior* a partir de la cual las predicciones de campo medio para las propiedades del punto crítico son exactas. Fuera del punto crítico podemos razonar de la siguiente manera. Como vimos en el capítulo 4, la rugosidad en la ecuación lineal de EW escala con el tamaño del sistema como L^χ donde χ es positivo para $d < 2$ y es negativo para $d > 2$. La dimensión $d = 2$ es la dimensión crítica superior para la teoría lineal. Por ello esperamos que la aproximación de campo medio del laplaciano dada por (8.41) sea válida a partir de esa dimensión. En el caso de la ecuación LMBE dicha dimensión es $d_c = 4$.

Pero, ¿de qué prescindimos en nuestra aproximación de campo medio? La respuesta es: de las fluctuaciones espaciales de nuestro sistema. Por tanto, la aproximación de campo medio será válida cuando la rugosidad $w^2 \ll 1$. Es evidente que cerca de la temperatura de rugosidad para los modelos xMBE y sG donde $w^2 \simeq L^{2\chi}$ la teoría de campo medio debe fallar. Sin embargo, para temperaturas inferiores, y como vimos en el capítulo 3, la rugosidad en las teorías lineales crece con respecto al tiempo como

$$\omega^2 \simeq t^{2\beta}, \quad (8.42)$$

con $\beta = 0$ para EW y $\beta = 1/4$ para IMBE. Por tanto a tiempos pequeños y temperaturas bajas también esperamos que nuestra aproximación de campo medio sea válida. La pregunta inmediata que surge de esta afirmación es si esta aproximación nos puede ayudar a describir las oscilaciones RHEED que tienen lugar al inicio del crecimiento de las superficies en el modo de Stranski-Krastanov. Dicha comparación la veremos en el siguiente capítulo, donde veremos además que en el límite de temperatura muy pequeña podemos estudiar la solución de las ecuaciones xMBE y sG perturbativamente a partir de la aproximación de campo medio.

Por último, en el caso del bilaplaciano la aproximación de campo medio que utilizaremos es

$$\Delta_d^2 \phi_i = \sum_{\delta} (\Delta_d \phi_{i+\delta} - \Delta_d \phi_i) \simeq -4 \Delta_d \phi_i \simeq -4 \sum_{j=1}^N (\phi_j - \phi_i). \quad (8.43)$$

donde hemos supuesto que $\Delta_d \phi_{i+\delta}$ y $\Delta_d \phi_i$ están totalmente descorrelacionados, y que ϕ está definido sobre una red cuadrada.

8.4. Tratamiento continuo mediante EDPs

El análisis de Kuramoto del modelo (8.4) se basa en relaciones autoconsistentes y por tanto no puede utilizarse de manera general para otros modelos [137]. En 1991 Strogatz y Mirollo [212] propusieron una descripción continua basada en una ecuación en derivadas parciales (ec. de Liouville) para la densidad de probabilidad $P(\phi, t)$ que permitía no sólo determinar los parámetros críticos para los cuales se producía una transición, sino también la estabilidad de las diferentes fases. El hecho de que la ecuación sea determinista, la ha convertido en el punto de partida de la mayoría de los estudios analíticos de colectividades de osciladores acoplados, aunque como veremos después la ecuación que se obtiene es bastante complicada y en la mayoría de los casos no se puede resolver exactamente. En este apartado veremos cómo se obtiene dicha ecuación. Como hemos visto, la clase ecuaciones que queremos tratar puede escribirse de la forma

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + f(\phi_i) + \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N \Gamma(\phi_j - \phi_i) + \sigma \eta_i(t). \quad (8.44)$$

Por simplicidad, suponemos que tanto $f(\phi)$ como $\Gamma(\phi)$ son funciones 2π -periódicas. La ecuación de Fokker-Planck para la probabilidad de que las fases de los N osciladores tomen los valores ϕ_1, \dots, ϕ_N y cuyas frecuencias sean $\omega_1, \dots, \omega_N$ verifica la ecuación de Fokker-Planck [74, 52]

$$\frac{\partial P(\{\phi_i\}, \{\omega_i\}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \phi_i} [v_i P(\{\phi_i\}, \{\omega_i\}, t)] = \sigma^2 \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 P(\{\phi_i\}, \{\omega_i\}, t)}{\partial^2 \phi_i}, \quad (8.45)$$

donde denotamos $P(\{\phi_i\}, \{\omega_i\}, t) = P(\phi_1, \dots, \phi_N, \omega_1, \dots, \omega_N, t)$ y

$$v_i = \omega_i + f(\phi_i) + \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N \Gamma(\phi_j - \phi_i). \quad (8.46)$$

Calculemos ahora la probabilidad reducida de una de las fases, definida como

$$P_1 \equiv P(\phi_1, \omega_1, t) = \int d\phi_2 \cdots d\phi_N \int d\omega_2 \cdots d\omega_N P(\{\phi_i\}, \{\omega_i\}, t). \quad (8.47)$$

Integrando la ecuación (8.45) sobre (ϕ_2, \dots, ϕ_n) y $(\omega_2, \dots, \omega_N)$, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \phi_1} \left[\left(\tilde{v}_1 + \frac{\kappa \Gamma(0)}{N} \right) P_1 + \frac{\kappa(N-1)}{N} \int d\phi_2 \int d\omega_2 \Gamma(\phi_2 - \phi_1) P_{12} \right] \\ = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_1}{\partial \phi_1^2}, \end{aligned} \quad (8.48)$$

donde

$$\tilde{v}_i = \omega_i + f(\phi_i), \quad (8.49)$$

y

$$P_{12} \equiv P(\phi_1, \phi_2, \omega_1, \omega_2, t) = \int d\phi_3 \cdots d\phi_N \int d\omega_3 \cdots d\omega_N P(\{\phi_i\}, \{\omega_i\}, t), \quad (8.50)$$

que se puede relacionar con la función de correlación de dos osciladores [43]

$$C(\phi_1, \phi_2, \omega_1, \omega_2, t) \equiv P_1(\phi_1, \omega_1, t) P_2(\phi_2, \omega_2, t) - P_{12}(\phi_1, \phi_2, \omega_1, \omega_2, t). \quad (8.51)$$

Con esta relación, la ecuación (8.48) se puede expresar como

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1(\phi_1, \omega_1, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \phi_1} \left[(\tilde{v}_1 + \kappa \Gamma(0)/N) P_1(\phi_1, \omega_1, t) + \right. \\ \left. + \frac{\kappa(N-1) P_1(\phi_1, \omega_1, t)}{N} \int d\phi_2 \int d\omega_2 \Gamma(\phi_2 - \phi_1) P_2(\phi_2, \omega_2, t) \right] = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_1(\phi_1, \omega_1, t)}{\partial \phi_1^2} \\ + \frac{\partial}{\partial \phi_1} \left[\frac{\kappa(N-1)}{N} \int d\phi_2 \int d\omega_2 \Gamma(\phi_2 - \phi_1) C(\phi_1, \phi_2, \omega_1, \omega_2, t) \right]. \end{aligned} \quad (8.52)$$

Si suponemos que en el límite $N \rightarrow \infty$ la función de correlación tiende a cero, obtenemos una ecuación autónoma para P_1

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \phi_1} \left\{ \left[\tilde{v}_1 + \kappa \int d\phi_2 \int d\omega_2 \Gamma(\phi_2 - \phi_1) P_2 \right] P_1 \right\} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_1}{\partial \phi_1^2}. \quad (8.53)$$

En algunos casos se puede probar que $C \rightarrow 0$ con una interacción de campo medio en el límite $N \rightarrow \infty$ [49, 21]. Sin embargo, en el caso general es una cuestión todavía no resuelta, aunque se suele tomar como suposición *a priori* en la aproximación de campo medio. Por último, por definición se tiene que

$$\int_0^{2\pi} d\phi P_1(\phi_1, \omega_1, t) = g(\omega_1), \quad (8.54)$$

donde $g(\omega)$ es la distribución de frecuencias. Con esto, y dado que la ecuación (8.53) no depende del oscilador que tomemos podemos definir la probabilidad normalizada de encontrar un oscilador con fase ϕ y frecuencia ω como $P(\phi, \omega, t) = P_1(\phi_1, \omega_1, t)/g(\omega)$, cuya dinámica viene dada por

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \phi} (vP) = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial \phi^2}, \quad (8.55)$$

donde v es la velocidad de la fase ϕ dada por

$$v(\phi, \omega, t) = \omega + f(\phi) + \kappa \int_0^{2\pi} d\phi' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \Gamma(\phi' - \phi) P(\phi', \omega', t) g(\omega'), \quad (8.56)$$

y $P(\phi, \omega, t)$ cumple la condición de normalización

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} d\omega P(\phi, \omega, t) = 1. \quad (8.57)$$

La ecuación (8.55) es una ecuación integro-diferencial en derivadas parciales. En algunos casos puede resolverse exactamente, pero en la mayoría, para acoplamientos y términos no lineales generales, debe estudiarse de manera perturbativa o numérica. La mayoría de los estudios teóricos de estas ecuaciones se realizan directamente sobre la ecuación (8.55) [47, 43].

Como hemos visto, en el caso de que las correlaciones entre osciladores sean pequeñas, la ecuación de Fokker-Planck para las fases de todos los osciladores sólo depende de la probabilidad de uno de los osciladores. Esto se traduce en que la densidad de probabilidad $P(\{\phi_i\}, \{\omega_i\}, t)$ se puede expresar como

$$P(\{\phi_i\}, \{\omega_i\}, t) = \prod_{i=1}^N P_1(\phi_i, \omega_i, t), \quad (8.58)$$

con lo que la ecuación de Langevin correspondiente a (8.55) es

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \omega_0 - f(\phi) + \kappa \langle \Gamma(\phi' - \phi) \rangle_{\phi'} + \sigma \eta(t), \quad (8.59)$$

con

$$\langle \Gamma(\phi' - \phi) \rangle_{\phi'} = \int_0^{2\pi} d\phi' \Gamma(\phi' - \phi) P(\phi', t), \quad (8.60)$$

y donde hemos supuesto por simplicidad que nuestro sistema es *unimodal*, es decir que $g(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$ y $P(\phi, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega P(\phi, \omega, t) g(\omega)$. Por ejemplo, en el caso del acoplamiento lineal $\Gamma(\phi' - \phi) = \phi' - \phi$, este valor medio es

$$\langle \Gamma(\phi' - \phi) \rangle_{\phi'} = \langle \phi' \rangle_{\phi'} - \phi = \langle \phi \rangle - \phi, \quad (8.61)$$

donde

$$\langle \phi \rangle = \int_0^{2\pi} \phi P(\phi, t). \quad (8.62)$$

En resumen, cuando las correlaciones entre los osciladores son nulas, el promedio sobre infinitas réplicas del sistema se convierte en el promedio sobre las realizaciones del ruido, ya que la única diferencia entre esas infinitas réplicas es precisamente las diferentes realizaciones del ruido. Otra manera de verlo, que no es una demostración y que es utilizada por algunos autores es observar que la ecuación (8.44) se puede expresar como

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega_i + f(\phi_i) + H(\phi_i, t) + \sigma \eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (8.63)$$

con

$$H(\phi_i, t) = \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N \Gamma(\phi_j - \phi_i). \quad (8.64)$$

Por la ley de los grandes números esperamos que cuando $N \rightarrow \infty$ $H(\phi, t)$ sea una cantidad que no dependa de los otros osciladores $j \neq i$. Por ejemplo, en el caso de Kuramoto se tiene que $g(\phi_i, t) = \rho \sin(\phi_i - \psi)$, donde ρ y ψ están definidas por la ecuación (8.3). Si suponemos

que $\rho(t)$ y $\psi(t)$ son dos funciones temporales cualesquiera, la solución de (8.63) no depende del subíndice i . Lo único que diferencia a las ecuaciones (8.63) son las diferentes realizaciones del ruido, con lo que la suma sobre todos los elementos de la colectividad es también suma sobre realizaciones; por tanto, cuando $N \rightarrow \infty$ la suma en (8.64) tiende al valor medio $\langle \Gamma(\phi' - \phi) \rangle_{\phi'}$ y llegamos a una ecuación autoconsistente. Sin embargo, para llegar a esta ecuación hemos utilizado que las N ecuaciones en (8.63) son realizaciones independientes de ϕ_i lo cual no es cierto ya que dependen unas de otras a través de $g(\phi_i, t)$. Otra vez, si las correlaciones entre osciladores son nulas, entonces las diferentes realizaciones de ϕ_i son estadísticamente independientes y entonces podemos aplicar la ley de los grandes números, obteniéndose el mismo razonamiento que el utilizado en la derivación de la ecuación (8.55).

La ecuación (8.55) es difícil de tratar de manera general. Por ello, lo que se suele hacer es tratarla perturbativamente. Una de las maneras es lo que se llama hacer la suposición de ruido pequeño, es decir $\sigma \rightarrow 0$. Como en (8.55) σ está multiplicando la derivada de mayor orden, el problema se convierte desde el principio en uno de perturbaciones singulares. La técnica de perturbaciones singulares apropiada para este estudio es la aproximación WKB [19]. Cuando el ruido es nulo y no existen soluciones estacionarias, la solución del problema es una onda que se mueve con una velocidad que depende del tiempo. Concretamente, cuando $\sigma = 0$, la solución del problema de valor inicial

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \phi}(v(\phi)P) = 0 \quad (8.65)$$

$$P(\phi, t = 0) = P_0(\phi), \quad (8.66)$$

con $P_0(\phi)$ cualquier función, es

$$P(\phi, t) = P_0(\phi - \phi_0(t)), \quad (8.67)$$

donde $\phi_0(t)$ es la solución de la ecuación

$$\frac{d\phi_0}{dt} = v(\phi_0). \quad (8.68)$$

Cuando $\sigma \rightarrow 0$ podemos estudiar perturbaciones en la ecuación (8.55) suponiendo que la solución de la ecuación (8.55) se puede expresar de la forma

$$P(\phi, t) \sim \exp \left\{ \frac{1}{\sigma^2} [S_0(\phi, t) + \sigma^2 S_1(\phi, t) + \mathcal{O}(\sigma^4)] \right\}. \quad (8.69)$$

Insertando esta expresión en la ecuación (8.55) e igualando los coeficientes de las mismas potencias de σ , obtenemos a primer orden la *ecuación eikonal*

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = -v(\phi) \frac{\partial S_0}{\partial \phi} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial S_0}{\partial \phi} \right)^2, \quad (8.70)$$

y a segundo orden obtenemos la *ecuación de transporte*

$$v'(\phi) - \frac{\partial S_1}{\partial t} - v(\phi) \frac{\partial S_1}{\partial \phi} - \frac{\partial S_0}{\partial \phi} \frac{\partial S_1}{\partial \phi} + \frac{\partial^2 S_0}{\partial \phi^2} = 0. \quad (8.71)$$

La ecuación eikonal puede resolverse mediante el método de las características [22]. Sin embargo, su solución es complicada y sólo puede obtenerse información de ella en el caso

de que existan soluciones estacionarias. Aún a pesar de tratar la ecuación de manera perturbativa, el conocer el primer y segundo orden requiere resolver ecuaciones en derivadas parciales no lineales. Como veremos en el siguiente capítulo, dichos órdenes se obtienen de manera muy sencilla si el estudio se realiza sobre la ecuación de Langevin (8.44). Veremos en ese estudio que existe una resonancia a segundo orden en las ecuaciones de la dinámica de los momentos, algo que no es obvio poder calcular a partir de las ecuaciones (8.70) y (8.71).

Más difícil de resolver es el caso en el que el ruido $\eta(t)$ está correlacionado en el tiempo. Entonces, $\eta(t)$ puede construirse como solución de la ecuación diferencial estocástica

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -\gamma \eta_i + \gamma \xi_i(t), \quad (8.72)$$

donde $\xi_i(t)$ es un ruido blanco y $\tau = 1/\gamma$ es el tiempo de correlación. En este caso no existe una ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad de ϕ_i . Pero si para los dos procesos estocásticos ϕ_i y η_i . Repitiendo el mismo razonamiento que antes, la ecuación que se verifica es

$$\frac{\partial P(\phi, \eta, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \phi} [(v(\phi) + \sigma \eta) P(\phi, \eta, t)] - \frac{\partial}{\partial \eta} (\gamma \eta P) - \frac{\gamma^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial \eta^2}. \quad (8.73)$$

Esta ecuación sigue siendo una ecuación integro-diferencial en derivadas parciales, pero en dimensión $d = 2$, lo que la hace más complicada todavía. Como veremos en el capítulo siguiente, la teoría de perturbaciones singulares aplicada directamente sobre la ecuación diferencial estocástica tiene la misma dificultad tanto para (8.55) que para (8.73), lo cual supone una ventaja adicional.

Capítulo 9

Efectos del ruido en la fase sincronizada de osciladores acoplados

Se estudian varios modelos de osciladores acoplados y el efecto del ruido en la fase sincronizada mediante la aplicación directa de técnicas de perturbaciones singulares. Se comprueban numéricamente las predicciones teóricas, encontrando, entre otros resultados, un comportamiento no trivial en el caso de acoplamiento no lineal.

9.1. Introducción

En el capítulo anterior vimos varios ejemplos de sistemas cuya dinámica se describe en términos de colectividades de osciladores acoplados entre sí, y que son analíticamente tratables cuando se realiza la aproximación de campo medio. Aunque varios de ellos son exactamente resolubles en esta aproximación, el estudio general de dichos modelos requiere normalmente partir de perturbaciones en los diferentes parámetros. Pese a todo, el estudio es complicado, ya que normalmente se realiza sobre una ecuación integro-diferencial en derivadas parciales, con lo que sólo el primer orden de perturbaciones puede obtenerse de manera fácil. Nuestro propósito en este capítulo es estudiar de manera general la fase sincronizada de los modelos de campo medio, para lo que haremos uso de la teoría de perturbaciones singulares, la cual, como veremos, es más sencilla si se realiza directamente sobre la ecuación diferencial estocástica correspondiente, permitiendo obtener resultados analíticos incluso en el caso de que el ruido sea correlacionado en el tiempo. Para ello trataremos sistemas en los que el desorden (bien por el ruido o por la diversidad en el sistema) es pequeño y los osciladores están prácticamente sincronizados. En este caso, dado que $\phi_i \simeq \phi_j$, la dinámica del sistema viene determinada por la forma del acoplamiento $\Gamma(\phi)$ cuando $\phi \approx 0$. Sin perder generalidad, en el siguiente apartado presentaremos los dos modelos que representan los dos tipos fundamentales de comportamiento frente al ruido en la fase sincronizada. Sobre ellos, realizamos un análisis de escalas múltiples en el apartado 9.3, comparando los resultados analíticos con simulaciones numéricas. Por último, la sección

9.4 se aplican nuestras predicciones a las oscilaciones RHEED discutidas en el capítulo 7.

9.2. Modelos

En este trabajo, por sencillez, supondremos que los osciladores son unimodales y sólo consideraremos el efecto desincronizador del ruido, es decir, sistemas de la forma

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \omega - f(\phi_i) + \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N \Gamma(\phi_i - \phi_j) + \sigma \eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (9.1)$$

donde ϕ_i es la fase del oscilador i , $\omega > 0$ es la frecuencia del oscilador, κ es la constante de acoplamiento y $f(\phi)$ es una función periódica de período 2π . Cuando $\sigma = 0$, la fase de todos los osciladores es la misma y su dinámica viene dada por la ecuación

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \omega - f(\phi_i) + \kappa \Gamma(0), \quad (9.2)$$

con lo que realizan una oscilación no lineal con período

$$P = \int_0^{2\pi} d\phi \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial t} \right)^{-1}. \quad (9.3)$$

Definimos entonces la frecuencia efectiva de las oscilaciones como

$$\omega_{\text{ef}} = 2\pi/P. \quad (9.4)$$

Dichas oscilaciones sólo tienen lugar cuando la frecuencia típica de cada uno de los osciladores es tal que $\omega + \kappa \Gamma(0) > \omega_c = \max_{\phi \in [0, 2\pi]} f(\phi)$, de manera que si $\omega < \omega_c$ el sistema tiene soluciones estacionarias ϕ_s , que verifican

$$\omega = f(\phi_s) - \kappa \Gamma(0). \quad (9.5)$$

Por ejemplo, en el caso de que $f(\phi) = a \sin(\phi)$ y $\Gamma(0) = 0$ se tiene que $\omega_c = a$ y que $P = 2\pi/\sqrt{\omega^2 - a^2}$ con lo que

$$\omega_{\text{ef}} = \sqrt{\omega^2 - \omega_c^2}, \quad (9.6)$$

mientras que las soluciones estacionarias son

$$\phi_{s,1} = \sin^{-1}(\omega/\omega_c), \quad \phi_{s,2} = \pi - \phi_{s,1}. \quad (9.7)$$

Cuando $\sigma \neq 0$ y $\kappa = 0$, no tendremos una sincronización perfecta ya que el ruido hará que cada oscilador oscile con una frecuencia distinta de ω_{ef} . Sin embargo, cuando el acoplamiento sea suficientemente grande podemos hacer que los osciladores tiendan a sincronizarse de manera que oscilen con frecuencias muy parecidas y distribuidas alrededor de la frecuencia media $\omega_{\text{ef}}(\sigma)$. Para un valor de κ fijo, a medida que el ruido sea más grande, dicha fase sincronizada dejará de ser estable y los osciladores se desincronizarán. En el caso de que $f(\phi) = 0$ y $\Gamma(\phi) = \sin(\phi)$ y en la aproximación de campo medio, es posible ver que el valor de σ para el cual se produce esta transición sincronización-desincronización es $\sigma_c^2 = \kappa$ [137]. En el caso no lineal (es decir $f(\phi) \neq 0$) solamente se puede estudiar el modelo de manera numérica, con el resultado de que la transición tiene lugar para $\sigma_c^2 < \kappa$ [203].

Lo que pretendemos en este capítulo es estudiar el modelo (9.1) en la fase sincronizada y averiguar cuáles son los efectos del ruido en las oscilaciones colectivas. Respecto al caso

determinista, esperamos que cuando $\sigma \neq 0$ el período de las oscilaciones sea diferente de (9.3), y que la frecuencia ω_c para la que se produzca la transición entre la fase estacionaria y oscilante también dependa de σ . Comenzaremos por suponer que σ es pequeño; entonces $\phi_i - \phi_j = \mathcal{O}(\sigma)$, y por tanto el comportamiento en esta fase sincronizada viene determinado por el desarrollo del acoplamiento [204]

$$\Gamma(\phi_j - \phi_i) = \Gamma_1(\phi_j - \phi_i) + \Gamma_2(\phi_j - \phi_i)^2 + \mathcal{O}[(\phi_j - \phi_i)^3]. \quad (9.8)$$

Para que los osciladores tiendan a sincronizarse debemos suponer que $\Gamma_1 > 0$. Del mismo modo, ya que nuestro estudio es perturbativo, estudiaremos sólo el efecto de los dos primeros términos del desarrollo anterior en la dinámica del sistema. Para posterior comparación con modelos físicamente relevantes, elegiremos dos que ejemplifican el desarrollo anterior hasta segundo orden:

- El *modelo lineal*, en el que $\Gamma(\phi_j - \phi_i) = \phi_j - \phi_i$, es decir $\Gamma_1 = 1$ y $\Gamma_i = 0$ para $i > 1$. Como hemos visto este acoplamiento puede obtenerse mediante la aproximación de campo medio de la discretización de operadores lineales como los que aparecen en las ecuaciones sG y xMBE.
- El segundo es el *modelo de Kuramoto con frustración*, en el que $\Gamma(\phi_j - \phi_i) = \sin(\phi_j - \phi_i + \alpha)$ con α una fase constante y positiva. En este caso se tiene que $\Gamma_1 = \cos \alpha$ y $\Gamma_2 = \sin \alpha$. Este tipo de acoplamientos aparece en la aproximación de campo medio de redes de uniones Josephson o para la ecuación de Ginzburg-Landau compleja.

En el primero de los modelos el acoplamiento tiende siempre a sincronizar los osciladores, mientras que en el segundo caso el término Γ_2 hace que la fase de cada uno de ellos sea diferente, aunque es de esperar que la solución sincronizada sea estable si $\Gamma_1 > \sigma \Gamma_2$, lo cual sucede para un intervalo de valores de $\alpha, \sigma > 0$ (véase el apéndice E). Sin embargo, si tomamos $\Gamma_i = 0$ para $i > 2$ en el desarrollo (9.8), los osciladores tienden a separarse indefinidamente y por tanto la fase sincronizada es inestable para cualquier conjunto de parámetros del sistema. Para ver esto, obsérvese que cuando introducimos el desarrollo del acoplamiento hasta segundo orden en (9.1) obtenemos (por simplicidad tomamos $f(\phi) = 0$ y $\omega = 0$)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \kappa \Gamma_1 (\langle \phi \rangle - \phi) + \kappa \Gamma_2 (\langle \phi^2 \rangle + \phi^2 - 2\phi \langle \phi \rangle) + \sigma \eta(t). \quad (9.9)$$

Si denotamos por $\theta = \phi - \langle \phi \rangle$ la fluctuación de la fase ϕ , entonces la ecuación para θ es

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\kappa \Gamma_1 \theta + \kappa \Gamma_2 (\theta^2 - \langle \theta^2 \rangle) + \sigma \eta(t). \quad (9.10)$$

La ecuación anterior es una ecuación de Langevin del tipo (2.126), donde el hamiltoniano efectivo no está acotado inferiormente. Esto significa que aunque $\langle \theta \rangle = 0$ se tiene que $\langle \theta^2 \rangle \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$ y por tanto los osciladores tienden a desincronizarse [157]. En el caso general $\Gamma(\phi)$ es una función que está acotada inferiormente y esto no sucede, como por ejemplo cuando $\Gamma(\phi_j - \phi_i) = \sin(\phi_j - \phi_i)$. En lo que sigue, supondremos que $\Gamma(\phi)$ es una función acotada inferiormente.

En nuestro estudio supondremos que $f(\phi)$ es una función periódica acotada cualquiera. Por simplicidad tomaremos $f(\phi) = a \sin(\phi)$. Por último, el método analítico que utilizaremos tiene una ventaja adicional, que es la de no requerir que el ruido sea blanco. De hecho, lo único que pediremos al proceso estocástico η_i es que sea gaussiano y estacionario.

Como sabemos por el teorema de Doob (véase el capítulo 2) el único proceso gaussiano y estacionario es el de Ornstein-Uhlenbeck, definido por la ecuación

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -\gamma \eta_i + \gamma \xi_i(t), \quad \eta(-\infty) = 0, \quad (9.11)$$

donde $\xi_i(t)$ es un ruido blanco local, i.e. $\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t')$. En este caso el tiempo de correlación del ruido es $\tau = 1/\gamma$.

El primer paso hacia un tratamiento analítico de las ecuaciones (9.1) y (9.11) consiste en tomar el límite $N \rightarrow \infty$. Como vimos en el capítulo anterior y suponiendo que las correlaciones entre los osciladores tienden a cero, en este límite la suma sobre todos los osciladores se convierte en el valor medio sobre las realizaciones del ruido. Concretamente, para los dos modelos antes mencionados, obtenemos las ecuaciones estocásticas

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \omega - a \sin \phi + \kappa [\langle \phi \rangle - \phi] + \sigma \eta(t), \quad (9.12)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \omega - a \sin \phi_i + \kappa [\cos(\phi - \alpha) \langle \sin \phi \rangle - \sin(\phi - \alpha) \langle \cos \phi \rangle] + \sigma \eta(t), \quad (9.13)$$

con lo que hemos reducido N ecuaciones a una sola, pero autoconsistente, ya que ϕ depende de los valores medios de funciones de ϕ . Las ecuaciones anteriores son sólo válidas cuando el número de osciladores $N \rightarrow \infty$. En el caso de que N sea finito, (9.12) y (9.13) son tan sólo una aproximación de orden $N^{-1/2}$ como se puede comprobar haciendo análisis de tamaño finito. En nuestras simulaciones $N \sim 10^4$ - 10^5 , lo cual implica un error del orden de 10^{-2} - 10^{-3} al comparar con el cálculo analítico [137].

9.3. Análisis de escalas múltiples

En este apartado describimos la técnica utilizada para estudiar la ecuación (9.1) cuando $\sigma \rightarrow 0$ y que se puede encontrar en [163]. En la literatura este problema ha sido tratado bien utilizando la ecuación de Fokker-Planck [22], bien con técnicas de promedio sobre oscilaciones rápidas [204]. En ambos casos los autores sólo son capaces de obtener el primer orden de la aproximación, que conduce, en valor medio, a la misma dinámica que cuando $\sigma = 0$, siendo la única diferencia el hecho de que la colectividad de osciladores no está perfectamente sincronizada y las frecuencias se distribuyen de manera gaussiana alrededor de $\omega_{\text{ef}}(0) \equiv (\omega^2 - \omega_c^2)^{1/2}$ con varianza proporcional a σ^2 . Sin embargo, como veremos, el movimiento determinista se ve alterado por el ruido debido a una resonancia a segundo orden, lo que hace que la frecuencia de los osciladores sea distinta de $\omega_{\text{ef}}(0)$. En el caso de que $\sigma \neq 0$ podemos definir la frecuencia efectiva del sistema como

$$\omega_{\text{ef}}(\sigma) = \overline{\frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t}}, \quad (9.14)$$

donde la barra significa promedio a tiempos largos¹. Cuando $\sigma = 0$ esta definición es equivalente a la dada por la ecuación (9.4). Además, veremos que la frecuencia crítica de desincronización, $\omega_c(0) \equiv a$, se ve modificada cuando $\sigma \neq 0$, algo no estudiado hasta ahora.

¹Si se conoce el período T de las oscilaciones la definición anterior es la misma que tomar

$$\omega_{\text{ef}}(\sigma) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} dt \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t}, \quad (9.15)$$

cuando $t \rightarrow \infty$. En general, T puede ser cualquier intervalo de tiempo donde $T \gg 1$.

9.3.1. Acoplamiento lineal

Empezamos por estudiar la transición entre las fases estacionaria y otra periódica para la ecuación (9.12). Como siempre, elegimos un parámetro de orden para caracterizar las distintas fases. Dado que, cuando $\sigma = 0$, en la fase estacionaria $\frac{\partial\phi}{\partial t} = 0$ mientras que $\frac{\partial\phi}{\partial t} \neq 0$ cuando estamos en la fase periódica, generalizamos de manera natural esta definición tomando el valor medio de dicha cantidad, es decir, nuestro parámetro de orden será $\frac{\partial\langle\phi\rangle}{\partial t}$. Esta definición da los mismos resultados para el valor de $\omega_c(\sigma)$ que si tomamos como parámetro ω_{ef} : en la fase estacionaria $\omega_{\text{ef}} = 0$, mientras que $\omega_{\text{ef}} \neq 0$ en la fase periódica.

En el límite $\sigma \rightarrow 0$, podemos desarrollar tanto ϕ como la frecuencia crítica en potencias de σ

$$\phi = \phi^{(0)} + \sigma\phi^{(1)} + \sigma^2\phi^{(2)} + \mathcal{O}(\sigma^3), \quad (9.16)$$

$$\omega_c = a + \sigma a^{(1)} + \sigma^2 a^{(2)} + \mathcal{O}(\sigma^3). \quad (9.17)$$

Sustituyendo estas dos expresiones en (9.12), igualando coeficientes de iguales órdenes en σ e imponiendo que $\langle\frac{\partial\phi^{(i)}}{\partial t}\rangle = 0$ podemos calcular las correcciones $a^{(i)}$ a ω_c

$$\frac{\omega_c(\sigma)}{a} = 1 - \frac{\sigma^2}{4\kappa(\kappa\tau + 1)} + \frac{\sigma^4}{32\kappa^4} \left[\frac{\kappa^2 - a^2}{(\kappa\tau + 1)^2} + \mathcal{O}(\tau) \right] + \mathcal{O}(\sigma^6). \quad (9.18)$$

De esta expresión vemos inmediatamente que la transición ocurre para un valor de $\omega_c(\sigma)$ que es menor que en el caso determinista $\omega_c(0) = a$. Este efecto es fácil de entender: el ruido ayuda a los osciladores a sobrepasar la barrera de potencial $f(\phi)$ como en el caso de activación térmica.

Otra conclusión importante es que para un conjunto de parámetros fijo, el tiempo de correlación τ controla esta transición: mientras que para valores pequeños de τ los osciladores están en la fase oscilante, a medida que aumentamos τ hacemos que los osciladores se paren. En la figura 9.1 se representa cómo variando τ podemos pasar de una fase a otra. Este tipo de transiciones son un fenómeno puramente de no equilibrio y se producen cuando se varían las propiedades del ruido (en este caso el tiempo de correlación). La bibliografía sobre este tema es muy amplia y a este tipo de fenómenos se los denomina *transiciones de fase inducidas por ruido*. Aunque tradicionalmente este tipo de transiciones han sido estudiadas para sistemas cero-dimensionales [96], la generalización a dimensión $d > 0$ da lugar también a diferentes tipos de transiciones de fase bien variando el tiempo de correlación [72] y/o la fuerza del ruido [29].

Con la expresión (9.18) podemos calcular hasta orden σ^2 el valor τ_c para el que se produce la transición entre la fase periódica y estacionaria. Para una ω fija, el tiempo de correlación crítico viene dado por el valor de τ para el que $\omega_c(\sigma) = \omega$. Invirtiendo la ecuación (9.18) obtenemos

$$\tau_c = \frac{a\sigma^2}{4\kappa^2(a - \omega)} - \frac{1}{\kappa}. \quad (9.19)$$

Para $\tau > \tau_c$ el sistema se encuentra en la fase estacionaria y por tanto $\omega_{\text{ef}} = 0$, mientras que para $\tau < \tau_c$ la fase oscila con una frecuencia efectiva que, a primer orden en σ , viene dada por la expresión (9.6). Como vimos en el capítulo 2, cuando $\tau \rightarrow 0$, $\eta(t)$ tiende a un ruido blanco, mientras que si $\tau \rightarrow \infty$ el ruido es nada más que una constante (igual a cero) y por tanto el problema se vuelve determinista. Como vemos en la figura 9.1 la transición a una fase estacionaria se produce cuando $\eta(t)$ tiende a un proceso determinista.

Una vez que conocemos los valores de ω para los cuales se produce una transición entre una fase estacionaria y otra oscilante, vamos a estudiar las propiedades de esta última. Si

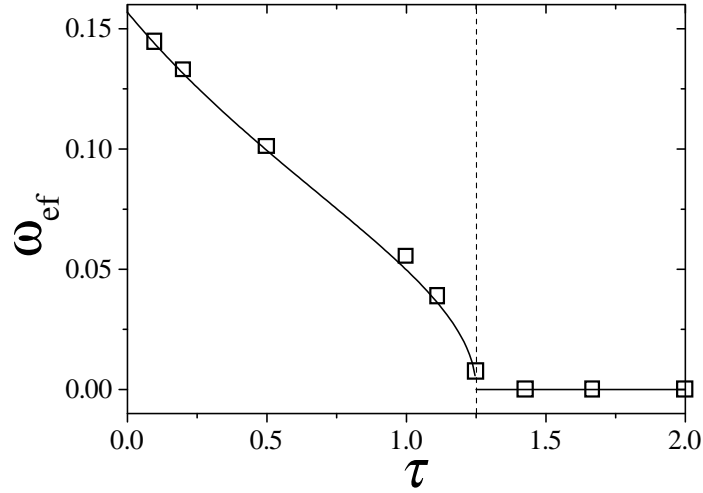


Figura 9.1: Frecuencia efectiva en función del tiempo de correlación τ . La línea continua corresponde a la expresión $\omega_{\text{ef}} = (\omega^2 - \omega_c^2(\sigma))^{1/2}$ con $\omega_c(\sigma)$ dada por la ecuación (9.18) y los cuadrados a simulaciones numéricas del modelo (9.12) y los cuadrados son simulaciones numéricas con $\omega = 0,99$, $a = 1$ y $\sigma = 0,3$. Con estos valores se tiene que $\tau_c = 1,25$, indicado mediante la línea a trazos.

suponemos que $\omega > \omega_c$ y desarrollamos ϕ como antes, obtenemos el siguiente conjunto de ecuaciones igualando coeficientes de distintas potencias de σ

$$\frac{\partial \langle \phi^{(0)} \rangle}{\partial t} = \omega - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle, \quad (9.20)$$

$$\frac{\partial \langle \phi^{(1)} \rangle}{\partial t} = -\langle \phi^{(1)} \rangle (\kappa + a \cos \langle \phi^{(0)} \rangle), \quad (9.21)$$

$$\frac{\partial \langle (\phi^{(1)})^2 \rangle}{\partial t} = -2 \langle (\phi^{(1)})^2 \rangle (\kappa + a \cos \langle \phi^{(0)} \rangle) + 2\zeta(t), \quad (9.22)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \frac{\gamma}{2} - \zeta (\kappa + \gamma + a \cos \langle \phi^{(0)} \rangle), \quad (9.23)$$

$$\frac{\partial \langle \phi^{(2)} \rangle}{\partial t} = -a \langle \phi^{(2)} \rangle \cos \langle \phi^{(0)} \rangle + a \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle}{2} \sin \langle \phi^{(0)} \rangle, \quad (9.24)$$

donde $\zeta = \langle \phi^{(1)} \eta \rangle$. La ecuación (9.21) tiene como solución $\langle \phi^{(1)} \rangle = 0$, luego a primer orden en σ , las ecuaciones (9.20) y (9.22) nos dicen que el movimiento de los osciladores en valor medio es el mismo que el determinista y que la varianza de la colectividad

$$w^2(t) = \langle (\phi - \langle \phi \rangle)^2 \rangle = \sigma^2 \langle (\phi^{(1)})^2 \rangle + \mathcal{O}(\sigma^3), \quad (9.25)$$

oscila con respecto al tiempo. Éste es el resultado en primer orden que también es posible obtener con las otras aproximaciones mencionadas [22, 204], aunque con bastante dificultad y sólo si $\tau = 0$. En nuestro caso, este formalismo permite incluso el obtener este orden cuando $\tau \neq 0$.

A segundo orden, la solución de la ecuación (9.24) es explícitamente

$$\langle \phi^{(2)} \rangle = \left[\int_0^t dt \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle}{\omega - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle} \right] (\omega - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle). \quad (9.26)$$

Mientras que el término entre paréntesis oscila, el que se encuentra entre corchetes crece con respecto al tiempo. Para verlo basta con darse cuenta de que

$$\int_t^{t+T} dt \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle \sin \langle \phi^{(0)} \rangle}{\omega - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle} = \int_t^{t+T} dt \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle}{a} \left[\frac{1}{1 - \frac{a}{\omega} \sin \langle \phi^{(0)} \rangle} - 1 \right] > 0, \quad (9.27)$$

siempre que $\omega > a$. Esto implica que $\sigma^2 \langle (\phi^{(1)})^2 \rangle \sim \mathcal{O}(1)$ y nuestro desarrollo (9.16) no es válido.

La manera de resolver este problema con perturbaciones singulares es bien conocida en ecuaciones diferenciales deterministas. Al igual que en ese caso, tomamos una nueva escala de tiempo $t_1 = \mu(\sigma)t_0$, donde $t_0 = t$. De entre las diferentes maneras en las que podemos tratar con las dos escalas de tiempo presentes en nuestras ecuaciones, t_0 y t_1 , elegimos el método de Linstedt [109] en el que se supone que $\phi^{(i)}$ depende del tiempo a través de una combinación lineal de las dos escalas de tiempo $t^* = t_0 + t_1$. Por último, utilizando análisis dimensional² es fácil ver que el término de ruido es de orden uno cuando $\mu(\sigma) = \nu\sigma^2$. Introduciendo esta nueva escala en las ecuaciones anteriores tenemos que

$$\frac{\partial \langle \phi^{(0)} \rangle}{\partial t^*} = \omega - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle; \quad (9.28)$$

$$\frac{\partial \langle \phi^{(2)} \rangle}{\partial t^*} = -a \langle \phi^{(2)} \rangle \cos \langle \phi^{(0)} \rangle + a \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle}{2} \sin \langle \phi^{(0)} \rangle - \nu\omega - \nu a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle. \quad (9.29)$$

La constante ν se fija utilizando la condición de solubilidad de la ecuación (9.29). Reescribimos dicha ecuación de la forma

$$\mathcal{L} \langle \phi^{(2)} \rangle = a \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle}{2} \sin \langle \phi^{(0)} \rangle - \nu\omega - \nu a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle, \quad (9.30)$$

donde

$$\mathcal{L} \langle \phi^{(2)} \rangle = \frac{d \langle \phi^{(2)} \rangle}{dt^*} + a \langle \phi^{(2)} \rangle \cos \langle \phi^{(0)} \rangle. \quad (9.31)$$

La condición de solubilidad supone que la parte no homogénea de la ecuación (9.30) debe ser ortogonal a las autofunciones del núcleo del operador adjunto de \mathcal{L} , que es

$$\mathcal{L}^\dagger \langle \phi^{(2)} \rangle = \frac{d \langle \phi^{(2)} \rangle}{dt^*} - a \langle \phi^{(2)} \rangle \cos \langle \phi^{(0)} \rangle. \quad (9.32)$$

La solución de $\mathcal{L}^\dagger y(t) = 0$ tiene la forma

$$y(t) = A \exp \left\{ a \int_0^t \cos \langle \phi^{(0)} \rangle dt' \right\} = A \frac{\omega}{\omega - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle}, \quad (9.33)$$

donde A es una constante, con lo que aplicando la condición de solubilidad tenemos

$$\int_{t^*}^{t^*+T^*} dt^* \left[a \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle}{2} \sin \langle \phi^{(0)} \rangle - \nu\omega - \nu a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle \right] \frac{\omega}{\omega - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle} = 0, \quad (9.34)$$

²La forma en que μ escala con σ se puede obtener imponiendo que la dinámica sea exclusivamente debida al ruido, es decir buscando la escala de tiempo t_1 en la cual $\frac{\partial \phi}{\partial t_1}$ y $\sigma \eta(t_1)$ sean del mismo orden de magnitud cuando $\sigma \ll 1$.

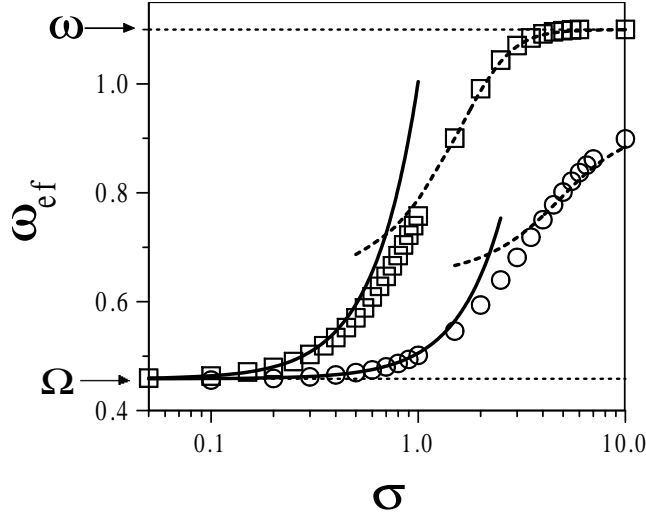


Figura 9.2: Comparación entre las aproximaciones (9.37) hasta orden σ^2 (líneas gruesas) y (9.38) hasta orden a^2 (líneas a trazos) con las simulaciones numéricas de la ecuación (9.12) para $N = 5000$, $a = 1$, $\kappa = 1$, $\omega = 1,1$ y $\tau = 0$ (cuadrados) y $\tau = 10$ (círculos).

donde T^* es el período de las oscilaciones de $\langle \phi^{(0)} \rangle$, es decir $T^* = 2\pi/\Omega$ con $\Omega = \omega_{\text{ef}}(0) = (\omega^2 - a^2)^{1/2}$. Simplificando la ecuación anterior obtenemos la expresión de ν como función de $\langle \phi^{(0)} \rangle$:

$$\nu = \frac{a}{2T^*} \int_{t^*}^{t^*+T^*} dt^* \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle \sin \langle \phi^{(0)} \rangle}{\omega - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle}. \quad (9.35)$$

La ecuación anterior nos da la corrección en primer orden del período de las oscilaciones, ya que como $t^* = t(1 + \nu\sigma^2)$, entonces

$$P = \frac{P^*}{1 + \nu\sigma^2} = \frac{2\pi}{\Omega(1 + \nu\sigma^2)}. \quad (9.36)$$

Con este valor, la frecuencia efectiva de las oscilaciones es

$$\omega_{\text{ef}} = \Omega[1 + \nu\sigma^2 + \mathcal{O}(\sigma^4)]. \quad (9.37)$$

Utilizando la ecuación (9.27) vemos que $\nu > 0$ para el caso del acoplamiento lineal siempre que $\omega > a$, es decir, el efecto del ruido sobre el movimiento colectivo de los osciladores es aumentar la frecuencia efectiva de dicho movimiento. Para ver la precisión de nuestra aproximación perturbativa comparamos la ecuación (9.37) con simulaciones numéricas de la ecuación (9.12) (véase la figura 9.2). Como vemos, la expresión hasta orden σ^2 es válida hasta $\sigma \simeq 0,5$ para ruido blanco. El significado del efecto del ruido es claro: cuando $\sigma \neq 0$ el ruido ayuda a los osciladores a saltar por encima de las barreras de potencial. Como este efecto es acumulativo (ya que se produce en cada intervalo $[t, t + P]$), esto da lugar a una corrección efectiva en el período de las oscilaciones. Cuando $\sigma \rightarrow \infty$ el ruido renormaliza de manera efectiva el potencial y la frecuencia efectiva es igual a ω , es decir, el sistema se comporta como si $f(\phi) = 0$. El efecto del ruido es pues determinar una nueva escala de tiempos, y hacer que el período de las oscilaciones dependa de σ . En la figura 9.3 mostramos el efecto de esta corrección efectiva. Además, como vemos en la figura 9.2, la aproximación (9.37) también es válida para ruido de color hasta $\sigma \simeq 1,0$.

Por último, en la figura 9.4 representamos la distribución de frecuencias de los osciladores. Como vemos, dicha distribución está centrada en ω_{ef} y tiene cierta anchura. Esto

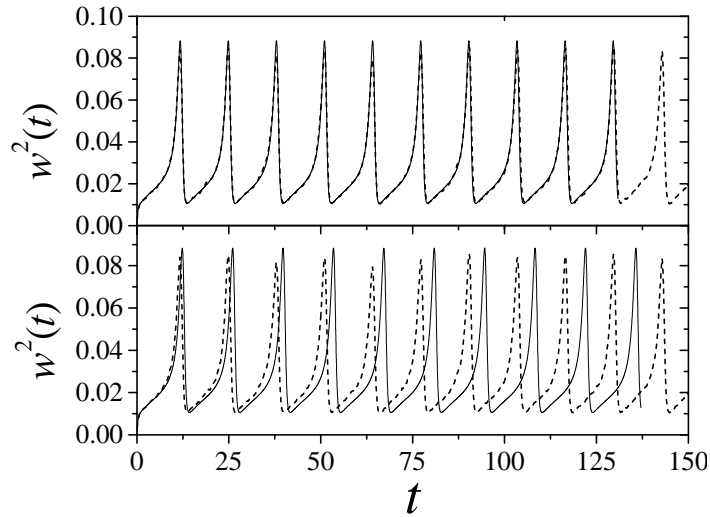


Figura 9.3: Comparación entre los resultados a primer y segundo orden de perturbaciones (línea continua) con las simulaciones numéricas de la ec. (9.12) con $\sigma = 0,2$, $\kappa = a = 1$ y $\tau = 0$ (línea a trazos). En el panel de abajo comparamos con la predicción a primer orden dada por la ecuación (9.25) observando una claro desfase entre ambas. En el panel de arriba, se ha hecho la corrección a segundo orden tomando $t = t^*/(1 + \nu\sigma^2)$ y la ecuación (9.25).

nos dice que la sincronización perfecta de los osciladores no es posible y que la colectividad oscila con frecuencias parecidas, pero no iguales.

Para completar el estudio, realizamos la misma teoría de perturbaciones, pero ahora suponemos que $\sigma \gg \kappa, \omega$. De este modo, podemos aproximar la solución de la ecuación (9.12) mediante perturbaciones en el parámetro a , ya que ahora el potencial se convierte en una perturbación. Repitiendo el mismo procedimiento que antes, hasta orden a^2 obtenemos que

$$\begin{aligned} \omega_{\text{eff}} = & \omega - \frac{a^2}{2} \exp\left(-\frac{\tilde{\sigma}^2}{2\kappa}\right) \left[\frac{\kappa^2\omega}{\kappa^2\omega^2 + \omega^4} + \right. \\ & \left. + \int_0^\infty \exp\left\{\frac{\tilde{\sigma}^2(\kappa\tau e^{-s/\tau} - e^{-\kappa s})}{2\kappa(\kappa\tau - 1)} - \kappa s\right\} \sin \omega s \, ds \right] + \mathcal{O}(a^4), \end{aligned} \quad (9.38)$$

donde $\tilde{\sigma} = \sigma/\sqrt{\kappa\tau + 1}$. Al igual que antes, en la figura 9.2 observamos que la aproximación (9.38) es muy precisa para valores iguales o mayores que $\sigma \simeq 2$. Queremos resaltar que, exceptuando el intervalo $0,5 \leq \sigma \leq 2$, las aproximaciones (9.37) y (9.38) describen muy bien la solución de la ecuación (9.12). Podemos concluir entonces que el efecto del ruido en el caso del acoplamiento lineal es doble: en primer lugar hace que la frecuencia efectiva sea mayor que en el caso determinista y que la transición entre la fase estacionaria y oscilante se modifique también. En segundo lugar el ruido provoca que el sistema no se encuentre en perfecta sincronización, lo que se refleja en el hecho de que las frecuencias de los osciladores son parecidas a ω_{ef} pero no iguales entre ellas. Además, en el modelo lineal no hay una transición de fase entre la fase sincronizada y la no sincronizada para un valor finito de σ . Solamente cuando $\sigma \rightarrow \infty$ tenemos que $\omega_{\text{ef}} \rightarrow \omega$ y el sistema se desincroniza.

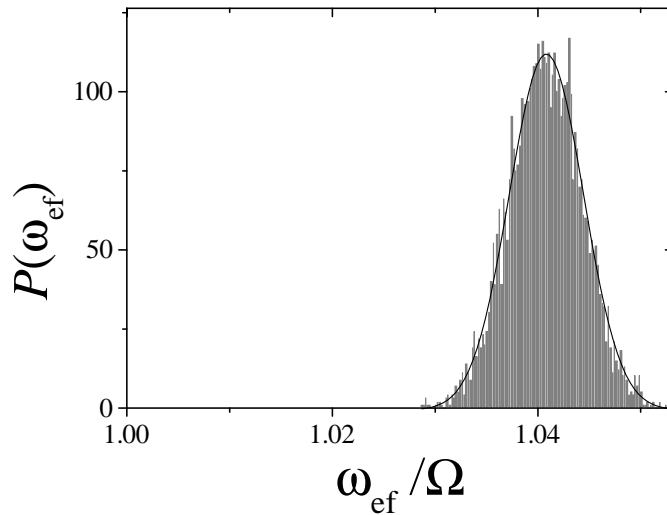


Figura 9.4: Histograma de la distribución de probabilidad de frecuencias efectivas obtenido mediante simulaciones de la ecuación (9.12). La línea gruesa es una aproximación gaussiana. Los parámetros utilizados son $N = 5000$, $a = \kappa = 1$, $\omega = 1,1$ y $\sigma = 0,1$.

9.3.2. Acoplamiento no lineal

En el apartado anterior hemos visto que el hecho de que $\Gamma_1 \neq 0$ da lugar a correcciones en la frecuencia crítica ω_c y en la efectiva de las oscilaciones ω_{ef} . En este apartado lo que pretendemos es estudiar cómo se modifican estas predicciones en el caso de que el acoplamiento sea no lineal, concretamente el caso de la ecuación (9.13). En este caso se tiene que $\Gamma_1 = \cos \alpha$, que supondremos siempre distinto de cero y positivo, con lo que $0 \leq \alpha < \pi/2$. La diferencia principal con el acoplamiento lineal se puede resumir en los siguientes aspectos:

- En primer lugar $\Gamma_i \neq 0$ para ciertos $i > 1$, por lo que tendremos otros efectos a órdenes superiores en σ . El que el acoplamiento sea periódico en $\phi_j - \phi_i$ dará lugar a una transición entre una fase sincronizada y otra desincronizada para un valor finito de σ , al contrario que en el caso anterior donde dicha transición sólo tenía lugar cuando $\sigma \rightarrow \infty$.
- En segundo lugar, en presencia de frustración ($\alpha \neq 0$), $\Gamma_2 = \kappa \sin \alpha \neq 0$ y tenemos un efecto de desincronización en el sistema.

Sin frustración

En el caso $\alpha = 0$, nuestro análisis perturbativo cuando $\sigma \rightarrow 0$ da lugar al mismo conjunto de ecuaciones (9.20)-(9.24). Esto se debe al hecho de que $\Gamma_1 = 1$ y $\Gamma_2 = 0$ al igual que en el caso lineal, es decir, hasta orden σ^2 el acoplamiento es el mismo cuando $\sigma \rightarrow 0$. Pero a medida que aumentamos σ , observamos una diferencia entre el modelo lineal y el de Kuramoto. Dado que el modelo (9.13) tiene la simetría $\phi_j - \phi_i \leftrightarrow \phi_j - \phi_i + 2n\pi$ para cualquier entero n , son posibles diferencias de módulo 2π entre osciladores, aunque son poco probables cuando $\sigma \rightarrow 0$. Esto hace que la aproximación lineal del operador sea buena para $\sigma \rightarrow 0$, pero existe un valor σ_c a partir del cual estas diferencias modulo 2π son muy probables y el sistema se desincroniza. En el modelo de Kuramoto con $a = 0$ se sabe de manera analítica que $\sigma_c^2 = \kappa$ [137], mientras que $\sigma_c^2 < \kappa$ para $a \neq 0$ [204]. De todas

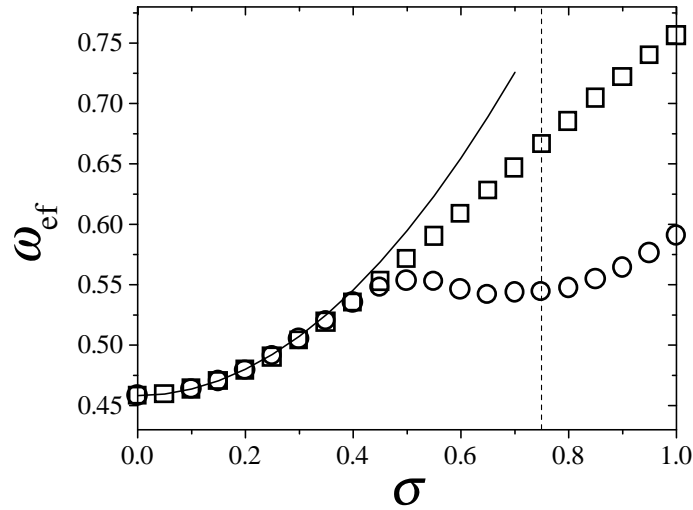


Figura 9.5: Comparación de los valores numéricos de ω_{ef} para el acoplamiento lineal (cuadrados) y de Kuramoto (círculos) con la aproximación (9.37) para σ pequeña. Los parámetros son los mismos que en la figura 9.2 con $\tau = 0$. Nótese que la transición sincronización-desincronización para el modelo de Kuramoto ocurre para $\sigma \simeq 0,75$ en nuestras unidades, marcada con la línea a trazos (véase el texto y figura 9.7).

maneras, hasta σ_c nuestra aproximación (9.37) da una descripción bastante precisa de la frecuencia efectiva, como podemos ver en la figura 9.5.

El parámetro de orden para determinar la transición entre la fase sincronizada y desincronizada en el modelo de Kuramoto (si $f(\phi) = 0$) es

$$\rho e^{i\psi} = \langle e^{i\phi} \rangle. \quad (9.39)$$

En la fase sincronizada, ρ oscila alrededor de un valor no nulo, mientras que $\rho = 0$ en la desincronizada. En la figura 9.6 comparamos el valor numérico de ρ con el resultado de nuestra aproximación hasta orden σ^2

$$\rho^2 = 1 - \sigma^2 \langle (\phi^{(1)})^2 \rangle + \mathcal{O}(\sigma^3). \quad (9.40)$$

El acuerdo es muy bueno hasta el valor $\sigma \simeq 0,5$. Cuando $f(\phi) \neq 0$, el parámetro que se estudia para ver dónde se produce la transición es $\delta\rho$, definido como

$$\delta\rho = \left| \overline{\rho e^{i\psi}} - \overline{\rho e^{i\psi}} \right|, \quad (9.41)$$

donde la barra significa promedio para tiempos largos. En la figura 9.7 hemos estudiado numéricamente los valores de este parámetro: en la fase sincronizada, ρ oscila y por tanto $\delta\rho \neq 0$, mientras que en la fase desincronizada ρ no oscila aunque tiende a un valor constante e igual a $\bar{\rho}$, con lo que $\delta\rho \simeq 0$. Como vemos en la figura 9.7 la transición se produce para $\sigma_c^2 = \kappa = 1$ cuando $a = 0$ y aproximadamente para $\sigma_c \simeq 0,75$ en el caso de que $a = 1$ y $\tau = 0$, y para $\sigma_c \simeq 1,8$ cuando $a = 1$ y $\tau = 10$.

Con frustración

En los dos casos analizados hasta ahora, acoplamiento lineal y de Kuramoto sin frustración, el efecto del ruido lo podemos considerar más o menos trivial: ayuda al movimiento en la fase oscilante debido a las fluctuaciones aleatorias. Sin embargo, este razonamiento intuitivo no describe la situación genérica. Los acoplamientos antisimétricos, es decir, aquéllos

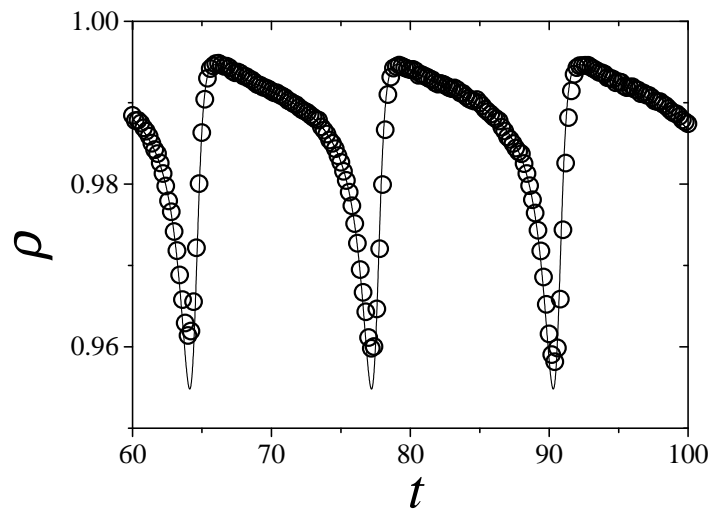


Figura 9.6: Comparación entre el valor de ρ obtenido mediante simulaciones de la ecuación (9.13) con $\sigma = 0,2$, $\kappa = a = 1$ y $\tau = 0$ (círculos) y la expresión analítica (9.40) hasta orden σ^2 (línea continua).

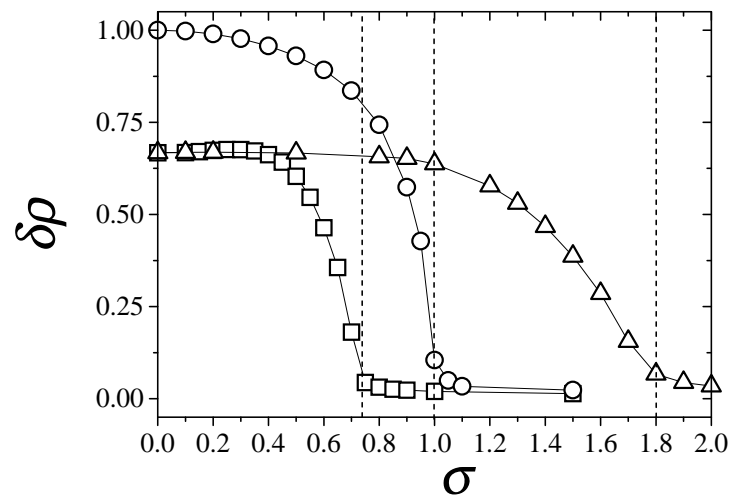


Figura 9.7: Comparación entre los valores de $\delta\rho$ para el modelo de Kuramoto sin frustración en el caso $a = 0$ y $\tau = 0$ (círculos), $a = 1$ y $\tau = 0$ (cuadrados) y $a = 1$ y $\tau = 10$ (triángulos). Las líneas verticales corresponden a los puntos en los que se produce la transición. Los parámetros utilizados son $N = 5000$ y $\omega = 1,1$.

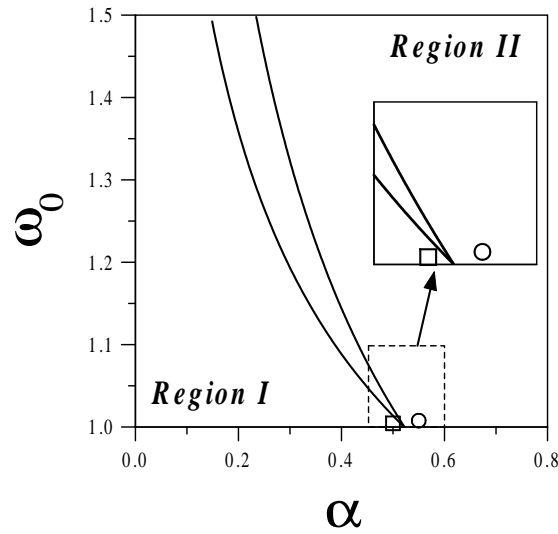


Figura 9.8: Diagrama del espacio de parámetros. Las líneas gruesas corresponden a los valores para los que $\nu_\alpha = 0$ para $\tau = 10$ (izquierda) y $\tau = 0$ (derecha). La región I corresponde a aquellos valores para los que $\nu_\alpha > 0$ y la región II para los que $\nu_\alpha < 0$. El cuadrado y el círculo representan los dos conjuntos de parámetros utilizados en la figura 9.9. El detalle es una ampliación de la zona alrededor de dichos puntos.

en los que $\Gamma(-\phi) = -\Gamma(\phi)$, tienden a anular la diferencia entre las fases de los osciladores (al menos en la fase sincronizada, como vimos en el caso de acoplamiento lineal o no lineal sin frustración). Cuando $\alpha \neq 0$ el acoplamiento no es antisimétrico y esto induce cierta frustración en nuestro sistema. Los osciladores pueden todavía estar sincronizados, pero sólo para un pequeño intervalo de valores de α que, obviamente, incluye $\alpha = 0$ como podemos ver en el apéndice E. Esto es debido a que la solución fuera de fase, es decir $\phi_i = \phi_j - \alpha$, es también posible.

Cuando tenemos este tipo de acoplamientos el ruido compite con la frustración inducida por α y puede ser que el efecto de activación que hemos visto hasta ahora desaparezca. Repitiendo el cálculo perturbativo cuando $\alpha \neq 0$ vemos que precisamente esto es lo que sucede en el límite $\sigma \rightarrow 0$. En este caso obtenemos una corrección a segundo orden igual que (9.37), pero donde ν depende de α y vale

$$\nu_\alpha = \frac{1}{2T} \int_0^T \frac{\langle (\phi^{(1)})^2 \rangle (a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle - 2\kappa \sin \alpha)}{\omega_0 - a \sin \langle \phi^{(0)} \rangle} dt, \quad (9.42)$$

con $\omega_0 = \omega + \kappa \sin \alpha$ es la frecuencia efectiva cuando $\sigma = 0$. A diferencia del caso lineal o de Kuramoto sin frustración, ν_α puede ser positivo o negativo: cuando $\alpha < \alpha_c \equiv \sin^{-1}(1/2\kappa)$, ν_α puede ser positivo o negativo dependiendo del valor de ω , mientras que cuando $\alpha > \alpha_c$, $\nu_\alpha < 0$ siempre. Esto divide el espacio de parámetros (ω, α) en dos regiones, tal y como hemos representado en la figura 9.8. En la región I $\nu_\alpha > 0$ y por tanto el efecto del ruido es ayudar a las oscilaciones, mientras que $\nu_\alpha < 0$ en la región II con lo que el ruido obstaculiza el movimiento de los osciladores. Variando los parámetros de nuestro sistema podemos pasar de un comportamiento a otro. Un ejemplo de este cambio se recoge en la figura 9.9.

Para entender por qué para diferentes parámetros (ω_0, α) el sistema responde de diferente manera al ruido, debemos observar que, cuando el sistema tiene frustración ν_α es la diferencia de dos términos. El origen del primero de ellos se vio en el apartado anterior y se debe a que el ruido ayuda a las oscilaciones mediante un efecto de activación para sobrepasar

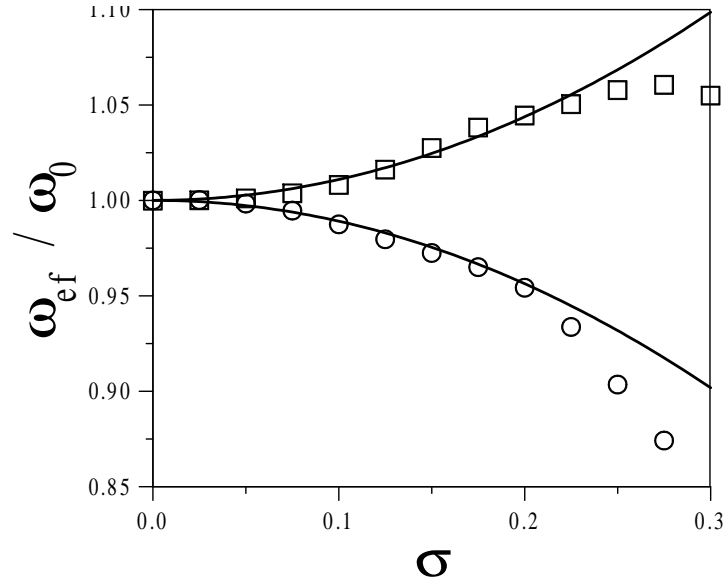


Figura 9.9: Comparación de los valores numéricos de ω_{ef} para $\omega_0 = 1,006$, y $\alpha = 0,5$ (cuadrados) y $\omega_0 = 1,01$ y $\alpha = 0,55$ (círculos) con las aproximaciones analíticas (líneas continuas) dadas por las ecuaciones (9.37) y (9.42). Los parámetros utilizados son $N = 10000$, $\tau = 0$ y $\kappa = 1$.

las barreras de potencial. Para entender el segundo término, observemos que sustituyendo el desarrollo (9.8) en (9.1), conservando sólo el término de Γ_2 y tomando valores medios,

$$\frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} = \left\langle \sum_{j=1}^N \Gamma_2 (\phi_j - \phi_i)^2 \right\rangle = 2\Gamma_2 w^2(t), \quad (9.43)$$

donde $w^2(t)$ viene dada por la ecuación (9.25). Cuando el acoplamiento es el de Kuramoto con frustración $\Gamma_2 = -\frac{1}{2} \sin \alpha$. En el caso determinista $w^2 = 0$ y por tanto el efecto de un $\Gamma_2 \neq 0$ es irrelevante. Sin embargo, cuando $\sigma \neq 0$ tenemos que $w(t) \neq 0$, con lo que la ecuación (9.43) da una contribución a la frecuencia efectiva que es negativa debido a que Γ_2 lo es. De este modo es más claro que el ruido da lugar a una resonancia a segundo orden ya que $w^2(t) \sim \mathcal{O}(\sigma^2)$. Este efecto es conocido en el lenguaje del crecimiento de superficies. Como vimos, la aproximación de fase de osciladores da lugar a la ecuación de KPZ (8.19) cuando tenemos en cuenta una distribución espacial de los mismos. Es bien conocido que en dicha ecuación, debido a que $(\nabla_d \phi_i)^2 \geq 0$, existe una *velocidad de exceso*, que hace que la superficie crezca independientemente de si existe un flujo externo de partículas [12]. En nuestra aproximación de campo medio dicha velocidad de exceso es proporcional a la rugosidad, pero el efecto es el mismo: independientemente de la frecuencia de cada oscilador, el término (9.43) da lugar a una velocidad efectiva en la colectividad de osciladores y rompe la simetría de invariancia temporal del sistema.

Por último, como vemos en la figura 9.10 la distribución de probabilidad de las frecuencias efectivas es una gaussiana desplazada hacia la derecha o hacia la izquierda respecto a la determinista, dependiendo de la región del espacio de parámetros en la que nos encontremos y con varianza proporcional a σ en ambos casos.

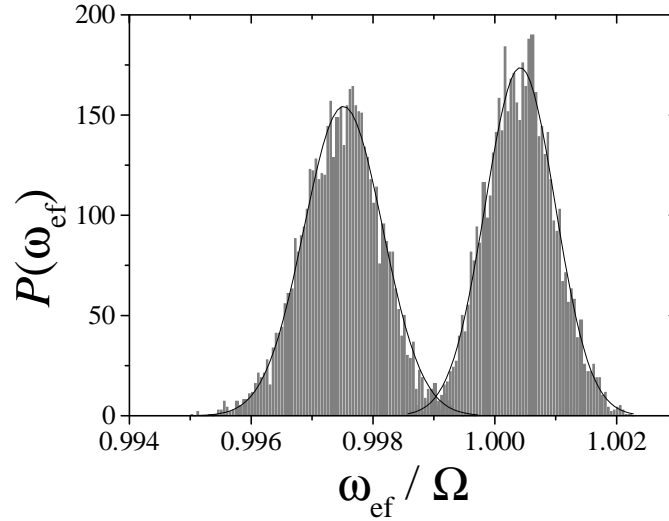


Figura 9.10: Histograma de frecuencias efectivas obtenido mediante simulaciones de la ecuación (9.13) con $\alpha = 0,5$ (derecha) y $\alpha = 0,55$ (izquierda). La línea gruesa es un ajuste a una gaussiana en cada caso. Los parámetros utilizados son $N = 5000$, $a = \kappa = 1$, $\omega_0 = 1,1$ y $\sigma = 0,1$.

9.4. Comparación con las oscilaciones RHEED

En el capítulo 7 vimos que, como consecuencia del crecimiento capa a capa de una superficie, la intensidad RHEED reflejada oscilaba en función del tiempo. En la aproximación gaussiana dichas oscilaciones están directamente relacionadas con las oscilaciones de la rugosidad [véase ec. (7.9)]. En este capítulo hemos estudiado el límite $\sigma \rightarrow 0$ de la aproximación de campo medio de alguno de esos modelos de crecimiento de superficies: concretamente, la ecuación con acoplamiento lineal (9.12) es la aproximación de campo medio de los modelos sG y xMBE, como vimos en el capítulo anterior. En ese caso $\sigma = \sqrt{2k_B T}$ donde T es la temperatura y $\omega = F$ es el flujo medio de partículas. Por definición, la frecuencia efectiva de las oscilaciones $\omega_{ef} = v$ donde v es la velocidad de crecimiento de la superficie.

En la aproximación de campo medio hemos visto que la rugosidad oscila con el tiempo con un período que depende de F y de T de una manera no trivial y que viene dado por la expresión (9.36). Sin embargo, las oscilaciones no se atenúan debido a que en la aproximación de campo medio se supone que las correlaciones entre osciladores son nulas. Así mismo, la aproximación de campo medio nos ha permitido también estudiar la transición entre la fase estacionaria (en la que la superficie no crece) y la fase periódica (en la que la superficie crece) cuando la temperatura es pequeña. Dicha transición se produce cuando $\omega > \omega_c$ donde ω_c viene dada por (9.18). Dado que en la aproximación de campo medio no tiene en cuenta las correlaciones espaciales, es obvio que los resultados que obtenemos son aplicables tanto a xMBE como a sG.

Sin embargo, la de campo medio es tan sólo una aproximación de las ecuaciones xMBE y sG. Por ello, el objetivo de la presente sección es compararla con los modelos de crecimiento utilizados para describir las oscilaciones RHEED. Como dijimos en el capítulo anterior, esperamos que esperamos que la aproximación de campo medio sea válida para $w^2 \ll 1$, lo que se cumple para tiempos cortos y temperaturas pequeñas en comparación con la de rugosidad. Para comparar los resultados de este capítulo con los modelos sG y xMBE los parámetros utilizados son $V_0 = 1$, $a_{\perp} = 2\pi$ y $\sigma = \sqrt{2k_B T}$ en todos los casos y $\nu = 1/4$ para sG en $d = 2$ y $\kappa = 1/16$ para xMBE en $d = 2$ [véanse ecuaciones (5.5) y (5.3)]. En

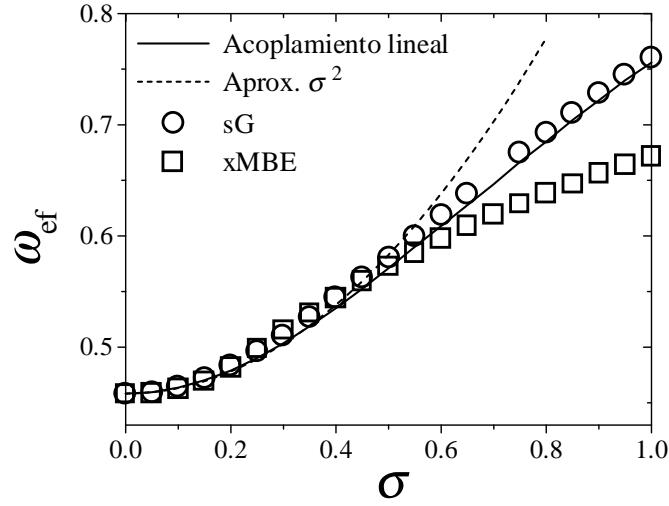


Figura 9.11: Comparación entre los valores obtenidos de ω_{ef} mediante las simulaciones de los modelos sG y xMBE con las simulaciones del modelo (9.12) y la aproximación analítica hasta orden σ^2 dada por las ecuaciones (9.37) y (9.35). Los valores de los parámetros utilizados son $\omega = 1,1$, $\kappa = 1$ y $N = 5000$ en el modelo (9.12). En el caso de los modelos de crecimiento, el sustrato es de tamaño $L \times L$ con $L = 64$.

estas unidades la temperatura de rugosidad para sG en equilibrio para $d = 2$ es $T_R = 8\pi\nu$ [174], mientras que para xMBE es aproximadamente $T_R \approx 10\kappa$ [161]. Estos valores se corresponden con $\sigma \simeq 3,5$ y $\sigma \simeq 1,1$ para los que la aproximación de campo medio deja de ser válida. En la figura 9.11 hemos comparado estos modelos con el modelo lineal, ec. (9.12) para $\sigma^2 = 2k_B T$ pequeño. Como vemos hasta $\sigma \simeq 0,5$ nuestra aproximación es válida y reproduce la velocidad de crecimiento de las oscilaciones RHEED (y por tanto el período de las mismas). Para $\sigma \geq 0,5$ la aproximación de campo medio falla para el modelo xMBE mientras que todavía es válida para sG. Ello se debe a que la temperatura de rugosidad para xMBE es menor, $\sigma \simeq 1,1$.

Del mismo modo, la ecuación (9.18) nos da información sobre los valores del flujo medio externo de material $F = \omega$ para los que se produce la transición de *depinning*, que traducido al lenguaje de las superficies, es cuando la superficie pasa a tener una velocidad de crecimiento distinta de cero. Como vimos en el capítulo 5 la movilidad de la superficie es distinta de cero para $T \neq 0$ siempre que el flujo $F \neq 0$. Por tanto en este caso no podemos definir una frecuencia o campo crítico del mismo modo que hemos hecho en este capítulo. Sin embargo, para temperaturas pequeñas esta movilidad despreciable por debajo de un umbral F_{th} . Para comparar ω_c con este F_{th} definimos éste último como el valor del flujo para el que la movilidad de la superficie es menor que 10^{-2} . En la figura 9.12 hemos comparado ω_c para la ecuación lineal (9.12) y los modelos sG y xMBE observando que nuestra aproximación es válida hasta $\sigma \simeq 0,5$, como antes.

En resumen, la aproximación de campo medio para las ecuaciones sG y xMBE funciona para valores pequeños de la temperatura y es capaz de predecir la velocidad de crecimiento [que se puede relacionar con el período de las oscilaciones RHEED mediante la relación (7.17)] y, para una temperatura fija, el valor del flujo F_{th} . Sin embargo, dado que en esta aproximación de campo medio no tenemos en cuenta las correlaciones, no podemos reproducir con ella el decaimiento de las oscilaciones RHEED, ya que este decaimiento se debe a que la rugosidad crece de manera cinética en el sistema.

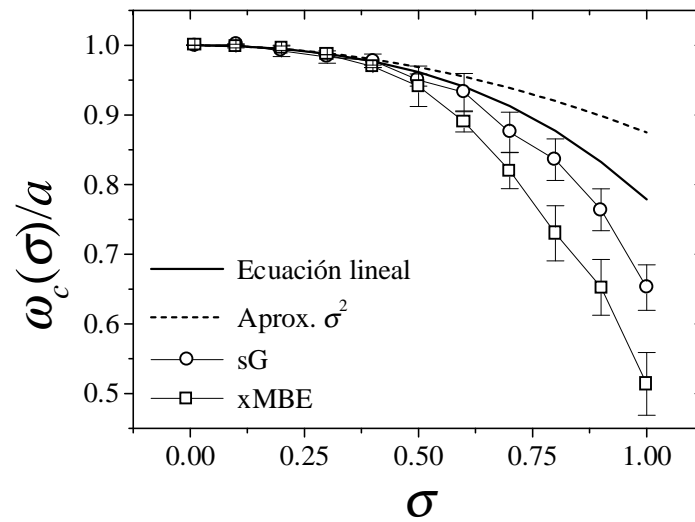


Figura 9.12: Comparación entre los valores de $\omega_c(\sigma)$ obtenidos mediante las simulaciones de los modelos sG y xMBE y comparados con las simulaciones del modelo (9.12) y la aproximación analítica hasta orden σ^2 dada por la ecuación (9.37) y (9.35). Los valores de los parámetros utilizados son $\omega = 1,1$, $\kappa = 1$ y $N = 5000$ en el modelo lineal. En el caso de los modelos de crecimiento, el sustrato es de tamaño $L \times L$ con $L = 64$.

Parte IV

Transiciones de fase dinámicas

Capítulo 10

Transiciones de fase dinámicas

Estudiamos la dinámica de las transiciones de fase de segundo orden en las que se produce una rotura de simetría y, en particular, la creación de defectos topológicos. Revisamos diversas teorías empleadas para estimar el número de defectos que se producen en función de la velocidad a la que tiene lugar la transición.

10.1. Introducción

Entre las transiciones de fase, aquellas en las que se produce una rotura de simetría son un ejemplo interesante de las mismas, y la dinámica de cómo tiene lugar esa transición es muy genérica. Una de las particularidades de este tipo de transiciones es la formación de los denominados *defectos topológicos*. Lejos de ser una peculiaridad, los defectos proporcionan una herramienta experimental para entender cómo se produce el proceso de rotura de simetría en este tipo de transiciones de fase.

La situación genérica de estas transiciones es un sistema que se enfría desde una fase simétrica respecto a un grupo de simetrías \mathcal{G} a temperatura $T > T_C$ hasta otra en la cual el sistema es obligado a elegir entre los estados degenerados de una variedad de vacío o de estados fundamentales \mathcal{M} a temperatura $T < T_C$, donde hemos supuesto que, en equilibrio, la transición tiene lugar cuando $T = T_C$. La transición de fase puede ser de primer o segundo orden. Después de este proceso el sistema consiste en zonas de diferentes estados fundamentales conectadas por *defectos* en los que se concentra la energía del sistema y que, en el caso de que sean topológicos, son estables respecto a pequeñas perturbaciones del campo, que sólo provocan el movimiento de dichos defectos. A tiempos largos, la dinámica del sistema es, de manera efectiva, la de dominios separados por defectos a temperatura cero [27] y depende la variedad de estados fundamentales, de si la dinámica es conservada o no y de la dimensión física del sistema. Mientras que en materia condensada la dinámica de dominios (*coarsening*) en diferentes sistemas ha atraído mucha atención durante estos últimos años [27], el proceso de formación de dominios no ha sido tan estudiado. En particular, la cuestión principal es cuál es el número de defectos que se forman cuando el sistema es obligado

a pasar por una transición en la que se produce rotura de simetría. Experimentalmente esta cuestión es muy importante, ya que los defectos son fácilmente identificables mediante métodos de *scattering*, por ejemplo, y esto permite una comparación cuantitativa con la teoría. Desde el punto de vista teórico la cuestión anterior está relacionada con conocer el proceso físico que fija la longitud característica de los dominios una vez que se ha producido la transición y que denominaremos ξ_{def} . Dicha longitud de correlación sólo podrá definirse una vez que los dominios estén perfectamente establecidos y esto sucede cuando $T < T_{\text{def}}$ donde T_{def} puede definirse como la temperatura máxima a partir de la cual se tiene que la densidad de defectos ρ es proporcional a $1/\xi_{\text{def}}^d$ donde d es la dimensión del sistema. Una vez conocida ξ_{def} la dinámica del sistema es el posterior proceso de *coarsening*.

Por tanto, para conocer el número de defectos que se producen después de una transición, necesitamos conocer tanto ξ_{def} como T_{def} para poder identificar la condición inicial y el instante inicial del proceso de evolución de defectos. Supongamos que la transición se produce variando la temperatura con el tiempo de modo que $|\frac{dT}{dt}| \ll 1$. Podemos asumir entonces que la longitud de correlación del sistema es aproximadamente igual a ξ_{eq} que es la longitud de correlación en equilibrio cuando $T = T(t)$ para t fijo. Sin embargo, si la transición es de segundo orden sabemos que $\xi_{\text{eq}} \rightarrow \infty$ cuando nos acercamos a T_C lo cual no sucede cuando la transición se produce de manera dinámica, ya que la longitud de correlación sólo puede tomar un valor finito en un tiempo finito. Por tanto, ξ_{def} no se puede obtener a partir de las propiedades de equilibrio del sistema. Por último, incluso aunque conociéramos la longitud de correlación de nuestro sistema para cualquier tiempo $\xi(t)$, deberíamos conocer el tiempo t en el que $T(t) = T_{\text{def}}$. El problema, por tanto, se enmarca dentro de la mecánica estadística de no equilibrio y la herramienta natural para su estudio son las ecuaciones de Langevin.

Además, aunque el conocer el número de defectos tiene su importancia en problemas como la transición superfluida del ^3He o ^4He , la de los cristales líquidos o en las aleaciones binarias, por ejemplo, la atención que ha recibido este problema durante los años noventa se debe a una posible realización experimental del escenario cosmológico de formación de defectos en la densidad de materia y radiación que dieron lugar a la actual estructura del Universo [75]. En 1994, Zurek [261] extendió el argumento de causalidad de Kibble propuesto en 1976 [122] para explicar la formación de cuerdas cosmológicas y lo adaptó a sistemas de materia condensada. Esto dio lugar a una serie de experimentos en diversos laboratorios, que resultaron compatibles con la teoría de Kibble-Zurek, aunque aún no se puede dar ésta por confirmada.

El objetivo del presente capítulo es introducir las diferentes propuestas teóricas para conocer ξ_{def} y T_{def} . Para ello, en el apartado 10.2 estudiamos de manera general los defectos topológicos y su importancia tanto en materia condensada como en cosmología. Por sencillez el estudio se restringe a los modelos efectivos de Landau-Ginzburg con simetría $O(N)$. Seguidamente, en el apartado 10.3 presentamos las diferentes teorías para determinar el número de defectos basándonos en conceptos de causalidad e inestabilidad. Como veremos las predicciones basadas en estos argumentos son cualitativas y determinan tan sólo cómo dependen ξ_{def} y T_{def} respecto a, por ejemplo, la velocidad con la que se produce la transición. En el capítulo siguiente veremos que es posible resolver de manera exacta el modelo de Landau-Ginzburg con simetría $O(1)$, por lo que seremos capaces de comprobar estas predicciones.

10.2. Transiciones de fase y defectos topológicos

Una transición en la que se produce rotura de simetría puede ser de primer o segundo orden (continua). En las de primer orden la longitud de correlación no es infinita cuando $T = T_C$ y la transición se produce a partir de la nucleación de burbujas en las que el parámetro de orden toma el valor de uno de los estados fundamentales en \mathcal{M} . La transición es por tanto local y la nucleación de estas burbujas se produce mediante activación térmica antes de que $T = T_C$. El estudio de formación de defectos en transiciones de primer orden ha sido también estudiado por Kibble [24] y Liu y Mazenko [149]. En una transición continua el cambio se produce en todos los puntos del sistema, ya que la longitud de correlación diverge cuando $T = T_C$. En la práctica esto no sucede, ya que, por ejemplo, la temperatura no es uniforme en todo el sistema. A pesar de estos detalles, en este apartado nos concentraremos en las transiciones de segundo orden o continuas.

Para estudiar este tipo de transiciones es suficiente considerar la teoría más simple, que es aquella en la que el parámetro de orden de nuestro sistema es un vector con N componentes $\phi(\mathbf{x}) = (\phi_1(\mathbf{x}), \dots, \phi_N(\mathbf{x}))$ en un espacio de dimensión d y donde la energía libre efectiva del sistema en equilibrio es de la forma de Landau-Ginzburg [20]

$$\mathcal{F}(T) = \int d^d \mathbf{x} \left(\frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} g(T) \phi^2 + \frac{1}{4} \lambda \phi^4 \right), \quad (10.1)$$

donde $g(T)$ puede entenderse como un parámetro fenomenológico que es positivo cuando $T > T_C$, y negativo para $T < T_C$. En el caso anterior, la energía libre del sistema es invariante respecto al grupo de rotaciones $O(N)$. Este tipo de modelos describe el comportamiento crítico de muchos sistemas físicos. Por ejemplo, cuando $N = 3$ describe ferroimanes; si $N = 1$ es una teoría efectiva de la transición líquido-vapor, las mezclas binarias o los superconductores de tipo II. Por último cuando $N = 2$ describe sistemas de polímeros o las propiedades de la fase superfluida del He^4 [186, 34].

El modelo anterior depende del parámetro de orden y no de los grados de libertad microscópicos. Podemos pensar en $\phi(\mathbf{x})$ como el promedio del parámetro de orden sobre un volumen y el hecho de que $g(T)$ dependa de manera efectiva de la temperatura se puede entender en función del grupo de renormalización aplicado a la teoría $\lambda \phi^4$ [95]. De este modo $g(T)$ es el valor que toma este parámetro bajo el grupo de renormalización. Así a temperaturas altas $T > T_C$ la parte potencial de la ecuación (10.1) definida por

$$V(\phi) = \frac{1}{2} g^2(T) \phi^2 + \frac{1}{4} \lambda \phi^4, \quad (10.2)$$

tiene un sólo mínimo que corresponde a $\phi = 0$ y que se denomina falso vacío. Para $T < T_C$ el sistema posee una variedad de estados fundamentales definidos por la ecuación

$$\frac{\delta V}{\delta \phi}(\phi_0) = 0. \quad (10.3)$$

Para temperaturas $T > T_C$ el parámetro de orden fluctúa alrededor del falso vacío $\langle \phi \rangle = 0$ con una varianza proporcional a la temperatura, mientras que después de la transición, donde la temperatura es de manera efectiva cero, $g < 0$ da lugar a una rotura de simetría y el parámetro de orden vale $\langle \phi \rangle = \phi_0$.

El potencial $V(\phi, T)$ determina la escala de las fluctuaciones de ϕ alrededor de $\phi = 0$. Si utilizamos la teoría de campo medio [20, 34], podemos expresar el potencial (10.2) como

$$V(\phi) = \frac{1}{2} g^2(T) \langle \phi \rangle^2 + \frac{1}{4} \lambda \langle \phi^4 \rangle. \quad (10.4)$$

Por tanto, el valor medio de ϕ viene dado por la ecuación (10.3), es decir

$$\langle \phi \rangle = \begin{cases} 0 & T > T_C \\ (-g/\lambda)^{1/2} \mathbf{e} & T < T_C, \end{cases} \quad (10.5)$$

donde \mathbf{e} es un vector unitario en el espacio del parámetro de orden de dimensión N . Si suponemos que a primer orden $g(T) \sim (T - T_C)$ la ecuación (10.5) significa que el parámetro de orden escala como $\langle \phi \rangle \sim |T - T_C|^\beta$ con $\beta = 1/2$. Del mismo modo se puede obtener que la función de estructura $S(\mathbf{q})$ es

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{g + 3\lambda \langle \phi \rangle^2 + q^2} \sim \frac{1}{\xi^{-2} + q^2}, \quad (10.6)$$

con lo que

$$\xi_{\text{eq}}(T) = \begin{cases} (1/g)^{1/2} & T > T_C \\ (1/(-2g))^{1/2} & T < T_C. \end{cases} \quad (10.7)$$

Como vemos la longitud de correlación diverge cuando $T = T_C$ y se tiene que $\xi_{\text{eq}} \sim |T - T_C|^{-\nu}$ con $\nu = 1/2$. En realidad en la teoría $\lambda\phi^4$ se obtiene $\nu = 0,67$ en tres dimensiones utilizando técnicas del grupo de renormalización y simulaciones numéricas [95].

Para estudiar la dinámica del sistema supondremos que el sistema responde a esta energía libre de manera lineal, es decir que

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \phi} + \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t) \quad (10.8)$$

donde γ es la disipación y que se conoce como *ecuación de Ginzburg-Landau dependiente del tiempo* (Time dependent Ginzburg-Landau, TDGL). Mientras que el primer término de la parte izquierda de la ecuación tiene importancia en el contexto de teorías de campos térmicas, el segundo es importante en materia condensada. Prescindiendo de la derivada segunda respecto al tiempo, la ecuación anterior es de la forma de Langevin. Por último, $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t)$ es un ruido blanco gaussiano, $\langle \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}', t') \rangle = 2\gamma \Theta \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t')$, donde Θ puede entenderse como la temperatura final después del proceso de enfriamiento, o como un ruido que da lugar a la configuración inicial una vez que se produce la transición de manera que puede ser reemplazado de manera efectiva por un conjunto de realizaciones para las condiciones iniciales. La ecuación (10.8) es fenomenológica, ya que al variar la temperatura cambiamos el parámetro g del potencial. Sin embargo constituye la teoría más simple en la que se produce una rotura de simetría.

Cuando se produce la transición, y a temperatura cero, el parámetro de orden viene dado por la solución de la ecuación

$$\nabla^2 \phi = \frac{\delta V(\phi)}{\delta \phi} \quad (10.9)$$

En el caso de la teoría $O(N)$ que hemos visto antes en dimensión d los defectos topológicos estables vienen dados por soluciones de la ecuación anterior para ciertas condiciones de contorno.

- En el caso escalar, $N = 1$, los estados fundamentales son $\phi_0 = \pm(\lambda/g)^{1/2}$ y por tanto en dimensión $d = 1$ los defectos son paredes o *kinks* que conectan estos dos estados y que cruzan el punto $\phi = 0$ de falso vacío. Este tipo de defectos se denominan puntuales. En dimensión $d = 2$ los puntos donde $\phi = 0$ forman líneas, mientras que en $d = 3$ son superficies.

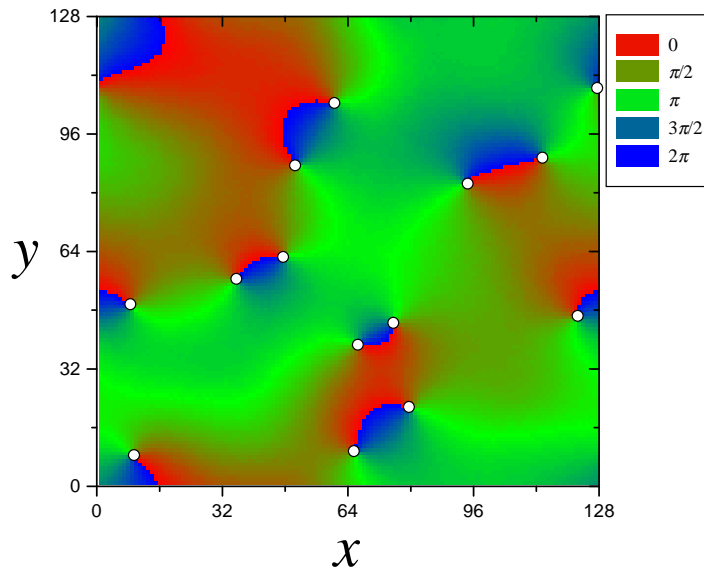


Figura 10.1: Valores de la fase para la ecuación TDGL (10.8) con simetría $O(2)$ en $d = 2$. Los defectos son vórtices marcados con \circ .

- Cuando $N = 2$ en dimensión $d = 1$ no tenemos defectos topológicos. En general se tiene que si $N > d$ entonces no existen defectos topológicos [34, 27]. En dimensión $d = 2$, tenemos defectos puntuales que se denominan *vórtices*, mientras que en $d = 3$ los defectos forman cuerdas o líneas de vórtices. En la figura 10.1 hemos representado la solución después de un enfriamiento del sistema del modelo $O(2)$ en dimensión $d = 2$. En particular representamos la fase del parámetro de orden $\phi(\mathbf{x}) = (\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}))$ definida como $\theta = \tan^{-1}(\phi_1/\phi_2)$. Los vórtices son defectos en los que la fase varía entre 0 y 2π al recorrer un circuito alrededor del vórtice.

En general, tendremos defectos puntuales si $n = d$, líneas si $n = d - 1$ y superficies si $n = d - 2$. Si $n < d$ los defectos están extendidos espacialmente.

A temperatura cero los defectos topológicos son estables. La dinámica del sistema total viene dada por el movimiento, suavizado y minimización de la curvatura de los defectos espacialmente extendidos. Esta dinámica se denomina *coarsening* de los dominios. En el caso de los defectos puntuales proceso de coarsening se produce mediante la aniquilización de un par defecto-antidefecto. En $d = 1$ por ejemplo el antidefecto asociado a un *kink* es un *antikink*, mientras que en $d = 2$ el antidefecto es un antivórtice. Los antidefectos no pueden obtenerse a partir de los defectos simplemente mediante una rotación espacial. En el caso de defectos puntuales en $d = 1$ y vórtices en $d = 2$ y suponiendo que $V(\phi)$ es simétrico respecto a $\phi = 0$, los antidefectos se obtienen mediante la transformación $\phi \leftrightarrow -\phi$. A cada defecto se le puede asociar una carga topológica. En el caso de los vórtices dicha carga es la variación de la fase al recorrer un lazo alrededor de él en un sentido predeterminado y que será $\pm 2\pi$.

Los defectos son soluciones no lineales de la ecuación (10.9). A temperatura suficientemente alta dichos defectos pueden ser excitados como fluctuaciones no perturbativas. Estos defectos dominan sobre las perturbaciones termodinámicas debido a su gran entropía de configuración y por tanto dominan las transiciones de fase en algunos casos. Un ejemplo lo tenemos en el caso del modelo $O(2)$: en él las perturbaciones termodinámicas a bajas temperaturas u *ondas de espín* no determinan la transición de fase que tiene lugar debido a la disociación de pares vórtice-antivórtice. Así mismo, dado que a temperaturas bajas los

defectos son estables (como por ejemplo los *kinks* en una dimensión), hacen que la fase de baja temperatura no sea de orden a largo alcance una vez que se han formado.

10.3. ¿Cuándo se rompe la simetría, cuál es el tamaño de las piezas?

Cuando se produce la transición y la simetría se rompe y si suponemos que la densidad de defectos se puede relacionar simplemente con la longitud de correlación, entonces la densidad *máxima* de defectos puede relacionarse con la longitud de correlación *más pequeña* en la fase de simetría rota. De esta manera el sistema se compone de zonas donde el parámetro de orden toma uno de los valores de la variedad de vacío cuyo tamaño medio es dicha longitud de correlación y que están unidas mediante defectos. En el caso de que el proceso posterior de *coarsening* sea muy lento (comparado con otras escalas de tiempo del sistema) y debido a que la temperatura después del enfriamiento es cero de manera efectiva [27], podemos decir que la densidad de defectos viene dada por

$$\rho \sim \frac{L^d}{\xi_{\text{def}}^d}, \quad (10.10)$$

donde L es el tamaño lateral del sistema. Sin embargo, durante y después de la transición el sistema no se encuentra en equilibrio y por tanto $\xi_{\text{def}} \neq \xi_{\text{eq}}(T)$. Para entender esto, supongamos que la variar la temperatura, el parámetro efectivo $g(T)$ de nuestra teoría varía de la forma

$$g = \left(1 - \frac{T(t)}{T_C}\right) = \mu t, \quad (10.11)$$

de manera que la transición se produce cuando $t = 0$ y

$$T(t) = T_C(1 - \mu t). \quad (10.12)$$

Por simplicidad suponemos que la condición inicial es $t = -\tau/\mu$ con $\tau = \mathcal{O}(1)$ y la final es $t = \tau/\mu$, con lo que la temperatura varía desde $T_C(1+\tau)$ hasta $T_C(1-\tau)$. Además, supondremos que $\mu \ll 1$ para que la transición tenga lugar en todo el sistema aproximadamente al mismo tiempo y para que fuera de la zona donde se produzca la longitud de correlación sea $\xi(t) \simeq \xi_{\text{eq}}(T(t))$.

La longitud de correlación en equilibrio vale $\xi_{\text{eq}} \rightarrow \infty$ en $T = T_C$. Sin embargo, como ya hemos dicho, cuando la transición se produce fuera del equilibrio esperamos que la longitud de correlación no diverja, ya que sólo puede vale un valor finito en un tiempo finito. La propuesta de Kibble y Zurek es que la longitud de correlación del sistema permanece constante al pasar por el punto crítico, y que ξ_{def} es esencialmente ξ_{eq} para una temperatura determinada T_{def} . Como veremos en el siguiente capítulo este argumento tan sólo predice la forma dimensional de ξ_{def} .

10.3.1. Activación térmica

En los trabajos de los años 70 acerca de la formación de cuerdas cosmológicas en el universo temprano, Kibble sugirió que el tamaño inicial de los dominios venía dado por lo que se denomina esquema de Ginzburg [122]. Si $\mu \ll 1$ entonces podemos reemplazar el potencial $V(\phi, T)$ por $V[\phi, T(t)]$. Esto está justificado lejos de la transición, mientras que existe un intervalo $T_G^- < T < T_G^+$ en el que no se puede hacer tal suposición. Las temperaturas T_G^\pm se denominan temperaturas de Ginzburg y vienen dadas por el siguiente argumento.

La temperatura T_G^+ viene dada por la temperatura a la que el potencial $V(\phi, T(t))$ deja de aproximar las fluctuaciones del parámetro de orden ϕ . Esto sucede cuando la parte cuadrática y $\lambda\phi^4$ son del mismo orden, es decir, cuando $|1 - T_G^+/T_C| = \mathcal{O}(\lambda)$. Una vez que la temperatura es menor que T_C y el potencial cambia de forma, T_G^- marca la temperatura por debajo de la cual la probabilidad de que se activen de manera térmica dominios de tamaño igual a la longitud de correlación es muy pequeña. Si la energía libre viene dada por la ecuación (10.1) entonces de manera explícita y suponiendo que $\xi(t) = \xi_{\text{eq}}(T(t))$, T_G^- verifica la expresión

$$\Delta E(T_G^-) \xi_{\text{eq}}^d(T_G^-) \simeq T_G^-, \quad (10.13)$$

donde $\Delta E(T)$ es la diferencia de energía entre el máximo central del potencial y el mínimo y d es la dimensión del sistema. De este modo y utilizando el potencial (10.2) tenemos que

$$g(T_G^-) = \mathcal{O}(\lambda). \quad (10.14)$$

Mientras que para temperaturas superiores a T_G^- , debido a las fluctuaciones térmicas se pueden producir dominios de diferente longitud, por debajo de esta temperatura este fenómeno se reduce exponencialmente. Esto sucede cuando la longitud de correlación es

$$\xi_{\text{eq}}(T_G^-) = \mathcal{O}(\lambda^{-1/2}). \quad (10.15)$$

El argumento de Kibble es que podemos de este modo identificar $\xi_{\text{eq}}(T_G)$ con ξ_{def} . Sin embargo, como veremos después esto es incorrecto ya que, aunque las fluctuaciones térmicas son relevantes para la formación de pequeños dominios no son determinantes para la formación de los dominios más grandes. Para entenderlo necesitamos algo más que la física de equilibrio del sistema y un concepto nuevo: el de causalidad.

10.3.2. Causalidad. El mecanismo de Kibble-Zurek

Si el argumento anterior pretende definir la escala de longitud típica del sistema una vez que se ha producido la transición el de causalidad pretende determinarla antes de que se produzca. Cuando $t < 0$ (es decir, $T > T_C$) y estamos lejos de la transición y si suponemos que $\mu \ll 1$, entonces el sistema se encuentra en un equilibrio efectivo y por tanto $\xi(t) \simeq \xi_{\text{eq}}(t)$, donde $\xi_{\text{eq}}(t)$ es la longitud de correlación en equilibrio para el valor de $g(t)$ con t fijo. Sin embargo, cuando nos acercamos al punto crítico $\xi_{\text{eq}}(t)$ aumenta de manera arbitrariamente rápida y por tanto el sistema no puede seguir en equilibrio. Para determinar el tiempo en el cual se produce esta desviación del equilibrio (o al menos una cota superior) identificamos $-t_{\text{cong}}$ como el tiempo en el que la longitud de correlación crece a la velocidad de la luz en nuestro sistema, es decir $-t_{\text{cong}}$ está definido implícitamente como

$$\frac{d\xi_{\text{eq}}}{dt}(-t_{\text{cong}}) = 1. \quad (10.16)$$

Kibble sugirió que la longitud de correlación del sistema se congela durante el intervalo $[-t_{\text{cong}}, t_{\text{cong}}]$ [123] y que por tanto una vez que $t = t_{\text{cong}}$ tenemos que $\xi_{\text{eq}}(t) \simeq \xi_{\text{eq}}(-t_{\text{cong}})$. Esto define la escala inicial de los defectos que es $\xi_{\text{def}} \simeq \xi_{\text{eq}}(-t_{\text{cong}})$ una vez producida la transición cuya expresión es, utilizando (10.7), (10.11) y (10.16),

$$\xi_{\text{def}} \sim \xi_{\text{eq}}(-t_{\text{cong}}) = \mu^{-1/3}. \quad (10.17)$$

Para $t > t_{\text{cong}}$ la longitud de correlación vuelve a ser comparable con $\xi_{\text{eq}}(T(t))$. El argumento de Kibble está basado en una teoría de campos en los que existe una doble derivada temporal

y por tanto una inercia que hace que una perturbación en el sistema viaje a la velocidad de la luz. Extendiendo este argumento a las transiciones en materia condensada Zurek [260, 261] reemplazó la velocidad de la luz por la velocidad del sonido del sistema en equilibrio. De manera explícita, la velocidad del sonido c_{eq} en equilibrio se obtiene como $c_{\text{eq}} = \xi_{\text{eq}}/\tau_{\text{eq}}$ donde τ_{eq} es el tiempo de relajación en equilibrio del sistema que también diverge cuando $T \rightarrow T_C$. En la aproximación de campo medio se tiene que [20, 34]

$$\tau_{\text{eq}} = g^{-1}. \quad (10.18)$$

Del mismo modo que hicimos antes, podemos suponer que fuera de la zona donde se produce la transición la velocidad del sonido en el sistema viene dada por $c(t) = c_{\text{eq}}(T(t))$ y por tanto

$$c(t) \simeq g^{1/2}(t), \quad (10.19)$$

y por tanto se anula cuando $T = T_C$. La velocidad del sonido es la velocidad a la que se propaga una perturbación en el sistema. De esta manera la relación equivalente a (10.16) es

$$\frac{d\xi_{\text{eq}}}{dt}(-t_{\text{cong}}) = c(-t_{\text{cong}}) \quad (10.20)$$

La suposición a partir de esta definición es, como antes, que la longitud de correlación queda congelada durante el intervalo $[-t_{\text{cong}}, t_{\text{cong}}]$ y por tanto $\xi_{\text{def}} \simeq \xi_{\text{eq}}(-t_{\text{cong}})$. Una vez que $t > t_{\text{cong}}$ la longitud de correlación del sistema vuelve a aproximarse a $\xi_{\text{eq}}(T(t))$. La longitud de correlación inicial que determina el tamaño de los dominios es aproximadamente igual a $\xi_{\text{def}} \simeq \xi_{\text{eq}}(T(-t_{\text{cong}}))$, con lo que a partir de (10.7), (10.19) y (10.20),

$$\xi_{\text{def}} \sim \xi_{\text{eq}}(-t_{\text{cong}}) = \mu^{-1/4}. \quad (10.21)$$

Tanto en (10.21) como en (10.17) el tamaño de los dominios después de producirse la transición depende de cómo de rápido hemos hecho esta transición. Además, si $\mu \ll 1$, la longitud de correlación dada por (10.17) y (10.21) es mucho mayor que la obtenida mediante el argumento de activación térmica y dada por la ecuación (10.15).

Para obtener las expresiones anteriores hemos utilizado las aproximaciones de campo medio para conocer como varía la longitud de correlación y el tiempo de relajación de nuestro sistema. De manera más general, si suponemos que en nuestra teoría y cerca del punto crítico

$$\xi(t) = \xi_0 |g|^{-\nu} \quad (10.22)$$

y

$$\tau(t) = \tau_0 |g|^{-\beta}, \quad (10.23)$$

entonces la estimación de Kibble-Zurek para la longitud de correlación es

$$\xi_{\text{def}} \simeq \xi_0 (\tau_0 \mu)^{-\nu/(1+\nu)}, \quad \xi_{\text{def}} \simeq \xi_0 (\tau_0 \mu)^{-\nu/(1+\beta)} \quad (10.24)$$

en el caso de teoría de campos y en materia condensada respectivamente. Podemos pensar en ambos casos como el límite no amortiguado ($\gamma \ll 1$) y sobreamortiguado ($\gamma \gg 1$) de la ecuación (10.8). En contra del argumento de activación térmica, las expresiones (10.24) predicen que cuando $\mu \rightarrow 0$ entonces $\xi_{\text{def}} \rightarrow \infty$, es decir, que cuando el sistema tarda tiempo infinito en cruzar por T_C le da tiempo a que la longitud de correlación sea lo suficientemente grande para que no haya defectos en el sistema y éste consista en un sólo dominio en el que el parámetro de orden toma un sólo valor. En la tabla 10.1 hemos resumido las predicciones de la teoría de Kibble-Zurek.

| Aproximación | t_{cong} | ξ_{def} |
|------------------------|-------------------|------------------------|
| $\gamma \rightarrow 0$ | $\mu^{-1/3}$ | $\mu^{-\nu/(1+\nu)}$ |
| $\gamma \gg 1$ | $\mu^{-1/2}$ | $\mu^{-\nu/(1+\beta)}$ |

Cuadro 10.1: Resumen de las predicciones del esquema de Kibble-Zurek para el tiempo de congelación del sistema [calculados a partir de las ecuaciones (10.16) y (10.20)] y de la longitud de correlación $\xi_{\text{def}} = \xi_{\text{eq}}(-t_{\text{cong}})$ en función de la variación del parámetro de orden μ . Se incluyen los casos de una teoría de campos térmica ($\gamma \rightarrow 0$) y el caso de materia condensada ($\gamma \gg 1$).

10.3.3. Experimentos

Zurek fue el primero en sugerir la comprobación de estas ideas en experimentos de materia condensada, particularmente en Helio líquido. Las líneas de vórtices en ^3He y ^4He superfluido son un buen análogo de las cuerdas cosmológicas. Una manera sencilla y eficaz de tratar estos sistemas es considerar que están compuestos de dos fluidos: uno el normal y otro superfluido en el que la viscosidad es nula. En ^4He el superfluido (que es un condensado de Bose-Einstein) se caracteriza por el campo complejo ϕ cuyo módulo al cuadrado $|\phi|^2$ es la densidad de la fase superfluida. La fracción de fase superfluida es uno cuando la temperatura es el cero absoluto, mientras que es nula cuando la temperatura se acerca al punto crítico λ para el que $T_\lambda = 2,17\text{K}$. La teoría de Landau-Ginzburg para el ^4He corresponde a una energía libre de la forma (10.1) con simetría $O(2)$ y $d = 3$. Los defectos son líneas de vórtices.

La situación es más complicada aunque más interesante en el ^3He en el que la transición se produce a una temperatura de 2 mK. La razón es que el ^3He es un fermión y por tanto el mecanismo por el que el sistema pasa a ser superfluido es diferente que en el caso del ^4He que es un bosón. Este mecanismo es parecido al de la teoría BCS para la superconductividad. El parámetro de orden para el ^3He es una matriz 3×3 y la simetría que se rompe es la de $SO(3) \times SO(3) \times U(1)$. Aunque la energía libre es más complicada que la dada por la ecuación (10.1), la forma diagonal de la misma se parece y por tanto se puede aplicar la teoría de Landau-Ginzburg.

Las predicciones de Kibble-Zurek para estos dos sistemas son que el número de defectos depende de la velocidad con la que se produce la transición con el exponente $1/4$ y por tanto el número de defectos es

$$\rho = \frac{L^2}{\xi_{\text{eq}}^2(t_{\text{cong}})} = O \left[\frac{1}{\xi_0^2} (\tau_0 \mu)^{1/2} \right] \quad (10.25)$$

Motivados por estas predicciones numerosos grupos han realizados diversos experimentos. Aunque trabajar con ^3He es más complicado los experimentos son más claros desde el punto de vista experimental y teórico. En primer lugar los núcleos de ^3He tienen espín $1/2$ y por tanto los vórtices pueden detectarse mediante resonancia nuclear. Segundo, la anchura de los vórtices es de varios espaciados atómicos y por tanto una teoría como la de Landau-Ginzburg es apropiada. Hasta ahora los experimentos han sido de dos tipos. En el primero de ellos que denominaremos experimento de Helsinki [190, 191] una muestra de ^3He en un criostato rotante es bombardeada con neutrones lentos. Cada neutrón que entra en la cámara libera 760 keV que, mediante ionización, se convierten en calor incrementando la temperatura de una región por encima de la temperatura de transición y creando vórtices. Rápidamente dicha región vuelve a la temperatura del criostato. De esta manera se crean vórtices, los cuales debido a la velocidad angular del criostato se mueven hasta el centro del aparato donde son detectados mediante resonancia magnética. En este sistema $\xi_0 \simeq 20 \text{ nm}$. es la longitud de coherencia a temperatura cero de la fase superfluida, mientras que el tiempo de

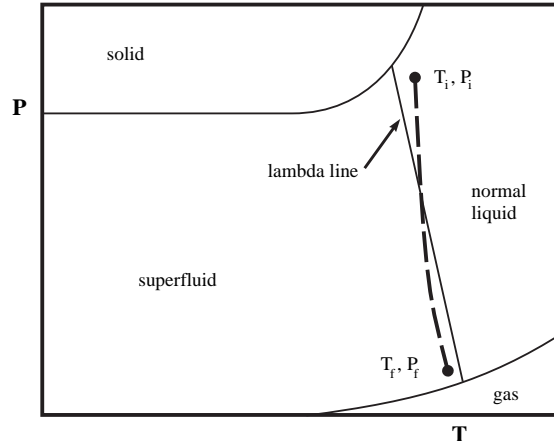


Figura 10.2: Diagrama de fases del ^4He . La línea a trazos corresponde a la trayectoria seguida por el experimento de Lancaster [50, 51] desde (T_i, P_i) hasta (T_f, P_f) al realizar una expansión mecánica.

relajación $\tau_0 \sim \xi_0/v_F \sim 1$ ns. donde v_F es la velocidad de Fermi. Por último la desviación del equilibrio se produce durante un tiempo $\mu^{-1} = 5 \mu\text{s}$. con lo que $\mu\tau_0 \sim 10^{-3}$. El acuerdo entre la predicción (10.25) y los experimentos es buena al menos desde el punto de vista de órdenes de magnitud. Un segundo experimento fue llevado a cabo en Grenoble y Lancaster [15]. En este caso, en vez de contar el número de vórtices, el experimento detectó la energía total que se utilizaba en la creación de los mismos. Como en el caso anterior el ^3He es irradiado por neutrones. Después de cada absorción la energía liberada se mide en forma de cuasipartículas obteniéndose siempre una energía menor que 760 keV. La diferencia de energía se supone que se utiliza en formar los vórtices. Otra vez se encontró un acuerdo cualitativo con la predicción de Kibble-Zurek (10.25).

En el caso del ^4He , el experimento fue llevado a cabo por el grupo de Lancaster y siguió la propuesta inicial de Zurek [261]. La idea es expandir una muestra de Helio líquido normal (no superfluido) de manera que disminuya la presión y el sistema pase a ser superfluido a temperatura casi constante como podemos ver en la figura 10.2. Dado que la temperatura crítica depende de la presión P la idea es variar $1 - T/T_C(P)$ de negativo a positivo sin variar apenas T . Los vórtices se detectan mediante la medida de segunda onda de presión la cual se atenúa debido a la dispersión con los vórtices. Dado que la transición en el sistema es debido a factores puramente mecánicos ésta es mucho más lenta que en el caso anterior y típicamente $\mu\tau_0 \sim 10^{-10}$. Utilizando esta técnica se han realizado dos experimentos. En el primero de ellos [90], aunque se encontró un acuerdo con la ecuación (10.25) no se pudo variar μ . Además, existían problemas con la creación de defectos mediante factores hidrodinámicos y de capilaridad. Un segundo experimento [50, 51], diseñado para minimizar estos problemas, no fue capaz de encontrar ningún vórtice lo que, debido a la precisión experimental utilizada, supone una cota superior a la densidad de defectos que es varios órdenes de magnitud menor que (10.25). Las explicaciones para este problema pueden ser varias, apuntadas por distintos autores:

- En primer lugar, la estimación de Kibble-Zurek dada por la ecuación (10.25) sobreestima el valor real de la densidad de defectos por varios órdenes de magnitud. Ello es debido a la inestabilidad espinodal que veremos después. Debido a ello, aparte de que el sistema se encuentre fuera del equilibrio durante el tiempo $[-t_{\text{cong}}, t_{\text{cong}}]$ también lo hace durante $[t_{\text{cong}}, t_{\text{stop}}]$ con $t_{\text{stop}} = f t_{\text{cong}}$, donde f es una constante que puede ser de varios órdenes de magnitud [151, 164, 119]. Esto estaría de acuerdo con la cota

experimental encontrada en [50] para la densidad de defectos.

- Otra causa puede ser que la temperatura a la que se produce la transición (recordemos que ésta es aproximadamente constante) sea muy grande y provoque el decaimiento de los vórtices que se forman. Esto sucede cuando la temperatura T está muy cerca de T_G . Por ejemplo, en los experimentos de Helsinki y Grenoble $1 - T_G/T_C = \mathcal{O}(10^{-8})$, mientras que en el experimento de Lancaster $1 - T_G/T_C = \mathcal{O}(1)$ [119].
- Por último, se ha propuesto que la no aparición de vórtices se debe a que la transición de fase se produce de una manera no local. En particular, en la expansión mecánica se supone que el parámetro de orden depende no sólo del tiempo sino de la posición $g(\mathbf{x}, t)$ en forma de una onda que se propaga a través del material. Si la velocidad de esta onda es menor que un valor límite la densidad de vórtices es nula [54].

10.3.4. Simulaciones numéricas

Numerosos autores han realizado simulaciones numéricas en varias dimensiones y distintos sistemas. Podemos dividir estas simulaciones en dos tipos:

- En el primero de ellos las simulaciones se realizan sobre la ecuación fenomenológica de Landau-Ginzburg variando el parámetro de control con el tiempo y forzando entonces la transición de fase. En este grupo se encuentran los trabajos del grupo de Zurek en una dimensión [140, 141] y en dos dimensiones [253] aparte de la mencionada anteriormente en la que el parámetro de control varía de forma no local y, por otro lado, los trabajos de G. D. Lythe y el autor de esta memoria [151, 164] en el que, aparte de las simulaciones numéricas, se obtienen resultados teóricos exactos para el caso de una dimensión.
- Como vimos antes, la ecuación (10.8) es fenomenológica y la rotura de simetría se produce debido a que variamos el parámetro de control. Recientemente Zurek y colaboradores han estudiado la transición de fase con rotura de simetría en el modelo $\lambda\phi^4$ con simetría $U(1)$ en tres dimensiones variando de manera directa la temperatura con respecto al tiempo. La ecuación de la dinámica de este modelo es [8]

$$\frac{\partial^2 \phi_i}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -m^2 \phi_i + \nabla^2 \phi_i + \lambda \phi_i \phi^2 + \eta_i(x, t) \quad (10.26)$$

donde $i \in \{1, 2\}$ y $\phi = (\phi_1, \phi_2)$ con $\langle \eta_i(x, t), \eta_j(x', t') \rangle = 2\gamma T(t) \delta_{ij} \delta(x - x') \delta(t - t')$. Las predicciones teóricas para la longitud de correlación (10.24) y la densidad de líneas de vórtices son compatibles aunque, otra vez, la densidad teórica es varios órdenes de magnitud mayor que la numérica y los exponentes que se obtienen son los de campo medio y no los de la teoría en equilibrio (es decir los exponentes obtenidos cuando $T(t)$ es constante).

10.3.5. Inestabilidad espinodal

El argumento de Kibble-Zurek parece dar los exponentes pero no el orden de magnitud de la densidad de defectos. Además, en varias simulaciones numéricas se ve que los exponentes ν y β de las ecuaciones (10.24) se ajustan mejor a los de campo medio, en vez de los obtenidos a partir de simulaciones numéricas o grupo de renormalización. Cuando la condición inicial es muy pequeña, es decir, cuando el ruido es muy pequeño, después de t_{cong} podemos

tener otro régimen, en el cual se producen muchos menos defectos que los predichos por el mecanismo de Zurek-Kibble. Como veremos en el siguiente capítulo este segundo régimen se extiende desde t_{cong} hasta $t_{\text{stop}} = ft_{\text{cong}}$ que es el tiempo para el que el sistema se congela definitivamente y donde f es una constante positiva que puede ser de varios órdenes de magnitud y depende del ruido. En este intervalo, que denominaremos región de inestabilidad espinodal, la condición inicial para t_{cong} en la que $\phi \simeq 0$ es inestable en el potencial efectivo y el intervalo $[t_{\text{cong}}, t_{\text{stop}}]$ es el que tarda el sistema en relajar esta condición inicial y salir de la región de inestabilidad espinodal. En este régimen, la dinámica del sistema puede aproximarse por la ecuación a orden cero o lineal en el que no hay intercambio de energía entre los modos. Para verlo, despreciamos ϕ^3 y el ruido $\eta(t)$ en la ecuación (10.8) con el potencial (10.2) y transformamos Fourier, de manera que

$$\frac{\partial^2 \phi_q}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \phi_q}{\partial t} = - \left(\mathbf{q}^2 + \left. \frac{\delta^2 V(\phi)}{\delta \phi^2} \right|_{\phi=0} \right) \phi_q \quad (10.27)$$

donde \mathbf{q} es el vector en el espacio recíproco y ϕ_q es la transformada de Fourier de ϕ . La función del tiempo $\left. \frac{\delta^2 V(\phi)}{\delta \phi^2} \right|_{\phi=0} = -g(t)$ define la llamada línea espinodal, de manera que si $\gamma \gg 1$ y $\mathbf{q}^2 > g(t)$ el modo con vector \mathbf{q} es estable, mientras que los modos con $\mathbf{q}^2 < g(t)$ son inestables. Debido a la inestabilidad, los dominios crecen con un tamaño característico $\xi(t)$. En el capítulo siguiente veremos un ejemplo de esta inestabilidad espinodal para un modelo concreto.

Capítulo 11

Dinámica de defectos

Estudiamos la formación de defectos en el modelo de Landau-Ginzburg con simetría $O(1)$ en 1+1 dimensiones. A partir de la aproximación lineal o de orden cero es posible obtener resultados sobre el número de defectos en función de la velocidad con la que se varía el parámetro de control, los cuales están de acuerdo con la predicción de Kibble-Zurek.

11.1. Introducción

En este capítulo pretendemos estudiar un modelo concreto en el que se formen defectos cuando el sistema es obligado a pasar a través de la transición de segundo orden con rotura de simetría. Tomaremos el caso de simetría $O(1)$, es decir, un parámetro escalar con simetría $Y \leftrightarrow -Y$, en una dimensión, cuya dinámica viene dada por la ecuación (10.8). En este caso, como vimos, los defectos son puntuales (ceros del parámetro de orden), lo que permite calcular de forma directa su densidad tanto analítica como numéricamente. Aunque como sabemos por el teorema de Mermin-Wagner [179], en una dimensión no puede haber orden de largo alcance y por tanto no hay transición de fase en equilibrio, nosotros provocaremos la transición de fase variando el parámetro de control de manera efectiva. Como veremos el sistema tiene diferentes etapas en su dinámica en las que se encuentra fuera del equilibrio y otras en las que la respuesta del mismo es suficientemente rápida para estar en cuasiequilibrio. El número de defectos que se crean después de la transición es debido esencialmente a la etapa fuera del equilibrio, por lo que el estudio se debe hacer directamente sobre las ecuaciones de Langevin del sistema. Como veremos después, para que estas etapas estén bien delimitadas debemos hacer un enfriamiento suficientemente lento.

Para estudiar el régimen en el que se crean los defectos y el valor de T_{def} y ξ_{def} utilizaremos la aproximación lineal o de orden cero para obtener expresiones exactas para la densidad de defectos y comprobaremos los resultados con simulaciones numéricas, también llevadas a cabo por Zurek y colaboradores [140, 141].

En la figura 11.1 mostramos un esquema de las diferentes etapas durante la transición

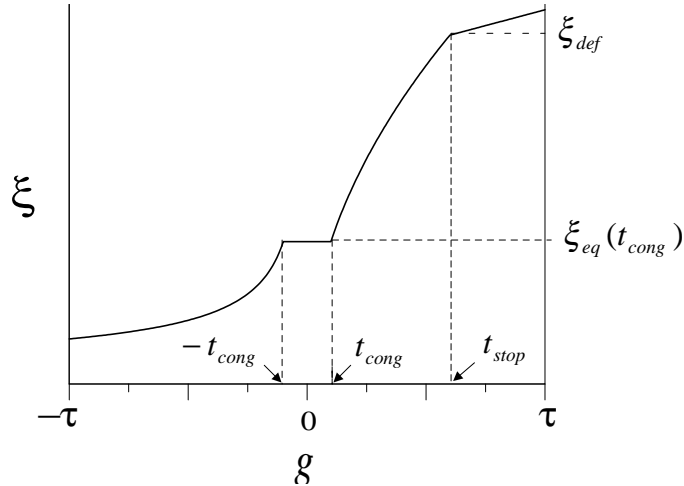


Figura 11.1: Comportamiento cualitativo de la longitud de correlación en función del parámetro de control g para la transición de fase dinámica.

dinámica y cómo varía la longitud de correlación del sistema en función del parámetro de control, y que comprobaremos a lo largo de este capítulo. Existen varias etapas en las que $\xi(t)$ está determinada por distintos procesos. En la etapa inicial $[0, -t_{\text{cong}}]$ la longitud de correlación viene dada por la expresión en equilibrio $\xi(t) \simeq \xi_{\text{eq}}(t) = g^{-1/2}(t)$. Una vez que $t > -t_{\text{cong}}$, el sistema se encuentra fuera de equilibrio hasta t_{stop} . En esta etapa, inicialmente la longitud de correlación se congela al pasar por el punto crítico tal y como predice la teoría de Kibble-Zurek. Una vez que sale de esta zona cerca del punto crítico, en el intervalo $[t_{\text{cong}}, t_{\text{stop}}]$ la longitud de correlación viene determinada por la inestabilidad espinodal. A partir de t_{stop} se produce el proceso de *coarsening* en el que la longitud de correlación permanece casi constante en nuestro caso, ya que el *coarsening* se produce por aniquilación *kink-antikink*, la cual es muy poco probable cuando la temperatura es muy pequeña.

El objetivo del presente capítulo es calcular de manera precisa t_{stop} , t_{cong} y ξ_{def} para el modelo con simetría $O(1)$. Para ello, en primer lugar veremos que las estimaciones de Kibble-Zurek para la longitud de correlación de nuestro sistema pueden obtenerse a partir de un simple análisis dimensional. Este procedimiento explicado en el apartado 11.2.1. Seguidamente, en el apartado 11.3 introducimos la aproximación lineal y la de Hartree-Fock. Bajo estas aproximaciones la ecuación en dimensión $d = 1$ se convierte en una ecuación estocástica ordinaria no homogénea para cada uno de los modos de Fourier del parámetro de orden. Esto nos llevará a estudiar el problema de partida en dimensión cero y convertirlo en un problema de bifurcación con ruido. Su estudio nos permitirá conocer, entre otras cosas, la distribución del tiempo de salida de cada uno de los modos y las condiciones bajo las cuales tiene lugar la transición en un instante bien definido. Por último, se estudia el problema unidimensional y se derivan las expresiones de t_{stop} y de la densidad de defectos tanto en el límite amortiguado como en el límite no amortiguado de la ecuación (10.8).

11.2. Ecuación de Landau Ginzburg con simetría $O(1)$

En 1+1 dimensiones la ecuación (10.8) para un parámetro de orden escalar se puede escribir de la forma

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \gamma \frac{\partial \phi}{\partial t} = g(t) \phi(t) - \phi^3 + \varepsilon \eta(x, t), \quad (11.1)$$

donde $\eta(x, t)$ es un ruido blanco local y $g(t)$ es el parámetro de control que varía en el intervalo $[-t_0, t_0]$, y $t_0 = \tau/\mu$ y $\tau > 0$, de la forma

$$g(t) = \mu t, \quad (11.2)$$

y con las condiciones iniciales

$$\phi(x, -t_0) = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial t}(x, -t_0) = 0. \quad (11.3)$$

Por otra parte, para que se cumpla el teorema de fluctuación-disipación debemos pedir que $\varepsilon^2 = 2\gamma k_B \Theta$, donde Θ es la temperatura final. En el límite sobreamortiguado $\gamma \gg 1$, la ecuación anterior constituye un modelo con aplicaciones a sistemas de mezclas binarias [27] o de semiconductores de tipo II [186]. Cuando $\gamma \rightarrow 0$, la ecuación (11.1) representa la dinámica de una teoría de campos térmica. En especial cuando $g > 0$ la ecuación anterior ha sido utilizada para estudiar los movimientos de *kinks* en presencia de ruido [199, 185, 4] con el resultado de que cuando $\varepsilon \ll 1$ los *kinks* se difunden con un coeficiente de difusión que depende de $k_B \Theta$. Además, cuando en el sistema hay presentes varios *kinks*, la difusión de éstos permite procesos de aniquilación de pares *kink-antikink* [4], que en el capítulo anterior denominamos *coarsening*.

Para estudiar la ecuación (11.1) desde el punto de vista numérico, hemos aproximado la ecuación anterior en un intervalo de longitud L con un espaciado $\Delta_x = 10^{-1}$ y condiciones de contorno periódicas. En las simulaciones típicamente $L = 4096 - 16384$. Para la integración se ha utilizado un esquema de segundo orden temporal [128].

11.2.1. Análisis dimensional

En este apartado presentamos un análisis dimensional simple que permite estimar fácilmente la dependencia de ξ_{def} respecto a los parámetros del sistema. Este estudio es interesante, pues permite estimar ξ_{def} sin apelar a las propiedades de equilibrio del sistema o a cómo escalan los tiempos de relajación o la longitud de correlación en equilibrio. La única suposición es que ξ_{def} viene determinada exclusivamente por la parte lineal de la ecuación (11.1). De este modo, y suponiendo que el parámetro de orden ϕ es adimensional, las dimensiones de los otros parámetros son

$$[\gamma] = T^{-1}, \quad [\mu] = T^{-3}, \quad [D] = L^2 T^{-2}. \quad (11.4)$$

En el caso $\gamma \ll 1$, la longitud de correlación no debe depender de γ , y por tanto esperamos que

$$\xi \sim D^{1/2} \mu^{-1/3} \quad \gamma \rightarrow 0. \quad (11.5)$$

Por otro lado, cuando $\gamma \gg 1$ podemos ignorar el término $\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$, y dividiendo la ecuación (11.1) por γ tenemos que la longitud de correlación vale

$$\xi \sim D^{1/2} \gamma^{-1/4} \mu^{-1/4} \quad \gamma \gg 1. \quad (11.6)$$

Ambas predicciones coinciden con las expresiones obtenidas a partir de la teoría de Kibble-Zurek (10.17) y (10.21). De este modo, y suponiendo que coinciden con ξ_{def} , la número de defectos en los límites considerados es igual a

$$\rho \sim \frac{L \mu^{1/3}}{D^{1/2}}, \quad \gamma \rightarrow 0, \quad (11.7)$$

$$\rho \sim \frac{L \gamma^{1/4} \mu^{1/4}}{D^{1/2}}, \quad \gamma \gg 1. \quad (11.8)$$

Como veremos después, las expresiones exactas de ρ coinciden con (11.7) y (11.8) salvo factores numéricos y funciones adimensionales.

El análisis dimensional nos permite hacer predicciones sobre otro tipo de ecuaciones. Por ejemplo, si el operador espacial es el de Swift-Hohenberg, es decir, la ecuación en una dimensión es

$$\gamma \frac{\partial \phi}{\partial t} = g(t)\phi + (c_1 + c_2 \nabla^2)^2 \phi + \phi^3 + \varepsilon \eta(x, t), \quad (11.9)$$

son definibles dos longitudes de correlación que son

$$\xi_1 = c_1^{1/2} c_2^{-1/2}, \quad (11.10)$$

$$\xi_2 = c_1^{1/2} \mu^{-1/8}. \quad (11.11)$$

La primera de las longitudes de correlación es la distancia típica entre los rollos, mientras que la segunda es la que hay entre las dislocaciones. La primera de ellas viene dada por la inestabilidad en el operador y es independiente de la velocidad con la que variamos el parámetro de control, mientras que la segunda si depende de μ .

En la siguiente sección vamos a obtener las expresiones exactas de ρ en la llamada aproximación lineal. En comparación con los resultados anteriores, las expresiones exactas son interesantes por varias razones:

- En primer lugar, nos permiten obtener todos los factores numéricos, lo que permite estimaciones precisas del orden de magnitud del número de defectos.
- En segundo lugar, veremos que el número de defectos depende del logaritmo de la intensidad del ruido, ε , así como de otros parámetros.
- En tercer lugar, veremos que existen correcciones logarítmicas a las leyes de potencias dadas por (11.5) y (11.6).

11.3. Aproximación lineal

Antes de proceder con las diferentes aproximaciones, hacemos el siguiente cambio de variables

$$T = \mu^{1/3} t, \quad \alpha = \frac{1}{2} \gamma \mu^{-1/3}, \quad \nu = D \mu^{-2/3}, \quad (11.12)$$

de manera que la ecuación de partida en función de estas nuevas variables queda

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial T^2} - \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + 2\alpha \frac{\partial \phi}{\partial T} = T\phi(x, T) - \phi^3(x, T) + \varepsilon \mu^{-1/2} \eta(x, T). \quad (11.13)$$

La aproximación lineal o de orden cero consiste en suponer que, cuando el sistema pasa por el punto crítico (es decir cuando $g \simeq 0$), $\phi \simeq 0$ y por tanto la dinámica del sistema puede aproximarse por la ecuación

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial T^2} - \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + 2\alpha \frac{\partial \phi}{\partial T} = T\phi(x, T) + \varepsilon \mu^{-1/2} \eta(x, T). \quad (11.14)$$

Esta aproximación ha sido utilizada con éxito en muchos trabajos tanto desde el punto de vista teórico [151, 164, 119, 118, 25, 7] como numérico [7, 99]. Al ser lineal la ecuación anterior, se puede resolver de manera exacta. Es evidente que esta aproximación dejará de funcionar cuando la dinámica del sistema se deba al intercambio de energía entre los modos

mediante el término ϕ^3 , o bien en el proceso de *coarsening* en el que tenemos estructuras no lineales (*kinks*) perfectamente formadas.

El siguiente orden a la aproximación lineal es la aproximación de Hartree-Fock, en la que se sustituye la energía libre (10.1) por otra que es cuadrática en ϕ , sustituyendo el término $\lambda\phi^4$ por otro que involucra sólo valores promedio de ϕ y su varianza. La ecuación resultante es

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial T^2} - \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + 2\alpha \frac{\partial \phi}{\partial T} = T\phi - \phi \langle \phi^2 \rangle + \varepsilon \mu^{-1/2} \eta(x, T), \quad (11.15)$$

y debe ser resuelta de manera autoconsistente, por lo que, en el caso general ha de estudiarse numéricamente [7]. A diferencia de la aproximación lineal, la de Hartree-Fock incluye un término a través del cual existe transferencia de energía entre los modos. Este término es $\phi \langle \phi^2 \rangle$ que podemos denominar modo cero o de campo medio.

En nuestro caso vamos a utilizar la aproximación (11.14) para determinar la longitud de correlación para cada instante de tiempo y (11.15) para establecer el instante en el que deja de ser válida dicha aproximación. Para estudiar la solución de (11.14) utilizamos los modos de Fourier

$$\hat{\phi}_k(T) = \frac{1}{L^{1/2}} \int_0^L \phi(x, T) e^{ik(2\pi/L)x} dx. \quad (11.16)$$

con $k = 0, \dots, L-1$. La ecuación de evolución para cada modo es

$$\frac{\partial^2 \hat{\phi}_k}{\partial T^2} + 2\alpha \frac{\partial \hat{\phi}_k}{\partial T} = (T - q^2) \hat{\phi}_k(T) + (2\mu)^{-1/2} \varepsilon \hat{\eta}_k(T), \quad (11.17)$$

donde $q^2 = \nu k^2 (2\pi/L)^2$ y

$$\langle \hat{\eta}_k(T) \hat{\eta}_{k'}(T') \rangle = \delta_{k, -k'} \delta(T - T'). \quad (11.18)$$

Las condiciones iniciales son

$$\hat{\phi}(T_0) = 0, \quad \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t}(T_0) = 0, \quad (11.19)$$

donde $T_0 = \mu^{1/3} t_0$. Por tanto, cada modo $\hat{\phi}_k(T)$ tiene media cero y es gaussiano. Como vemos, el estudio de la ecuación (11.14) se ha reducido a estudiar las ecuaciones desacopladas (11.17) para cada uno de los modos. En el siguiente apartado vamos a estudiar el caso del modo $q = 0$. Dado que el resto de los modos podemos obtenerlos a partir de éste mediante el cambio de variable $T \leftrightarrow T - q^2$, las conclusiones que obtengamos se pueden aplicar al resto.

11.3.1. El problema cero dimensional

En el caso de dimensión cero, la ecuación de partida es

$$\frac{d^2 \phi}{dt^2} + \gamma \frac{d\phi}{dt} = g(t)\phi(t) - \phi^3(t) + \varepsilon \eta(t). \quad (11.20)$$

El problema inicial de formación de dominios extendidos espacialmente se transforma en un problema de bifurcación dinámica en un sistema adimensional. En el caso de que $\varepsilon = 0$, si g es independiente del tiempo, el sistema presenta una bifurcación de *pitchfork* cuando $g = 0$. Para $g < 0$ el sistema tiene como único punto fijo estable $\phi = 0$, mientras que para $g > 0$ existen dos puntos fijos estables $\phi = \pm \sqrt{g}$ y uno inestable $\phi = 0$. Cuando la bifurcación es dinámica y debido al ruido, tenemos que si el parámetro vale inicialmente $\phi = 0$, entonces

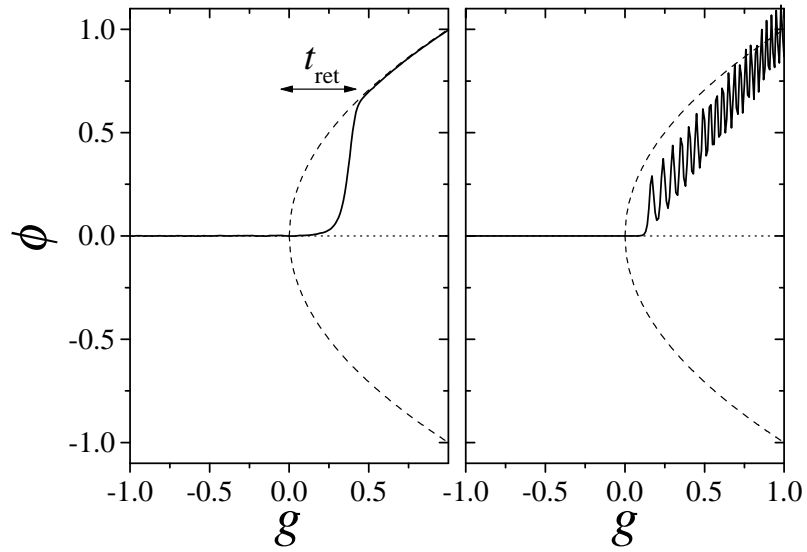


Figura 11.2: Simulaciones de la ecuación (11.20) en el caso sobreamortiguado $\gamma = 2$ (panel de la izquierda) y no amortiguado $\gamma = 0,01$ (panel de la derecha). Las líneas continuas corresponden a las simulaciones, las líneas a trazos son las soluciones estacionarias estables $\phi = \pm\sqrt{g}$, mientras que las líneas de puntos son la solución inestable $\phi = 0$ para $g > 0$. Los parámetros utilizados son $\mu = 10^{-2}$ y $\varepsilon = 10^{-4}$.

aunque $g > 0$ tenemos que $\phi \simeq 0$ durante un tiempo t_{ret} que depende del ruido y que da lugar a un retraso en la bifurcación. En la figura 11.2 hemos representado una realización de la ecuación (11.20) para el caso amortiguado ($\gamma \gg 1$) y no amortiguado ($\gamma \rightarrow 0$). Como vemos, la bifurcación se produce con retraso en el instante $t_{\text{ret}} > 0$.

En el caso sobreamortiguado y en ausencia de ruido, este problema ha sido estudiado desde los años 70 y 80 (veáse [152]). En este caso el retraso en la bifurcación se produce debido a las condiciones iniciales. Cuando $\varepsilon \neq 0$, el problema se estudió inicialmente mediante la ecuación de Fokker-Planck correspondiente [30] y a través de la integración analítica de las ecuaciones de los momentos de ϕ [257]. Torrent y San Miguel reformularon el problema como un problema de tiempos de salida concentrándose en las propiedades de las trayectorias individuales [227] en el contexto de la inestabilidad en láseres. En los últimos años, las ideas de bifurcaciones dinámicas han sido aplicadas experimentalmente en el contexto de láseres y en el estudio de la convección en fluidos [152].

En el caso no amortiguado el estudio se ha restringido al caso $\varepsilon = 0$ [155], por lo que el estudio de la ecuación anterior cuando $\gamma \rightarrow 0$ y $\varepsilon \neq 0$ se convierte en un problema con importancia propia. En este apartado veremos que, en la aproximación lineal, ambos problemas (sobreamortiguado y no amortiguado) pueden ser tratados simultáneamente recuperando los resultados obtenidos para el caso sobreamortiguado cuando $\gamma \rightarrow \infty$.

Para ello, realizando el cambio de variables (11.12) y tomando la parte lineal de la ecuación (11.20) obtenemos de variables (11.12)

$$\frac{d^2\phi}{dT^2} + 2\alpha\frac{d\phi}{dT} = T\phi(T) + \varepsilon\mu^{-1/2}\eta(T). \quad (11.21)$$

La solución exacta de esta ecuación es

$$\phi(T) = \psi^{(1)}(T) \left(C_1 - \int_{T_0}^T \psi^{(2)}(S) w^{-1}(S) dW(S) \right) \quad (11.22)$$

$$+ \psi^{(2)}(T) \left(C_2 + \int_{T_0}^T \psi^{(1)}(S) w^{-1}(S) dW(S) \right), \quad (11.23)$$

donde $W(S)$ es un proceso Wiener $dW(T)/dT = \eta(T)$, C_i son constantes dadas por las condiciones iniciales, $\psi^{(i)}$ son las soluciones de la ecuación homogénea

$$\psi^{(1)}(T) = \text{Ai}(T + \alpha^2) e^{-\alpha T}, \quad (11.24)$$

$$\psi^{(2)}(T) = \text{Bi}(T + \alpha^2) e^{-\alpha T}, \quad (11.25)$$

donde Ai Bi son las funciones de Airy, y $w(T)$ es el Wronskiano

$$w(T) = \pi^{-1} \mu^{1/3} e^{-2\alpha T}. \quad (11.26)$$

Con las condiciones iniciales $\phi(t_0) = \frac{\partial \phi}{\partial t}(t_0) = 0$ obtenemos que

$$\langle \phi^2(T) \rangle = \frac{\pi^2 \varepsilon^2}{\mu} \int_{T_0}^T e^{-2\alpha(T-S)} [\text{Ai}^2(T + \alpha^2) \text{Bi}^2(S + \alpha^2) + \text{Bi}^2(T + \alpha^2) \text{Ai}^2(S + \alpha^2)] dS. \quad (11.27)$$

Esta varianza crece de manera exponencial cuando $T + \alpha^2 > 1$, por lo que podemos aproximar (11.27) por

$$\langle \phi^2(T) \rangle \simeq \frac{\pi \varepsilon^2}{\mu} \frac{\Phi(T_0, \alpha)}{\sqrt{T + \alpha^2}} e^{\frac{4}{3}(T + \alpha^2)^{3/2} - 2\alpha T - \frac{4}{3}\alpha^3}, \quad (11.28)$$

donde

$$\Phi(T_0, \alpha) = e^{\frac{4}{3}\alpha^3} \int_{T_0}^T \text{Ai}^2(S + \alpha^2) e^{2\alpha S} dS. \quad (11.29)$$

Podemos evaluar esta expresión en los dos límites: no amortiguado ($\alpha \rightarrow 0$) y sobreamortiguado ($\alpha \gg 1$). En el caso no amortiguado se cumple¹ que si $T > 1$

$$\Phi(T_0, \alpha = 0) \simeq \int_{T_0}^{\infty} \text{Ai}^2(S) dS \simeq \Phi_1 |T_0|^{1/2}, \quad (\alpha \rightarrow 0), \quad (11.30)$$

donde $\Phi_1 = 0,318\dots$ Así

$$\langle \phi^2(T) \rangle \simeq \frac{\pi \varepsilon^2}{\mu} \frac{\Phi_1}{\sqrt{T/|T_0|}} e^{\frac{4}{3}T^{3/2}}, \quad (\alpha \rightarrow 0). \quad (11.31)$$

En el límite sobreamortiguado tenemos que

$$\Phi(T_0, \alpha \rightarrow \infty) \simeq \Phi_2 \alpha^{-1/2}, \quad (\alpha \gg 1), \quad (11.32)$$

con $\Phi_2 = (8\pi)^{-1/2}$. Por tanto

$$\langle \phi^2(T) \rangle \simeq \frac{\pi \varepsilon^2}{\mu} \frac{\Phi_2}{\sqrt{T + \alpha^2}} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} e^{\frac{4}{3}(T + \alpha^2)^{3/2} - 2\alpha T - \frac{4}{3}\alpha^3}, \quad (\alpha \gg 1). \quad (11.33)$$

¹Por definición $T = g(t)\mu^{-2/3}$, con lo que $T > 1$ si $g(t) > \mu^{2/3}$.

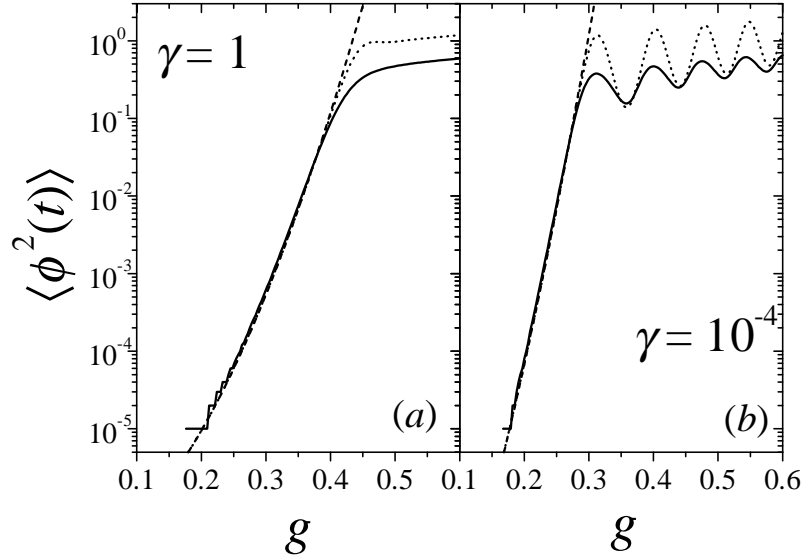


Figura 11.3: Comparación entre los valores de $\langle \phi^2(t) \rangle$ obtenidos mediante simulaciones de la ecuación (11.20) (línea continua) y las aproximaciones (11.33) y (11.31) (líneas de trazos). Los parámetros utilizados son $k_B\Theta = 5 \times 10^{-9}$, $\mu = 0,01$, y $\gamma = 1$ en el panel (a) y $\gamma = 10^{-4}$ en el panel (b).

La diferencia fundamental entre las dos expresiones anteriores es que (11.31) depende del instante inicial T_0 , mientras que (11.33) es independiente de él. En la figura 11.3 hemos comparado las expresiones (11.28) y (11.33) con simulaciones numéricas de la ecuación (11.20). Observamos que dichas aproximaciones son bastante precisas hasta $\langle \phi^2(t) \rangle \sim \mathcal{O}(10^{-1})$.

En estas expresiones no hemos tenido en cuenta la condición inicial $\phi(t_0)$ que suponemos nula. De esta manera $\langle \phi^2 \rangle$ y la evolución del sistema para $g \geq 0$ están controladas únicamente por el ruido. Sin embargo, en el caso de que la condición inicial fuera distinta de cero, para que el ruido determine la dinámica deberíamos imponer que

$$\tau > \gamma^{1/2} \mu^{1/2}, \quad \tau \gg \mu^{2/3}, \quad (11.34)$$

en el caso sobreamortiguado y no amortiguado respectivamente². En el caso de que no se cumplan estas relaciones, son las condiciones iniciales las que controlan el retraso en la bifurcación.

Las expresiones (11.31) y (11.33) no se pueden prolongar más allá del instante en el que $\phi^2(t_{\text{ret}}) \sim \mathcal{O}(1)$. Esto sucede cuando el parámetro de la bifurcación vale $\hat{g} \equiv g(t_{\text{ret}}) = \mu t_{\text{ret}}$. Para determinar de forma precisa este instante debemos comparar la aproximación lineal con el siguiente orden, que como vimos antes viene dado por la ecuación de Hartree-Fock

$$\frac{d^2 \phi}{dt^2} + \gamma \frac{d\phi}{dt} = g(t)\phi(t) - \langle \phi^2 \rangle \phi(t) + \varepsilon \eta(t). \quad (11.35)$$

La aproximación lineal funcionará mientras que el término $\langle \phi^2 \rangle \phi(t)$ sea muy pequeño en comparación con $g(t)\phi(t)$. De este modo, t_{ret} se define implícitamente como

$$\hat{g}\phi(t_{\text{ret}}) \simeq \langle \phi^2(t_{\text{ret}}) \rangle \phi(t_{\text{ret}}), \quad (11.36)$$

²Estas cotas se obtienen exigiendo que $\phi \ll 1$ en $g = 0$ cuando $\varepsilon = 0$. Por ejemplo, en el caso no amortiguado, dado que las funciones de Airy decaen como $(T - T_0)^{-1/4}$, cuando $T \rightarrow 0$, imponemos que $T_0^{-1/4} \rightarrow 0$, lo cual se cumple cuando $\tau \gg \mu^{2/3}$ [155, 152].

es decir, cuando se cumple la relación autoconsistente

$$\hat{g}\delta = \langle \phi^2(t_{\text{ret}}) \rangle, \quad (11.37)$$

con $\delta = \mathcal{O}(1)$. Utilizando las expresiones (11.31) y (11.33) para $\langle \phi^2 \rangle$ obtenemos las relaciones

$$\hat{g}^{3/2} = \frac{3}{4}\mu \ln \left(\frac{\mu^{4/3}\delta\hat{g}^{3/2}}{\Phi_1\pi\varepsilon^2} \right), \quad (\alpha \rightarrow 0), \quad (11.38)$$

$$\hat{g}^2 = \mu\gamma \ln \left(\frac{\mu^{1/2}\gamma^{3/2}\delta\hat{g}}{\sqrt{8}\Phi_2\pi\varepsilon^2} \right), \quad (\alpha \gg 1), \quad (11.39)$$

que definen el instante t_{ret} en los límites no amortiguado y sobreamortiguado. Como vemos el tiempo de retardo depende de la velocidad con la que se produce la bifurcación, y también de $|\ln \varepsilon^2|$ de manera que cuanto más pequeña es la intensidad del ruido más se retrasa la bifurcación.

Las ecuaciones (11.38) y (11.39) definen el punto en el que $\langle \phi^2(x, t_{\text{ret}}) \rangle = \mathcal{O}(1)$. Pero, dado que el crecimiento de $\langle \phi \rangle$ es exponencial (véase figura 11.3), el instante t_{ret} es prácticamente el mismo que el instante en el que el término no lineal controla la dinámica del sistema, es decir el punto donde se produce la bifurcación. Recordemos que t_{ret} viene dado por la ecuación (11.36), lo que significa que mide el tiempo para el que se produce la bifurcación *en media*. Esto significa que, aunque el tiempo para el que se produce la bifurcación es diferente para cada una de las realizaciones de la ecuación (11.20), esperamos que estén distribuidos alrededor del tiempo t_{ret} . Cuantitativamente, nos interesa el caso en el que la bifurcación está bien definida, es decir, cuando cada una de las realizaciones se bifurca para un instante $t \simeq t_{\text{ret}}$. Calculamos entonces la distribución de tiempos de salida $R(g)$ (en función del parámetro de bifurcación g) definida de la siguiente manera: si denotamos por $P(\phi, t)$ la densidad de probabilidad de que el parámetro de orden tome el valor ϕ en el instante de tiempo t , entonces la probabilidad $R(g)$ de que el parámetro de orden tome un valor fuera del intervalo $\Omega = [-\zeta, \zeta]$ cuando el parámetro de control vale g está relacionada con la probabilidad de que $|\phi| > \zeta$

$$\int_{-\tau}^g R(g') dg' = P_{|\phi| \notin \Omega}(g) \equiv \int_{\zeta}^{\infty} P(\phi, g) d\phi. \quad (11.40)$$

Derivando respecto al parámetro g obtenemos que

$$R(g) = \frac{d}{dg} P_{|\phi| \notin \Omega}(g). \quad (11.41)$$

Dado que la ecuación (11.21) es lineal, sus soluciones son gaussianas y por tanto sólo tenemos que determinar los dos primeros momentos de la distribución $P(\phi, t)$. Si se cumplen las condiciones (11.34) podemos suponer que $\langle \phi \rangle = 0$ y que $\langle \phi^2 \rangle$ viene dado por la ecuación (11.28). En ese caso

$$P(\phi, t) \simeq e^{-\phi^2/2\langle \phi^2(t) \rangle}, \quad (11.42)$$

Con ello tenemos que

$$R(g) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{g}{\mu} \frac{\zeta}{\langle \phi(t) \rangle^{1/2}} e^{-\zeta^2/2\langle \phi^2(t) \rangle}. \quad (11.43)$$

Para calcular el valor medio y la varianza de $R(g)$, denotamos por \bar{g} el valor de g tal que $\langle \phi^2(\bar{g}) \rangle = \zeta^2$, con lo que la probabilidad anterior se puede escribir como

$$R(v) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^v e^{-\frac{1}{2}e^{2v}}, \quad (11.44)$$

donde $v = -(g - \bar{g})(\bar{g}/\gamma\mu)$ en el caso amortiguado y $v = -(g - \bar{g})\sqrt{\bar{g}}/\mu$ en el no amortiguado. Dado que la relación entre g y v es lineal y sabiendo que

$$\langle v \rangle = -\frac{1}{2}(c + \ln 2), \quad \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = \frac{\pi^2}{8} \quad (11.45)$$

($c = 0,57721\dots$ es la constante de Euler), podemos calcular el valor medio y la varianza de la distribución de tiempos de salida $R(g)$, con el resultado

$$\langle g \rangle = \bar{g} + \frac{1}{2} \frac{\mu\gamma}{\bar{g}} (c + \ln 2) + \mathcal{O}(\mu^2), \quad (\alpha \gg 1), \quad (11.46)$$

$$\langle g \rangle = \bar{g} + \frac{1}{2} \frac{\mu}{\sqrt{\bar{g}}} (c + \ln 2) + \mathcal{O}(\mu^2), \quad (\alpha \rightarrow 0), \quad (11.47)$$

y

$$\langle (g - \langle g \rangle)^2 \rangle = \frac{\pi^2 \mu^2 \gamma^2}{8 \bar{g}^2} + \mathcal{O}(\mu^4), \quad (\alpha \gg 1), \quad (11.48)$$

$$\langle (g - \langle g \rangle)^2 \rangle = \frac{\pi^2 \mu^2}{8 \bar{g}} + \mathcal{O}(\mu^4), \quad (\alpha \rightarrow 0). \quad (11.49)$$

En ambos casos tenemos que la distribución de tiempos de salida está centrada aproximadamente en \bar{g} siendo la varianza proporcional a μ^2 . Recordemos que \bar{g} viene definido por $\langle \phi^2(\bar{g}) \rangle = \zeta^2$, por lo que si elegimos $\zeta^2 = \hat{g}/\delta$ entonces $\bar{g} = \hat{g}$. En este caso, la condición para que la bifurcación se produzca aproximadamente en un punto, es decir, para que la varianza de la distribución de tiempos de salida sea muy pequeña, es que $\mu\gamma \ll \hat{g}$ y $\mu^2 \ll \hat{g}$ en los casos sobreamortiguado y no amortiguado respectivamente. En el caso de que $\varepsilon \ll 1$, las condiciones anteriores quedan

$$\mu\gamma \ll |\ln \varepsilon^2|, \quad (\alpha \gg 1), \quad (11.50)$$

$$\mu^2 \ll |\ln \varepsilon^2|, \quad (\alpha \rightarrow 0). \quad (11.51)$$

En la figura 11.4 comparamos las distribuciones de tiempo de salida dadas por la expresión (11.43) con simulaciones de la ecuación (11.20).

Como resumen de esta sección, hemos visto que si se cumplen las condiciones (11.34) y (11.50)-(11.51) entonces la bifurcación prácticamente es instantánea y se produce cuando el parámetro de control toma el valor \hat{g} definido por las ecuaciones (11.38) y (11.39). La bifurcación está controlada por el ruido siempre que $\varepsilon \ll 1$ y el tiempo de retardo es proporcional a $|\ln \varepsilon^2|$.

11.4. Sistema unidimensional

En esta sección presentamos el estudio realizado en [164] de la ecuación (11.1) a partir de la aproximación lineal (11.14). A diferencia del apartado anterior, en este caso se produce una transición de fase en un punto \hat{g} en el que el sistema pasa de tener una configuración $\phi(x, t) \simeq 0$ a formar dominios en los que $\phi(x, t) = \pm\sqrt{\bar{g}}$ separados por defectos. Dicha transición tiene lugar de manera casi instantánea cuando la temperatura final es muy baja, por lo que el efecto de la no linealidad es el de congelar al sistema en un estado metaestable cuyo tiempo de decaimiento es muy grande. Por ello, la longitud de correlación en \hat{g} define el tamaño inicial de los dominios para el posterior proceso de *coarsening*. En ese caso, aparte de calcular el punto \hat{g} nos interesa también determinar el número de defectos que tiene el

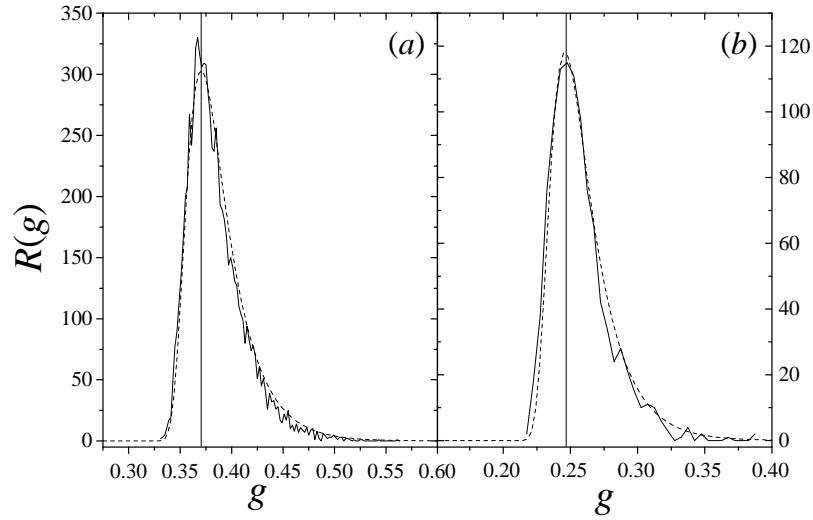


Figura 11.4: Comparación entre la distribución de tiempos de salida obtenida mediante simulaciones de la ecuación (11.20) y la expresión analítica (11.43) (línea continuas y a trazos, respectivamente). Los parámetros utilizados son $\Theta = 5 \times 10^{-9}$, $\tau = 1$, $\mu = 10^{-2}$ y $\gamma = 2$ (panel a) y $\gamma = 10^{-2}$ (panel b).

sistema. En función de este observable, la dinámica del sistema la podemos ver resumida en la figura 11.5. Así, mientras el parámetro de control es negativo se tiene que $\phi(x, t) \simeq 0$ y por tanto la densidad de ceros es muy grande. Una vez que $g > \hat{g}$ se empiezan a formar los dominios y el número de ceros es menor. Para comparar las simulaciones numéricas con las aproximaciones analíticas tenemos que tener en cuenta dos cosas:

- En primer lugar, en un sistema espacial continuo (es decir en el que $\Delta_x \rightarrow 0$) un cero del parámetro de orden no identifica de forma unívoca un defecto topológico. Ello es debido a que las fluctuaciones térmicas dan lugar a un gran número de ceros a escalas arbitrariamente pequeñas y por tanto el número de ceros diverge. Para evitar esta divergencia podemos introducir un *cut-off* en momentos [7, 209], o bien tratar con sistemas en los que $\Delta_x \neq 0$, como haremos nosotros [140, 253, 151, 164]. En este último caso es obvio que el número de ceros puede ser como máximo L , el tamaño del sistema.
- En segundo lugar, la aproximación lineal nos dice que la solución de la ecuación (11.14) es gaussiana. De este modo podemos aplicar la fórmula de Halperin-Liu-Mazenko [86, 149]: en un sistema con una simetría $O(d)$ en dimensión d la densidad de ceros viene dada por³

$$\rho = C_d \left(\frac{c''(0, t)}{c(0, t)} \right)^{d/2}, \quad (11.52)$$

donde C_d es una constante que depende de la dimensión ($C_1 = 1/\pi$, $C_2 = 1/2\pi$), $c(x, t)$ es la función de correlación del parámetro de orden

$$c(x, t) = \langle \phi(y, t) \phi(y + x, t) \rangle, \quad (11.53)$$

³Aunque muchas veces no se menciona explícitamente, la ecuación (11.52) solamente es válida si $\frac{\partial c}{\partial x}(0, t) = 0$.

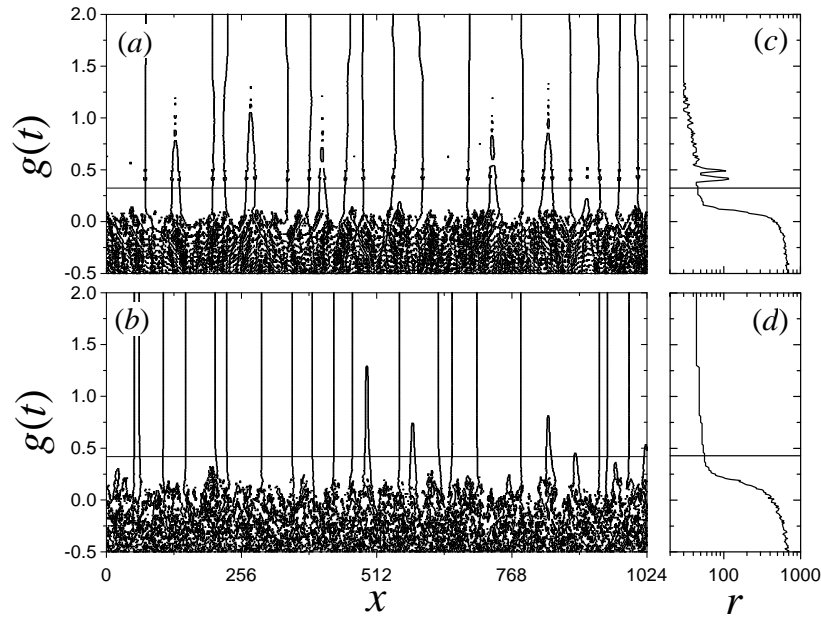


Figura 11.5: Evolución espacio-temporal de las posiciones de los ceros en función del tiempo para el límite no amortiguado (a) y sobreamortiguado (b). En (c) y (d) mostramos el número de ceros para cada caso (obsérvese que el tiempo aumenta hacia arriba). Las líneas horizontales corresponden al instante $g = \hat{g}$, con $\hat{g} \simeq 0,33$ para el panel (a) y $\hat{g} \simeq 0,39$ para el panel (b).

y $c''(x, t)$ es la derivada segunda de $c(x, t)$ respecto a x . Aunque normalmente conocida como fórmula o ecuación de Halperin-Liu-Mazenko, esta ecuación fue derivada por Itô en 1967 [101, 3] estudiando el problema de retorno en un camino browniano.

En las figuras 11.6 y 11.7 hemos representado el perfil del campo para el caso sobreamortiguado y no amortiguado respectivamente. Como vemos, los dominios no se forman claramente hasta $g = \hat{g}$. Aparte de esto, en el caso no amortiguado el campo es menos uniforme en los dominios, al contrario que cuando el sistema se encuentra sobreamortiguado, en el que podemos observar que $\phi = \pm g^{1/2}(t)$ cuando $g > \hat{g}$. Pese a este detalle los dominios siempre están perfectamente definidos, y el cero se corresponde con un defecto topológico del campo.

Aunque podríamos pensar que \hat{g} viene dado por las expresiones que obtuvimos en el apartado anterior, hay que recordar que t_{ret} se obtuvo a partir de la ecuación no lineal (11.20). Aunque la parte lineal de esta ecuación coincide con (11.17) la parte no lineal de (11.20) es $\phi^3(t)$, que no es la misma que obtenemos cuando transformamos Fourier la ecuación de partida (11.1). Aún así, el crecimiento exponencial de cada uno de los modos dado por las ecuaciones (11.31) y (11.33) es válido. La consecuencia más importante es que las condiciones para que la transición se produzca en un instante de tiempo definido y dependa exclusivamente del ruido siguen siendo las mismas que antes, es decir, se deben cumplir las ecuaciones (11.34) y (11.50).

11.4.1. Aproximación lineal

La aproximación lineal nos va a servir para determinar la dinámica del sistema durante el intervalo de tiempo $[-\tau, \hat{g}]$ y por tanto, podremos comprobar el diagrama esquemático de la figura 11.1. Recordemos que, en la aproximación lineal que vimos en el apartado 11.3,

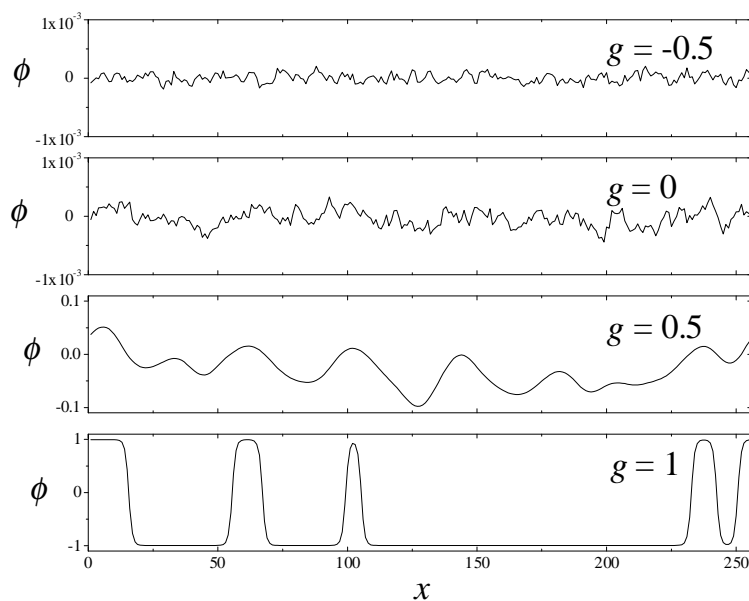


Figura 11.6: Perfiles del campo $\phi(x, t)$ para varios valores del parámetro de control en el caso sobreamortiguado $\gamma = 2$. Los parámetros utilizados son $\Theta = 5 \times 10^{-9}$, $\tau = 1$.

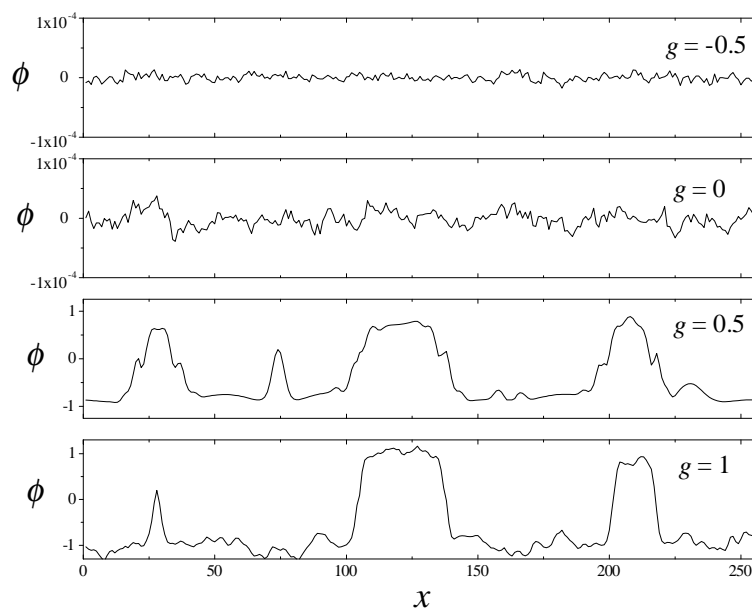


Figura 11.7: Perfiles del campo $\phi(x, t)$ para varios valores del parámetro de control en el caso no amortiguado $\gamma = 10^{-4}$. Los parámetros utilizados son $\Theta = 5 \times 10^{-9}$, $\tau = 1$.

la ecuación para cada uno de los modos de la ecuación (11.1) es

$$\frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial T^2} + 2\alpha \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial T} = (T - q^2) \hat{\phi}(k, T) + (2\mu)^{-1/2} \varepsilon \hat{\eta}(k, T). \quad (11.54)$$

En primer lugar calculamos el punto \hat{g} en el cual deja de ser válida la aproximación lineal. Para ello utilizamos como antes la aproximación de Hartree-Fock para determinar \hat{g} mediante la condición⁴

$$\hat{g}\delta = \langle \phi^2(x, t_{\text{stop}}) \rangle, \quad (11.55)$$

con $\hat{g} = g(t_{\text{stop}})$ y $\delta = \mathcal{O}(1)$. Además se tiene que

$$\langle \phi^2(x, T) \rangle = \frac{1}{L} \sum_{k=0}^{L-1} \langle \hat{\phi}(k, T) \hat{\phi}^*(k, T) \rangle, \quad (11.56)$$

donde el asterisco indica complejo conjugado. Sin embargo, $\langle \phi^2(x, T) \rangle$ crece exponencialmente y su dinámica está dominada por la de los modos más bajos. De hecho, podemos aproximar la varianza por

$$\langle \phi^2(x, T) \rangle = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \langle \hat{\phi}^*(k, T) \hat{\phi}(k, T) \rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}\lambda(T)} \langle \hat{\phi}^*(0, T) \hat{\phi}(0, T) \rangle, \quad (11.57)$$

donde

$$\lambda(T) = -2\nu \frac{\partial^2}{\partial q^2} \ln \langle \hat{\phi}^*(k, T) \hat{\phi}(k, T) \rangle|_{q=0} \quad (11.58)$$

es la longitud de correlación del sistema.

Para calcular $\langle \hat{\phi}^*(k, T) \hat{\phi}(k, T) \rangle$ resolvemos la ecuación lineal (11.54) del mismo modo que hicimos en el caso en dimensión cero. La solución es

$$\langle \hat{\phi}^*(k, T) \hat{\phi}(k, T) \rangle = \frac{\pi^2 \varepsilon^2}{\mu} \int_{T_0}^T e^{-2\alpha(T-S)} [\text{Ai}^2(T - q^2 + \alpha^2) \text{Bi}^2(S - q^2 + \alpha^2) \quad (11.59)$$

$$+ \text{Bi}^2(T - q^2 + \alpha^2) \text{Ai}^2(S - q^2 + \alpha^2)] \quad (11.60)$$

Si definimos $f(T, \alpha, q) = \frac{4}{3}(T - q^2 + \alpha^2)^{3/2} - 2\alpha(T - q^2) - \frac{4}{3}\alpha^3$, entonces si $f(T, \alpha, q) > 1$, el crecimiento de (11.59) es exponencial y se puede aproximar por

$$\langle \hat{\phi}^*(k, T) \hat{\phi}(k, T) \rangle \simeq \pi \frac{\varepsilon^2}{\mu} \Phi(T_0, \alpha, q^2) (T - q^2 + \alpha^2)^{-1/2} \times \exp \left[\frac{4}{3}(T - q^2 + \alpha^2)^{3/2} - 2\alpha(T - q^2) - \frac{4}{3}\alpha^3 \right], \quad (11.61)$$

donde

$$\Phi(T_0, \alpha, q) = e^{(4/3)\alpha^3} \int_{T_0}^{\infty} \text{Ai}(S - q^2 - \alpha^2) e^{2\alpha S} dS. \quad (11.62)$$

Con estas expresiones podemos calcular $\lambda(T)$. Así en el caso no amortiguado, es decir, cuando $\alpha \rightarrow 0$ la ecuación (11.58) queda

$$\lambda(T) = 2\nu^{1/2} T^{1/4}, \quad (11.63)$$

⁴Como podemos observar (11.55) es la misma condición que (11.37). Sin embargo y para diferenciar los resultados de esta sección con los del sistema en dimensión cero, denominamos t_{stop} en vez de t_{ret} al instante de tiempo para el que se verifica (11.55).

mientras que cuando el sistema está sobreamortiguado tenemos que

$$\lambda(T) = \left(\frac{2\nu T}{\alpha} \right)^{1/2}, \quad (11.64)$$

Como vimos en el capítulo anterior este régimen en el que la longitud de correlación crece es el de inestabilidad espinodal. El instante de tiempo en el que comienza esta etapa en la dinámica viene dado implícitamente por la ecuación $f(T, \alpha, q) \simeq 1$ y coincide con el final de la etapa en la que la longitud de correlación apenas crece. Por tanto de manera aproximada podemos calcular t_{cong} mediante la condición $f(t_{\text{cong}}, \alpha, q) = 1$ que en los casos sobreamortiguado y no amortiguado puede aproximarse de la forma

$$t_{\text{cong}} = \gamma^{1/2} \mu^{-1/2}, \quad t_{\text{cong}} = (3/4)^{2/3} \mu^{-1/3} \quad (11.65)$$

Estas expresiones coinciden con las que obtuvimos en el capítulo anterior mediante el argumento de causalidad.

En el caso no amortiguado, utilizando las ecuaciones (11.55), (11.57), (11.58) y (11.63) obtenemos

$$\langle \phi^2(x, T) \rangle \rightarrow \pi \frac{\varepsilon^2}{\mu} \Phi_2 \left(\frac{\tau}{4\pi D} \right)^{1/2} T^{-3/4} \exp \left(\frac{4}{3} T^{3/2} \right). \quad (11.66)$$

Por tanto el instante de tiempo t_{stop} o el valor del parámetro de control $\hat{g} = g(t_{\text{stop}})$ para el cual deja de ser válida la aproximación lineal, puede calcularse a partir de la ecuación (11.55), obteniéndose la siguiente relación autoconsistente

$$\hat{g}^{3/2} = \frac{3}{4} \mu \ln \left[\frac{\mu}{\pi \varepsilon^2} \left(\frac{4\pi D}{\mu \tau} \right)^{1/2} \frac{\delta \hat{g}^{7/4}}{\Phi_2} \right]. \quad (11.67)$$

Del mismo modo, utilizando (11.55), (11.57), y (11.64) obtenemos para el caso sobreamortiguado que

$$\langle \phi^2(x, T) \rangle \rightarrow \pi \frac{\varepsilon^2}{\mu} \frac{\Phi_1}{\alpha} \frac{1}{\sqrt{4\pi\nu T}} \exp \left(\frac{1}{2} \frac{T^2}{\alpha} \right), \quad (11.68)$$

y \hat{g} viene dado por

$$\hat{g}^2 = \mu \gamma \ln[\varepsilon^{-2} \gamma \delta (8D\hat{g}^3)^{1/2}]. \quad (11.69)$$

Como el crecimiento de $\langle \phi^2 \rangle$ es exponencial en ambos casos, cuando $g = \hat{g}$, $\langle \phi^2 \rangle \sim \mathcal{O}(1)$ y la parte no lineal no puede despreciarse. Por tanto \hat{g} marca el final de la zona en la que el sistema se encuentra fuera del equilibrio. El intervalo de tiempo $[t_{\text{cong}}, t_{\text{stop}}]$ en el que son válidas las aproximaciones (11.64) y (11.63) es la etapa que hemos llamado *inestabilidad espinodal*. Resumiendo, en dicha zona la longitud de correlación crece con el tiempo de la forma

$$\lambda(t) \sim D^{1/2} t^{1/2}, \quad (\alpha \gg 1), \quad (11.70)$$

$$\lambda(t) \sim D^{1/2} \mu^{-1/2} t^{1/4}, \quad (\alpha \rightarrow 0). \quad (11.71)$$

Dicha zona se extiende desde t_{cong} hasta t_{stop} . A partir de las ecuaciones (11.67) y (11.69) podemos calcular t_{stop} obteniendo que

$$t_{\text{stop}} = (3/4)^{2/3} \mu^{-1/3} f_{\gamma \rightarrow 0} = t_{\text{cong}} f_{\alpha \rightarrow 0}, \quad (11.72)$$

donde

$$f_{\alpha \rightarrow 0} = \left(\ln \left[\frac{\mu}{\pi \varepsilon^2} \left(\frac{4\pi D}{\mu \tau} \right)^{1/2} \frac{\delta \hat{g}^{7/4}}{\Phi_2} \right] \right)^{2/3}, \quad (11.73)$$

en el caso no amortiguado y

$$t_{\text{stop}} = \gamma^{1/2} \mu^{-1/2} f_{\alpha \gg 1} = t_{\text{cong}} f_{\alpha \gg 1}, \quad (11.74)$$

donde

$$f_{\alpha \gg 1} = \left(\ln[\varepsilon^{-2} \gamma \delta (8D \hat{g}^3)^{1/2}] \right)^{1/2}, \quad (11.75)$$

en el límite sobreamortiguado.

Utilizando las ecuaciones (11.64) y (11.63) podemos también calcular cuánto vale la longitud de correlación en el instante t_{stop} . En cada uno de los límites, y suponiendo que $\xi_{\text{def}} = \lambda(t_{\text{stop}})$, la longitud de correlación en t_{stop} vale

$$\xi_{\text{def}} = 2D^{1/2} \mu^{-1/3} (3/4)^{1/6} f_{\alpha \rightarrow 0}^{1/4}, \quad (11.76)$$

en el caso no amortiguado

$$\xi_{\text{def}} = 2D^{1/2} (\gamma \mu)^{-1/4} f_{\alpha \gg 1}^{1/2}, \quad (11.77)$$

en el sobreamortiguado respectivamente. Como vemos ambas expresiones coinciden con (11.5) y (11.6) aparte de factores numéricos. Del mismo modo, estas expresiones son las mismas leyes de potencias que las obtenidas a partir del argumento de Kibble-Zurek cuando los exponentes son los de campo medio [véase ecuaciones (10.24)]. Pese a ello ξ_{def} no está definido por el comportamiento del sistema cerca del punto crítico, sino por el régimen de inestabilidad espinodal, y puede ser varios órdenes de magnitud mayor que la longitud de correlación en $t = t_{\text{cong}}$. De manera explícita se tiene que, aparte de correcciones logarítmicas,

$$\xi_{\text{def}} \propto \xi_{\text{eq}}(t_{\text{cong}}). \quad (11.78)$$

En la figura 11.8 comparamos las expresiones teóricas (11.63) y (11.64) con resultados numéricos extrayendo la longitud de correlación ξ a partir de un ajuste de la función de correlación espacial a la forma $c(x) \sim e^{-x^2/2\xi^2}$. Como vemos, la longitud de correlación teórica y la numérica coinciden aproximadamente en el intervalo $[t_{\text{cong}}, t_{\text{stop}}]$, aunque en el caso no amortiguado hay cierta discrepancia al principio del intervalo. Por otro lado para $t > t_{\text{stop}}$ los valores teóricos y numéricos de ξ se separan bastante. Esto es debido a dos razones: la aproximación lineal deja de ser válida para $t > t_{\text{stop}}$ y la función de correlación es de la forma $c(x) \sim e^{-x/\xi}$ para $t > t_{\text{stop}}$ como veremos después. Dado que el número inicial de defectos se determina en el instante \hat{g} , la figura 11.8 supone que la aproximación lineal es suficiente para calcular el número de ceros.

Por último, en la figura (11.8) también comprobamos la ecuación

$$\rho \sim \frac{L}{\xi}, \quad (11.79)$$

representando la longitud de correlación obtenida a partir de la ecuación anterior y midiendo el número de defectos. Como vemos, después de t_{cong} el número de ceros que tenemos en nuestro sistema es mucho mayor que el dado por la ecuación (11.79). Este exceso de ceros es debido a que inicialmente $\phi \simeq 0$ y las fluctuaciones térmicas dan lugar a ceros que no son defectos. A pesar de ello, justo antes de que $t = t_{\text{stop}}$, se empiezan a formar de manera clara

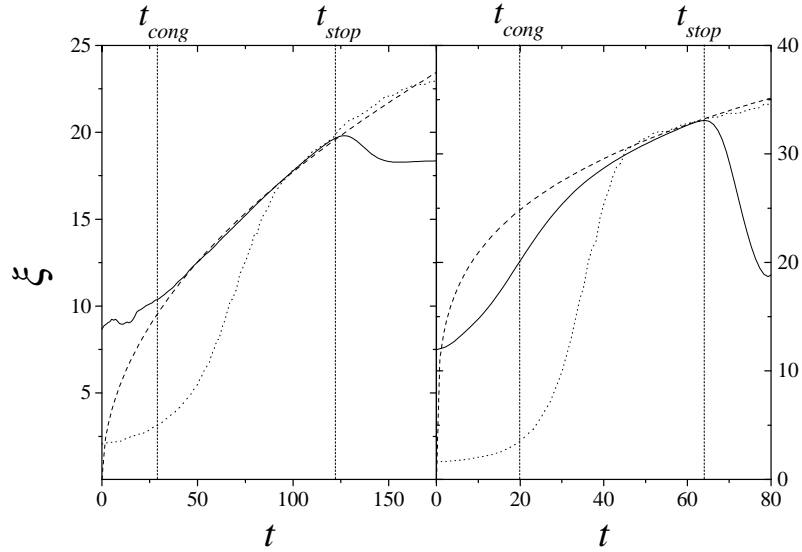


Figura 11.8: Comparación entre las distintas longitudes de correlación. La línea continua corresponde a un ajuste de la función de correlación numérica a la forma $e^{-x^2/(2\xi^2)}$. Las líneas de trazos son las expresiones analíticas (11.64) y (11.63). Las líneas de puntos son la expresión $L/(\pi\rho)$, donde ρ es el número de ceros obtenido a partir de las simulaciones de la ecuación (11.1). Los parámetros utilizados son $\Theta = 5 \times 10^{-9}$, $\tau = 1$, $D = 1$, $\mu = 10^{-3}$ y $\gamma = 2$ (panel de la izquierda) y $\gamma = 10^{-4}$ (panel de la derecha).

los dominios y dichas fluctuaciones térmicas hacen que el parámetro simplemente fluctúe alrededor de $\phi = \pm g^{1/2}(t)$, con lo que el número de ceros coincide con el de defectos.

Pasamos ahora a calcular la densidad de defectos en el instante \hat{g} . Para ello necesitamos conocer la función de correlación, que no es más que la transformada de Fourier de $\langle \hat{\phi}^*(k, T) \hat{\phi}(k, T) \rangle$. Para $t > t_{\text{cong}}$ y utilizando la ecuación (11.61) tenemos que

$$c(x) = c(0) \exp \left[-\frac{x^2}{2\lambda^2(g)} \right], \quad (11.80)$$

de manera que el número de defectos es

$$\rho = \frac{1}{\pi} \frac{L}{\lambda(g)}. \quad (11.81)$$

Si evaluamos esta expresión en los distintos límites, utilizando (11.63) y (11.64) tenemos que

$$\rho(T) = \frac{L}{2\pi} \frac{T^{-1/4}}{\nu^{1/2}}, \quad (\alpha \rightarrow 0), \quad (11.82)$$

$$\rho(T) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha^{1/2} T^{-1/2}}{(2\nu)^{1/2}}, \quad (\alpha \gg 1). \quad (11.83)$$

Utilizando (11.67) y (11.69), el número de defectos en el instante \hat{g} es

$$\rho(\hat{g}) = \frac{L}{2\pi} \frac{\mu^{1/3}}{D^{1/2}} \left\{ \frac{3}{4} \ln \left[\frac{\mu}{\pi \varepsilon^2} \left(\frac{4\pi D}{\mu \tau} \right)^{1/2} \frac{\delta \hat{g}^{7/4}}{\Phi_2} \right] \right\}^{-1/6}, \quad (\alpha \rightarrow 0), \quad (11.84)$$

$$\rho(\hat{g}) = \frac{L}{2\pi} \frac{(\mu\gamma)^{1/4}}{D^{1/2}} \{ \ln[\varepsilon^{-2} \gamma \delta (8D\hat{g}^3)^{1/2}] \}^{-1/4}, \quad (\alpha \gg 1). \quad (11.85)$$

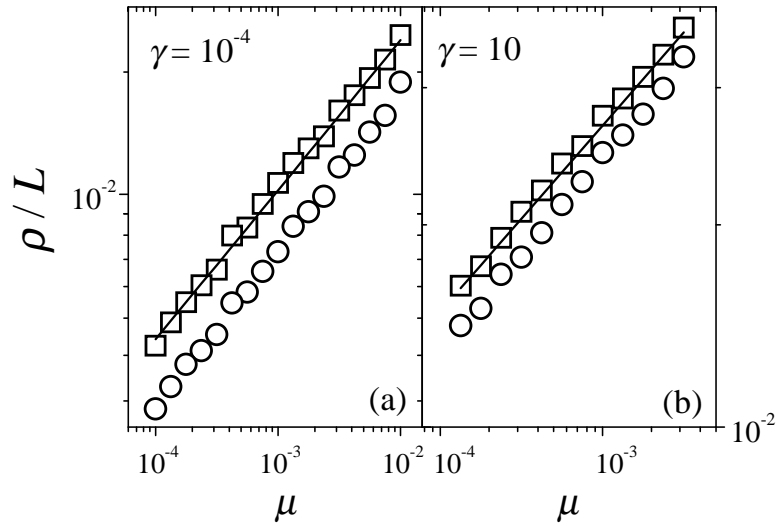


Figura 11.9: Densidad de defectos para el caso no amortiguado (a) y sobreamortiguado (b). Las líneas continuas son las aproximaciones analíticas (11.85) y (11.84). En cada panel mostramos los promedios obtenidos mediante simulaciones para el instante \hat{g} (cuadrados) y $g = \tau$ (círculos). Los parámetros utilizados son $D = \tau = 1$, $\Theta = 5 \times 10^{-9}$.

Las relaciones (11.85) y (11.84) son las expresiones finales para el número de defectos en el caso de sobreamortiguamiento y no amortiguamiento. En particular, vemos que ρ depende de μ de la forma

$$\rho(\hat{g}) = \begin{cases} \mu^{1/3} & , \text{ caso no amortiguado} \\ \mu^{1/4} & , \text{ caso sobreamortiguado} \end{cases} \quad (11.86)$$

donde hemos despreciado las correcciones logarítmicas que se obtienen en (11.84) y (11.85). De este modo reproducimos las leyes de potencias para el número de defectos en función de la velocidad con la que se produce la transición, obtenidas mediante el argumento de causalidad o el de análisis dimensional del anterior y presente capítulo respectivamente. Sin embargo, el número de defectos puede ser mucho menor que el estimado por el argumento de Kibble-Zurek, ya que como vimos antes, aunque $\xi_{\text{def}} \propto \xi_{\text{eq}}(t_{\text{cong}})$ se tiene que si, por ejemplo, $\varepsilon \ll 1$, entonces $\xi_{\text{def}} \gg \xi_{\text{eq}}(t_{\text{cong}})$ [véanse ecuaciones (11.76) y (11.77)].

Para comprobar las predicciones (11.85) y (11.84) hemos realizado simulaciones numéricas de la ecuación (11.1). En la figura 11.9 comparamos las expresiones (11.85) y (11.84) con simulaciones numéricas midiendo el número de ceros en los instantes $g = \hat{g}$ y $g = \tau$. Observamos que nuestras predicciones analíticas para $\rho(\hat{g})$ coinciden satisfactoriamente con las simulaciones. Ajustando dicho número de defectos a una ley de potencias obtenemos que $\rho(\hat{g}) \sim \mu^{0,323 \pm 0,004}$ y $\rho(\tau) \sim \mu^{0,337 \pm 0,004}$ en el caso no amortiguado y $\rho(\hat{g}) \sim \mu^{0,24 \pm 0,003}$ y $\rho(\tau) \sim \mu^{0,249 \pm 0,003}$ en el sobreamortiguado. Sin embargo, las correcciones logarítmicas pueden producir desviaciones respecto a los exponentes cuando el amortiguamiento es finito. Por ejemplo, los exponentes teóricos que se obtienen de ajustar las expresiones (11.85) y (11.84) a una ley de potencias en el intervalo estudiado en la figura (11.9) son 0,24 y 0,318 respectivamente a comparar con 1/4 y 1/3. Cuanto mayor sea el intervalo en el que se estudia el sistema mayor será la desviación respecto a la ley de potencias debido a las correcciones logarítmicas.

Dado que el número de defectos creados en el instante \hat{g} es típicamente mucho mayor que la densidad de equilibrio para la temperatura Θ , dicho número de defectos decrece después

de \hat{g} debido a que los pares *kink-antikink* se aniquilan entre ellos. La densidad de *kinks* en equilibrio térmico fue estudiada teóricamente en los años 70 [136] y más recientemente en el caso $\Theta \ll 1$ mediante simulaciones numéricas [4]. Para este sistema se tiene que, en equilibrio, la densidad de *kinks* a temperatura $\Theta \ll 1$ y en la aproximación WKB es

$$\rho_{\Theta}(t \rightarrow \infty) = \sqrt{E_k \beta} \exp(-E_k \beta), \quad (11.87)$$

con $E_k = (8/9)^{1/2} g^{3/2}$ y $\beta = \Theta^{-1}$. Más aún, en este estudio es posible ver que la función de correlación va como

$$c(x) \sim e^{-x/\xi}, \quad (11.88)$$

donde

$$\xi = \frac{1}{4} \frac{\pi}{3} \frac{1}{\sqrt{E_k \beta}} e^{E_k \beta}. \quad (11.89)$$

Aunque estos resultados son válidos cuando g es constante, es de esperar que, cuando $t > t_{\text{stop}}$, y dado que $\mu \ll 1$, aproximen bastante la solución de nuestro problema. La longitud de correlación dada por (11.89) tiene dos características: en primer lugar tiene un valor muy grande cuando $\Theta \ll 1$. En nuestras simulaciones típicamente $\Theta = 5 \times 10^{-9}$ por lo que utilizando (11.89) obtenemos para $g = 1$ que $\xi \sim e^{10^8}$. Es decir, en equilibrio, la densidad de *kinks* es prácticamente nula. En segundo lugar el tiempo necesario para llegar a este valor, es decir, el tiempo de decaimiento en este sistema, es muy grande, por lo que después de t_{stop} podemos decir que el sistema se encuentra en un estado metaestable. En un artículo reciente [84], se ha estimado que la vida media de un *kink* o un *antikink* es inversamente proporcional a $\bar{D}^{1/2}$ donde $\bar{D} \simeq (E_k \beta \gamma)^{-1}$ es la constante de difusión de los *kinks*. Para los valores típicos de los parámetros que estamos utilizando el tiempo de decaimiento es del orden de 10^5 para el caso no amortiguado y 10^9 para el caso amortiguado. Este tiempo es del orden de τ/μ para el caso no amortiguado en algunas simulaciones y por tanto es más probable la aniquilación *kink-antikink* en el caso no amortiguado. En la figura 11.5 observamos este efecto. Mientras que en el caso amortiguado los *kinks* permanecen prácticamente inmóviles, el efecto de la difusión de éstos es apreciable cuando $\gamma \rightarrow 0$, así como la aniquilación de pares *kink-antikink*. Por tanto, para $t > t_{\text{stop}}$ el posterior proceso de *coarsening* disminuye el número de defectos aunque, debido a que $\Theta \ll 1$, esta disminución es muy pequeña, sobre todo en el caso sobreamortiguado como podemos ver en la figura (11.9). Por último, dado que la aniquilación de pares *kink-antikink* es proporcional al número de ellos, el número de defectos en $g = \tau$ es proporcional al número de defectos en $g = \hat{g}$, por lo que las leyes de potencias (11.86) válidas en \hat{g} son también aproximadamente válidas en $g = \tau$.

Para ver cómo cambia el sistema del caso sobreamortiguado al no amortiguado, hemos simulado la ecuación (11.1) manteniendo μ fijo y variando el amortiguamiento γ . Los resultados se muestran en la figura 11.10, en la que vemos que el cambio se produce cuando $\alpha \simeq 1$. Cuando $\alpha \ll 1$, ρ no depende del amortiguamiento y sólo lo hace de manera logarítmica a través de $\varepsilon^2 \propto \gamma$. En el caso amortiguado, ρ depende explícitamente de γ de manera que $\rho \sim \gamma^{1/4}$.

Aparte de conocer cómo depende la densidad de defectos de la velocidad del parámetro de control, en el caso no amortiguado observamos otro efecto (véanse figuras 11.5 y 11.11): el número de defectos oscila una vez que $g \geq \hat{g}$. En las simulaciones se observan típicamente dos o tres oscilaciones claras. Este fenómeno se ha encontrado también en simulaciones del mismo sistema en dimensión $d = 2$ pero cuando la transición se produce debido a una súbita congelación del mismo, es decir cuando $\mu = \infty$ [7]⁵. Para entender este fenómeno

⁵Es interesante observar que Zurek y colaboradores también encuentran estas oscilaciones en sus simulaciones

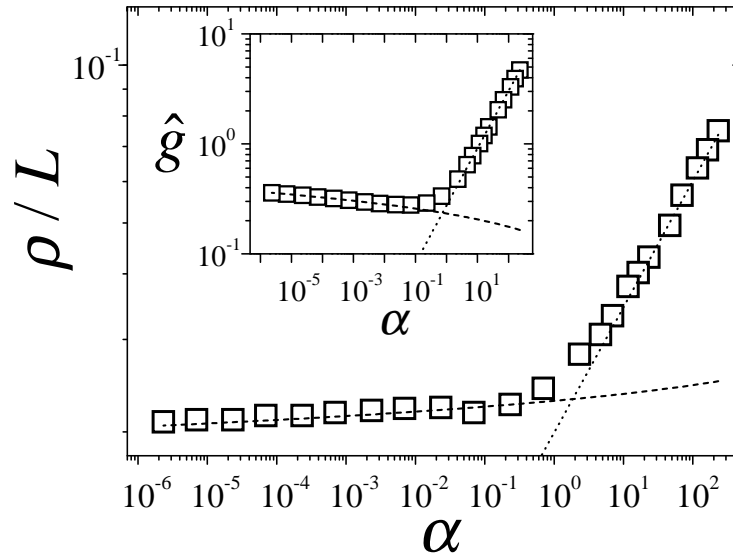


Figura 11.10: Densidad de defectos en función del amortiguamiento $\alpha = \frac{1}{2}\gamma\mu^{-1/3}$ para un valor de $\mu = 10^{-2}$ fijo. Las líneas de trazos muestran las aproximaciones (11.84) y (11.85) mientras que los cuadrados son simulaciones para con $D = \tau = 1$, $\Theta = 5 \times 10^{-9}$. La gráfica pequeña muestra la comparación entre el valor de \hat{g} para $\delta = 1/2$ obtenido mediante simulaciones numéricas (cuadrados) y las aproximaciones analíticas (11.67) y (11.69).

proponemos la siguiente interpretación. Cuando $g > 0$ el parámetro de orden se distribuye en un potencial con dos mínimos. Debido a la inercia, y en el caso que $\gamma \ll 1$, el parámetro de orden oscila alrededor de estos mínimos. Estas oscilaciones puede provocar que el parámetro de orden cruce otra vez $\phi = 0$ provocando que el número de ceros sea mayor. El periodo de las oscilaciones está pues relacionado con las oscilaciones dentro de cada uno de los pozos. Como estas oscilaciones suceden inmediatamente después de \hat{g} , el potencial en ese momento es

$$V(\phi) = \frac{1}{4}\phi^4 - \frac{\hat{g}}{2}\phi^2 = V(\phi_{\pm}) + \omega_0^2(\phi - \phi_{\pm})^2 + \mathcal{O}[(\phi - \phi_{\pm})^3], \quad (11.90)$$

donde hemos linealizado el potencial alrededor de los mínimos $\phi_{\pm} = \pm\sqrt{\hat{g}}$, y $\omega_0^2 = 2\hat{g}$. Por ello el periodo de las oscilaciones es

$$P = \frac{2\pi}{\omega_0} = \frac{2\pi}{\sqrt{2\hat{g}}}. \quad (11.91)$$

Esta predicción se compara en la figura 11.11 con simulaciones numéricas, encontrándose un buen acuerdo entre ambas.

Por último, estudiamos la ecuación en el intervalo $[-t_0, t_{\text{cong}}]$ para comprobar que la longitud de correlación varía como $\xi_{\text{eq}}(t)$ en $[-t_0, -t_{\text{cong}}]$ y permanece constante e igual a $\xi_{\text{eq}}(-t_{\text{cong}})$ en $[-t_{\text{cong}}, t_{\text{cong}}]$ tal y como predice el esquema de Kibble-Zurek. Para ello tomamos el caso sobreamortiguado por simplicidad en los cálculos. Recordemos que en este caso y en la aproximación de campo medio se tiene que $t_{\text{cong}} \sim \mu^{-1/2}$ y $\xi_{\text{eq}}(t) \simeq g^{-1/2}$. En el caso sobreamortiguado, podemos despreciar el término $\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$ en la ecuación (11.1). De este

hechas para la ecuación (11.1) (véase la figura 1 de la referencia [141]). Sin embargo estos autores no comentan este efecto.

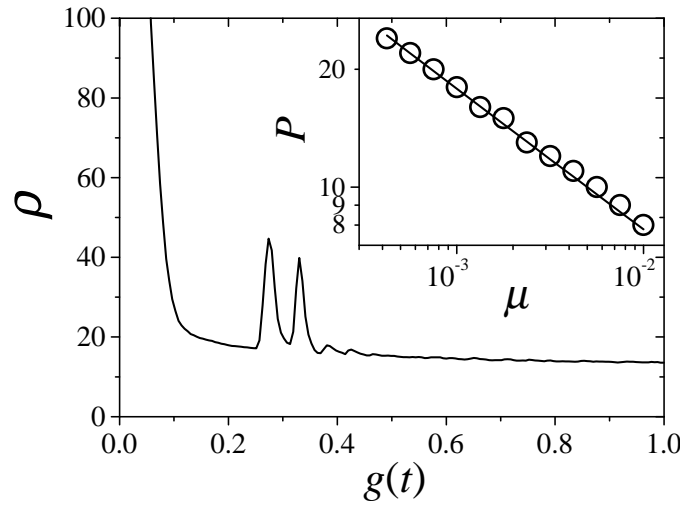


Figura 11.11: Oscilaciones en el número de ceros al variar el parámetro de control. La gráfica principal se obtiene a partir de las simulaciones de la ecuación (11.1) con $\mu = 4 \times 10^{-3}$, $\gamma = 10^{-4}$, $\varepsilon = 10^{-6}$ y $D = \tau = 1$. La gráfica pequeña muestra el periodo P de estas oscilaciones en función de μ para los mismos valores de los parámetros. La línea recta corresponde $P = 2\pi/\sqrt{2\hat{g}}$ [ec. (11.91)] con \hat{g} dado por la ec. (11.67).

modo obtenemos que

$$\langle \hat{\phi}(k, t) \hat{\phi}^*(k, t) \rangle = \varepsilon^2 \int_{-\tau/\mu}^t e^{-2q^2(t-s)} e^{\mu(t^2-s^2)} ds, \quad (11.92)$$

donde, sin pérdida de generalidad, hemos tomado $\gamma = 1$. La forma de esta función de correlación depende de la escala de tiempo $\mu^{-1/2}$. Si $t < -\mu^{-1/2}$, podemos aproximar la ecuación anterior por

$$\langle \hat{\phi}(k, t) \hat{\phi}^*(k, t) \rangle \simeq \varepsilon^2 \int_0^\infty e^{-y(q^2+\mu t)} dy, \quad (11.93)$$

y por tanto

$$c(x) \simeq \frac{\varepsilon^2}{4|g|^{-1/2}} e^{-x|g|^{1/2}}. \quad (11.94)$$

Esto significa que la longitud de correlación es $\xi(t) = \xi_{\text{eq}}(t) = |g|^{-1/2}$. El tiempo por debajo del cual es válida esta aproximación es pues $t_{\text{cong}} = \mu^{-1/2}$ para el caso sobreamortiguado. Por otro lado, cuando $t > \mu^{-1/2}$

$$\langle \hat{\phi}(k, t) \hat{\phi}^*(k, t) \rangle \simeq \varepsilon^2 e^{-2q^2 t} e^{\mu t^2} \int_{-\infty}^\infty e^{2q^2 s} e^{-\mu s^2} ds. \quad (11.95)$$

De esta manera

$$c(x) \sim e^{-x^2/(8t)}, \quad (11.96)$$

luego $\xi(t) = (4t)^{1/2}$. Esta expresión coincide con la que obtuvimos en (11.64). Por último, veamos cuánto vale la longitud de correlación dentro del intervalo $[-t_{\text{cong}}, t_{\text{cong}}]$. Para ello evaluamos $\langle \hat{\phi}(k, t) \hat{\phi}^*(k, t) \rangle$ en el instante $t = 0$

$$\langle \hat{\phi}(k, 0) \hat{\phi}^*(k, 0) \rangle \sim \varepsilon^2 e^{q^4/\mu} \int_{q^2/\mu}^\infty e^{-\mu s^2} ds. \quad (11.97)$$

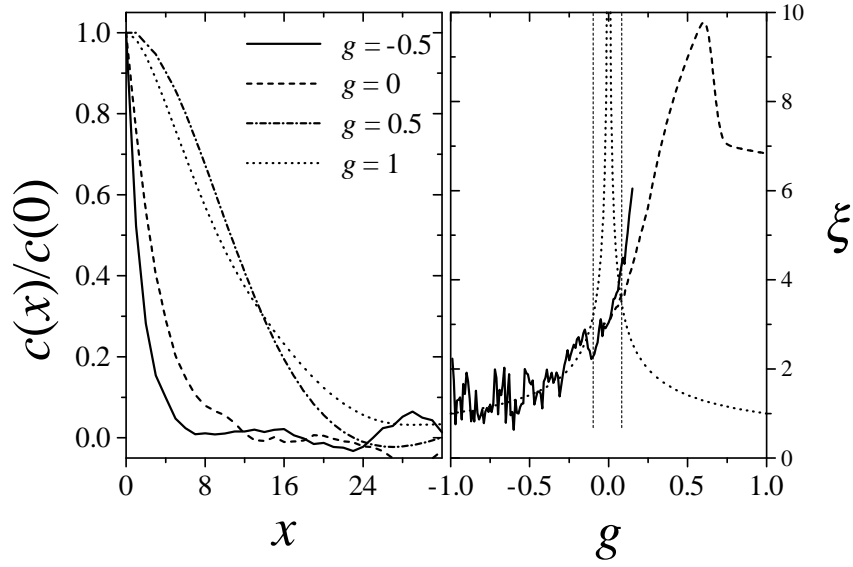


Figura 11.12: Panel de la izquierda: función de correlación normalizada $c(x)/c(0)$ para distintos tiempos en el caso sobreamortiguado. Panel de la derecha: longitud de correlación calculada a partir de las simulaciones numéricas. La línea continua es un ajuste de la función de correlación a $e^{-x/\xi}$, la línea a trazos es un ajuste a $e^{-x^2/2\xi^2}$. Por último la línea de puntos es $\xi_{\text{eq}} \sim |g|^{-1/2}$ mientras que las líneas verticales marcan los tiempos $\pm t_{\text{cong}} \simeq \pm 10$. Los parámetros utilizados son $\Theta = 5 \times 10^{-9}$, $D = \tau = 1$ y $\mu = 0,01$.

Como vemos en la expresión anterior tenemos dos longitudes características. la primera de ellas es $\mu^{-1/4}$ y la segunda $\mu^{-1/2}$. La longitud de correlación es la escala de longitud asociada a los modos más bajos. En el límite $q \rightarrow 0$ podemos aproximar la expresión anterior por

$$\langle \hat{\phi}(k, 0) \hat{\phi}^*(k, 0) \rangle \sim e^{-q^2/\mu^{1/2}}, \quad (11.98)$$

con lo que la longitud de correlación es $\xi(0) = \mu^{-1/4} = \xi_{\text{eq}}(-t_{\text{cong}})$. Este resultado concuerda con la predicción del esquema de Kibble-Zurek.

Aunque la longitud de correlación se congela en el intervalo $[-t_{\text{cong}}, t_{\text{cong}}]$, la función de correlación cambia de la forma $e^{-x/\xi}$ a $e^{-x^2/2\xi^2}$, que son las expresiones para $t < -t_{\text{cong}}$ y $t > t_{\text{cong}}$ respectivamente. En la figura 11.12 podemos observar este cambio en la forma de $c(x)$. Cuando $t > t_{\text{stop}}$ la función de correlación tiende a la dada por la ecuación (11.88). Es decir, resumiendo

$$c(x) \sim e^{-x/\xi} \quad t \in [-t_0, -t_{\text{cong}}], \quad (11.99)$$

$$c(x) \sim e^{-x^2/\xi} \quad t \in [t_{\text{cong}}, t_{\text{stop}}], \quad (11.100)$$

$$c(x) \rightarrow e^{-x/\xi} \quad t \in [t_{\text{stop}}, \infty]. \quad (11.101)$$

En la figura 11.12 también mostramos la longitud de correlación en las diferentes zonas de la dinámica. Como resumen, tanto las predicciones analíticas como numéricas corroboran el esquema que vimos al principio de este capítulo en la figura (11.1).

Parte V

Conclusiones

Capítulo 12

Conclusiones y cuestiones abiertas

En este capítulo presentamos un resumen esquemático de los principales resultados a los que hemos llegado en los capítulos anteriores y que hemos agrupado en secciones correspondientes a cada una de las partes. El capítulo se completa con un apartado sobre cuestiones abiertas y extensiones del trabajo presentado en esta memoria.

12.1. Conclusiones

12.1.1. Parte I

En esta parte hemos estudiado el crecimiento epitaxial de cristales mediante la técnica de epitaxia de haces moleculares. Nuestra contribución, en el mismo espíritu del modelo de sG [ec. (5.5)], ha sido la de proponer un modelo *continuo* que contenga de manera efectiva la estructura cristalina y la difusión superficial a lo largo de la superficie, y que hemos llamado modelo xMBE [ec. (5.3)]. Este modelo se diferencia del de sG en que el mecanismo de relajación de la superficie se debe a la difusión y no a que la superficie tienda a minimizar la tensión superficial. Las conclusiones de cada uno de los capítulos han sido:

- En el capítulo 5 hemos integrado numéricamente la ecuación en derivadas parciales estocástica o de Langevin correspondiente al modelo xMBE con los siguientes resultados:
 - En **equilibrio** el modelo xMBE presenta de forma inequívoca una *transición de fase de rugosidad* para una temperatura T_R entre una *fase plana* en la que la rugosidad w es prácticamente nula e independiente del tamaño del sistema, y una *fase rugosa* en la que $w^2 \sim L^2$ donde L^2 es el área del sustrato. Esta transición se diferencia de la de sG en que la fase de altas temperaturas es la de la teoría lineal LMBE en vez de la de EW, en la que $w^2 \sim \ln L$. Además, el análisis de tamaño finito nos indica que la transición en el modelo xMBE es de segundo orden y no del tipo Kosterlitz-Thouless como ocurre en sG. Por último, la comparación

de nuestro modelo con otros relevantes en la descripción de la transición sólido-líquido o de fusión en dos dimensiones nos ha llevado a estudiar la posibilidad de la existencia de otra transición de fase para una temperatura $T^* > T_R$. En estos modelos, para $T_R > T > T^*$ aparece una fase (denominada *hexática*) en la que la superficie es rugosa, pero en la que las pendientes en la superficie están ordenadas. Aunque las simulaciones muestran evidencias de esta posible transición, nuestras actuales posibilidades computacionales no permiten asegurar su existencia.

- **Fuera del equilibrio**, es decir, cuando existe un flujo de partículas incidente F , el modelo xMBE presenta un diagrama de fases que hemos resumido en la figura (5.8). Las distintas fases se diferencian por el comportamiento de la rugosidad w^2 y la velocidad de crecimiento de la superficie v . Dependiendo del flujo y de la temperatura, podemos tener tres tipos de fases: para $T \ll T_R$ tenemos una *fase plana* ($w^2 \simeq 0$) en la que la superficie no crece ($v \simeq 0$) debido a que los átomos que llegan a ella son desorbidos; una *fase oscilante no lineal* en la que la superficie crece ($v \neq 0$), aunque la velocidad de crecimiento depende de manera no lineal respecto al flujo de partículas incidentes y en la que la rugosidad crece ($w \neq 0$) y oscila inicialmente; por último, para $T > T_R$ tenemos una *fase rugosa* en la que la superficie crece con una velocidad proporcional al flujo de partículas incidente ($v = F$) y la rugosidad crece ($w \neq 0$) y no oscila. A diferencia de lo que sucede en equilibrio, la aparición de una fase rugosa no lineal hace que $w^2 \neq 0$ para una temperatura $T < T_R$. Sin embargo, sólo cuando $T \geq T_R$ la rugosidad es proporcional al área de la superficie. Para flujos suficientemente grandes la fase plana desaparece y el sistema es rugoso incluso a temperaturas pequeñas.
- En el capítulo 6 hemos utilizado varias técnicas analíticas para estudiar el modelo xMBE.
 - La primera de ellas es la clásica **técnica variacional**, que reproduce de manera cualitativa el diagrama de fases que encontramos en el capítulo 5, es decir, predice una transición de fase de rugosidad en equilibrio entre una fase plana y una rugosa con $w^2 \sim L^2$, y tres fases (plana, no lineal oscilante y rugosa lineal) fuera del equilibrio. Sin embargo, el acuerdo es sólo cualitativo y, por ejemplo, la temperatura de rugosidad en equilibrio que nos da la técnica variacional es mayor (pero no mucho mayor) que la obtenida numéricamente en el capítulo 5.
 - La segunda técnica es la del **grupo de renormalización**, en la que estudiamos la evolución de los coeficientes de cada uno de los términos del modelo xMBE al ir eliminando grados de libertad microscópicos de nuestro sistema. La primera conclusión es que el flujo de renormalización indica que se genera de manera efectiva una tensión superficial, aún cuando el modelo xMBE no contenga inicialmente este término. Por ello, debemos incluirlo en nuestro modelo desde el principio y de este modo el estudio que realizamos en este capítulo es mucho más general. En particular contiene el estudio del modelo de sG cuando consideramos también efectos de la difusión superficial, y del modelo xMBE. El estudio de uno u otro modelo se determina especificando las condiciones iniciales del flujo. En este capítulo hemos estudiado dos problemas
 - **Modelo xMBE**: Para ello tomamos las condiciones iniciales $\kappa \neq 0$, $V \neq 0$ y $\nu = 0$. Para un sistema finito y en equilibrio hemos visto que, dependiendo de la temperatura inicial, tenemos diferentes comportamientos: para temperaturas altas, el potencial renormaliza a cero, mientras que κ y ν tienden a

valores constantes no nulos. Sin embargo, el ν generado de forma efectiva es muy pequeño comparado con κ , lo que nos dice que el sistema es rugoso a grandes escalas con $w^2 \sim L^2$. A temperaturas intermedias el potencial también renormaliza a cero aunque el ν generado es mucho mayor y $\kappa \rightarrow 0$. En este caso el sistema es rugoso y se comporta a grandes escalas como la teoría lineal de EW, es decir, $w^2 \sim \ln L$. Por último, a temperaturas suficientemente pequeñas el potencial tiende hacia infinito y por tanto domina frente a la difusión o la tensión superficial, con lo que la superficie es plana. Mientras que la fase de altas temperaturas y la de bajas temperaturas coinciden con las que observamos en nuestras simulaciones, la de temperaturas intermedias tiene las mismas propiedades que la fase hexática sugerida por la comparación con los modelos de fusión. Sin embargo, no nos es posible la comparación con los datos numéricos del capítulo 5, ya que los parámetros utilizados en dichas simulaciones (que son las condiciones iniciales de nuestro flujo de renormalización) están lejos de la zona donde las integrales involucradas en el flujo convergen y lejos de los puntos fijos del flujo de renormalización.

- El grupo de renormalización también nos permite estudiar el **modelo de sG con difusión superficial**. Así, vemos que cuando $\kappa \neq 0$ y $\nu \neq 0$ inicialmente, se produce también una transición de rugosidad entre una fase plana y una fase rugosa en la que $w^2 \sim \ln L$, pero para una temperatura mayor que en el caso de que $\kappa \neq 0$. Esta predicción del grupo de renormalización ha sido verificada por simulaciones numéricas de la ecuación de Langevin correspondiente.
- El capítulo 7 se dedica a estudiar la fase no lineal oscilante y su relación con las oscilaciones RHEED. Así, hemos medido cómo depende el tiempo de decaimiento de estas oscilaciones, τ_{ML} , de la temperatura o del flujo de partículas para el modelo xMBE y lo hemos comparado con otros modelos continuos como sG o csG [ec. (7.13)]. Mediante simulaciones numéricas observamos que este tiempo depende de manera diferente de la temperatura o de la velocidad de crecimiento según los distintos modelos. Este hecho, y el que el decaimiento de las oscilaciones se produzca en las primeras etapas del crecimiento nos lleva a proponer un posible criterio para determinar qué modelo es relevante para cada contexto experimental.

12.1.2. Parte II

Esta parte se dedica al estudio de la fase sincronizada de osciladores no lineales acoplados entre sí con frecuencia ω y sometidos a ruido pequeño. Debido a la dificultad de la ecuación de Liouville para la densidad de probabilidad de la fase de los osciladores, la información conocida sobre este problema a través de técnicas de perturbaciones singulares como WKB era muy reducida. Nuestra aproximación al problema (desarrollada en el capítulo 9) ha sido diferente: hemos estudiado directamente las ecuaciones diferenciales estocásticas realizando desarrollos perturbativos sobre ellas. Debido a la sencillez del estudio, hemos generalizado nuestros resultados para tener en cuenta el caso de que el tiempo de correlación sea arbitrario y no nulo, sin necesidad de hacer ningún tipo de aproximación sobre este tiempo. Las principales conclusiones de este estudio son:

- En primer lugar, mediante un simple cálculo perturbativo a primer orden reproducimos los resultados existentes en la literatura sobre este problema, es decir, la existencia de

dos fases: una *fase estacionaria* en la que los osciladores no oscilan y otra *fase periódica* en la que oscilan con una frecuencia efectiva, $\omega_{\text{ef}} \neq 0$, que coincide con la frecuencia efectiva determinista (cuando el ruido no está presente). La transición entre estas dos fases se produce variando la frecuencia intrínseca de los osciladores ω para un valor ω_c que depende del término no lineal.

- A segundo orden es posible estudiar el efecto del ruido sobre el valor de ω_c . El ruido modifica el valor de ω para el que se produce la transición de una manera no trivial respecto al caso determinista. En esta transición el efecto del tiempo de correlación del ruido es importante y también no trivial.
- Cuando el sistema está en la fase periódica, presenta una resonancia también a segundo orden que define una nueva escala de tiempos en nuestro problema y que depende de la intensidad del ruido. Esto da una corrección a la frecuencia efectiva de las oscilaciones ω_{ef} respecto a la determinista que puede ser positiva o negativa dependiendo de la forma del acoplamiento:
 - Cuando el **acoplamiento es lineal**, el efecto del ruido es el de perturbar las oscilaciones de manera que la frecuencia efectiva es siempre mayor que la determinista. En este caso el efecto del tiempo de correlación es el de modificar cuantitativa pero no cualitativamente este efecto.
 - Cuando el **acoplamiento es no lineal**, dependiendo de los valores de los parámetros del sistema (incluido el tiempo de correlación del ruido), el ruido puede producir el mismo efecto que en el caso lineal o puede retardar las oscilaciones, haciendo que la frecuencia efectiva sea menor que la determinista.

Este comportamiento no trivial es corroborado por simulaciones numéricas de la ecuación de Langevin. Aunque las predicciones analíticas son obtenidas en el límite del número de osciladores $N \rightarrow \infty$, nuestras simulaciones con N finito reproducen los resultados teóricos.

- Por último, la ecuación en la aproximación de campo medio para los modelos xMBE y sG es la misma que la del modelo de osciladores con acoplamiento lineal estudiado en este capítulo. Esto nos permite comparar las predicciones analíticas de este capítulo con las simulaciones numéricas del capítulo 7 para los modelos completos xMBE y csG. En particular vemos que, por debajo de cierto valor de la intensidad del ruido, las predicciones para el periodo de las oscilaciones RHEED, y el periodo de la colectividad de osciladores acoplados de manera lineal, $P = 2\pi/\omega_{\text{ef}}$, coinciden para los modelos xMBE y sG. Sin embargo, en la aproximación de campo medio las oscilaciones no se atenúan y no es posible calcular τ_{ML} mediante las técnicas de esta parte.

12.1.3. Parte III

En el capítulo 11 hemos estudiado la dinámica de las transiciones de fase en las que se produce una rotura de la simetría y, en particular, la creación de defectos. Utilizando un modelo sencillo en una dimensión [una ecuación de Landau-Ginzburg dependiente del tiempo con ruido y simetría $O(1)$], y a partir de la aproximación lineal del problema en los límites sobreamortiguado y no amortiguado de la dinámica, medimos el número de dominios ρ que se crean al producir un enfriamiento muy lento del sistema desde una temperatura $T \gg T_C$ hasta una temperatura $T \ll T_C$, donde T_C es la temperatura donde se produce la transición en equilibrio. Las principales conclusiones de este estudio son:

- Aunque existen distintas propuestas para *estimar* el número de defectos (entre ellas la que hacemos en el capítulo 11 basada en análisis dimensional, o la de causalidad presentada en el capítulo 10), nuestro estudio es el primero que deriva expresiones *exactas* para ρ en función de los diversos parámetros del sistema. En particular el número de defectos depende de la velocidad con la que se produce la transición, μ , de la forma $\rho \sim \mu^{1/3}$ en el caso no amortiguado y $\rho \sim \mu^{1/4}$ en el sobreamortiguado, lo que reproduce las estimaciones anteriormente mencionadas.
- Sin embargo, el número de defectos que obtenemos es mucho menor que el obtenido mediante estimaciones basadas en el análisis de causalidad (básicamente desarrollado por Kibble y Zurek), en el que se supone que ρ queda determinado por propiedades del sistema en equilibrio cerca de T_C . En el caso que hemos estudiado ello se debe a que, aunque es verdad que cerca de T_C el número de defectos es básicamente el que predice el argumento de causalidad, entre T_C y la temperatura final tiene lugar otro proceso conocido como *inestabilidad espinodal* en el que decrece el número de defectos como resultado de la existencia de modos inestables en el sistema. Este proceso tiene lugar claramente fuera del equilibrio y no puede ser descrito por el argumento de causalidad. A pesar de esto, las leyes de potencias que vimos en el párrafo anterior no se ven afectadas por la inestabilidad espinodal, cuyo único efecto es el de disminuir el número de defectos proporcionalmente a su valor cerca de T_C . La constante de proporcionalidad y la anchura de la región de inestabilidad espinodal dependen del logaritmo de la intensidad del ruido, lo que hace que, cuando ésta es muy pequeña, el efecto de esta inestabilidad es muy grande. En particular el número de defectos es menor a medida que la intensidad del ruido es menor.
- Nuestras expresiones muestran que las leyes de potencias no son exactas y contienen correcciones logarítmicas de la forma $\ln \mu$, las cuales pueden ser observadas en las simulaciones numéricas del modelo considerado.

Todos estas conclusiones se han comprobado mediante simulaciones numéricas de la ecuación en derivadas parciales estocástica.

12.2. Cuestiones abiertas y posibles extensiones

Finalmente, el trabajo realizado hasta ahora plantea nuevos problemas o cuestiones que no han podido ser resueltas en el mismo.

En el estudio del crecimiento de superficies cristalinas mediante MBE existen todavía problemas abiertos y trabajo por realizar en esta dirección:

- En primer lugar queda por determinar la existencia o no de una segunda transición cerca de la de rugosidad traslacional en la que se desordenan las pendientes. Esto nos llevaría a resolver numéricamente la ecuación de Langevin correspondiente para tamaños mucho más grandes.
- El hamiltoniano del modelo totalmente discreto, o modelo de Nelson, tiene acoplos a primeros (como el caso del modelo Gaussiano Discreto) y a segundos vecinos, aunque los acoplos se organizan en forma de un laplaciano al cuadrado. Nuestra intención es la de estudiar un modelo general de hamiltonianos que contengan acoplos genéricos a primeros y segundos vecinos. Con ello esperamos poder separar las dos transiciones (orientacional y traslacional de rugosidad) y observarlas numéricamente.

- Del mismo modo sería interesante realizar simulaciones detalladas para el modelo discreto de Nelson [véase ec. (5.4)]. Este objetivo tiene una doble finalidad: por un lado comparar los resultados del modelo de Nelson con los obtenidos en esta memoria, ya que el de Nelson es la versión totalmente discreta del xMBE; por otro, zanjar la discusión entre diversos autores que vimos en el capítulo 5 sobre si la transición de rugosidad en este modelo es una única transición de fase de primer orden o dos del tipo Kosterlitz-Thouless entre las que existe una fase hexática. Este trabajo está siendo realizado en la actualidad.
- En conexión con el punto anterior, sería también interesante derivar de manera rigurosa la ecuación continua que describe el sistema a grandes escalas cuando el modelo microscópico del mismo es el laplaciano discreto de Nelson.
- Quedaría también por completar las predicciones del grupo de renormalización. En particular conocer a partir del flujo el carácter de la transición de rugosidad y realizar simulaciones numéricas en las que los parámetros permitan una comparación con las predicciones del grupo de renormalización, y queda por realizar el análisis del flujo fuera del equilibrio ($F \neq 0$) e incluir la posibilidad de que exista o se genere un término de KPZ.
- En los trabajos sobre el esquema de Nozières-Gallet aplicado al modelo de sG o el realizado en esta memoria sobre xMBE se supone que el sistema verifica en todo momento la hipótesis de hiperescalado. Dicha hipótesis puede estudiarse generalizando el grupo de renormalización para tener en cuenta la función de correlación. Este estudio sería interesante, puesto no está realizado ni siquiera para el modelo sG.
- Otras extensiones posibles en la dirección del grupo de renormalización serían las de utilizar regularización dimensional para las integrales, o, al igual que el trabajo de Amit, Goldschmidt y Grinstein sobre el modelo de sG, estudiar mediante el grupo de renormalización la teoría de campos que se obtiene del modelo xMBE. Esto nos permitiría una comparación con los trabajos publicados sobre membranas.

Nuestro estudio de las colectividades de osciladores acoplados cuando la intensidad del ruido es pequeña, nos ha proporcionado un tratamiento analítico que puede generalizarse a los siguientes problemas:

- En primer lugar, podemos considerar una colectividad de osciladores deterministas (sin ruido) acoplados entre sí y con frecuencias intrínsecas distintas distribuidas mediante una distribución de probabilidad. Un estudio preliminar muestra que, mediante desarrollos perturbativos en la varianza de la distribución de frecuencias, una colectividad determinista de osciladores diferentes tiene el mismo comportamiento que una colectividad de osciladores idénticos sometidos a un ruido. Ello se debe a que las ecuaciones a distintos órdenes de perturbaciones que se obtienen son las mismas que las obtenidas en el capítulo 9 sin más que intercambiar la intensidad del ruido por la varianza de la distribución de frecuencias. Este estudio está siendo completado en la actualidad y comparado con simulaciones numéricas.
- Así mismo, se pueden generalizar nuestros cálculos para que la dinámica del sistema incluya un término inercial [por ejemplo un término $\frac{d^2\phi}{dt^2}$ en la ecuación (9.12)]. Un estudio preliminar muestra que nuestro tratamiento analítico reproduce de una manera más sencilla los resultados obtenidos por otros autores utilizando la distribución de probabilidad para la fase.

Por último el estudio de la creación de defectos mediante transiciones de fase dinámicas es un tema de actualidad por la posible comparación con escenarios cosmológicos. Lejos de esta potencial aplicación, existen muchos sistemas en el laboratorio en el que se pueden estudiar la creación de defectos como cristales líquidos o Helio. Sin embargo, en estos sistemas el parámetro de orden no es unidimensional y la simetría que se rompe es más compleja que la de $O(1)$ que hemos considerado en esta parte de la memoria. Por ello, es necesario generalizar nuestros resultados a situaciones más genéricas.

Además, en los sistemas reales, la transición no tiene lugar en todos los puntos del sistema. Esto da lugar a permitir la posibilidad de que el parámetro de control dependa del espacio. En concreto, podemos suponer que el parámetro de control fluctúa alrededor de un valor medio que crece y por tanto en la ecuación que hemos estudiado tendríamos un ruido multiplicativo aparte del aditivo. Esto modificará las predicciones del número de defectos, ya que cerca de T_C tendremos zonas de nuestro sistema en las que se ha producido la transición y otras en las que no.

Por otro lado, como vimos mediante el análisis dimensional, podemos predecir las leyes de potencias para otro tipo de ecuaciones como aquellas que incluyen un operador de Swift-Hohenberg. En ese caso el número de defectos (en este caso dislocaciones) va como $\rho \sim \mu^{1/8}$, predicción que estamos estudiando mediante simulaciones numéricas y un estudio analítico parecido al presentado en el capítulo 11.

Referencias básicas

Una buena parte de los resultados de esta tesis se encuentra publicado en las siguientes referencias:

- Parte II
 - Esteban Moro, Rodolfo Cuerno y Angel Sánchez, “Growth dynamics of crystalline tensionless surfaces”. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4982-4985 (1997).
 - Esteban Moro, Rodolfo Cuerno y Angel Sánchez, “Crystalline lattice effects on tensionless surface dynamics”. *Microelectronic Engineering B* **43-44**, 497-505 (1998).
- Parte III
 - Esteban Moro y Angel Sánchez, “Noise effects on synchronized globally coupled oscillators”. *Europhysics Letters* **44**, 409-415 (1998).
- Parte IV
 - Esteban Moro y Grant Lythe, “Dynamics of defect formation”. *Phys. Rev. E* **59**, R1303-R1306 (1999).

Bibliografía

- [1] Y. Abe, S. Ayik, P. G. Reinhard y E. Suraud, “On stochastic approaches of nuclear dynamics”. *Phys. Rep.* **275**, 49-196 (1996).
- [2] J. A. Acebrón y R. Spigler, “Adaptive Frequency Model for Phase-Frequency Synchronization in Large Populations of Globally Coupled Nonlinear Oscillations”. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2229-2232 (1998).
- [3] R. J. Adler, *The geometry of Random Fields*. Wiley, New York (1981).
- [4] F. J. Alexander, S. Habib y A. Kovner, “Statistical mechanics of kinks in 1+1 dimensions: numerical simulations and double-Gaussian approximation”. *Phys. Rev. E* **48**, 4284-4296 (1993).
- [5] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, 2nd ed. World Scientific (1984).
- [6] Daniel J. Amit, Yadin Y. Goldschmidt y G. Grinstein, “Renormalisation group analysis of the phase transition in the 2D Coulomb gas, Sine-Gordon theory and XY-model”, *J. Phys. A* **13**, 585-623 (1980).
- [7] N. D. Antunes, L. M. A. Bettencourt, “Out of equilibrium dynamics of quench-induced spontaneous symmetry breaking and topological defect formation”. *Phys. Rev. D* **55**, 925-937 (1997).
- [8] N. D. Antunes, L. M. A. Bettencourt y W. H. Zurek, “Vortex string formation in a 3D $U(1)$ temperature quench”. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2824-2827 (1999).
- [9] L. Arnold, *Stochastic differential equations: Theory and Applications*. Krieger Publishing Company, Florida (1992).
- [10] K. Bagchi, H. C. Andersen y W. Swope, “Computer Simulation Study of the Melting Transition in Two Dimensions”. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 255-258 (1996).
- [11] P. Bak, C. Tang y K. Wiesenfeld, “Self-organized criticality: An explanation of the $1/f$ noise”. *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381-384 (1987).
- [12] A.-L. Barabási y H. E. Stanley, *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge University Press (1995).
- [13] M. C. Bartelt y J. W. Evans, “Transition to Multilayer Kinetic Roughening for Metal (100) Homoepitaxy”. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4250-4253 (1995).
- [14] A. Barone y G. Paternó, *Physics and applications of the Josephson effect*. Wiley, Nueva York (1982).
- [15] C. Bäuerle *et al.*, “Laboratory simulation of cosmic string formation in the early Universe using superfluid ^3He ”. *Nature* **382**, 332-334 (1996).
- [16] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic Press (1982).
- [17] P. Beckmann y A. Spizzichino, “The scattering of electromagnetic waves from rough surfaces”. Pergamon, Nueva York (1963).
- [18] H. van Beijeren, “Exactly solvable model for the roughening transition of a crystal surface”. *Phys. Rev. Lett.* **38**, 993-995 (1977).
- [19] C. M. Bender y S. A. Orszag, *Advanced mathematical methods for scientists and engineers*. McGraw Hill, Singapur (1978).

- [20] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher y M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena*. Oxford University Press (1992).
- [21] L. L. Bonilla, "Stable nonequilibrium probability densities and phase transitions for mean-field models in the thermodynamic limit". *J. Stat. Phys.* **46**, 659-678 (1987).
- [22] L. L. Bonilla, "Nonequilibrium phase transition to a time-dependent probability density for a model of charge-density waves". *Phys. Rev. B* **35**, 3637-3639 (1987).
- [23] L. L. Bonilla, C. J. Pérez Vicente y J. M. Rubí, "Glassy synchronization in a population of coupled oscillators". *J. Stat. Phys.* **70**, 921 (1993).
- [24] J. Borril, T. W. B. Kibble, T. Vachaspati y A. Vilenkin, "Defect production in slow first order phase transitions". *Phys. Rev. D* **52**, 1934-1943 (1995).
- [25] M. Bowick y A. Momen, "Domain formation in finite-time quenches". *Phys. Rev. D* **58**, 085014 (1998).
- [26] W. Braun, *Reflection High-Energy Electron Diffraction studies of semiconductor interfaces during molecular beam epitaxy growth*. Tesis (no publicada).
- [27] A. J. Bray, "Theory of phase-ordering kinetics". *Adv. Phys.* **43**, 357-459 (1994).
- [28] F. Briones, D. Golmayo, L. González y A. Ruiz, "Phase-locked RHEED oscillations during MBE growth of GaAs and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ", *J. Cryst. Growth* **81**, 19-25 (1987).
- [29] C. van der Broeck, J. M. Parrondo y R. Toral, "Noise-Induced Nonequilibrium Phase Transition". *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3395-3398 (1994).
- [30] G. Broggi, A. Colombo, L. A. Lugiato y P. Mandel, "Influence of random fluctuations on delayed bifurcations". *Phys. Rev. A* **42**, 3635-3637 (1986).
- [31] A. Bru *et al.*, "Super-rough dynamics on tumor growth". *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4008-4011 (1998).
- [32] D. Bruce, "Phase Transitions in the Laplacian Roughening Model". *Mater. Sci. Forum* **4**, 51 (1985).
- [33] W. K. Burton, N. Cabrera y F. C. Frank, "The growth of crystals and the equilibrium structure of their surface". *Phil. Trans. R. Soc (Londres)* **243A**, 299-358 (1951).
- [34] P. M. Chaikin y T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*. Cambridge University Press (1995).
- [35] J. Chevrier, V. Le Than, R. Buys y J. Derrien, "A RHEED study of epitaxial growth of iron on a silicon surface: Experimental evidence for kinetic roughening". *Europhys. Lett.* **16**, 737-742 (1991).
- [36] J. Chevrier *et al.*, "Influence of kinetic roughening on the epitaxial growth of silicon". *J. Phys. I (Francia)* **4**, 1309-1324 (1994).
- [37] R. Chiarello, V. Panella, J. Krim y C. Thompson, "X-Ray Reflectivity and Adsorption Isotherm Study of Fractal Scaling in Vapor-Deposited Films". *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3408-3411 (1991).
- [38] S. T. Chui y J. D. Weeks, "Phase transition in the two-dimensional Coulomb gas, and the interfacial roughening transition". *Phys. Rev. B* **14**, 4978-4982 (1976).
- [39] S. T. Chui y J. D. Weeks, "Dynamics of the Roughening Transition". *Phys. Rev. Lett.* **40**, 733-736 (1978).
- [40] S. Clarke y D. D. Vvedensky, "Origin of reflection high-energy electron-diffraction intensity oscillations during molecular-beam epitaxy: a computational modeling approach". *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2235-2238 (1987); T. Shitara *et al.*, "Step-density variations and reflection high-energy electron-diffraction intensity oscillations during epitaxial growth on vicinal GaAs (001)". *Phys. Rev. B* **46**, 6815-6824 (1992).
- [41] G.W. Collins *et al.*, "Surface Roughness Scaling of Plasma Polymer Films". *Phys. Rev. Lett.* **73**, 708 (1994).
- [42] M. A. Cotta *et al.*, "Kinetic Surface Roughening in Molecular Beam Epitaxy on InP". *Phys. Rev. Lett.* **70**, 4106-4109 (1993).
- [43] J. D. Crawford y K. T. R. Davies, "Synchronization of globally-coupled phase oscillators: singularities and scaling for general couplings". *Physica D* **125**, 1-46 (1999).

- [44] J. D. Crawford, "Scaling and Singularities in the Entrainment of Globally Coupled Oscillators". *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4341-4344 (1995).
- [45] H. Daido, "Lower critical dimension for populations of oscillators with randomly distributed frequencies: A renormalization-group analysis". *Phys. Rev. Lett.* **61**, 231-234 (1988).
- [46] H. Daido, "Quasientrainment and slow relaxation in a population of oscillators with random and frustrated interactions". *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1073-1077 (1992).
- [47] H. Daido, "Onset of cooperative entrainment in limit-cycle oscillators with uniform all-to-all interactions: bifurcation of the order function". *Physica D* **91**, 24-66 (1996).
- [48] S. Das Sarma y P. Tamborenea, "A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular-beam epitaxy". *Phys. Rev. Lett.* **66**, 325-328 (1991).
- [49] R. C. Desai y R. Zwanzig, "Statistical mechanics of a nonlinear stochastic model". *J. Stat. Phys.* **19**, 1-24 (1978).
- [50] M. E. Dodd *et al.*, "Non-appearance of vortices in fast mechanical expansions of liquid ^4He through the lambda transition". *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3703-3707 (1998).
- [51] M. E. Dodd *et al.*, "Expansion of liquid ^4He through the lambda transition". *cond-mat/9810107*.
- [52] C. R. Doering, "Modelling complex systems: stochastic processes, stochastic differential equations, and Fokker-Planck equations" en L. Nadel y D. Stein (Eds.), *Lectures in Complex Systems*, Addison-Wesley, Nueva York, pp. 3-51 (1991).
- [53] J. L. Doob, *Stochastic Processes*. John Wiley and Sons, Nueva York (1994).
- [54] J. Dziarmaga, P. Laguna y W. H. Zurek, "Symmetry breaking with a slant: topological defects after an inhomogeneous quench". *cond-mat/9810396*.
- [55] S. F. Edwards and D. R. Wilkinson, "The Surface Statistics of a Granular Aggregate". *Proc. R. Soc. London A* **381**, 17-31 (1982).
- [56] G. Ehrlich y F. G. Hudda, "Atomic view of surface self-diffusion: Tungsten on tungsten". *J. Chem. Phys.* **44**, 1039-1099 (1966); R. L. Schwoebel, "Step motion on crystal surfaces II". *J. Appl. Phys.* **40**, 614-619 (1968).
- [57] E. A. Eklund, R. Bruinsma, J. Rudnick y R. Stanley Williams, "Submicron-Scale Surface Roughening Induced by Ion Bombardment". *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1759-1762 (1991).
- [58] W. C. Elliott, P. F. Miceli, T. Tse y P. W. Stephens, "Temperature and orientation dependence of kinetic roughening during homoepitaxy: A quantitative x-ray-scattering study of Ag". *Phys. Rev. B* **54**, 17938-17942 (1996).
- [59] G. B. Ermentrout, "An adaptive model for synchrony in the firefly *Pteroptyx malaccae*". *J. Math. Biol.* **29**, 571-585 (1991).
- [60] H. J. Ernst, F. Fabre, R. Folkerts y J. Lapujoulade, "Observation of a Growth Instability during Low Temperature Molecular Beam Epitaxy". *Phys. Rev. Lett.* **72**, 112-115 (1994).
- [61] H. J. Ernst, R. Folkerts y L. Schwenger, "Thermal roughening of Cu(115): An energy-resolved helium-atom-beam scattering study". *Phys. Rev. B* **52**, 8461-8470 (1995).
- [62] F. Falo *et al.*, "Langevin molecular dynamics of interfaces: Nucleation versus spiral growth". *Phys. Rev. B* **43**, 8081-8088 (1991).
- [63] F. Family and T. Vicsek, "Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model". *J. Phys. A* **18**, L75-L81 (1985).
- [64] K. Fang, T.-M. Lu y G.-C. Wang, "Roughening and faceting in a Pb thin film growth on the Pb(110) surface". *Phys. Rev. B* **49**, 8331-8339 (1994).
- [65] D. S. Fisher, "Sliding charge-density waves as a dynamical critical phenomena". *Phys. Rev. B* **31**, 1396-1427 (1985).

- [66] L. M. Floría y J. J. Mazo, "Dissipative dynamics of the Frenkel-Kontorova model". *Adv. Phys.* **45**, 505-598 (1996).
- [67] D. Forster, D. R. Nelson y M. J. Stephen, "Large-distance and long-time properties of a randomly stirred fluid". *Phys. Rev. A* **16**, 732-749 (1977).
- [68] J. Frölich y T. Spencer, "The Kosterlitz-Thouless transition in two-dimensional abelian spin systems and the Coulomb gas". *Commun. Math. Phys.* **81**, 527-602 (1981).
- [69] H. Fukuyama y P. A. Lee, "Dynamics of the charge-density wave. I. Impurity pinning in a single chain". *Phys. Rev. B* **17**, 535-541 (1978); H. Fukuyama y P. A. Lee, "Dynamics of the charge-density wave. II. Long-range Coulomb effects in an array of chains". *ibid* **17**, 542-548 (1978); P. A. Lee y T. M. Rice, "Electric field depinning of charge density waves". *Phys. Rev. B* **19**, 3970-80 (1979).
- [70] B. Gallas, I. Berbezier, J. Chevrier y J. Derrien, "Gallium-mediated homoepitaxial growth of silicon at low temperatures". *Phys. Rev. B* **54**, 4919-4925 (1996).
- [71] F. Gallet, S. Balibar y E. Rolley, "The roughening transition. II. Experiments on static and dynamic properties near the first roughening transition of hcp ^4He ". *J. Physique* **48**, 369-377 (1987).
- [72] J. García-Ojalvo, A. M. Lacasta, J. M. Sancho y R. Toral, "Phase separation driven by external fluctuations". *Europhys. Lett.* **42**, 125-130 (1998).
- [73] T. C. Gard, *Introduction to Stochastic Differential Equations*. Marcel Dekker, New York (1988).
- [74] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer-Verlag Berlin (1985).
- [75] A. J. Gill, "Defects and the dynamics of phase transitions". *Contemporary Phys.* **39**, 13-47 (1998).
- [76] S. Giorgini and R. M. Bowley, "The Response to an External AC Drive of the Interface Between Solid and Liquid Helium Near the Roughening Transition", *J. Phys. I France* **5**, 815-845 (1995).
- [77] J. Glimm y D. Sharp, "Stochastic partial differential equations: Selected applications in continuum physics". Preprint SUNYSB-AMS-96-24
- [78] L. J. Gómez *et al.*, "He scattering study of the nucleation and growth of Cu(100) from its vapor". *Phys. Rev. B* **31**, 2551-2553 (1985).
- [79] R. Graham en *Instabilities and nonequilibrium structures III*, E. Tirapegui y W. Zeller (eds.), Reidel, Dordrecht (1991).
- [80] G. Grinstein, D. Mukamel, R. Seidin y C. H. Bennett, "Temporally Periodic Phases and Kinetic Roughening". *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3607-3610 (1993).
- [81] G. Grinstein, "Generic scale invariance in classical nonequilibrium systems". *J. Appl. Phys.* **69**, 5441-5446 (1991); G. Grinstein, "Generic scale invariance and self-organized criticality" en *Scale Invariance, interfaces and non-equilibrium systems*. A. McKane, M. Droz, J. Vannimerus y D. Wolf (Editores). Plenum Press, Nueva York (1995).
- [82] G. Grüner, A. Zawadowski y P. M. Chaikin, "Nonlinear conductivity and noise due to charge-density-wave depinning in NbSe_3 ". *Phys. Rev. Lett.* **46**, 511-513 (1981).
- [83] G. Grüner, "The dynamics of charge-density waves". *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1129-1181 (1988).
- [84] S. Habib y G. Lythe, "Dynamics of kinks: nucleation, diffusion and annihilation". Los Alamos Laboratory Preprint (no publicado).
- [85] B. I. Halperin y D. R. Nelson, "Theory of Two-Dimensional Melting". *Phys. Rev. Lett.* **41**, 121-124 (1978); D. R. Nelson y B. I. Halperin "Dislocation-mediated melting in two dimensions", *Phys. Rev. B* **19**, 2457-2484 (1979).
- [86] B. I. Halperin, en *Physics of Defect*, Proceedings of Les Houches, Session XXXV, 1980 NATO ASI, edited by R. Balian, M. Kléman y J.-P. Poirier (North-Holland, Amsterdam, 1981), p 816.

- [87] T. Halpin-Healy, Y.-C. Zhang, “Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that” *Physics Reports* **254**, 215-414 (1995).
- [88] J. J. Harris, B. A. Joyce y P. J. Dobson “Oscillations in the surface structure of Sn-doped GaAs during growth by MBE”. *Surf. Sci* **103**, L90-L96 (1981).
- [89] Y.-L. He, H.-N. Yang, T.-M. Lu y G.-C. Wang, “Measurements of Dynamic Scaling from Epitaxial Growth Front: Fe Film on Fe(001)”. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3770-3773 (1992).
- [90] P. C. Hendry *et al.*, “Generation of defects in superfluid ^4He as an analogue of the formation of cosmic strings”. *Nature* **368**, 315-317 (1994).
- [91] M. Henzler, “Diffraction from stepped surfaces”. En [144], pág. 193.
- [92] P. Herrasti *et al.*, “Scanning-tunneling-microscopy on the growth mode of vapor-deposited gold films”. *Phys. Rev. A* **45**, 7440-7447 (1992).
- [93] C. Herring, “Effect of change of scale on sintering phenomena”. *J. Appl. Phys.* **21**, 301-303 (1950).
- [94] I. Heyvaert, J. Krim, C. Van Haesendonck y Y. Bruynseraede, “Surface morphology and kinetic roughening of Ag on Ag(111) studied with scanning tunneling microscopy”. *Phys. Rev. E* **54**, 349-353 (1996).
- [95] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, “Theory of dynamic critical phenomena”, *Rev. Mod. Phys.* **49**, 435-479 (1977).
- [96] W. Horsthemke y R. Lefever, *Noise-induced transitions. Theory and applications in Physics, Chemistry, and Biology*. Springer-Verlag Berlin (1984).
- [97] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd ed. John Wiley and Sons (1987).
- [98] T. Hwa, M. Kardar y M. Paczuski, “Growth-Induced Roughening of Crystalline Facets”. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 441-444 (1991).
- [99] D. Ibaceta y E. Calzetta, “Counting defects in an instantaneous quench”. hep-ph/9810301.
- [100] N. Ikeda, S. Watanab, M. Fukushima y H. Kunita (eds.) *Itô Stochastic Calculus and Probability Theory*. Springer-Verlag (1996).
- [101] K. Itô, “Expected number of zeros of continuous stationary Gaussian processes”. *J. Math Kyoto Univ.* **2-3**, 207-216 (1964).
- [102] C. Itzykson y J.-M. Drouffe, *Statistical Field Theory*, Vol. 1 y 2. Cambridge University Press, Cambridge (1991).
- [103] A. Iwamoto, T. Yoshinobu y H. Iwasaki, “Stable Growth and Kinetic Roughening in Electrochemical Deposition”. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4025-4028 (1994).
- [104] W. Janke y H. Kleinert, “First-order transition in a two-dimensional laplacian roughening modelo on a square lattice”. *Phys. Lett. A* **114**, 255-262 (1986).
- [105] W. Janke y D. Toussaint, “Laplacian roughening on a triangular lattice”. *Phys. Lett. A* **116**, 387-391 (1986).
- [106] W. Janke y H. Kleinert, “Monte Carlo study of two-step defect melting”. *Phys. Rev. B* **41**, 6848-6863 (1990).
- [107] J. H. Jeffries, J.-K. Zuo y M. M. Craig, “Instability of Kinetic Roughening in Sputter-Deposition Growth of Pt on Glass”. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4931-4934 (1996).
- [108] M. D. Johnson *et al.*, “Stable and unstable growth in molecular beam epitaxy”. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 116-119 (1994).
- [109] D. W. Jordan y P. Smith, *Nonlinear Ordinary Differential Equations*. Clarendon Press, Oxford (1987).
- [110] Leo P. Kadanoff, “Multicritical behavior at the Kosterlitz-Thouless Critical Point”. *Ann. Phys.* **120**, 39-71 (1979).
- [111] B. Kahng, A. Berera y K. A. Dawson, “Surface phase transitions: Roughening, preroughening, orientational roughening and reconstruction in an isotropic frustated Ising model”. *Phys. Rev. A* **42**, 6093-6103 (1990);

- [112] H. Kallabis, L. Brendel, J. Krug y D. E. Wolf, "Damping of oscillations in layer-by-layer growth". *Int. J. Mod. Phys. B* **11**, 3621-3634 (1997); H. Kallabis *et al.*, "Damping of Growth Oscillations". *cond-mat/9901178* (1999).
- [113] G. Kallianpur, "Some recent developments in nonlinear filtering theory" en [100].
- [114] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland (1981).
- [115] H. C. Kang y J. W. Evans, "Scaling analysis of surface roughness and Bragg oscillation decay in models for low-temperature epitaxial growth", *Surf. Sci.* **271**, 321-330 (1992).
- [116] M. Kardar, G. Parisi y Y.-G. Zhang, "Dynamic scaling of growing Interfaces." *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889-892 (1986).
- [117] M. Kardar y J. O. Indekeu, "Wetting of Fractally Rough Surfaces". *Phys. Rev. Lett.* **65**, 622-625 (1990).
- [118] G. Karra y R. J. Rivers, "Initial vortex densities after a temperature quench". *Phys. Lett. B* **414**, 28-33 (1997).
- [119] G. Karra y R. J. Rivers, "Reexamination of Quenches in ^4He (and ^3He)". *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3707-3710 (1998).
- [120] R. Kenna y A. C. Irving, "The Kosterlitz-Thouless universality class". *Nuclear Physics B* **485**, 583-612 (1997).
- [121] D. A. Kessler, H. Levine y L. M. Sander, "Molecular-Beam Epitaxial Growth and Surface Diffusion". *Phys. Rev. Lett.* **69**, 100-103 (1992)
- [122] T. W. B. Kibble, "Topology of cosmic domains and strings". *J. Phys. A* **9**, 1387-1398 (1976).
- [123] T. W. B. Kibble, "Some implications of a cosmological phase transition". *Phys. Rep.* **67**, 183-199 (1980).
- [124] J. M. Kim y S. Das Sarma, "Dynamical universality of the nonlinear conserved current equation for growing interfaces". *Phys. Rev. E* **51**, 1889-1893 (1995).
- [125] S. Kim y M. Y. Choi, "Arrays of resistively shunted Josephson junctions in magnetic fields". *Phys. Rev. B* **48**, 322-332 (1993).
- [126] S. Kim, S. H. Park y C. S. Ryu, "Noise-induced transitions in coupled oscillator systems with a pinning force". *Phys. Rev. E* **54**, 6042-6052 (1996).
- [127] S. Kim, S. H. Park y C. S. Ryu, "Multistability in coupled oscillator systems with time delay". *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2911-2913 (1997).
- [128] P. E. Kloeden, E. Platen, *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*. Springer-Verlag Berlin (1992).
- [129] H. J. F. Knops and L. W. J. den Ouden, "Momentum Space Renormalization for the sine-Gordon Model". *Physica A* **103**, 597-608 (1980).
- [130] M. Kosterlitz y D. J. Thouless, "Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems". *J. Phys. C* **6**, 1181-1203 (1973).
- [131] M. Kotrla, A.C. Levi y P. Šmilauer, "Roughness and nonlinearities in (2+1)-dimensional growth models with diffusion". *Europhys. Lett.* **20**, 25-30 (1992).
- [132] J. Krim, I. Heyvaert, C. Van Haesendonck y Y. Bruynsereade, "Scanning Tunneling Microscopy Observation of Self-Affine Fractal Roughness in Ion-Bombarded Film Surfaces". *Phys. Rev. Lett.* **70**, 57 (1993).
- [133] J. Krim y G. Palasantzas, "Experimental observations of self-affine scaling and kinetic roughening at sub-micron lengthscales". *Int. Journal of Mod. Phys. B* **9**, 599-632 (1995).
- [134] J. Krug, M. Plischke y M. Siegert, "Surface diffusion currents and the universality classes of growth". *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3271-3274 (1993).
- [135] J. Krug, "Origins of scale invariance in growth processes". *Adv. Phys.* **46**, 139-282 (1997).

- [136] J. A. Krumhansl y J. R. Schrieffer, "Dynamics and statistical mechanics of a one-dimensional model Hamiltonian for structural phase transitions". *Phys. Rev. B* **11**, 3535-3545 (1975); J. F. Currie, J. A. Krumhansl, A. R. Bishop y S. E. Trullinger, "Statistical mechanics of a one-dimensional solitary-wave-bearing scalar fields: Exact results and ideal-gas phenomenology". *Phys. Rev. B* **22**, 477-496 (1980).
- [137] Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*. Springer-Verlag Berlin (1984).
- [138] M. G. Lagally (editor), "Kinetics of Ordering and Growth at Surfaces". NATO ASI Series B, Vol. 239, Plenum Press (1990).
- [139] M. G. Lagally, D. E. Savage y M. C. Tringides, "" . En [144], p. 139.
- [140] P. Laguna y W. H. Zurek, "Density of kinks after a quench: When the symmetry breaks, how big are the pieces?". *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2519-2522 (1997).
- [141] P. Laguna y W. H. Zurek, "Critical dynamics of symmetry breaking: quenches, dissipation, and cosmology". *Phys. Rev. D* **58**, 085021/1-4 (1998).
- [142] Z.-W. Lai y S. Das Sarma, "Kinetic roughening with surface relaxation: Continuum versus atomistic models". *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2348-2351 (1991).
- [143] J. Lapujoulade, "The roughening of metal surfaces". *Surf. Sci. Rep.* **20**, 191-249 (1994).
- [144] P. K. Larsen y P. J. Dobson (editores), *Reflection High Energy Electron Diffraction and Reflection Imaging of Surfaces*. Plenum, Nueva York (1988).
- [145] N. E. Lee, D. G. Cahill y J. E. Greene, "Surface roughening during low-temperature Si epitaxial growth on singular vs vicinal Si(001)". *Phys. Rev. B* **53**, 7876-7879 (1996).
- [146] A. C. Levi y M. Kotrla, "Theory and simulation of crystal growth", *J. Phys* **9**, 299-344 (1997).
- [147] Y. Levin y K. A. Dawson, "Sine-Gordon renormalization of the orientational roughening transition". *Phys. Rev. A* **42**, 3507-3511 (1990).
- [148] B. F. Lewis *et al.*, "RHEED oscillation studies of MBE growth kinetics and lattice mismatch strain-induced effects during InGaAs growth on GaAs(100)". *J. Vac. Sci. Technol. B* **2**, 419-424 (1984).
- [149] F. Liu y G. F. Mazenko, "Defect-defect correlation in the dynamics of first-order phase transitions". *Phys. Rev. B* **46**, 5963-5971 (1992).
- [150] J. M. López, M. A. Rodríguez y R. Cuerno, "Power spectrum scaling in anomalous kinetic roughening of surfaces". *Physica A* **246**, 329-347 (1997).
- [151] G. D. Lythe, "Domain formation in transitions with noise and a time-dependent bifurcation parameter". *Phys. Rev. E* **53**, R4271-R4274 (1996).
- [152] G. D. Lythe, "Stochastic slow-fast dynamics". Tesis (no publicada).
- [153] S. K. Ma, "A useful general review of critical phenomena". *Rev. Mod. Phys.* **45**, 589- (1973)
- [154] S. K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics, Vol. 46. Benjamin (1976).
- [155] G. J. M. Marée, "Slow passage through a pitchfork bifurcation". *SIAM J. Appl. Math* **56**, 889-918 (1996).
- [156] I. V. Markov, *Crystal Growth for Beginners*. World Scientific (1996).
- [157] M. Marsili y A. J. Bray, "Soluble Infinite-Range Model of Kinetic Roughening". *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2750-2753 (1996).
- [158] P. Meakin, *Fractals, scaling and growth far from equilibrium*. Cambridge University Press, (1998).
- [159] J. H. Miller, Jr. *et al.*, "Phase coherence in the hysteric magnetic behavior of parallel Josephson-junction arrays". *Phys. Rev. B* **49**, 15317-15321 (1994).
- [160] K. K. Mon y S. Teitel, "Phase coherence and nonequilibrium behavior in Josephson junctions arrays". *Phys. Rev. Lett.* **62**, 673-676 (1989).

- [161] E. Moro, R. Cuerno y A. Sánchez, "Growth Dynamics of Crystalline Tensionless Surfaces". *Phys. Rev. Lett* **78**, 4982-4985 (1997).
- [162] E. Moro, R. Cuerno y A. Sánchez, "Crystalline lattice effects on tensionless surface dynamics". *Microelectronic Engineering* **43-44**, 497-505 (1998).
- [163] E. Moro y A. Sánchez, "Noise effects on Synchronized globally coupled oscillators". *Europhys. Lett.* **44**, 409-415 (1998).
- [164] E. Moro y G. D. Lythe, "Dynamics of defect formation". *Phys. Rev. E* **59**, R1303-R1306 (1999).
- [165] H. Müller-Krumbhaar, "Developments in the theory of roughening transition" en *1976 Crystal Growth and Materials*, editado por E. Kaldis y H. J. Scheel (North-Holland, New York) pág. 79 (1977).
- [166] W. W. Mullins, "Theory of thermal grooving". *J. Appl. Phys.* **28**, 333-339 (1957).
- [167] J. D. Murray, *Mathematical Biology*. Springer-Verlag, Nueva York (1993).
- [168] J. H. Neave *et al.*, "Dynamics of film growth of GaAs by MBE from RHEED observations". *Appl. Phys. A* **31**, 1-8 (1983); J. M. Van Hove *et al.*, "Damped oscillations in reflection high energy electron diffraction during GaAs MBE". *J. Vac. Sci. Technol B* **1**, 741-743 (1983).
- [169] J. H. Neave *et al.*, "Some observations on Ge:GaAs(001) and GaAs:Ge(001) interfaces and films". *J. Vac. Sci. Technol. B* **1**, 668-674 (1983); J. Aarts y P. K. Larsen en [144], pp. 449-461.
- [170] D. R. Nelson, "Laplacian Roughening models and two-dimensional melting". *Phys. Rev. B* **26**, 269-283 (1982).
- [171] M. den Nijs, "Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin clusters". *Phys. Rev. B* **40**, 4709-4734 (1989)
- [172] J. E. van Nostrand *et al.*, "Surface morphology during multilayer epitaxial growth of Ge(001)". *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1127-1130 (1995).
- [173] P. Nozières y F. Gallet, "The roughening transition of crystal surfaces. I. Static and dynamic renormalization theory, crystal shape and facet growth". *J. Physique* **48**, 353-367 (1987).
- [174] P. Nozières, "Shape and Growth of Crystals" en *Solids far from equilibrium*. C. Godrèche (editor). Cambridge University Press (1992).
- [175] S. Pal y D. P. Landau, "Monte Carlo simulation and dynamic scaling of surfaces in MBE growth". *Phys. Rev. B* **49**, 10597-10606 (1994).
- [176] G. Palasantzas y J. Krim, "Scanning Tunneling Microscopy Study of the Thick Film Limit of Kinetic Roughening". *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3564 (1994).
- [177] V. Panella y J. Krim, "Adsorption isotherm study of the fractal scaling behavior of vapor-deposited silver films". *Phys. Rev. E* **49**, 4179-4184 (1994).
- [178] E. Pardoux, "Stochastic partial differential equations, a review". *Bull. Sc. Math.* **117**, 29-47 (1993).
- [179] G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Frontiers in Physics, Vol. 66. Addison-Wesley (1988).
- [180] K. Park, B. Kahng y S. S. Kim, "Surface dynamics of the Wolf-Villain model for epitaxial growth in 1+1 dimensions". *Physica A* **210**, 146-154 (1994); P. Šmilauer y M. Kotrla, "Crossover effects in the Wolf-Villain model of epitaxial growth in 1+1 and 2+1 dimensions". *Phys. Rev. B* **49**, 5769-5772 (1994).
- [181] P. Pfeifer, Y. J. Wu, M. W. Cole and J. Krim, "Multilayer Adsorption on a Fractally Rough Surface". *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1997-2000 (1989); P. Pfeifer, M. W. Cole y J. Krim, "Reply to: Wetting on a Fractally Rough Surfaces". *Ibid.* **65**, 663 (1990).
- [182] A. Pimpinelli y J. Villain, *Physics of Crystal Growth*. Cambridge University Press (1999).
- [183] M. Plischke y B. Bergensen, *Equilibrium Statistical Mechanics*. Prentice-Hall (1989).
- [184] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling y B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran*. Cambridge University Press, (1992).

- [185] N. R. Quintero y Angel Sánchez, “Overdamped sine-Gordon kink in a thermal bath”. *Phys. Rev. E* (aceptado).
- [186] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley and Sons (1998).
- [187] K. Rommelse y M. den Nijs, “Preroughening Transitions in Surfaces”. *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2578-2580 (1987).
- [188] M. Rost y H. Spohn, “Renormalization of the driven sine-Gordon equation in 2 + 1 dimensions”. *Phys. Rev. E* **49**, 3709-3716 (1994).
- [189] M. Rost y J. Krug, “Damping of growth oscillations in Molecular Beam Epitaxy: A renormalization group approach”. *J. Phys. I (France)* **7**, 1627-1638 (1997).
- [190] V. M. H. Ruutu *et al.*, “Vortex formation in neutron-irradiated superfluid ^3He as an analogue of cosmological defect formation”. *Nature* **382**, 334-336 (1996).
- [191] V. M. H. Ruutu *et al.*, “Defect formation in quench-cooled superfluid phase transition”. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1465-1468 (1998).
- [192] S. A. Safran, *Statistical Thermodynamics of Surfaces, Interfaces, and Membranes*. Addison-Wesley 1994.
- [193] Y. Saito, “Self-Consistent Calculation of Statics and Dynamics of the Roughening Transition”. *Z. Physik B* **32**, 75-82 (1978).
- [194] Y. Saito y H. Müller-Krumbhaar, “Two-dimensional Coulomb gas: A Monte Carlo study”. *Phys. Rev. B* **23**, 308-315 (1981).
- [195] H. Sakaguchi, “Desynchronization in a population of globally coupled identical oscillators”. *Prog. Theo. Phys.* **91**, 693-698 (1994).
- [196] T. Sakamoto *et al.*, “Intensity oscillations of reflection high-energy electron diffraction during silicon molecular beam epitaxial growth”. *Appl. Phys. Lett.* **47**, 617-619 (1985).
- [197] T. Salditt, T. H. Metzger y J. Peisl, “Kinetic Roughness of Amorphous Multilayers Studied by Diffuse X-Ray Scattering”. *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2228-2231 (1994).
- [198] M. San Miguel y R. Toral, “Stochastic effects in physical systems” en *Instabilities and nonequilibrium structures VI*, E. Tirapegui y W. Zeller (eds.), Kluwer Academic Pub. (1997).
- [199] A. Sánchez y L. Vázquez, “Nonlinear wave propagation in disordered media”. *Int. J. Mod. Phys.* **5**, 2825-2882 (1991).
- [200] A. Sánchez *et al.*, “Roughening transitions of driven surface growth”. *Phys. Rev. B* **51**, 14 664-14 668 (1995).
- [201] A. Sánchez y A. R. Bishop, “Collective coordinates and length-scale competition in spatially inhomogeneous soliton-bearing equations”. *SIAM Rev.* **40**, 579-615 (1998).
- [202] M. Shiino, “Dynamical behavior of stochastic systems of infinitely many coupled nonlinear oscillators exhibiting phase transitions of mean-field type: H theorem on asymptotic approach to equilibrium and critical slowing down of order-parameter fluctuations”. *Phys. Rev. A* **36**, 2393-2412 (1987).
- [203] S. Shinomoto y Y. Kuramoto, “Phase transitions in active rotator systems”. *Prog. Theor. Phys.* **75**, 1105-1110 (1986).
- [204] S. Shinomoto y Y. Kuramoto, “Cooperative Phenomena in Two-Dimensional Active Rotator System”. *Prog. Theor. Phys.* **75**, 1319-1327 (1986).
- [205] S. Shreve, “Stochastic Calculus and Finance”. Carnegie Mellon University Draft. No publicado.
- [206] W. J. Shugard, J. D. Weeks and G. H. Gilmer, “Monte Carlo test of theories for the planar model, the F model, and related systems”. *Phys. Rev. Lett.* **41**, 1399-1402 (1978).
- [207] S. Sinha, E. B. Sirota, S. Garoff y H. B. Stanley, “X-ray scattering and neutron scattering from rough surfaces”. *Phys. Rev. B* **38**, 2297-2311 (1988).
- [208] K. Sobczyk, *Stochastic Differential Equations*. Kluwer Academic Publishers (1991).

- [209] G. J. Stephens, E. A. Calzetta, B. L. Hu y S. A. Ramsey, "Defect formation and critical dynamics in the early Universe". *Phys. Rev. D* **59**, 045009 (1999).
- [210] K. J. Strandburg, S. A. Solla y G. V. Chester, "Monte Carlo studies of a Laplacian roughening model for two-dimensional melting". *Phys. Rev. B* **28**, 2717-2731 (1983).
- [211] K. J. Strandburg, "Two-dimensional Melting". *Rev. Mod. Phys.* **60**, 161-207 (1988); *ibid.* **61**, 747 (1989).
- [212] S. H. Strogatz y R. E. Mirollo, "Stability of Incoherence in a Population of Coupled Oscillators". *J. Stat. Phys.* **63**, 613-635 (1991).
- [213] S. H. Strogatz, en *Frontiers in Mathematical Biology*, editado por S. Levin (Springer, Berlin) 1994.
- [214] J. A. Stroschio, D. T. Pierce y R. A. Dragoset, "Homoepitaxial growth of iron and a real space view of Reflection-High-Energy-Electron Diffraction". *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3615-3618 (1993).
- [215] J. A. Stroschio y D. T. Pierce, "Scaling of diffusion-mediated island growth in iron-on-iron homoepitaxy". *Phys. Rev. B* **49**, R8522-R8525 (1994).
- [216] J. A. Stroschio *et al.*, "Coarsening of Unstable Surface Features during Fe(001) Homoepitaxy". *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4246-4249 (1995).
- [217] T. Sun, B. Morin, H. Guo y M. Grant, "Roughening Transition of a driven interface with a conservation law" en *Surface Disordering: Growth, Roughening and Phase Transition*. Eds. R. Jullien, J. Kertesz, P. Meakin y D. E. Wolf. Nova Science, Nueva York (1992).
- [218] T. Sun y M. Plischke, "Dynamics of interfaces in a model for molecular-beam epitaxy". *Phys. Rev. E* **50**, 3370-3382 (1994).
- [219] R. H. Swendsen, "Monte Carlo studies of the interface roughening transition". *Phys. Rev. B* **15**, 5421-5431 (1977).
- [220] R. H. Swendsen, "Monte Carlo study of the Coulomb gas and the Villain XY model in the discrete Gaussian roughening representation". *Phys. Rev. B* **18**, 492-502 (1978).
- [221] H.-A. Tanaka, A. J. Lichtenberg y S. Oishi, "First Order Phase Transition Resulting from Finite Inertia in Coupled Oscillator Systems". *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2104-2107 (1997).
- [222] K. Theis-Bröhl *et al.*, "Temperature- and rate-dependent RHEED oscillation studies of epitaxial Fe(001) on Cr(001)". *Phys. Rev. B* **57**, 4747-4755 (1998).
- [223] C. Thompson *et al.*, "X-ray-reflectivity study of growth kinetics of vapor-deposited silver films". *Phys. Rev. B* **49**, 4902-4907 (1994).
- [224] K. Thürmer, R. Koch, M. Weber y K. H. Rieder, "Dynamic evolution of pyramid structures during growth of epitaxial Fe(001) films". *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1767-1770 (1995).
- [225] W. A. Tiller, *The Science of Crystallization*. Cambridge University Press (1991).
- [226] W. M. Tong *et al.*, "Atomic Force Microscope Study of Growth Kinetics: Scaling in the Heteroepitaxy of CuCl on CaF₂(111)". *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3374-3377 (1994).
- [227] M. C. Torrent y M. San Miguel, "Stochastic-dynamics characterization of delayed laser threshold instability with swept control parameter". *Phys. Rev. A* **38**, 245-251 (1988).
- [228] S. Prestipino y E. Tosatti, "Variational theory of preroughening". *Phys. Rev. B* **59**, 3108-3124 (1999).
- [229] F. Tsui, J. Wellman, C. Uher y R. Clarke, "Morphology transition and layer-by-layer growth of Rh(111)". *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3164-3167 (1996).
- [230] H. C. Tuckwell, *Stochastic Processes in the Neurosciences*. CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics. SIAM (1989).
- [231] J. Villain, D. R. Grempel y J. Lapujoulade, "Roughening transition of high-index crystal faces: the case of copper". *J. Phys. (France)* **15**, 809-834 (1985).

- [232] J. Villain y I. Vilfan, "Surface deconstruction in Au(110)". *Surf. Sci* **199**, 165-173 (1988).
- [233] J. Villain, "Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without desorption". *J. Phys. I (Francia)* **1**, 19-42 (1991).
- [234] D. D. Vvedensky, A. Zangwill, C. N. Luse y M. R. Wilby, "Stochastic equations of motion for epitaxial growth". *Phys. Rev. E* **48**, 852-861 (1993).
- [235] W. Weber y B. Lengeler, "Diffuse scattering of hard x rays from rough surfaces". *Phys. Rev. B* **46**, R7953-R7956 (1992).
- [236] H. Weber, D. Marx y K. Binder, "Melting transition in two dimensions: A finite-size scaling analysis of bond-orientational order in hard disks". *Phys. Rev. B* **51**, 14 636-14 651 (1995).
- [237] J. D. Weeks y G. H. Gilmer, "Dynamics of crystal growth". *Adv. Chem. Phys.* **40**, 157-228 (1979).
- [238] J. D. Weeks, "The roughening transition", en *Ordering in strongly fluctuating condensed matter systems*. NATO ASI Series. Plenum, Nueva York, (1980).
- [239] G. B. West, "The origin of universal scaling laws in Biology". *Physica A* **263**, 104-113 (1999).
- [240] K. Wiensiefel, P. Colet, S. H. Strogatz, "Synchronization Transitions in a Disordered Josephson Series Array". *Phys. Rev. Lett.* **76**, 404-407 (1996); K. Wiesenfeld, P. Colet y S. H. Strogatz, "Frequency locking in Josephson arrays: Connection with the Kuramoto model". *Phys. Rev. E* **57**, 1563-1569 (1998).
- [241] P. Wilmott, S. Howinson y J. Dewynne, "The Mathematics of Financial Derivatives". Cambridge University Press (1995).
- [242] A. T. Winfree, *The Geometry of Biological Time*. Springer-Verlag, Nueva York (1980).
- [243] D. E. Wolf y J. Villain, "Growth with surface diffusion". *Europhys. Lett.* **13**, 389-394 (1990).
- [244] D. E. Wolf, "Kinetic roughening of vicinal surfaces". *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1783-1786 (1991).
- [245] H.-N. Yang, T.-M. Lu y G.-C. Wang, "High-Resolution Low-Energy Electron Diffraction Study of PB(110) Surface Roughening Transition". *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1621-1624 (1989)
- [246] H.-N. Yang, T.-M. Lu y G.-C. Wang, "Time-Invariant Structure Factor in an Epitaxial Growth Front". *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2612-2615 (1992); *Phys. Rev. B* **47**, 3911-3921 (1993).
- [247] H.-N. Yang, T.-M. Lu y G.-C. Wang, "Diffraction from surface growth fronts". *Phys. Rev. B* **47**, 3911-3922 (1993).
- [248] H.-N. Yang, G.-C. Wang y T.-M. Lu, "Instability in Low-Temperature Molecular-Beam Epitaxy Growth of Si/Si(111)". *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2348-2351 (1994).
- [249] H.-N. Yang y T.-M. Lu, "Inconsistency between height-height correlation and power-spectrum functions of scale-invariant surfaces for roughness exponent $\alpha \simeq 1$ ". *Phys. Rev. B* **51**, 2479-2483 (1995).
- [250] H.-N. Yang, G.-C. Wang y T.-M. Lu, "Formation of facets and pyramidlike structures in molecular-beam epitaxy growth of Si on a singular Si(111) surface". *Phys. Rev. B* **51**, 14293-14299 (1995).
- [251] H.-N. Yang, G.-C. Wang y T.-M. Lu, "Quantitative study of the decay of intensity oscillations in transient layer-by-layer growth". *Phys. Rev. B* **51**, 17932-17945 (1995).
- [252] H.-N. Yang, Y.-P. Zhao, G.-C. Wang y T.-M. Lu, "Noise-Induced Roughening Evolution of Amorphous Si films Grown by Thermal Evaporation". *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3774-3777 (1996).
- [253] A. Yates y W. H. Zurek, "Vortex formation in two dimensions: when symmetry breaks, how big are the pieces?". *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5477-5480 (1998).
- [254] H. You, R. P. Chiarello, H. K. Krim y K. G. Vandervoort, "X-Ray Reflectivity and Scanning-Tunneling-Microscope Study of Kinetic Roughening of Sputter-Deposited Gold Films during Growth". *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2900-2903 (1993).
- [255] A. P. Young, "Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions". *Phys. Rev. B* **19**, 1855-1866 (1979).

-
- [256] A. Zangwill, "Some causes and a consequence of epitaxial roughening" *Journal of Crystal Growth* **163**, 8-21 (1996).
- [257] H. Zeghlache, P. Mandel y C. van der Broeck, "Influence of noise on delayed bifurcations". *Phys. Rev. A* **40**, 286-294 (1989).
- [258] H. Zeng y G. Vidali, "Measurement of Growth Kinetics in a Heteroepitaxial System: Pb on Cu(100)". *Phys. Rev. Lett.* **74**, 582-585 (1995).
- [259] Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, 2nd ed. Clarendon Press, Oxford (1993).
- [260] W. H. Zurek, "Cosmological experiments in superfluid helium?". *Nature* **317**, 505-508 (1985).
- [261] W. H. Zurek, "Cosmological experiments in condensed matter systems". *Phys. Rep.* **276**, 177-221 (1996).

Apéndice A

Estudio Analítico de las Teorías Lineales

Las teorías lineales de crecimiento de superficies se han convertido en un referente a lo largo esta memoria, debido a que describen soluciones autosemejantes que podemos considerar como libres, en las cuales sólo tenemos en cuenta los procesos de difusión (en forma de un operador espacial lineal) y la parte estocástica de la deposición (reflejada en un término de ruido). Estas teorías o modelos son importantes porque

1. Se pueden resolver exactamente.
2. Describen el comportamiento efectivo de sistemas no lineales (como los modelos xMBE y sG) para ciertos rangos de parámetros (por ejemplo, para temperaturas $T < T_R$).
3. Son base del tratamiento perturbativo de sistemas completos a partir de técnicas analíticas como las aproximaciones variacionales y el grupo de renormalización.

De forma general, las ecuaciones que vamos a ver en este apéndice pueden expresarse como:

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nu \mathcal{L}h(\mathbf{r}) + \eta(\mathbf{r}, t), \quad (\text{A.1})$$

donde \mathcal{L} es un operador espacial lineal y donde $\langle \eta(\mathbf{r}', t') \eta(\mathbf{r}, t) \rangle = 2k_B T \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$.

Debido al carácter lineal de este tipo de ecuaciones, podemos calcular los exponentes mediante suposiciones de autosemejanza, ya que los coeficientes del ruido y del operador lineal renormalizan independientemente como veremos después. Para ello se supone que el sistema que describe la ecuación (A.1) tiene las mismas propiedades después de hacer una transformación de similaridad del tipo

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' \equiv b\mathbf{r}, \quad h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h, \quad t \rightarrow t' \equiv b^z t. \quad (\text{A.2})$$

Introduciendo este cambio en la ecuación (A.1), obtenemos

$$\frac{\partial h'(\mathbf{r}', t')}{\partial t'} = \nu f(b) \mathcal{L}h'(\mathbf{r}') + b^{-d/2+x/2-\alpha} \eta(\mathbf{r}', t'), \quad (\text{A.3})$$

| Teoría | n | d | α | z | β |
|--------|-----|-----|----------|-----|---------|
| EW | 1 | 1 | 1/2 | 2 | 1/4 |
| EW | 1 | 2 | 0* | 2 | 0* |
| EW | 1 | 3 | -1/2 | 2 | -3/4 |
| LMBE | 2 | 1 | 3/2 | 4 | 3/8 |
| LMBE | 2 | 2 | 1 | 4 | 1/4 |
| LMBE | 2 | 3 | 1/2 | 4 | 1/8 |
| LMBE | 2 | 4 | 0* | 4 | 0* |

Cuadro A.1: Valores de los exponentes para las teorías lineales EW y LMBE. (*) El valor 0 debe entenderse como dependencia logarítmica.

donde $f(b)$ es una función de b que depende de la forma explícita del operador \mathcal{L}_r y d la dimensión del sustrato. La ecuación (A.3) tiene la misma forma que (A.1) salvo los coeficientes, que han cambiado de la forma

$$\nu \rightarrow \nu' \equiv \nu f(b), \quad (\text{A.4})$$

$$k_B T \rightarrow k_B T' \equiv b^{-d+z-2\alpha} k_B T. \quad (\text{A.5})$$

Si buscamos soluciones autosemejantes, entonces haciendo $T = T'$ obtenemos que

$$z - 2\alpha = d \quad (\text{A.6})$$

que se conoce como *relación de hiperescalado* y, aunque para las teorías lineales se cumple, no lo hace necesariamente para las ecuaciones no lineales.

Para simplificar, supongamos que el operador $\mathcal{L}h(\mathbf{r}) = (-1)^{n+1} \Delta^n h(\mathbf{r})$, donde Δ es el laplaciano en d dimensiones. Por tanto, $f(b) = b^{z-2n}$, y pidiendo que la solución de (A.3) sea autosemejante, tenemos $\log_b f(b) = 0 \Rightarrow z = 2n$. Aplicando (A.6), resulta que $\alpha = n - d/2$. En la tabla A.1 tenemos los valores para algunos de los modelos que veremos en este apéndice. Como vemos, $d = 2$ es la dimensión marginal para EW, en el sentido de que para dimensiones superiores la rugosidad es una función decreciente del tamaño del sistema. En el caso de LMBE la dimensión marginal es $d = 4$.

A pesar de que los exponentes de ambas ecuaciones pueden obtenerse de manera fácil como hemos visto, el hecho de que la ecuación (A.1) sea lineal nos permite resolverla exactamente. El conocer la solución exacta nos va a permitir:

- Obtener una prueba de que los exponentes obtenidos anteriormente son exactos y, como veremos, establecer el tamaño mínimo del sistema para el cual se verifica la hipótesis de escalado. Dicho de otro modo, establecer un L mínimo para el cual se verifique, por ejemplo, $w^2 \sim L^{2\alpha}$.
- Calcular la forma exacta de las medidas termodinámicas locales (energía, rugosidad, pendiente total, etc.) y de las funciones de correlación, incluyendo los efectos de tamaño finito. Desde el punto de vista computacional esto es importante para comparar las simulaciones de alta temperatura con los resultados teóricos.
- Poder obtener estimaciones de los tiempos de relajación cerca de la temperatura de transición.

Separaremos el estudio de las ecuaciones de EW y LMBE. En el caso de las teorías lineales, la ecuación (A.1) puede representar tanto el caso en equilibrio ($F = 0$) como el de fuera del

equilibrio ($F \neq 0$), sin más que redefinir h como la desviación respecto a la altura media $\bar{h} = Ft$.

Antes de particularizar, damos las expresiones exactas de los diferentes observables en dimensión arbitraria. La resolución de una ecuación lineal como (A.1) con condiciones periódicas pasa por estudiar los modos de Fourier $\hat{h}_{\mathbf{q}}$ que de manera general podemos poner como

$$\hat{h}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} h(\mathbf{r}, t), \quad (\text{A.7})$$

donde \mathbf{r} es el vector en el sustrato de volumen L^d , y $\mathbf{q} = \frac{2\pi}{L}\mathbf{k}$, $k_i = 0, \dots, L-1$ es el vector en el espacio recíproco. Si el operador \mathcal{L} es lineal, la ecuación que verifican cada uno de los modos de Fourier se puede escribir como

$$\frac{\partial \hat{h}_{\mathbf{q}}}{\partial t} = -\nu\omega_{\mathbf{q}}\hat{h}_{\mathbf{q}} + \hat{\eta}_{\mathbf{q}}, \quad (\text{A.8})$$

donde $\hat{\eta}_{\mathbf{q}}$ es un ruido blanco que verifica $\langle \hat{\eta}_{\mathbf{q}}(t)\hat{\eta}_{\mathbf{q}'}(t') \rangle = 2D\delta_{\mathbf{q},-\mathbf{q}'}\delta(t-t')$ con $D = k_B T$, y $\omega_{\mathbf{q}}$ es la relación de dispersión lineal. La ecuación anterior nos dice que cada uno de los modos de Fourier es un proceso de Ornstein-Uhlenbeck independiente. La solución exacta de la ecuación (A.8) es (suponiendo que $h(\mathbf{r}, 0) = 0$)

$$\hat{h}_{\mathbf{q}} = e^{-\nu\omega_{\mathbf{q}}t} \int_0^t e^{\nu\omega_{\mathbf{q}}s} dW_{\mathbf{q}}(s). \quad (\text{A.9})$$

donde $W_{\mathbf{q}}(t)$ es un proceso Wiener que verifica $\langle W_{\mathbf{q}}(t)W_{\mathbf{q}'}(t') \rangle = 2D\delta_{\mathbf{q},-\mathbf{q}'}\min(t, t')$. A partir de la solución, podemos calcular el factor de estructura de nuestro modelo. Así, tenemos que

$$S(\mathbf{q}) = \langle \hat{h}_{\mathbf{q}}\hat{h}_{-\mathbf{q}} \rangle = D \frac{1 - e^{-2\nu\omega_{\mathbf{q}}t}}{\nu\omega_{\mathbf{q}}}. \quad (\text{A.10})$$

En función de ella podemos expresar todos los observables de nuestro sistema. Por ejemplo, la rugosidad total se escribe como

$$w^2(t) = \left\langle \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{r}} [h(\mathbf{r}, t) - \bar{h}]^2 \right\rangle = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} S(\mathbf{q}) \quad (\text{A.11})$$

(donde $\bar{h} = \langle \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{r}} h(\mathbf{r}, t) \rangle$), y la función de correlación como

$$C(\mathbf{r}) = \left\langle \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{s}} [h(\mathbf{s} + \mathbf{r}) - h(\mathbf{s})]^2 \right\rangle = \frac{2}{L^d} \sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) [1 - \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})], \quad (\text{A.12})$$

o bien, la función de correlación conexas

$$C_c(\mathbf{r}) = \left\langle \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{s}} h(\mathbf{s} + \mathbf{r})h(\mathbf{s}) \right\rangle = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}). \quad (\text{A.13})$$

Con ello la correlación pendiente-pendiente es

$$G(\mathbf{r}) = \left\langle \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{s}} [\nabla h(\mathbf{s} + \mathbf{r}) - \nabla h(\mathbf{s})]^2 \right\rangle = \frac{4}{L^d} \sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) \sum_{i=1}^d [1 - \cos(q_i r_i)] [1 - \cos(q_i)] \quad (\text{A.14})$$

Otros observables termodinámicos locales puede expresarse como

$$E = \frac{1}{L^d} \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{2L^2} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) = \frac{D}{2\nu} \quad (\text{A.15})$$

para la energía, o

$$\tau^2 = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{r}} \left[\sum_{\delta_j} (-1)^j h(\mathbf{r} + \delta_j) \right] \right\rangle = \frac{4}{L^2} \sum_{q=1}^L S(\mathbf{q}) [\cos q_x - \cos q_y]^2 \quad (\text{A.16})$$

para el parámetro de fluctuación en $d = 2$ dimensiones y una red cuadrada (los vectores δ_j están representados en la figura 5.3), y

$$s^2 = \frac{1}{L^d} \sum_{q=1} S(q) \omega_{\mathbf{q}}^{EW} \quad (\text{A.17})$$

para la pendiente total, donde $\omega_{\mathbf{q}}^{EW}$ es la relación de dispersión que se obtiene cuando el operador $\mathcal{L}_{\mathbf{r}} = \Delta_{\mathbf{r}}$.

Ahora pasamos a estudiar cada uno de los casos.

A.1. Edward-Wilkinson

En este caso tenemos que $\mathcal{L}h(\mathbf{r}) = \Delta h(\mathbf{r})$. Discretizando el laplaciano en una y dos dimensiones, obtenemos

$$\omega_{\mathbf{q}} = 4 \sin^2 \frac{q}{2}, \quad 1D, \quad (\text{A.18})$$

$$\omega_{\mathbf{q}} = 4 \left[\sin^2 \frac{q_x}{2} + \sin^2 \frac{q_y}{2} \right], \quad 2D. \quad (\text{A.19})$$

Observamos que, debido a los efectos de tamaño finito, en dimensión $d > 1$ se tiene que $\omega_{\mathbf{q}}$ no depende solamente del módulo de \mathbf{q} . Particularizamos a cada una de las dimensiones

A.1.1. Dimensión $d = 1$

En este caso el factor de estructura es

$$S(q) = D \frac{1 - e^{-2\nu\omega_{\mathbf{q}}t}}{4\nu \sin^2 \left(\frac{q}{2} \right)}. \quad (\text{A.20})$$

En el estado estacionario se tiene que

$$S(q, t \rightarrow \infty) = \frac{D}{4\nu \sin^2 \left(\frac{q}{2} \right)}. \quad (\text{A.21})$$

A partir de aquí podemos calcular los exponentes. El exponente dinámico, por ejemplo, se puede obtener calculando el tiempo necesario para que el factor de estructura alcance su valor de saturación con un error del 1 % para el modo de Fourier que más tarde en saturar, en este caso el modo con q más bajo (aquél con $q = 2\pi/L$). Esto supone

$$t_{\times} = \frac{\ln 10}{\nu\omega_{q=2\pi/L}} \simeq 6 \times 10^{-2} \nu^{-1} L^2, \quad (\text{A.22})$$

(donde, si $L \gg 1$ podemos aproximar el seno por su argumento de manera que $\omega_{q=2\pi/L} \simeq (2\pi/L)^2$), y por tanto $z = 2$. La ecuación anterior da también una estimación de los tiempos de simulación de nuestro sistema. Para que éste sature numéricamente, se debe verificar que el tiempo de simulación debe ser siempre mayor que t_\times .

Hacemos lo mismo para la anchura total

$$w^2(t, L) = \frac{D}{\nu L} \sum_q \frac{1 - e^{-2\omega_q t}}{\omega_q}. \quad (\text{A.23})$$

Calculando el comportamiento asintótico $t \gg t_\times$

$$w^2(t \rightarrow \infty, L) \equiv w_{\text{sat}}^2(L) = \frac{D}{\nu L} \sum_{k=1}^{L-1} \frac{1}{4 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{L} \right)} = D \frac{L}{12\nu} \left(1 - \frac{1}{L^2} \right), \quad (\text{A.24})$$

vemos que varía linealmente con la temperatura y que $w^2 \sim L$ cuando el tamaño del sistema es suficientemente grande, con lo que $\alpha = \frac{1}{2}$. Por último estudiamos el comportamiento a tiempos cortos. Para sistemas grandes y tiempos pequeños podemos desarrollar

$$w^2(t \ll 1, L) = \frac{D}{\nu L} \sum_q \frac{2\omega_q t + \mathcal{O}(t^2)}{\omega_q} \simeq \frac{2D}{\nu} t + \mathcal{O}(t^2) \quad (\text{A.25})$$

es decir, a tiempos cortos cada uno de los modos evoluciona como un caminante aleatorio independiente. Para ver cuál es el exponente β hacemos la aproximación $L \rightarrow \infty$ para tiempos $1 < t < t_\times$. Con ello la suma para w^2 se transforma en una integral

$$w^2(t, L \rightarrow \infty) \simeq \frac{D}{\nu\pi} \int_{\pi/L}^{\pi/2} \frac{1 - e^{-8t \sin^2 x}}{4 \sin^2 x} dx \quad (\text{A.26})$$

y si además aproximamos $\sin^2 x \simeq x^2$

$$w^2(t, L \rightarrow \infty) \simeq \frac{D}{\nu\pi} \int_0^\pi \frac{1 - e^{-2y^2 t}}{2y^2} dy \quad (\text{A.27})$$

$$= \frac{D}{\nu\pi} \left[\frac{1}{2\pi} \left(e^{-2\pi^2 t} - 1 \right) + \sqrt{\frac{\pi t}{2}} \text{Erf}(\sqrt{2t}\pi) \right] \quad (\text{A.28})$$

$$\simeq \frac{D}{\nu} \sqrt{\frac{\pi t}{2}}, \quad (\text{A.29})$$

para $t > 1$, con lo que $\beta = \frac{1}{4}$.

El promedio de la pendiente en el estado estacionario en este caso vale

$$s^2 = \frac{1}{L} \sum_q \omega_q^{EW} S(\mathbf{q}) = \frac{D}{2\nu}. \quad (\text{A.30})$$

Para acabar, calculamos las expresiones de las funciones de correlación en el estado estacionario. Empezamos por la función punto a punto

$$C_c(r) = \frac{D}{\nu L} \sum_{k=1}^{L-1} \frac{\cos \left(\frac{2\pi k r}{L} \right)}{4 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{L} \right)} \quad (\text{A.31})$$

Si L es suficientemente grande, podemos aproximar¹ en el denominador $\sin^2 x \simeq x^2$, y por tanto

$$C_c(r) \simeq \frac{LD}{4\pi^2\nu} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{L}kr\right)}{k^2} \quad (\text{A.32})$$

$$= \frac{D}{24\nu}L - \frac{D}{4\nu}r \left(1 - \frac{r}{L}\right). \quad (\text{A.33})$$

Otras medidas pueden expresarse en función de $C_c(r)$. Así por ejemplo, se tiene que $w^2(t \rightarrow \infty) = C_c(0)$. Pero ahora nos interesamos por las funciones de correlación. Para la de altura-altura tenemos que

$$C(r) = 2w^2(t) - 2C_c(r) \simeq \frac{D}{2\nu}r \left(1 - \frac{r}{L}\right), \quad (\text{A.34})$$

mientras que para la de pendiente-pendiente tenemos que

$$G(r) = 2C(1) - 4C_c(r) + 2C_c(r+1) + 2C_c(r-1) \quad (\text{A.35})$$

$$\simeq \frac{D}{\nu}. \quad (\text{A.36})$$

A.1.2. Dimensión $d = 2$

En este caso se tiene que

$$\omega_{\mathbf{q}} = 4 \sin^2\left(\frac{q_x}{2}\right) + 4 \sin^2\left(\frac{q_y}{2}\right). \quad (\text{A.37})$$

En saturación ($t \rightarrow \infty$) tendremos que:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{D}{4\nu} \frac{1}{\sin^2\left(\frac{q_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{q_y}{2}\right)}, \quad (\text{A.38})$$

En primer lugar calculamos el exponente dinámico. Utilizando el mismo razonamiento que para $d = 1$ obtenemos

$$t_{\times} \simeq 3 \times 10^{-2} \nu^{-1} L^2 \quad (\text{A.39})$$

luego $z = 2$ al igual que en dimensión $d = 1$. Para el resto de los exponentes calculamos la rugosidad. En primer lugar, en saturación

$$w^2(t \rightarrow \infty, L) = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) = \frac{D}{4\nu L^2} \sum_{k_x, k_y=1}^{L-1} \frac{1}{\sin^2\left(\frac{2\pi k_x}{L}\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi k_y}{L}\right)}, \quad (\text{A.40})$$

La suma anterior no puede calcularse exactamente. Sin embargo, para L suficientemente grande podemos aproximar la suma por una integral, así como las funciones seno que aparecen en el denominador de la función de estructura por su argumento, de modo que

$$w^2(t \rightarrow \infty, L) \simeq \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{2\pi/L}^{\pi} \int_{2\pi/L}^{\pi} dq_x dq_y \frac{D}{\nu(q_x^2 + q_y^2)} \simeq \frac{D}{2\pi\nu} \int_{2\pi/L}^{\pi} \frac{dq}{q}, \quad (\text{A.41})$$

$$= \frac{D}{2\pi\nu} \ln L, \quad (\text{A.42})$$

¹El numerador en (A.31) no puede aproximarse de la misma forma, ya que cambia de signo cuando k varía entre 0 y L siempre que $r \neq 0$.

luego definimos el exponente de rugosidad como $\alpha = 0$, entendiendo que supone una dependencia logarítmica. Por último, para tiempos cortos y L suficientemente grande se tiene que

$$w^2(t, L \rightarrow \infty) \simeq \frac{D}{\nu} \text{Ie}(8\pi^2 t/L) \simeq \frac{D}{\nu} \ln t, \quad (\text{A.43})$$

donde $\text{Ie}(x)$ es la integral exponencial y donde hemos aplicado que $t \ll t_x \sim L^2$. Por tanto se tiene que $\beta = 0$.

La función de correlación punto a punto en este caso es

$$C_c(\mathbf{r}) \simeq \frac{2}{4\nu L^2} \sum_{k_x, k_y=1}^{L-1} \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{L}(k_x r_x + k_y r_y)\right)}{\sin^2\left(\frac{\pi k_x}{L}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi k_y}{L}\right)}. \quad (\text{A.44})$$

Como antes, hacemos la aproximación de la suma por una integral, suponiendo que L es suficientemente grande, con lo que

$$C_c(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{2\pi/L}^{\pi} dq_x dq_y \frac{D}{\nu(q_x^2 + q_y^2)} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \simeq \frac{D}{2\pi\nu} \int_{2\pi/L}^{\pi} dq \frac{J_0(qr)}{q} \quad (\text{A.45})$$

$$\simeq \frac{D}{2\pi\nu} \ln \frac{r}{L}, \quad (\text{A.46})$$

donde $J_0(x)$ es la función de Bessel de primera especie y orden cero.

Con ello las funciones de correlación altura-altura y pendiente-pendiente tienen las siguientes expresiones asintóticas en saturación

$$C(\mathbf{r}) = 2w^2 - 2C_c(\mathbf{r}) \quad (\text{A.47})$$

$$\simeq \frac{D}{\nu\pi} \ln r, \quad (\text{A.48})$$

y

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= 2C(1, 0) + 2C(0, 1) - 8C_c(r_x, r_y) \\ &\quad + 2C_c(r_x + 1, r_y) + 2C_c(r_x - 1, r_y) + 2C_c(r_x, r_y + 1) + 2C_c(r_x, r_y - 1) \\ &\simeq \frac{D}{4\pi\nu} \ln \frac{r^8}{[(r^2 + 1)^2 - 4r_x^2][(r^2 + 1)^2 - 4r_y^2]} \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

$$\simeq \frac{D}{2\nu}. \quad (\text{A.50})$$

para r suficientemente grande y donde hemos utilizado la notación $C_c(\mathbf{r}) = C_c(r_x, r_y)$.

Finalmente evaluamos la pendiente total

$$s^2 = C(1, 0) + C(0, 1) \simeq \frac{D}{\nu}. \quad (\text{A.51})$$

y el parámetro de fluctuación

$$\tau^2 = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) [\cos q_x - \cos q_y]^2 \simeq \frac{4D}{(2\pi)^2} \int_{2\pi/L}^{\pi} \int_{2\pi/L}^{\pi} dq_x dq_y \frac{(q_x^2 - q_y^2)^2}{\nu(q_x^2 + q_y^2)} \quad (\text{A.52})$$

$$\simeq \frac{D}{4\nu} \pi^3 - \frac{4D}{\nu L^4} \quad (\text{A.53})$$

A.2. LMBE

En este caso tenemos que $\mathcal{L}h(\mathbf{r}) = -\Delta^2 h(\mathbf{r})$. Discretizando el laplaciano en una y dos dimensiones obtenemos que

$$\omega_{\mathbf{q}} = 16 \sin^4 \frac{q}{2}, \quad 1D, \quad (\text{A.54})$$

$$\omega_{\mathbf{q}} = 16 \left[\sin^2 \frac{q_x}{2} + \sin^2 \frac{q_y}{2} \right]^2, \quad 2D. \quad (\text{A.55})$$

Como antes, debido al carácter discreto de la red, en dimensión $d > 1$ se tiene que $\omega_{\mathbf{q}}$ no depende solamente del módulo de \mathbf{q} . Particularizamos a cada una de las dimensiones

A.2.1. Dimensión $d = 1$

El factor de estructura es

$$S(\mathbf{q}, t) = \frac{D}{\nu} \frac{1 - e^{-2\omega_{\mathbf{q}} t}}{16 \sin^4 \left(\frac{q}{2} \right)}. \quad (\text{A.56})$$

Como en la sección anterior, utilizamos este factor de estructura para calcular los exponentes. El exponente dinámico lo obtenemos a partir de t_{\times} definido como el tiempo para el cual el modo más bajo toma el valor asintótico con un error del 1 %, con el resultado

$$t_{\times} \simeq 1,5 \times 10^{-3} \nu^{-1} L^4, \quad (\text{A.57})$$

es decir, $z = 4$. Para obtener los otros dos exponentes calculamos la rugosidad

$$w^2(t \rightarrow \infty, L) = \frac{D}{\nu L} \sum_{k=1}^{L-1} \frac{1}{16 \sin^4 \left(\frac{\pi k}{L} \right)} \simeq \frac{\pi^4 D L^3}{16 \nu} \sum_{k=1}^{L-1} \frac{1}{k^4} \quad (\text{A.58})$$

$$= \frac{D}{1440 \nu} L^3, \quad (\text{A.59})$$

donde hemos tomado el límite $L \rightarrow \infty$ en el extremo superior de la suma. De la expresión anterior tenemos que $\alpha = \frac{3}{2}$.

Para tiempos cortos ($1 < t < t_{\times}$), y suponiendo que $L \gg 1$ tenemos que

$$w^2(t, L \rightarrow \infty) \simeq \frac{2D}{\nu \pi} \int_{\pi/L}^{\pi/2} dq \frac{1 - e^{-32t \sin^4 q}}{16 \sin^4 q} \simeq \frac{2D}{\nu \pi} \int_0^{\pi/2} dq \frac{1 - e^{-32t q^4}}{16 q^4} \quad (\text{A.60})$$

$$= t^{3/4} \frac{2D}{3 \cdot 2^{1/4} \nu \pi} \Gamma\left(\frac{1}{4}, 2\pi^4 t\right), \quad (\text{A.61})$$

donde $\Gamma(a, x)$ es la función Gamma incompleta. Suponiendo que t es suficientemente grande se tiene que

$$w^2(t, L \rightarrow \infty) \simeq t^{3/4} \frac{2D}{3\sqrt{2}\nu\pi} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right), \quad (\text{A.62})$$

luego $\beta = \frac{3}{8}$.

Pasamos ahora a calcular la función de correlación a dos puntos en saturación. En este caso tenemos que

$$C_c(r) = \frac{1}{\nu L} \sum_{k=1}^{L-1} \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{L} kr\right)}{16 \sin^4\left(\frac{\pi k}{L}\right)} \simeq \frac{DL^3}{16\nu\pi^4} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{L} kr\right)}{k^4} \quad (\text{A.63})$$

$$= \frac{DL^3}{1440\nu} - \frac{DL}{48\nu} r^2 \left(1 - \frac{r}{L}\right)^2. \quad (\text{A.64})$$

Utilizando esta función de correlación obtenemos las demás. Así, tenemos que

$$C(r) = 2w^2(t) - 2C_c(r) \simeq \frac{D}{24\nu} L r^2 \left(1 - \frac{r}{L}\right)^2, \quad (\text{A.65})$$

y también

$$G(r) = 2C(1) - 4C_c(r) + 2C_c(r-1) + 2C_c(r+1)] \quad (\text{A.66})$$

$$= \frac{D}{2\nu} r \left(1 - \frac{r}{L}\right) - \frac{D}{6L\nu}. \quad (\text{A.67})$$

Por último, para el promedio de las pendientes obtenemos que

$$s^2 = \frac{2}{L} \sum_q S(q)(1 - \cos q) = C(1) \simeq \frac{D}{24\nu} L \left(1 - \frac{1}{L}\right)^2. \quad (\text{A.68})$$

A.2.2. Dimensión $d = 2$

Ahora

$$S(\mathbf{q}) = \frac{D}{\nu} \frac{1}{16 \left[\sin^2\left(\frac{q_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{q_y}{2}\right)\right]^2} \quad (\text{A.69})$$

Para calcular el exponente dinámico hacemos la estimación del tiempo de cruce y obtenemos

$$t_\times \simeq 7,3 \times 10^{-4} \nu^{-1} L^4, \quad (\text{A.70})$$

luego $z = 4$. La rugosidad en este caso se puede aproximar como

$$w^2(t \rightarrow \infty, L) \simeq \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{2\pi/L}^{\pi} \int_{2\pi/L}^{\pi} dq_x dq_y \frac{D}{\nu(q_x^2 + q_y^2)^2} \simeq \frac{D}{2\nu\pi} \int_{2\pi/L}^{\pi} dq \frac{1}{q^3} \quad (\text{A.71})$$

$$\simeq \frac{D}{16\nu\pi^3} L^2, \quad (\text{A.72})$$

luego $\alpha = 1$. Por último, a tiempos cortos y suponiendo que $L \gg 1$ tenemos que

$$w^2(t, L \rightarrow \infty) \simeq \frac{D}{2\nu\pi} \int_0^{\pi} \frac{1 - e^{-2q^4 t}}{q^3} \quad (\text{A.73})$$

$$\simeq \frac{D}{2^{3/2}\nu\sqrt{\pi}} t^{1/2}, \quad (\text{A.74})$$

luego $\beta = \frac{1}{4}$.

Para la función de correlación punto a punto tenemos que

$$C_c(\mathbf{r}) \simeq \frac{D}{2\nu\pi} \int_{2\pi/L}^{\pi} dq \frac{J_0(qr)}{q^3} \quad (\text{A.75})$$

$$\simeq \frac{D}{8\nu\pi} r^2 \ln \frac{r}{L} + \frac{D}{16\nu\pi^3} L^2, \quad (\text{A.76})$$

luego

$$C(\mathbf{r}) \simeq -\frac{D}{8\nu\pi} r^2 \ln \frac{r}{L}, \quad (\text{A.77})$$

y

$$\begin{aligned}
 G(\mathbf{r}) &= 2C(1, 0) + 2C(0, 1) - 8C_c(n, m) \\
 &\quad + 2C_c(n + 1, m) + 2C_c(n - 1, m) + 2C_c(n, m + 1) + 2C_c(n, m - 1) \\
 &\simeq -\frac{D}{\nu\pi} \ln \frac{r}{L}.
 \end{aligned} \tag{A.78}$$

Otras cantidades que medimos son el parámetro de fluctuación, que se puede poner como

$$\tau^2 = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) [\cos q_x - \cos q_y]^2 \simeq \frac{4D}{(2\pi)^2} \int_{2\pi/L}^{\pi} dq_x dq_y \frac{(q_x^2 - q_y^2)^2}{\nu(q_x^2 + q_y^2)^2} \tag{A.79}$$

$$\simeq \frac{D}{2\nu} \pi - \frac{2D}{\nu L^2}, \tag{A.80}$$

y también la pendiente total

$$s^2 = C(1, 0) + C(0, 1) \simeq \frac{D}{4\nu\pi} \ln L. \tag{A.81}$$

Apéndice B

Transformaciones de dualidad

En este apéndice obtenemos los modelos continuos y el gas de Coulomb relacionados con el modelo gaussiano discreto (4.23) y el modelo laplaciano discreto de Nelson (5.4).

B.1. Modelo gaussiano discreto

La función de partición del modelo gaussiano discreto es

$$\mathcal{Z}_{DG} \equiv \sum_{\{h(\mathbf{r})\}} \exp \left\{ -\frac{J}{2k_B T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla h(\mathbf{r}))^2 \right\}, \quad (\text{B.1})$$

donde la primera suma es sobre todas las posibles configuraciones de alturas $\{h(\mathbf{r})\}$ siempre que éstas sean valores enteros. Una manera alternativa de representar el hecho de que $h(\mathbf{r})$ sólo puede tomar valores enteros es introducir *funciones peso* en la función de partición:

$$\mathcal{Z}_{DG} = \int \mathcal{D}h(\mathbf{r}) \left[\sum_{n(\mathbf{r})=-\infty}^{\infty} \delta[h(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r})] \right] \exp \left\{ -\frac{J}{2k_B T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla h(\mathbf{r}))^2 \right\} \quad (\text{B.2})$$

donde $\int \mathcal{D}h(\mathbf{r})$ es la integral sobre todas las posibles configuraciones de la variable continua $h(\mathbf{r})$ y $n(\mathbf{r})$ toma todos los valores discretos entre $\pm\infty$. La equivalencia entre el modelo gaussiano y otros modelos proviene de elegir diferentes representaciones de la delta de Dirac. Así, si utilizamos la relación de Poisson [38]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(h - n) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i l h}, \quad (\text{B.3})$$

la función de partición (B.2) se transforma en un producto de funciones

$$\mathcal{Z}_{DG} = \mathcal{Z}_G \mathcal{Z}_C, \quad (\text{B.4})$$

donde

$$\mathcal{Z}_G = \int \mathcal{D}h(\mathbf{r}) \exp \left\{ -\frac{J}{2k_B T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla h(\mathbf{r}))^2 \right\}, \quad (\text{B.5})$$

es la función de partición del modelo gaussiano en una red cuadrada y variables continuas y

$$\mathcal{Z}_C = \sum_{\{n(\mathbf{r})\}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \beta' \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} q(\mathbf{r}) q(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\}; \quad \beta' = k_B T / J \quad (\text{B.6})$$

es la función de partición de un gas de Coulomb neutro en dimensión 2, donde $q(\mathbf{r}) = 2\pi n(\mathbf{r})$ son las cargas de las partículas del gas y $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ es la "ley de Coulomb.^{en} dos dimensiones¹ y en una red discreta de constante de red a_{\parallel} :

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx \frac{1}{4\pi} \ln \left\{ \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{a} \right\} + \text{cte.}, \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg a_{\parallel}. \quad (\text{B.7})$$

La función de partición gaussiana no tiene ninguna propiedad excepcional: se puede evaluar de manera exacta y no presenta ningún tipo de transición de fase. De este modo, las propiedades de la transición de fase (si existe) del modelo gaussiano discreto son las mismas que la del gas de Coulomb bidimensional.

Otra representación de la delta de Dirac que podemos tomar es [165]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(h - n) = \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{B}{\sqrt{\pi}} \exp\{-B^2 \sin^2 \pi h\} \quad (\text{B.8})$$

Introduciendo esta relación en (B.2) obtenemos

$$\mathcal{Z}_{DG} = \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{B}{\sqrt{\pi}} \int \mathcal{D}h(\mathbf{r}) \exp \left\{ -\sum_{\mathbf{r}} \left[\frac{2J}{k_B T} (\nabla h(\mathbf{r}))^2 + B^2 \sin^2 \pi h(\mathbf{r}) \right] \right\} \quad (\text{B.9})$$

El argumento de la exponencial es equivalente al hamiltoniano del modelo de sine-Gordon en dos dimensiones, también llamado modelo de XY.

Así pues, utilizando varias representaciones de la delta de Dirac hemos transformado el modelo discreto gaussiano en modelos continuos (i.e. donde la variable h toma valores continuos). Precisamente debido a la no restricción sobre los valores que puede tomar h , los modelos continuos pueden ser estudiados analíticamente mediante técnicas del grupo de renormalización o variacionales.

B.2. Modelo laplaciano discreto

En esta ocasión partimos de la función de partición del modelo laplaciano discreto

$$\mathcal{Z}_{DxMBE} \equiv \sum_{\{h(\mathbf{r})\}} \exp \left\{ -\frac{J}{2k_B T} \sum_{\mathbf{r}} [\nabla^2 h(\mathbf{r})]^2 \right\}. \quad (\text{B.10})$$

Utilizando la representación de la delta (B.3), obtenemos que [170]

$$\mathcal{Z}_{DxMBE} = \mathcal{Z}_G \mathcal{Z}_D, \quad (\text{B.11})$$

¹Por ley de Coulomb entendemos la solución de la ecuación de Maxwell $\nabla^2 U = -\rho/\epsilon_0$, donde U es el potencial eléctrico, ρ es la densidad de carga libre, y ϵ_0 una constante (capacidad inductiva).

donde

$$\mathcal{Z}_G = \int \mathcal{D}h(\mathbf{r}) \exp \left\{ -\frac{J}{2k_B T} \sum_{\mathbf{r}} [\Delta h(\mathbf{r})]^2 \right\}, \quad (\text{B.12})$$

es la función de partición del modelo gaussiano correspondiente en una red cuadrada y variables continuas y

$$\mathcal{Z}_D = \sum_{\{n(\mathbf{r})\}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \beta' \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} q(\mathbf{r}) q(\mathbf{r}') U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \right\}; \quad \beta' = k_B T / J \quad (\text{B.13})$$

es el hamiltoniano de un gas de Coulomb neutro en dimension $d = 2$, y donde $q(\mathbf{r})$ son las cargas que tienen que satisfacer las propiedades de

$$\sum_{\mathbf{r}} q(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{carga total cero} \quad (\text{B.14})$$

$$\sum_{\mathbf{r}} \mathbf{r} q(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{momento dipolar total cero} \quad (\text{B.15})$$

Por último, el potencial de interacción entre las cargas es

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) [\cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) - 1 + \frac{1}{2}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})^2]. \quad (\text{B.16})$$

Cuando $\mathbf{r} \gg 1$, podemos hacer la aproximación

$$U(\mathbf{r}) \simeq A \mathbf{r}^2 \ln \mathbf{r} + B \mathbf{r}^2 - C. \quad (\text{B.17})$$

Del mismo modo que antes se puede tomar la representación de la delta (B.8) y en vez de obtener el modelo sG, nos queda el modelo xMBE en el límite $B \rightarrow \infty$.

$$\mathcal{Z}_{DG} = \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{B}{\sqrt{\pi}} \int \mathcal{D}h(\mathbf{r}) \exp \left\{ -\sum_{\mathbf{r}} \left[\frac{2J}{k_B T} (\nabla^2 h(\mathbf{r}))^2 + B^2 \sin^2 \pi h(\mathbf{r}) \right] \right\}. \quad (\text{B.18})$$

Apéndice C

Desarrollos de alta temperatura

C.1. Energía

En equilibrio, la función de partición para el modelo xMBE es

$$\mathcal{Z} = \int \left[\prod_{\mathbf{r}} dh(\mathbf{r}) \right] e^{-\beta[\sum_{\mathbf{r}}(\Delta h(\mathbf{r}))^2 + V_0 - V_0 \cos 2\pi h(\mathbf{r})]}, \quad (\text{C.1})$$

donde $\beta = 1/k_B T$ y \mathbf{r} son todas las posiciones sobre una red cuadrada $L \times L$. La expansión para temperatura alta consiste en desarrollar la expresión anterior en potencias de βV_0 , de manera que

$$\mathcal{Z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta V_0)^n}{n!} \int \left[\prod_{\mathbf{r}} dh(\mathbf{r}) \right] e^{-\beta \sum_{\mathbf{r}} (\Delta h(\mathbf{r}))^2} \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos 2\pi h(\mathbf{r}) \right)^n, \quad (\text{C.2})$$

donde hemos prescindido de constantes multiplicativas. Reescrita en función de los promedios sobre la distribución de equilibrio del hamiltoniano libre \mathcal{H}_0 (es decir, cuando $V_0 = 0$) la ecuación (C.2) queda

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta V_0)^n}{n!} \langle \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos 2\pi h(\mathbf{r}) \right)^n \rangle_{\mathcal{H}_0} \quad (\text{C.3})$$

donde \mathcal{Z}_0 es la función de partición del hamiltoniano libre. Usualmente en la literatura se encuentra que en la fase de altas temperaturas, el promedio del coseno es cero. Sin embargo, utilizando este desarrollo vemos que

$$\langle \cos 2\pi h(\mathbf{r}') \rangle_{\mathcal{H}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta V_0)^n}{n!} \int \left[\prod_{\mathbf{r}} h(\mathbf{r}) \right] e^{-\beta \sum_{\mathbf{r}} (\Delta h(\mathbf{r}))^2} \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos 2\pi h(\mathbf{r}) \right)^n \cos 2\pi h(\mathbf{r}'), \quad (\text{C.4})$$

es decir

$$\langle \cos 2\pi h(\mathbf{r}') \rangle_{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{Z}_0}{\mathcal{Z}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta V_0)^n}{n!} \langle \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos 2\pi h(\mathbf{r}) \right)^n \cos 2\pi h(\mathbf{r}') \rangle_{\mathcal{H}_0}. \quad (\text{C.5})$$

Prescindiendo de términos subdominantes que van como $\beta^n \exp(-A/\beta)$, y teniendo en cuenta solamente aquellos términos de la serie anterior que van como β^n , podemos expresar el promedio anterior como

$$\langle \cos 2\pi h(\mathbf{r}') \rangle_{\mathcal{H}} = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(\beta V_0)^{2n-1}}{2^{2n-1}(n!)^2}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta V_0)^{2n}}{2^{2n}(n!)^2}} = \frac{V_0\beta}{2} - \frac{V_0^3\beta^3}{16} + \frac{V_0^5\beta^5}{96} - \frac{11V_0^7\beta^7}{6144} + \mathcal{O}[(V_0\beta)^9]. \quad (\text{C.6})$$

De este modo, el desarrollo de altas temperaturas de la energía es

$$E = \frac{1}{L^2} \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\nu}{2\beta} + V_0 \left\{ 1 - \frac{V_0\beta}{2} + \frac{(V_0\beta)^3}{16} + \mathcal{O}[(V_0\beta)^5] \right\} \quad (\text{C.7})$$

La única aproximación en este desarrollo es haber despreciado los términos subdominantes. En ellos se encuentra la diferencia entre tomar uno u otro hamiltoniano libre, por ejemplo, pasar de sG a xMBE. Así a segundo orden en el desarrollo (C.5) debemos calcular

$$\langle \cos 2\pi h(\mathbf{r}') \cos 2\pi h(\mathbf{r}) \rangle_{\mathcal{H}_0} \simeq \frac{1}{2} \exp \left\{ -2\pi^2 \langle [h(\mathbf{r}') - h(\mathbf{r})]^2 \rangle_{\mathcal{H}_0} \right\} \quad (\text{C.8})$$

que depende de \mathcal{H}_0 . Además, este término depende del tamaño del sistema L , por lo que, con él, podemos estudiar los efectos de tamaño finito. Sin embargo, los términos de mayor orden son más difíciles de evaluar y el estudio de esta serie se complica.

C.2. Rugosidad

En este caso evaluamos

$$w^2 = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{r}} \langle (h(\mathbf{r}) - \bar{h})^2 \rangle_{\mathcal{H}}, \quad (\text{C.9})$$

donde \bar{h} es el valor medio de la altura. De este modo se tiene que

$$\langle (h(\mathbf{r}) - \bar{h})^2 \rangle_{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{Z}_0}{\mathcal{Z}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta V_0)^n}{n!} \left\langle h^2(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{r}'} [\cos 2\pi h(\mathbf{r}')]^n \right\rangle_{\mathcal{H}_0}, \quad (\text{C.10})$$

donde hemos supuesto que, en equilibrio, $\bar{h} = 0$. Despreciando los términos subdominantes tenemos que

$$\langle h^2(\mathbf{r}) \rangle_{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{Z}_0}{\mathcal{Z}} \langle h^2(\mathbf{r}) \rangle_{\mathcal{H}_0}, \quad (\text{C.11})$$

con lo que:

$$w_{\mathcal{H}}^2 = w_{\mathcal{H}_0}^2 \left\{ 1 - \frac{V_0\beta}{4} + \frac{3(V_0\beta)^2}{64} - \frac{19(V_0\beta)^3}{2304} + \mathcal{O}[(V_0\beta)^4] \right\}. \quad (\text{C.12})$$

De nuevo la no linealidad afecta al valor estacionario de la anchura, y tenemos que la rugosidad del modelo xMBE para altas temperaturas $w_{\mathcal{H}}^2$ coincide con la del modelo LMBE $w_{\mathcal{H}_0}^2$ solamente cuando $\beta V_0 \rightarrow 0$.

Apéndice D

Esquema de renormalización de Nozières-Gallet

En este apéndice estudiamos la aplicación del esquema de renormalización propuesto por Nozières y Gallet en [173] al modelo xMBE [Ec. (5.3)]. El espíritu del esquema es el mismo que el de la técnica clásica de integrar los grados de libertad microscópicos de Wilson y Kogut [153, 95] para obtener las propiedades de escalado de sistemas en equilibrio cerca de una transición de segundo orden, es decir, con invariancia de escala. Sin embargo, el esquema de Nozières-Gallet está especialmente diseñado para tratar con no linealidades que contengan infinitos términos relevantes, como por ejemplo el seno [173] o funciones analíticas de la curvatura de la superficie [218]. Dicho esquema ha sido aplicado también con éxito al estudio de problemas como la transición de fase orientacional de rugosidad [147, 111], en distintas generalizaciones del modelo de sine-Gordon [76, 217] o en modelos no lineales de crecimiento epitaxial [218]. El esquema puede aplicarse tanto a problemas en equilibrio (esquema estático, utilizando la función de partición) como a problemas fuera del equilibrio (esquema dinámico, utilizando la ecuación de Langevin).

El objetivo de este apéndice es describir detalladamente (a diferencia de la mayor parte de la literatura existente) la deducción de las ecuaciones de flujo tanto para el caso estático como dinámico. La discusión física de las ecuaciones del Grupo de Renormalización (GR) que se obtienen se puede encontrar en el capítulo 6. Una discusión más amplia sobre el GR puede encontrarse en, e.g., [154]-[259]. En las siguientes secciones introduciremos el esquema estático y dinámico de Nozières y Gallet propuesto en [173] y de manera más extensa por Nozières en [174].

D.1. Esquema estático

En el esquema estático partimos de la función de partición en equilibrio ($F = 0$) de nuestro modelo

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}h(\mathbf{r}) e^{-\beta E(\kappa, \nu, V)}, \quad (\text{D.1})$$

con

$$E(\kappa, \nu, V) = \int d^2\mathbf{r} \left[\frac{\kappa}{2} (\Delta h(\mathbf{r}))^2 + \frac{\nu}{2} (\nabla h(\mathbf{r}))^2 - V \cos \frac{2\pi h(\mathbf{r})}{a_\perp} \right]. \quad (\text{D.2})$$

donde $\beta = 1/T$, \mathbf{r} son todas las posiciones sobre una red cuadrada $L \times L$, $\Delta h(\mathbf{r})$ es el laplaciano en dos dimensiones y $\nabla h(\mathbf{r})$ el gradiente. Por último $\int \mathcal{D}h(\mathbf{r})$ es la integral sobre todas las posibles configuraciones de la superficie. Como vemos hemos incluido un término de tensión superficial en el modelo. Aunque en nuestro caso $\nu = 0$, veremos que bajo el flujo de renormalización se obtiene $\nu \neq 0$, por lo que necesariamente ha de incorporarse el término correspondiente desde el principio.

La idea del esquema de renormalización podemos resumirla en los siguientes pasos:

1. En primer lugar separamos las fluctuaciones en altura en dos partes $h(\mathbf{r}) = \bar{h}(\mathbf{r}) + \delta h(\mathbf{r})$ donde $\delta h(\mathbf{r})$ no son más que aquellas que tienen lugar a longitudes de onda muy pequeñas que denominaremos *microscópicas*, y $\bar{h}(\mathbf{r})$ describe las variaciones *macroscópicas*. De manera formal definimos

$$\delta h(\mathbf{r}) \equiv \int_{\bar{\Lambda}}^{\Lambda} d^2\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{h}(\mathbf{k}), \quad (\text{D.3})$$

donde $\Lambda = 2\pi/a_\parallel$ es el cut-off en momentos y $\bar{\Lambda} = e^{-\varepsilon}\Lambda$ es el nuevo cut-off con $\varepsilon \ll 1$. De la definición se deduce que $\delta h(\mathbf{r}) \sim \varepsilon$.

2. El segundo paso es integrar los modos microscópicos en la función de partición (D.1) de manera que obtenemos

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\bar{h}(\mathbf{r}) \int \mathcal{D}\delta h(\mathbf{r}) e^{-\beta E(\kappa, \nu, V)}. \quad (\text{D.4})$$

Aún así la integral sobre los modos microscópicos es intratable. Para poder evaluarla utilizamos perturbaciones en el parámetro del potencial suponiendo que $\beta V \ll 1$.

3. El tercer paso consiste en reescribir la expresión (D.4) de la forma inicial

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\bar{h}(\mathbf{r}) e^{-\beta \bar{E}(\kappa'(\varepsilon), \nu'(\varepsilon), V_0'(\varepsilon))}, \quad (\text{D.5})$$

para lo cual despreciamos los términos de orden $(\beta V)^3$ y ε^2 . En este paso, la forma funcional de \bar{E} es la misma que la de E , pero los parámetros han cambiado de valor.

4. Aunque la forma funcional de \bar{E} es la misma que la de E , la integral en (D.5) se extiende sólo sobre los modos macroscópicos. En un último paso, reescalamos las variables dependientes e independientes para que $\bar{\Lambda} \rightarrow \Lambda$. Esto hace que los parámetros cambien y obtengamos $[\kappa'(\varepsilon), \nu'(\varepsilon), V_0'(\varepsilon)] \rightarrow [\kappa''(\varepsilon), \nu''(\varepsilon), V_0''(\varepsilon)]$
5. El procedimiento 1 \rightarrow 4 puede repetirse indefinidamente. Como los cambios en las constantes y el reescalado son infinitesimales, podemos obtener ecuaciones diferenciales para la variación de los parámetros del sistema sin más que suponer $\varepsilon = dl$, que se denominan ecuaciones del flujo de renormalización.

El esquema (al igual que cualquier técnica de renormalización) no resuelve el problema: tan sólo permite obtener información acerca de cómo escala la superficie cerca de los puntos críticos y dónde se encuentra estos: los puntos fijos de las ecuaciones de flujo son los puntos críticos y los exponentes se pueden obtener a partir ahí.

Obsérvese que existe una aproximación en el esquema, que es suponer que $\beta V \ll 1$. Si bajo el flujo de renormalización V crece indefinidamente, nuestro esquema no predice la variación de los parámetros de la superficie. La suposición es por tanto que $V \rightarrow 0$ a cada paso del esquema de renormalización.

En nuestro caso, a partir de (D.1) y (D.2) la función $\bar{E}(\kappa', \nu', V'_0)$ definida por (D.4) y (D.5) es

$$\begin{aligned}\bar{E} &= -\frac{1}{\beta} \ln \int \mathcal{D}\delta h(\mathbf{r}) e^{-\beta E(\kappa, \nu, V)} \\ &= \bar{E}_0 + \int d^2\mathbf{r} \left[\frac{\kappa}{2} (\Delta \bar{h}(\mathbf{r}))^2 + \frac{\nu}{2} (\nabla \bar{h}(\mathbf{r}))^2 \right] - \frac{1}{\beta} \ln \langle e^{-\beta E_p} \rangle_{\delta h},\end{aligned}\quad (\text{D.6})$$

(siendo \bar{E}_0 una constante) donde

$$E_p = -V \int d^2\mathbf{r} \cos \frac{2\pi[\bar{h}(\mathbf{r}) + \delta h(\mathbf{r})]}{a_\perp} \quad (\text{D.7})$$

y

$$\langle A \rangle_{\delta h} \equiv \frac{\int \mathcal{D}\delta h(\mathbf{r}) A \exp \left\{ - \int d^2\mathbf{r} \left[\frac{\kappa}{2} (\Delta \delta h(\mathbf{r}))^2 + \frac{\nu}{2} (\nabla \delta h(\mathbf{r}))^2 \right] \right\}}{\int \mathcal{D}\delta h(\mathbf{r}) \exp \left\{ - \int d^2\mathbf{r} \left[\frac{\kappa}{2} (\Delta \delta h(\mathbf{r}))^2 + \frac{\nu}{2} (\nabla \delta h(\mathbf{r}))^2 \right] \right\}} \quad (\text{D.8})$$

es el promedio sobre una distribución gaussiana continua. Hasta aquí el desarrollo es exacto. La primera aproximación la realizamos para poder evaluar el promedio en (D.6). Así, si V es pequeño podemos utilizar el desarrollo en cumulantes

$$\begin{aligned}-\frac{1}{\beta} \ln \langle e^{-\beta E_p} \rangle_{\delta h} &= \langle E_p \rangle_{\delta h} - \frac{\beta}{2} [\langle E_p^2 \rangle_{\delta h} - \langle E_p \rangle_{\delta h}^2] + \mathcal{O}(V^3) \\ &= \delta E^{(1)} + \delta E^{(2)} + \mathcal{O}(V^3)\end{aligned}\quad (\text{D.9})$$

que es válido si $\beta V \ll 1$. El primer orden es fácil de calcular

$$\begin{aligned}\delta E^{(1)} = \langle E_p \rangle_{\delta h} &= -V \int d^2\mathbf{r} \left\langle \cos \frac{2\pi[\bar{h}(\mathbf{r}) + \delta h(\mathbf{r})]}{a_\perp} \right\rangle_{\delta h} \\ &= -V \int d^2\mathbf{r} \cos \frac{2\pi\bar{h}(\mathbf{r})}{a_\perp} \left\langle \cos \frac{2\pi\delta h(\mathbf{r})}{a_\perp} \right\rangle_{\delta h} \\ &= -V \int d^2\mathbf{r} \exp \left[-\frac{2\pi^2}{a_\perp^2} \langle \delta h^2(\mathbf{r}) \rangle \right] \cos \frac{2\pi\bar{h}(\mathbf{r})}{a_\perp},\end{aligned}\quad (\text{D.10})$$

donde hemos aplicado que $\langle \sin \frac{2\pi\delta h}{a_\perp} \rangle_{\delta h} = 0$. El valor medio restante puede calcularse de manera aproximada, con el resultado

$$\begin{aligned}\langle \delta h^2(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\bar{\Lambda}}^{\Lambda} d^2\mathbf{k} S(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\bar{\Lambda}}^{\Lambda} k dk \frac{T}{\nu k^2 + \kappa k^4} \\ &\simeq \frac{1}{2\pi} \frac{T}{\nu \Lambda + \kappa \Lambda^3} (\Lambda - \bar{\Lambda}) = \frac{1}{2\pi} \frac{T}{\nu + \kappa \Lambda^2} \varepsilon.\end{aligned}\quad (\text{D.11})$$

Desarrollando la exponencial tenemos que

$$\begin{aligned}\langle E_p \rangle_{\delta h} &= -V \int d^2 \mathbf{r} \left[1 - \frac{\pi}{a_{\perp}^2} \frac{T}{\nu + \kappa \Lambda^2} \varepsilon \right] \cos \frac{2\pi \bar{h}(\mathbf{r})}{a_{\perp}} \\ &= - \int d^2 \mathbf{r} [V + \varepsilon \delta V] \cos \frac{2\pi \bar{h}(\mathbf{r})}{a_{\perp}},\end{aligned}\quad (\text{D.12})$$

donde hemos definido $\delta V = -V \frac{\pi}{a_{\perp}^2} \frac{T}{\nu + \kappa \Lambda^2}$, que cambia el potencial a primer orden. Con este resultado vemos que, a primer orden, el promedio sobre los grados microscópicos del sistema renormaliza el potencial, ya que el coeficiente del coseno cambia $V \rightarrow V + \varepsilon \delta V$.

Para ver cómo renormalizan los otros parámetros necesitamos ir hasta segundo orden, donde los cálculos se complican:

$$\begin{aligned}\delta E^{(2)} &= -\frac{\beta}{2} [\langle E_p^2 \rangle_{\delta h} - \langle E_p \rangle_{\delta h}^2] \\ &= \frac{V^2}{2T} \int d^2 \mathbf{r} d^2 \mathbf{r}' \left[\left\langle \cos \frac{2\pi(\bar{h} + \delta h)}{a_{\perp}} \cos \frac{2\pi(\bar{h}' + \delta h')}{a_{\perp}} \right\rangle_{\delta h} \right. \\ &\quad \left. - \left\langle \cos \frac{2\pi(\bar{h} + \delta h)}{a_{\perp}} \right\rangle_{\delta h} \left\langle \cos \frac{2\pi(\bar{h}' + \delta h')}{a_{\perp}} \right\rangle_{\delta h} \right],\end{aligned}\quad (\text{D.13})$$

donde hemos utilizado la notación $\bar{h}(\mathbf{r}) = \bar{h}$ y $\bar{h}(\mathbf{r}') = \bar{h}'$. Dado que δh es pequeño (ya que ε es infinitesimal) podemos desarrollar la expresión anterior hasta orden δh^2 , de modo que

$$\delta E^{(2)} = -\frac{V^2}{2T} \frac{4\pi^2}{a_{\perp}^2} \int d^2 \mathbf{r} d^2 \mathbf{r}' \sin \frac{2\pi \bar{h}}{a_{\perp}} \sin \frac{2\pi \bar{h}'}{a_{\perp}} \langle \delta h \delta h' \rangle_{\delta h}.\quad (\text{D.14})$$

El promedio que aparece en la expresión anterior puede calcularse de forma aproximada

$$\begin{aligned}\langle \delta h \delta h' \rangle_{\delta h} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\bar{\Lambda}}^{\Lambda} d^2 \mathbf{k} \frac{T}{\nu \mathbf{k}^2 + \kappa \mathbf{k}^4} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\ &\simeq \frac{T}{2\pi} \int_{\bar{\Lambda}}^{\Lambda} k dk \frac{J_0(\rho k)}{\nu k^2 + \kappa k^4} \\ &\simeq \frac{T}{2\pi} \frac{J_0(\rho \Lambda)}{\nu + \kappa \Lambda^2} \varepsilon,\end{aligned}\quad (\text{D.15})$$

donde hemos definido $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$. Insertando esta expresión en (D.14) obtenemos

$$\delta E^{(2)} = \frac{\pi V^2}{2a_{\perp}^2} \frac{\varepsilon}{\nu + \kappa \Lambda^2} \int d^2 \mathbf{r} d^2 \mathbf{r}' J_0(\rho \Lambda) \left\{ \cos \frac{2\pi(\bar{h} + \bar{h}')}{a_{\perp}} - \cos \frac{2\pi(\bar{h} - \bar{h}')}{a_{\perp}} \right\}.\quad (\text{D.16})$$

Ahora hacemos las siguientes aproximaciones

1. En primer lugar despreciamos el término $V^2 \cos \frac{2\pi(\bar{h} + \bar{h}')}{a_{\perp}}$ por ser un armónico de orden superior para $\bar{h} = \bar{h}'$ que será irrelevante frente a $V \cos \frac{2\pi \bar{h}}{a_{\perp}}$ a medida que reescalamos la ecuación, ya que suponemos que $V\beta \ll 1$.
2. En segundo lugar, suponiendo que $\boldsymbol{\rho}$ es pequeño podemos aproximar

$$\begin{aligned}\cos \frac{2\pi(\bar{h} - \bar{h}')}{a_{\perp}} &\simeq 1 - \frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} (\bar{h} - \bar{h}')^2 \\ &\simeq 1 - \frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \left[\boldsymbol{\rho} \cdot \nabla \bar{h} + \frac{1}{2} (\rho_x^2 \partial_x^2 \bar{h} + 2\rho_x \rho_y \partial_{xy}^2 \bar{h} + \rho_y^2 \partial_y^2 \bar{h}) \right]^2\end{aligned}\quad (\text{D.17})$$

donde $\partial_x^2 \bar{h} = \frac{\partial^2 \bar{h}}{\partial x^2}$, etc.

Sin embargo esta forma de proceder da lugar a divergencias. Por ejemplo, el primer término del desarrollo (D.17) da lugar a una integral divergente del tipo

$$\int d^2 \mathbf{r} \int d^2 \boldsymbol{\rho} [\boldsymbol{\rho} \cdot \nabla \bar{h}]^2 J_0(\rho \Lambda) = \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \bar{h}(\mathbf{r}))^2 \int_0^\infty \rho^3 d\rho J_0(\rho \Lambda), \quad (\text{D.18})$$

y por tanto una corrección infinita a la tensión superficial ν . La explicación está en que el desarrollo (D.17) se basa en que $\rho \ll 1$, lo que implica que $\bar{h} \simeq \bar{h}'$. Con ello, el integrando en (D.18) es tan sólo una aproximación para $\rho \ll 1$. La divergencia surge de integrar hasta $\rho \rightarrow \infty$. El procedimiento correcto fue dado por Knops y den Ouden [129] en la renormalización del modelo de sine-Gordon, y utiliza el llamado *desarrollo de producto de operadores*, introducido por Kadanoff [110]. En el desarrollo (D.17) no sólo el término cuadrático da lugar a un término $(\bar{h} - \bar{h}')^2$, sino que, en general, cualquier término $(\bar{h} - \bar{h}')^n$ puede expresarse, en el formalismo de operadores, como

$$O_{2n}(\mathbf{r}) \equiv (\bar{h}(\mathbf{r}) - \bar{h}(\mathbf{r}'))^{2n} = \tilde{O}_{2n}(\mathbf{r}) + a_{2n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(\bar{h} - \bar{h}')^2 + b_{2n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{D.19})$$

donde \tilde{O}_{2n} es un operador irrelevante (en el sentido del grupo de renormalización) y b_{2n} es una constante que contribuye a la renormalización de la energía libre. Los coeficientes pueden calcularse imponiendo que la función de correlación

$$g_{2n}(\mathbf{R}) \equiv \langle [O_{2n}(\mathbf{r}) - a_{2n}O_2(\mathbf{r})] O_2(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle \quad (\text{D.20})$$

satisfaga la propiedad de “ortogonalidad” de que no contenga términos que decaigan como \mathbf{R}^{-4} . El promedio en (D.20) es con respecto a la distribución de equilibrio de nuestro modelo. A primer orden podemos tomar dicha distribución con $V = 0$. La propiedad de ortogonalidad proviene de que, en tal caso

$$\langle O_2(\mathbf{r}) O_2(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle_{\bar{h}} \simeq \mathbf{R}^{-4} \quad (\text{D.21})$$

respecto a la distribución de equilibrio con $V = 0$. De este modo tenemos que

$$\begin{aligned} a_{2n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{\langle O_{2n}(\mathbf{r}) O_2(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle_{\bar{h}}}{\langle O_2(\mathbf{r}) O_2(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle_{\bar{h}}} \\ &= 2n(2n-1) \langle (\bar{h} - \bar{h}')^{2n-2} \rangle_{\bar{h}} = \frac{(2n)!}{2^n (n-1)!} \langle (\bar{h} - \bar{h}')^2 \rangle_{\bar{h}}^{n-1}, \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

luego el coseno como operador lo podemos expresar como

$$\begin{aligned} \cos \frac{2\pi(\bar{h} - \bar{h}')}{a_\perp} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^{2n} O_{2n}(\mathbf{r}) \\ &\simeq 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^{2n} a_{2n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') O_2(\mathbf{r}) \\ &= 1 + O_2(\mathbf{r}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2^n (n-1)!} \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^{2n} \langle (\bar{h} - \bar{h}')^2 \rangle_{\bar{h}}^{n-1} \\ &= 1 - \frac{2\pi^2}{a_\perp^2} O_2(\mathbf{r}) \exp \left[-\frac{2\pi^2}{a_\perp^2} \langle (\bar{h} - \bar{h}')^2 \rangle_{\bar{h}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

Por tanto tenemos que el desarrollo correcto es

$$\simeq 1 - \frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \left[\boldsymbol{\rho} \cdot \nabla \bar{h} + \frac{1}{2} (\rho_x^2 \partial_x^2 \bar{h} + 2\rho_x \rho_y \partial_{xy}^2 \bar{h} + \rho_y^2 \partial_y^2 \bar{h}) \right]^2 \exp \left[-\frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \langle (\bar{h} - \bar{h}')^2 \rangle_{\bar{h}} \right]. \quad (\text{D.24})$$

El promedio se puede evaluar de manera aproximada

$$\langle (\bar{h} - \bar{h}')^2 \rangle_{\bar{h}} = \frac{2T}{(2\pi)^2} \int_0^{\Lambda} d^2 \mathbf{k} \frac{1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\nu \mathbf{k}^2 + \kappa \mathbf{k}^4} \simeq \frac{T}{\pi} \int_0^{\Lambda} k dk \frac{1 - J_0(k\rho)}{\nu k + \kappa k^3}. \quad (\text{D.25})$$

Con ello, reescribimos

$$\exp \left[-\frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \langle (\bar{h} - \bar{h}')^2 \rangle \right] = \exp \left[-\frac{2\pi T}{a_{\perp}^2} \phi(\rho, \nu, \kappa) \right], \quad (\text{D.26})$$

donde

$$\phi(\rho, \nu, \kappa) = \int_0^{\Lambda} k dk \frac{1 - J_0(k\rho)}{\nu k + \kappa k^3}. \quad (\text{D.27})$$

Introduciendo (D.24) en (D.16), integrando la parte angular y despreciando términos constantes obtenemos finalmente

$$\delta E^{(2)} \simeq \int d^2 \mathbf{r} \left[\frac{\varepsilon \delta \nu}{2} (\nabla \bar{h}(\mathbf{r}))^2 + \frac{\varepsilon \delta \kappa}{2} (\Delta \bar{h}(\mathbf{r}))^2 \right], \quad (\text{D.28})$$

donde

$$\delta \nu = -\frac{V^2 \pi^3}{a_{\perp}^3 (\nu + \kappa \Lambda^2)} \int_0^{\infty} \rho^3 d\rho J_0(\rho \Lambda) e^{-\frac{2\pi T}{a_{\perp}^2} \phi(\rho, \nu, \kappa)}, \quad (\text{D.29})$$

$$\delta \kappa = \frac{3V^2 \pi^4}{16a_{\perp}^4 (\nu + \kappa \Lambda^2)} \int_0^{\infty} \rho^5 d\rho J_0(\rho \Lambda) e^{-\frac{2\pi T}{a_{\perp}^2} \phi(\rho, \nu, \kappa)}. \quad (\text{D.30})$$

Recapitulando hasta ahora, tenemos que la energía de interacción efectiva entre los modos macroscópicos \bar{h} tras integrar los modos microscópicos δh tiene la *misma forma* que la energía completa (D.2)

$$\bar{E} = \int d^2 \mathbf{r} \left[\frac{\nu'(\varepsilon)}{2} (\nabla \bar{h})^2 + \frac{\kappa'(\varepsilon)}{2} (\Delta \bar{h})^2 - V'(\varepsilon) \cos \frac{2\pi \bar{h}}{a_{\perp}} \right], \quad (\text{D.31})$$

con unos valores distintos de los parámetros, $\nu'(\varepsilon) = \nu + \varepsilon \delta \nu$, $\kappa'(\varepsilon) = \kappa + \varepsilon \delta \kappa$ y $V'(\varepsilon) = V + \varepsilon \delta V$.

El último paso es el reescalado de las variables. Hacemos una transformación de escala para volver a tener un sistema con un *cut-off* Λ en momentos como el original. Bajo dicha transformación hacemos

$$\bar{\Lambda} \rightarrow \Lambda = b\bar{\Lambda}, \quad (\text{D.32})$$

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r}/b, \quad (\text{D.33})$$

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' = b\mathbf{k} \quad (\text{D.34})$$

$$\bar{h} \rightarrow \bar{h}' = \bar{h} b^{-\alpha} \quad (\text{D.35})$$

donde $b = e^{-\varepsilon}$; con estas nuevas variables tenemos

$$\bar{E} = \int d^2 \mathbf{r}' b^2 \left[\frac{\nu'(\varepsilon) b^{2\alpha-2}}{2} (\nabla \bar{h})^2 + \frac{\kappa'(\varepsilon) b^{2\alpha-4}}{2} (\Delta \bar{h})^2 - V'(\varepsilon) \cos \frac{2\pi \bar{h}'}{a'_\perp} \right]. \quad (\text{D.36})$$

La forma funcional es la misma después de eliminar los grados microscópicos y de haber reescalado las variables. Sin embargo, los parámetros que definen la superficie son distintos

$$\nu''(\varepsilon) = (\nu + \varepsilon \delta \nu) b^{2\alpha} \simeq \nu + \varepsilon (\delta \nu + 2\alpha \nu) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{D.37})$$

$$\kappa''(\varepsilon) = (\kappa + \varepsilon \delta \kappa) b^{2\alpha-2} \simeq \kappa + \varepsilon [\delta \kappa + (2\alpha - 2)\kappa] + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{D.38})$$

$$V''(\varepsilon) = (V + \varepsilon \delta V) b^2 \simeq V + \varepsilon (\delta V + 2V) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{D.39})$$

$$a''_\perp(\varepsilon) = a_\perp b^{-\alpha} \simeq a_\perp - \varepsilon \alpha a_\perp + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{D.40})$$

Como ε es infinitesimal, podemos tomar $\varepsilon = dl$, con lo que las ecuaciones anteriores adoptan la forma de ecuaciones diferenciales que denominamos *flujo de renormalización*:

$$\frac{d\nu}{dl} = 2\alpha\nu + \delta\nu, \quad (\text{D.41})$$

$$\frac{d\kappa}{dl} = (2\alpha\nu - 2)\kappa + \delta\kappa, \quad (\text{D.42})$$

$$\frac{dV}{dl} = 2V + \delta V, \quad (\text{D.43})$$

$$\frac{da_\perp}{dl} = -\alpha a_\perp, \quad (\text{D.44})$$

cuyas condiciones iniciales en nuestro caso son

$$\nu(l=0) = 0, \quad \kappa(l=0) = \kappa_0, \quad V(l=0) = V_0, \quad a_\perp(l=0) = a_{\perp 0}. \quad (\text{D.45})$$

En las simulaciones numéricas del capítulo 5 hemos tomado $\kappa_0 = 1$, $V_0 = 1$ y $a_{\perp 0} = 1$.

La primera conclusión de las ecuaciones (D.41)-(D.42) es que, aunque inicialmente $\nu = 0$, el flujo del grupo de renormalización da lugar a una tensión superficial no nula ya que $\delta\nu \neq 0$. De ahí nuestra suposición inicial en el que la teoría incluía un término de tensión superficial.

Para estudiar estas ecuaciones introducimos unas variables adimensionales

$$x = \frac{2a_\perp^2}{\pi T} (\nu + \kappa \Lambda^2), \quad y = \frac{4\pi V}{T \Lambda^2}, \quad K = \frac{\kappa a_\perp^2 \Lambda^2}{\pi T}, \quad (\text{D.46})$$

en función de las cuales las ecuaciones de flujo forman un sistema autónomo

$$\frac{dx}{dl} = 2\alpha x - 4K + \frac{y^2}{x} \left[A^{(2)}(x, K) + \frac{3\pi}{16} A^{(4)}(x, K) \right], \quad (\text{D.47})$$

$$\frac{dy}{dl} = 2y \left(1 - \frac{1}{x} \right), \quad (\text{D.48})$$

$$\frac{dK}{dl} = (2\alpha - 2)K + \frac{3\pi}{32} \frac{y^2}{x} A^{(4)}(x, K), \quad (\text{D.49})$$

y con condiciones iniciales

$$x_0 = 2K_0, \quad K_0 = \frac{k_0 a_{\perp 0}^2 \Lambda^2}{\pi T}, \quad y_0 = \frac{4\pi V_0}{T \Lambda^2}, \quad (\text{D.50})$$

y donde

$$A^{(n)}(x, K) = \int_0^\infty \tilde{\rho}^{n+1} d\tilde{\rho} J_0(\tilde{\rho}) \exp \left\{ -2\tilde{\rho}^2 \int_0^{\tilde{\rho}} dk \frac{1 - J_0(k)}{\tilde{\rho}^2(x/2 - K)k + Kk^3} \right\} \quad (\text{D.51})$$

Las ecuaciones anteriores suponen una generalización de las ecuaciones para el modelo de sG. Estas últimas pueden recuperarse tomando $K = A^{(4)} = \alpha = 0$ en (D.47)-(D.49). Por tanto también incluyen la transición de KT que tiene lugar en el modelo sG. Aún en el caso de que inicialmente $\kappa_0 = 0$ la ecuación (D.49) nos dice que se genera un κ efectivo.

La integral (D.51) converge siempre que $x \neq 2K$ y $K \neq 0$, es decir, siempre que el sistema tenga tensión superficial no nula y $\kappa \neq 0$. Sin embargo, las integrales no están bien definidas en los siguientes casos:

- Si $K = 0$, es decir en el caso de sine-Gordon, el integrando de (D.51) va como $\tilde{\rho}^{n+\frac{1}{2}-\frac{4}{x}}$, con lo que la integral es convergente siempre que $n + \frac{1}{2} - \frac{4}{x} \leq 2 \Leftrightarrow x \geq \frac{8}{n+5}$. Aunque para el caso $n = 2$ (el único considerado por Nozières-Gallet) esta cota no da lugar a problemas en el punto fijo $x = 1$ de la ecuación (D.48), $A^{(4)}(x, 0)$ diverge para $x > \frac{8}{9}$.
- Si $x = 2K$, es decir sin tensión superficial, la integral $A^{(n)}(x, x/2)$ diverge para cualquier valor de n .

De todo lo anterior se deduce que el problema estático está mal definido cuando la condición inicial incluye una tensión superficial nula, o en el punto fijo de sG ($x = 1, K = 0$), ya que las integrales no convergen en estos casos. La explicación la encontramos en que el modelo sin tensión superficial está mal definido en un sistema de tamaño infinito: como vimos en el apéndice A las funciones de correlación no convergen a medida que $L \rightarrow \infty$.

Este tipo de divergencias no es algo propio de nuestro sistema. Es bien sabido que en el modelo de sine-Gordon $A^{(2)}(x, K)$ también diverge. La explicación a estas divergencias para ciertos valores de ν se debe a que en este esquema estático estamos, debido al esquema de renormalización, suponiendo implícitamente a priori ciertas características de la superficie. En palabras de Nozières, el esquema estático supone que el sistema tiene una respuesta infinita a cualquier perturbación y que la función de partición siempre tiene la misma forma funcional. Tanto en sine-Gordon como en el modelo xMBE, es el esquema dinámico el que describe mejor el sistema aunque, como veremos, los cálculos se complican.

D.2. Esquema dinámico

En este esquema partimos de la ecuación de Langevin para el modelo (D.1)

$$\mu^{-1} \frac{\partial h}{\partial t} = F + \nu \Delta h - \kappa \Delta^2 h + \frac{2\pi V}{a_\perp} \sin \frac{2\pi h}{a_\perp} + \sqrt{2D\mu^{-1}} \eta(\mathbf{r}, t) \quad (\text{D.52})$$

donde μ es la movilidad definida en (5.26). En el caso del esquema dinámico supondremos que todos los parámetros pueden ser renormalizados, por lo que incluimos también la movilidad y el prefactor del ruido D cuya condición inicial es $D_0\mu_0^{-1} = T$. Comparando con el caso estático vemos que en éste se supone que D no renormaliza.

D.2.1. Problema de equilibrio

En este caso suponemos que $F = 0$. Al igual que en el esquema anterior, podemos resumir éste en varios pasos:

1. Partiendo de la ecuación de Langevin de nuestro modelo, separamos las fluctuaciones en el ruido en dos partes que corresponden a grandes y pequeñas escalas, análogamente al caso de equilibrio, $\eta = \bar{\eta} + \delta\eta$, lo que hace que las fluctuaciones en altura las podamos separar como $h = \bar{h} + \delta h$, donde definimos $\bar{h} = \langle h \rangle_{\delta\eta}$. En concreto, supondremos que $\delta\eta$ son las fluctuaciones del ruido para momentos entre $\bar{\Lambda} = e^{-\varepsilon}\Lambda$ y $\Lambda = 2\pi/a_{\parallel}$. De este modo de la ecuación (D.52) obtenemos dos ecuaciones

$$\mu^{-1} \frac{\partial \bar{h}}{\partial t} = \nu \Delta \bar{h} - \kappa \Delta^2 \bar{h} + \langle \Phi(\bar{h}, \delta h) \rangle_{\delta\xi} + \sqrt{2D\mu^{-1}} \bar{\xi}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{D.53})$$

$$\mu^{-1} \frac{\partial \delta h}{\partial t} = \nu \Delta \delta h - \kappa \Delta^2 \delta h + \Phi(\bar{h}, \delta h) - \langle \Phi(\bar{h}, \delta h) \rangle_{\delta\xi} + \sqrt{2D\mu^{-1}} \delta\xi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{D.54})$$

$$\text{donde } \Phi(\bar{h}, \delta h) = \frac{2\pi V}{a_{\perp}} \sin \frac{2\pi(\bar{h} + \delta h)}{a_{\perp}}.$$

2. Dado que $\varepsilon \ll 1$ y suponiendo que $V \ll 1$ podemos resolver perturbativamente la ecuación para δh , introducir esta solución perturbativa en la ecuación para \bar{h} y obtener correcciones a los parámetros, que ahora son $\kappa'(\varepsilon)$, $\nu'(\varepsilon)$, $V'(\varepsilon)$, $\eta'(\varepsilon)$ y $D'(\varepsilon)$.
3. Por último reescalamos las variables para que la ecuación (D.53) sea la misma que la inicial para h . Con esto obtenemos nuevos valores de los parámetros $\nu''(\varepsilon)$, ..., cuya variación puede ser tratada de manera diferencial y dar lugar a las ecuaciones diferenciales que definen el flujo del grupo de renormalización.

Comenzamos por resolver (D.54) perturbativamente. Para ello evaluamos las partes no lineales de ambas ecuaciones hasta orden δh^2

$$\begin{aligned} \Phi(\bar{h}, \delta h) - \langle \Phi(\bar{h}, \delta h) \rangle_{\delta\eta} &= \frac{2\pi V}{a_{\perp}} \left[\sin \frac{2\pi}{a_{\perp}} (\bar{h} + \delta h) - \langle \sin \frac{2\pi}{a_{\perp}} (\bar{h} + \delta h) \rangle_{\delta\eta} \right] \\ &\simeq -\delta h \frac{4\pi^2 V}{a_{\perp}^2} \cos \frac{2\pi}{a_{\perp}} \bar{h} + \mathcal{O}(\delta h^2) \end{aligned} \quad (\text{D.55})$$

y

$$\begin{aligned} \langle \Phi(\bar{h}, \delta h) \rangle_{\delta\eta} &= \frac{2\pi V}{a_{\perp}} \langle \sin \frac{2\pi}{a_{\perp}} (\bar{h} + \delta h) \rangle_{\delta\eta} \\ &\simeq -\frac{2\pi V}{a_{\perp}^2} \sin \frac{2\pi \bar{h}}{a_{\perp}} \left\{ 1 - \frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \langle \delta h^2 \rangle \right\} + \mathcal{O}(\delta h^3). \end{aligned} \quad (\text{D.56})$$

De este modo, la solución de la ecuación (D.54) puede escribirse formalmente como

$$\delta h(\mathbf{r}, t) = \int d^2 \mathbf{r}' \int_{-\infty}^t dt' \chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') [\delta\xi(\mathbf{r}', t') + \Phi - \langle \Phi \rangle_{\delta\xi}], \quad (\text{D.57})$$

que resolvemos desarrollando en potencias de V

$$\delta h(\mathbf{r}, t) = \delta h^{(0)}(\mathbf{r}, t) + V \delta h^{(1)}(\mathbf{r}, t) + \mathcal{O}(V^2). \quad (\text{D.58})$$

Igualando los coeficientes de las diferentes potencias

$$\delta h^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \int d^2 \mathbf{r}' \int_{-\infty}^t dt' \chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \delta\xi(\mathbf{r}', t'), \quad (\text{D.59})$$

$$\delta h^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \int d^2 \mathbf{r}' \int_{-\infty}^t dt' \chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \left[-\delta h^{(0)} \frac{4\pi^2}{a_{\perp}^2} \cos \frac{2\pi \bar{h}}{a_{\perp}} \right]. \quad (\text{D.60})$$

Con estas expresiones vamos a (D.53) y obtenemos

$$\langle \Phi \rangle_{\delta\eta} = -\frac{2\pi V}{a_{\perp}} \sin \frac{2\pi\bar{h}}{a_{\perp}} \left\{ 1 - \frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \langle (\delta h^{(0)})^2 \rangle_{\delta\eta} - \frac{4\pi^2 V}{a_{\perp}^2} \langle \delta h^{(0)} \delta h^{(1)} \rangle_{\delta\eta} + \mathcal{O}(\delta h^3) \right\}, \quad (\text{D.61})$$

que podemos escribir en la forma

$$\langle \Phi \rangle_{\delta\eta} = V\Phi^{(1)} + V^2\Phi^{(2)} + \mathcal{O}(V^3), \quad (\text{D.62})$$

donde

$$\Phi^{(1)} = -\frac{2\pi}{a_{\perp}} \sin \frac{2\pi\bar{h}}{a_{\perp}} \left\{ 1 - \frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \langle (\delta h^{(0)})^2 \rangle_{\delta\eta} \right\}, \quad (\text{D.63})$$

$$\Phi^{(2)} = \frac{8\pi^3}{a_{\perp}^3} \sin \frac{2\pi\bar{h}}{a_{\perp}} \langle \delta h^{(0)} \delta h^{(1)} \rangle_{\delta\eta}. \quad (\text{D.64})$$

Ahora utilizamos (D.59) para obtener

$$\begin{aligned} \langle (\delta h^{(0)})^2 \rangle_{\delta\eta} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^t dt' \int_{\bar{\Lambda}}^{\Lambda} d^2\mathbf{k} \chi_0(\mathbf{k}, t-t') 2T\mu^{-1} \\ &\simeq \varepsilon \Lambda^2 \frac{\mu T}{\pi} \int_{-\infty}^t dt' e^{-2(\nu\Lambda^2 + \kappa\Lambda^4)\mu(t-t')} \\ &= \varepsilon \frac{T}{2\pi} \frac{1}{\nu + \kappa\Lambda^2}. \end{aligned} \quad (\text{D.65})$$

y

$$\langle \delta h^{(0)}(\mathbf{r}, t) \delta h^{(0)}(\mathbf{r}', t') \rangle_{\delta\eta} = \frac{T}{2\pi^2} \int_{\bar{\Lambda}}^{\Lambda} d^2\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}}{\nu\mathbf{k}^2 + \kappa\mathbf{k}^4} e^{-(\nu\mathbf{k}^2 + \kappa\mathbf{k}^4)\mu(t-t')} \quad (\text{D.66})$$

$$\simeq \frac{T}{\pi} \int_{\bar{\Lambda}}^{\Lambda} k dk \frac{J_0(k\rho)}{\nu k^2 + \kappa k^4} e^{-(\nu k^2 + \kappa k^4)\mu(t-t')} \quad (\text{D.67})$$

$$\simeq \varepsilon \frac{T}{2\pi} \frac{J_0(\Lambda\rho)}{\nu + \kappa\Lambda^2} e^{-(\nu\Lambda^2 + \kappa\Lambda^4)\mu(t-t')}, \quad (\text{D.68})$$

donde de nuevo hemos definido $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

El otro valor medio que aparece en (D.61) es más difícil de obtener. En principio, se tiene que

$$\Phi^{(2)} = -\frac{32\pi^5}{a_{\perp}^5} \int d^2\mathbf{r}' \int_{-\infty}^t \chi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t-t') \langle \delta h^{(0)} \delta h'^{(0)} \rangle_{\delta\eta} \cos \frac{2\pi\bar{h}'}{a_{\perp}} \sin \frac{2\pi\bar{h}}{a_{\perp}}, \quad (\text{D.69})$$

donde, para simplificar la notación, hemos adoptado las abreviaturas $\bar{h}' \equiv \bar{h}(\mathbf{r}', t')$ y $\delta h'^{(i)} \equiv \delta h^{(i)}(\mathbf{r}', t')$. Despreciando armónicos de orden superior, $\cos \frac{2\pi\bar{h}'}{a_{\perp}} \sin \frac{2\pi\bar{h}}{a_{\perp}} = \frac{1}{2} \sin \frac{2\pi(\bar{h}' - \bar{h})}{a_{\perp}}$, y ahora desarrollamos el seno como operador local análogamente al caso de equilibrio [véanse ecuaciones (D.19)-(D.24)]

$$\sin \frac{2\pi(\bar{h}' - \bar{h})}{a_{\perp}} \simeq \frac{2\pi}{a_{\perp}} O_1(\boldsymbol{\rho}) \exp \left[-\frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \langle (\bar{h} - \bar{h}')^2 \rangle_{\bar{h}} \right] \quad (\text{D.70})$$

donde $O_1(\mathbf{r}) = \bar{h}' - \bar{h}$. Desarrollando $O_1(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned} \sin \frac{2\pi(\bar{h}' - \bar{h})}{a_\perp} \simeq & \frac{2\pi}{a_\perp} \left[- (t - t') \frac{\partial \bar{h}}{\partial t} - \frac{1}{2} \left\{ \rho_x^2 \frac{\partial^2 \bar{h}}{\partial x^2} + 2\rho_x \rho_y \frac{\partial^2 \bar{h}}{\partial x \partial y} + \rho_y^2 \frac{\partial^2 \bar{h}}{\partial y^2} \right\} \right. \\ & - \frac{1}{24} \left\{ \rho_x^4 \frac{\partial^4 \bar{h}}{\partial x^4} + 4\rho_x^3 \rho_y \frac{\partial^4 \bar{h}}{\partial x^3 \partial y} + 6\rho_x^2 \rho_y^2 \frac{\partial^4 \bar{h}}{\partial x^2 \partial y^2} \right. \\ & \left. \left. + 4\rho_x \rho_y^3 \frac{\partial^4 \bar{h}}{\partial x \partial y^3} + \rho_y^4 \frac{\partial^4 \bar{h}}{\partial y^4} \right\} \right] \exp \left[-\frac{2\pi T}{a_\perp^2} \phi(\rho, t - t', \nu, \kappa, \mu) \right], \end{aligned} \quad (\text{D.71})$$

donde hemos definido

$$\phi(\rho, t - t', \nu, \kappa, \mu) = \int_0^\Lambda k dk \frac{1}{\nu k^2 + \kappa k^4} [1 - J_0(\rho k) e^{-(\nu k^2 + \kappa k^4)\mu(t-t')}]. \quad (\text{D.72})$$

Introduciendo (D.71) en (D.69) y realizando las integrales angulares podemos escribir finalmente la ecuación (D.53) como

$$(\eta + \varepsilon \delta \eta) \frac{\partial \bar{h}}{\partial t} = (\nu + \varepsilon \delta \nu) \Delta \bar{h} - (\kappa + \varepsilon \delta \kappa) \Delta^2 \bar{h} + \frac{2\pi(V + \varepsilon \delta V)}{a_\perp} \sin \frac{2\pi \bar{h}}{a_\perp} + \sqrt{2D\eta} \bar{\xi}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{D.73})$$

donde

$$\delta \nu = \frac{4\pi^5 V^2}{a_\perp^6 \Lambda^4} \frac{T}{(\nu + \kappa \Lambda^2)^2} B^{(2,0)}(\nu, \kappa), \quad (\text{D.74})$$

$$\delta \kappa = -\frac{\pi^5 V^2}{4a_\perp^6 \Lambda^6} \frac{T}{(\nu + \kappa \Lambda^2)^2} B^{(4,0)}(\nu, \kappa), \quad (\text{D.75})$$

$$\delta V = -\frac{\pi V}{a_\perp^2} \frac{T}{\nu + \kappa \Lambda^2}, \quad (\text{D.76})$$

$$\delta \mu^{-1} = -\frac{16\pi^5 V^2}{a_\perp^6 \Lambda^4} \frac{T \mu^{-1}}{(\nu + \kappa \Lambda^2)^3} B^{(0,1)}(\nu, \kappa), \quad (\text{D.77})$$

con

$$B^{(n,m)}(\nu, \kappa) = \int_0^\infty d\tilde{\rho} \tilde{\rho}^{n+1} \int_0^\infty d\tau e^{-\tau} \tau^m J_0(\tilde{\rho}) G(\tilde{\rho}, \tau, \nu, \kappa) e^{-\frac{2\pi T}{a_\perp^2} \phi(\tilde{\rho}, \tau, \nu, \kappa)}, \quad (\text{D.78})$$

donde

$$G(\tilde{\rho}, \tau, \nu, \kappa) = \int_0^1 \tilde{k} d\tilde{k} J_0(\tilde{k} \tilde{\rho}) \exp \left\{ -\tau \frac{\nu \tilde{k}^2 + \kappa \Lambda^2 \tilde{k}^4}{\Lambda \nu + \kappa \Lambda^2} \right\}, \quad (\text{D.79})$$

$$\phi(\tilde{\rho}, \tau, \nu, \kappa) = \int_0^1 \tilde{k} d\tilde{k} \frac{1}{\nu \tilde{k}^2 + \kappa \Lambda^2 \tilde{k}^4} \left[1 - J_0(\tilde{k} \tilde{\rho}) \exp \left\{ -\tau \frac{\nu \tilde{k}^2 + \kappa \Lambda^2 \tilde{k}^4}{\Lambda \nu + \kappa \Lambda^2} \right\} \right]. \quad (\text{D.80})$$

Por último, reescalamos la ecuación (D.73) mediante

$$\bar{\Lambda} \rightarrow \Lambda = b\bar{\Lambda}, \quad (\text{D.81})$$

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r}/b, \quad (\text{D.82})$$

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k}b, \quad (\text{D.83})$$

$$\bar{h} \rightarrow \bar{h}' = b^{-\alpha} \bar{h}, \quad (\text{D.84})$$

$$t \rightarrow t' = b^{-z} t, \quad (\text{D.85})$$

con lo que la ecuación (D.73) puede escribirse a primer orden en ε como

$$\eta''(\varepsilon) \frac{\partial \bar{h}'}{\partial t'} = \nu''(\varepsilon) \Delta \bar{h}' - \kappa''(\varepsilon) \Delta^2 \bar{h}' + \frac{2\pi V_0''(\varepsilon)}{a_\perp'} \sin \frac{2\pi \bar{h}'}{a_\perp'} + \sqrt{2D''(\varepsilon)\eta''(\varepsilon)} \bar{\xi}(\mathbf{r}', t'), \quad (\text{D.86})$$

donde

$$\nu''(\varepsilon) = (\nu + \varepsilon \delta \nu) b^{z-2} \simeq \nu + \varepsilon [\delta \nu + (z-2)\nu] + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{D.87})$$

$$\kappa''(\varepsilon) = (\kappa + \varepsilon \delta \kappa) b^{z-4} \simeq \kappa + \varepsilon [\delta \kappa + (z-4)\kappa] + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{D.88})$$

$$V''(\varepsilon) = (V + \varepsilon \delta V) b^{z-2\alpha} \simeq V + \varepsilon [\delta V + (z-2\alpha)V] + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{D.89})$$

$$\eta''(\varepsilon) = \eta + \varepsilon \delta \eta + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{D.90})$$

$$D''(\varepsilon) = D b^{z-2\alpha-2} \simeq D + \varepsilon (z-2\alpha-2)D + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{D.91})$$

$$a_\perp''(\varepsilon) = a_\perp b^{-\alpha} \simeq a_\perp - \varepsilon \alpha a_\perp + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{D.92})$$

Al igual que en el caso estático podemos plantear estas ecuaciones infinitesimalmente, con lo que

$$\frac{d\nu}{dl} = (z-2)\nu + \delta \nu, \quad (\text{D.93})$$

$$\frac{d\kappa}{dl} = (z-4)\kappa + \delta \kappa, \quad (\text{D.94})$$

$$\frac{dV}{dl} = (z-2\alpha)V + \delta V, \quad (\text{D.95})$$

$$\frac{d\eta}{dl} = \delta \eta, \quad (\text{D.96})$$

$$\frac{dD}{dl} = (z-2\alpha-2)D, \quad (\text{D.97})$$

$$\frac{da_\perp}{dl} = -\alpha a_\perp. \quad (\text{D.98})$$

$$(\text{D.99})$$

De estas ecuaciones podemos deducir dos cosas: la primera de ellas es que la movilidad η renormaliza independientemente de los otros parámetros (al menos hasta orden V^2), ya que la parte derecha de todas las ecuaciones anteriores no depende de η . La segunda es que, si suponemos que el sistema verifica hiperescalado en el sentido de que $z-2\alpha = d = 2$, entonces D no renormaliza y se tiene que $D = D_0 = T$ bajo el flujo de renormalización en todo momento. Esta condición de hiperescalado se verifica tanto para el modelo de EW ($\alpha = 0, z = 2$) que es la teoría libre de sG, como para LMBE ($\alpha = 1, z = 4$) que es la teoría libre de xMBE.

Por último expresamos las ecuaciones en función de las variables definidas en (D.46)

$$\frac{dx}{dl} = (z-2-2\alpha)x - 4K + \frac{2y^2}{x^2} \left[\tilde{B}^{(2,0)}(x, K) - \frac{1}{16} \tilde{B}^{(4,0)}(x, K) \right], \quad (\text{D.100})$$

$$\frac{dy}{dl} = 2y \left(1 - \frac{1}{x} \right), \quad (\text{D.101})$$

$$\frac{dK}{dl} = -(4-z+2\alpha)K - \frac{1}{16} \frac{y^2}{x^2} \tilde{B}^{(4,0)}(x, K), \quad (\text{D.102})$$

donde

$$\tilde{B}^{(n)}(x, K) = \int_0^\infty d\tilde{\rho} \tilde{\rho}^{n+1} \int_0^\infty d\tau \tau^m e^{-\tau} J_0(\tilde{\rho}) \tilde{G}(\tilde{\rho}, \tau, x, K) e^{-2\tilde{\phi}(\tilde{\rho}, \tau, x, K)}, \quad (\text{D.103})$$

con

$$\tilde{G}(\tilde{\rho}, \tau, x, K) = \int_0^1 \tilde{k} d\tilde{k} J_0(\tilde{k}\tilde{\rho}) e^{-\frac{2\tau}{x}[(x/2-K)\tilde{k}^2 + K\tilde{k}^4]}, \quad (\text{D.104})$$

$$\tilde{\phi}(\tilde{\rho}, \tau, x, K) = \int_0^1 \tilde{k} d\tilde{k} \frac{1 - J_0(\tilde{k}\tilde{\rho}) e^{-\frac{2\tau}{x}[(x/2-K)\tilde{k}^2 + K\tilde{k}^4]}}{(x/2 - K)\tilde{k}^2 + K\tilde{k}^4}. \quad (\text{D.105})$$

$$(\text{D.106})$$

Las integrales $\tilde{B}^{(n)}(x, K)$ convergen para cualquier valor de x y K . En el caso de que $x = 2K$ (i.e. sin tensión superficial), $\tilde{B}^{(n,m)}(x, x/2) = 0$, lo que implica que si inicialmente no hay tensión superficial, las ecuaciones anteriores predicen que no se genera.

Por último, para comparar con el caso estático, transformamos las integrales. Se tiene que

$$\frac{\partial \phi(\tilde{\rho}, \tau, x, K)}{\partial \tau} = \frac{2}{x} \tilde{G}(\tilde{\rho}, \tau, x, K) \quad (\text{D.107})$$

con lo que

$$\tilde{B}^{(n)}(x, K) = \frac{x}{4} \int_0^\infty d\tilde{\rho} \tilde{\rho}^{n+1} J_0(\tilde{\rho}) \left[e^{-2\tilde{\phi}(\tilde{\rho}, 0, x, K)} - \int_0^\infty d\tau e^{-\tau} e^{-2\tilde{\phi}(\tilde{\rho}, \tau, x, K)} \right] \quad (\text{D.108})$$

Por tanto, cuando $\tau \ll 1$, es decir, cuando el tiempo de respuesta en el sistema es nulo, tenemos que $\tilde{B}^{(n)} = \frac{x}{4} A^{(n)}$ con lo que las ecuaciones (D.100)-(D.100) son las mismas que (D.47)-(D.49).

Apéndice E

Estudio analítico de la transición sincronización-desincronización en osciladores acoplados

En este apéndice reproducimos el cálculo del punto donde se produce la transición para el modelo

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \omega + \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\phi_j - \phi_i + \alpha) + \sigma\eta_i(t), \quad (\text{E.1})$$

donde η es un ruido blanco. Cuando $N \rightarrow \infty$ sabemos que la ecuación para la densidad número de osciladores $P(\phi, t)$ es

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial \phi^2} - \frac{\partial}{\partial \phi} (v(\phi)P), \quad (\text{E.2})$$

siendo $P(\phi, t)$ la densidad de probabilidad normalizada

$$\int_0^{2\pi} d\phi P(\phi, t) = 1. \quad (\text{E.3})$$

En nuestro caso, la función $v(\phi)$ puede expresarse a través de relaciones trigonométricas como

$$v(\phi) = \omega + \kappa\rho \sin(\psi - \phi + \alpha) \quad (\text{E.4})$$

donde $\rho e^{i\psi}$ es el parámetro de orden definido por (8.3). Una solución trivial de la ecuación (E.2) es $P_0 = 1/2\pi$ que se denomina *solución incoherente*, ya que entonces $\rho = 0$. Para ver la estabilidad de esta solución desarrollamos $P(\phi, t)$ alrededor de P_0 de manera que

$$P(\phi, t) = P_0 + \epsilon P_1(\phi, t), \quad (\text{E.5})$$

donde $\epsilon \ll 1$. La condición de normalización (E.3) requiere que

$$\int_0^{2\pi} d\phi P_1(\phi, t) = 0. \quad (\text{E.6})$$

Introduciendo la expresión (E.5) en (E.2) obtenemos la ecuación que verifica P_1

$$\epsilon \frac{\partial P_1}{\partial t} = \epsilon \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_1}{\partial \phi^2} - \frac{\partial}{\partial \phi} [(P_0 + \epsilon P_1)v(\phi)]. \quad (\text{E.7})$$

Sabiendo que

$$\rho(t) = \epsilon \rho_1(t) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (\text{E.8})$$

con

$$\rho_1 e^{i\psi} = \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\phi} P_1(\phi, t), \quad (\text{E.9})$$

entonces la ecuación (E.7) queda

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P_1}{\partial \phi^2} - \omega \frac{\partial P_1}{\partial \phi} + \frac{\kappa}{2\pi} \rho_1 \cos(\psi - \phi + \alpha). \quad (\text{E.10})$$

Para analizar la ecuación anterior es conveniente utilizar los modos de Fourier y expresar P_1 como una función periódica en ϕ . Es decir, buscamos soluciones de la forma

$$P_1(\phi, t) = c(t)e^{i\phi} + c^*(t)e^{-i\phi} + P_1^\perp(\phi, t), \quad (\text{E.11})$$

donde $P_1^\perp(\phi, t)$ son armónicos de segundo o mayor orden y $c(t)$ es la amplitud compleja. El hecho de que tomemos sólo el primero de los armónicos se debe a que este es el único que contribuye a la función $\rho(t)$, y por tanto la única contribución de P_1 en el último término de (E.10) viene a través de $c(t)$ y su compleja conjugada. Para ver esto, nótese que

$$\rho_1 e^{i\psi} = 2\pi c^*(t), \quad (\text{E.12})$$

con lo que

$$\rho_1 \cos(\psi - \phi + \alpha) = \pi c(t) e^{-i\alpha} e^{i\phi} + c.c.. \quad (\text{E.13})$$

De esta manera, la ecuación para la amplitud es:

$$\frac{dc}{dt} = - \left(\frac{\sigma^2}{2} + i\omega \right) c(t) + \frac{\kappa}{2} e^{i\alpha} c(t). \quad (\text{E.14})$$

Los autovalores discretos de la ecuación anterior son

$$\lambda = - \left(\frac{\sigma^2}{2} + i\omega \right) + \frac{\kappa}{2} e^{i\alpha} = \frac{1}{2} (\kappa \cos \alpha - \sigma^2) + \frac{i}{2} (\kappa \sin(\alpha) - \omega). \quad (\text{E.15})$$

De esta manera, la solución P_0 es linealmente estable cuando $\text{Re}(\lambda) < 0$, es decir cuando

$$\sigma^2 > \kappa \cos \alpha. \quad (\text{E.16})$$

Este es el punto donde se produce la transición entre la solución incoherente y la coherente (o fase sincronizada).

Índice

- Aproximación de Born, 97
- Autocriticalidad Organizada, 34
- Autosemejanza, 35
 - estocástica, 35
- Autosimilaridad, 35
 - estocástica, 35

- Balance detallado, 30
- Bogoliubov
 - desigualdad de, 81

- Calor específico
 - seeSusceptibilidad de la energía, 68
- Caminante aleatorio, 13
- Correlación
 - función de, 11
 - longitud de, 81
- correlación
 - tiempo de, 18
- Criterio
 - de Kolmogorov, 11

- Doob, teorema de, 18

- Ecuación
 - de Fokker-Planck, 20
 - sine-Gordon conservada (csG), 99
- Ecuaciones estocásticas
 - Solución, 17
- Energía, 204
 - media, **67**
- Equilibrio
 - estado de, 29
- Exponente
 - α , de rugosidad, 36
 - β , de crecimiento, 36
 - z , dinámico, 36

- Fórmula de Itô, 17
- Factor de estructura, **67**, 81
- Fase
 - hexática, 62
- Fractales, 35
- Función
 - de correlación
 - altura-altura, **67**
 - pendiente-pendiente, **67**

- Itô
 - Fórmula de, *véase* Fórmula de Itô

- Longitud de correlación, *véase* Correlación

- Modelo
 - A, 27
 - ASOS, 61
 - B o de Cahn-Hilliard, 28
 - BCSOS, 61
 - de Kuramoto, 111
 - DxMBE, 49, 57
 - gaussiano Discreto, **49**
 - laplaciano discreto de Nelson, *véase* Modelo DxM-BE
 - sine-Gordon (sG), **57**
 - xMBE, **57**
 - XY, **117**
- Movilidad, **68**

- Parámetro
 - de fluctuación, **67**, 204
- Pendiente total, **66**, 204
- Probabilidad, 7
- Proceso estocástico
 - de Ornstein-Uhlenbeck, 18, 203
 - de Wiener, 11, 35, 203
 - difusivo, 19
 - estacionario, 11
 - markoviano, 12

- Relación
 - de fluctuación-dispación, 26
 - de hiperscalado, 202
- Rugosidad, **66**
- Ruido
 - blanco, 11
 - de color, 18

- Susceptibilidad
 - de la energía, 68
 - del parámetro de fluctuación, 68

- Teorema
 - de equipartición, 28
 - de Mermim-Wagner, 157
 - de Wong-Zakai, 22
 - fundamental de Kolmogorov, 10

- o Fórmula de Itô, 17
- Transición
 - de Kosterlitz-Thouless, 61
 - de KTHNY, 62
 - de rugosidad, 58-65
 - orientacional, 62
 - traslacional, 59
 - sólido-líquido o de fusión, 62