

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA “LA SAPIENZA”
DOTTORATO DI RICERCA IN MATEMATICA
XVII CICLO

TESI DI DOTTORATO

**Γ -convergenza di un modello di
transizione di fase per le dislocazioni
planari nei cristalli**

Simone Cacace

A.A. 2006/2007

Indice

Introduzione	1
1 Preliminari	5
1.1 Γ -convergenza	5
1.2 Funzionali integrali definiti sulle partizioni	11
2 Il modello di transizione di fase delle dislocazioni	15
2.1 Dislocazioni	15
2.2 Il modello bi-dimensionale	22
2.2.1 L'energia di interazione elastica a lungo raggio	23
2.2.2 L'energia dei core delle dislocazioni	32
2.2.3 Forze esterne	33
2.3 Il funzionale di energia	33
2.4 Il problema variazionale	35
2.4.1 Applicazione del modello ai "Twist Boundaries"	37
3 Funzionali a buche multiple: analisi di alcuni risultati noti	41
3.1 Il funzionale di Cahn-Hilliard	42
3.2 Un funzionale non-locale di tipo Cahn-Hilliard	46
3.3 Il funzionale delle dislocazioni: un caso scalare	48
4 Il Γ-limite del funzionale delle dislocazioni	57
4.1 Compattezza	60
4.2 Esistenza: La stima fondamentale	65
4.3 Rappresentazione Integrale	73
4.4 Osservazioni su alcuni problemi di minimo	77
5 Non ottimalità del profilo unidimensionale per il reticolo cubico	79
Bibliografia	89

Introduzione

Questa tesi è dedicata allo studio del comportamento asintotico, tramite Γ -convergenza, del seguente funzionale integrale:

$$F_\varepsilon(u) = \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{T^2} \int_{T^2} \left(u(x) - u(y)\right)^T \mathbb{J}(x - y) \left(u(x) - u(y)\right) dx dy + \quad (1)$$
$$+ \frac{1}{\varepsilon |\log \varepsilon|} \int_{T^2} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}^N) dx,$$

dove ε è un piccolo parametro positivo, l'insieme $T^2 = \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$ è il toro unitario di \mathbb{R}^2 , $u : T^2 \rightarrow \mathbb{R}^N$ è un parametro d'ordine vettoriale 1-periodico, il simbolo $(\cdot)^T$ indica la trasposizione di vettore, $\mathbb{J} : T^2 \rightarrow M^{N \times N}$ è una funzione singolare a valori nello spazio delle matrici $N \times N$ che definisce un termine non locale equivalente al quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}$ di u e infine $\text{dist}(\cdot, \mathbb{Z}^N)$ è la funzione distanza dall'insieme delle N -ple di numeri interi.

Questo funzionale è stato proposto da Koslowski, Cuitiño e Ortiz ([25], [26]) come un modello di transizione di fase per la descrizione delle linee di dislocazione all'interno dei cristalli. In presenza di forze applicate dall'esterno, la particolare geometria di un cristallo vincola le deformazioni lungo dei piani preferenziali, detti piani di slittamento, e determina su di essi le direzioni lungo le quali è favorito lo scorrimento degli atomi (i sistemi di slittamento). Questo processo, noto come slittamento cristallografico, può produrre difetti del reticolo cristallino più o meno estesi e di varia natura topologica. Le dislocazioni sono imperfezioni di carattere unidimensionale, che possono migrare lungo i piani di slittamento con un basso dispendio energetico, alterando drasticamente le proprietà meccaniche del cristallo. In particolare esse sono responsabili di molti interessanti fenomeni, ad esempio quelli di plasticità o di "hardening".

Nel modello (si veda il Capitolo 2) si considera un cristallo elastico periodico che possiede un singolo piano di slittamento (identificato con l'insieme T^2), mentre lo slittamento cristallografico è rappresentato tramite il campo vettoriale u , che quantifica in ogni punto l'entità e la direzione della deformazione plastica subita dal reticolo cristallino sottostante, in termini di combinazioni lineari di un numero

N arbitrario di direzioni di slittamento attive su T^2 . Il comportamento asintotico del funzionale (1) fornisce un modello variazionale per le dislocazioni, in cui queste si possono identificare con le linee di discontinuità di un campo di fase a valori in \mathbb{Z}^N su cui è concentrata tutta l'energia. Notiamo inoltre che la struttura di (1) è quella di un funzionale a buche multiple perturbato da un termine regolarizzante di ordine superiore. I primi risultati di Γ -convergenza per questo tipo di energie, nel caso di perturbazioni locali del tipo integrale di Dirichlet, sono dovuti a Modica e Mortola ([28],[29]), in particolare quelli relativi al funzionale di Cahn-Hilliard per le transizioni di fase di un fluido ([13], [30]), i.e.

$$E_\varepsilon(u) = \varepsilon \int_{\Omega} |\nabla u(x)|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} W(u(x)) dx, \quad (2)$$

dove $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ rappresenta il contenitore del fluido e dove W è un potenziale i cui minimi identificano le fasi ammissibili del sistema. È ben noto che il comportamento asintotico di (2) è descritto dal funzionale di tensione superficiale

$$E(u) = C_W \mathcal{H}^2(Su),$$

dove Su è la superficie di separazione tra le fasi e C_W è una costante che dipende solo da potenziale W e rappresenta il costo energetico di una transizione di fase dal profilo ottimale (si veda la Sezione 3.1). Su questa linea delle perturbazioni di tipo locale si è sviluppata un'ampia letteratura, tra cui ricordiamo [30], [24], [14], [20]. Più recentemente alcune applicazioni hanno invece portato allo studio di varianti di (2) non locali, derivate da modelli di Ising con potenziali di Kac (si veda ad esempio [4], [32]). In questi casi il termine non locale del funzionale di energia è descritto da un nucleo regolare e il comportamento asintotico è ancora caratterizzato da un problema di profilo ottimale ([2], [3]). D'altra parte, la descrizione di modelli di transizione con tensione di linea al bordo ([5]) ha condotto all'analisi di funzionali in cui la regolarizzazione è di tipo $H^{\frac{1}{2}}$, ossia non locale con nucleo d'interazione singolare, per i quali il riscaldamento naturale dell'energia è, come nel caso del funzionale F_ε definito in (1), di tipo logaritmico (si veda anche [6], [27]). Per quanto riguarda lo studio delle dislocazioni il primo risultato di Γ -convergenza è dovuto a Garroni e Müller ([22]), relativo ad una versione scalare di F_ε , i.e.

$$I_\varepsilon(u) = \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{T^2} \int_{T^2} J(x-y) |u(x) - u(y)|^2 dx dy + \frac{1}{\varepsilon |\log \varepsilon|} \int_{T^2} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}) dx. \quad (3)$$

Questo caso corrisponde a richiedere un'ipotesi di struttura molto forte, ossia che lo slittamento cristallografico sul piano T^2 sia vincolato ad utilizzare un solo sistema

di slittamento, descritto da un multiplo u scalare di una particolare direzione di slittamento. Questo vincolo non permette quindi di trattare alcuni interessanti problemi legati al modello e di osservare alcuni fenomeni tipici dei cristalli, come la formazione, la crescita e l'arrangiamento in cicli e network delle linee di dislocazione. Un esempio significativo è quello del twist boundary, in cui il cristallo è sottoposto, in corrispondenza del piano di slittamento, all'azione di una forza di torsione (si veda la Sezione 2.4.1 e [26],[31]).

Tuttavia il funzionale $I_\varepsilon(u)$ in (3) è indispensabile per comprendere a fondo il caso vettoriale, soprattutto perché il suo Γ -limite $I(u)$ è stato completamente caratterizzato ([22]):

$$I(u) = \int_{Su} \gamma(n)[u] d\mathcal{H}^1,$$

dove $[u]$ indica il salto del campo di slittamento in corrispondenza delle dislocazioni (individuate dall'insieme Su delle sue discontinuità) e $\gamma(n)$ è una tensione di linea anisotropa, espressa esplicitamente in termini del nucleo di interazione J . In particolare osserviamo che la struttura del potenziale non influisce affatto sul limite. Tale comportamento è dovuto proprio al riscaldamento logaritmico, che rende inoltre irrilevante il profilo della transizione ottimale, segnando una sostanziale differenza tra questa classe di problemi e quelle citate precedentemente. Fenomeni analoghi sono stati osservati anche in altri modelli di transizione di fase, ad esempio per il funzionale di Ginzburg-Landau ([1], [11]).

Come annunciato l'obiettivo di questa tesi è lo studio del comportamento asintotico del funzionale delle dislocazioni nel caso vettoriale. Abbiamo infatti rimosso il vincolo di struttura del funzionale (3), consentendo sul piano T^2 l'attivazione di un numero N arbitrario di sistemi di slittamento. Questo, come vedremo, comporta sostanziali differenze. In particolare il maggior numero di gradi di libertà del sistema invalida le strategie utilizzate nel caso scalare e pertanto abbiamo attaccato il problema adottando un approccio astratto, basato sulla compattezza della Γ -convergenza e sulle tecniche di rappresentazione integrale per i funzionali definiti sulle partizioni. Il punto chiave del nostro risultato (Teorema 4.1) consiste in una stima fondamentale per il funzionale (1), con cui abbiamo dimostrato che la sua localizzazione sugli insiemi approssima a passo ε una misura di Borel, concentrata sulle singolarità dei campi di fase u a valori in \mathbb{Z}^N e rappresentata dal funzionale integrale

$$F(u, B) = \int_{Su \cap B} \varphi([u], n_u) d\mathcal{H}^1,$$

dove $\varphi : \mathbb{Z}^N \times S^1$ è una tensione di linea anisotropa. Anche in questo caso la forma precisa del potenziale non influisce sul limite, dal momento che il termine non locale dell'energia (1) risulta asintoticamente dominante per effetto del riscaldamento

logaritmico. Tuttavia questo approccio presenta due problemi principali: la dipendenza del limite F da una sotto-successione in ε e il fatto che φ non è caratterizzata esplicitamente come nel caso scalare. Al fine di chiarirne la difficoltà descriveremo quindi un particolare caso vettoriale, relativo ad un reticolo cristallino cubico che possiede due sistemi di slittamento. In particolare vedremo che il costo energetico di una transizione dipende in modo diverso dall'orientazione della normale all'interfaccia. Utilizzeremo questa informazione per costruire un profilo non unidimensionale che produce un valore limite di energia strettamente inferiore rispetto a quello associato alla mollificazione di una interfaccia piatta (che nel caso scalare corrisponde alla transizione ottimale), suggerendo che le successioni ottimali possono sviluppare oscillazioni. La tesi è organizzata come segue.

Il Capitolo 1 è dedicato ai preliminari. Discuteremo in generale la nozione Γ -convergenza e le sue principali proprietà e descriveremo la classe dei funzionali definiti sulle partizioni. In particolare presenteremo un importante risultato di Ambrosio e Braides (si veda [9],[10]) con cui proveremo, nel Capitolo 4, la rappresentazione integrale per il Γ -limite del funzionale delle dislocazioni.

Nel Capitolo 2 introdurremo alcuni concetti di teoria delle dislocazioni (si veda ad esempio [23]) e descriveremo dettagliatamente una derivazione formale del modello di Koslowski, Cuitiño e Ortiz ([25],[26]) per le dislocazioni. Successivamente discuteremo il problema variazionale associato al modello e la sua applicazione al problema del twist boundary citato precedentemente.

Il Capitolo 3 è invece dedicato all'analisi di alcuni dei modelli di transizione di fase menzionati, al fine di sottolineare, con analogie e differenze, le caratteristiche dei due termini dell'energia delle dislocazioni e gli effetti del riscaldamento logaritmico sulla loro interazione. Più precisamente descriveremo il funzionale di Cahn-Hilliard e il Teorema di Modica e Mortola, una sua versione non-locale e unidimensionale dovuta ad Alberti, Bouchitté e Seppecher ([6]) e infine l'equivalente scalare di (1).

Il Capitolo 4 contiene il risultato principale di questa tesi (Teorema 4.1). In particolare la Sezione 4.1 è dedicata alla compattezza, la Sezione 4.2 alla stima fondamentale e all'esistenza del Γ -limite di F_ε , la Sezione 4.3 alla rappresentazione integrale e la Sezione 4.4 ad alcune osservazioni sui problemi di minimo associati al funzionale Γ -limite. Infine nel Capitolo 5 presenteremo la costruzione del profilo non unidimensionale a bassa energia limite qui sopra citato.

Capitolo 1

Preliminari

1.1 Γ -convergenza

Nell'ambito del calcolo delle variazioni, molti modelli matematici portano spesso allo studio di famiglie di problemi di minimo dipendenti da uno o più parametri. La natura di questi parametri è legata al contesto specifico di un problema: essi possono rappresentare, ad esempio, delle scale di osservazione, oppure le grandezze intrinseche di una determinata struttura geometrica, come il passo di discretizzazione di un reticolo o lo spessore di un campione fisico. Solitamente, quando i parametri variano, i corrispondenti problemi di minimo possono risultare assai degeneri, il che rende complicato capire le caratteristiche delle loro soluzioni. Si cerca quindi di individuare un problema più semplice, anche di tipo completamente differente, in cui possibilmente non sia presente alcun parametro e che conservi il maggior numero di informazioni importanti del problema di partenza. La Γ -convergenza, introdotta negli anni 70 da De Giorgi e Franzoni, è attualmente riconosciuta come lo strumento più adatto per questo tipo di operazione. Si tratta di una nozione di convergenza per problemi variazionali assai flessibile, che si è rapidamente affermata nel mondo fisico-matematico per la sua capacità di giustificare e collegare rigorosamente tra loro modelli che provengono dai settori più disparati, come la teoria dell'omogenizzazione, la teoria delle transizioni di fase e la teoria delle perturbazioni singolari. Essa inoltre comincia ad avere un ruolo importante anche nelle applicazioni numeriche, in cui viene utilizzata, ad esempio, per approssimare funzionali che richiedono implementazioni complesse, fornendo una valida alternativa ai più diffusi modelli differenziali. Vediamo quindi come dedurre la definizione di Γ -convergenza a partire da alcune importanti proprietà che essa dovrà soddisfare. Per una trattazione approfondita e di carattere generale sull'argomento, rimandiamo il lettore interessato ai testi di Dal Maso [15] e Braides [12].

Consideriamo una famiglia di problemi di minimo dipendente da un piccolo parametro $\varepsilon > 0$:

$$\min \left\{ F_\varepsilon(u) : u \in X_\varepsilon \right\}. \quad (1.1)$$

Nelle applicazioni gli spazi X_ε sono tipicamente spazi di funzioni, adatti a descrivere grandezze fisiche o configurazioni ammissibili per un sistema fisico, ad esempio una densità di magnetizzazione, un parametro d'ordine legato alle transizioni di fase di un fluido o il campo di deformazione elastica di un cristallo, laddove i funzionali F_ε quantificano solitamente un qualche tipo di energia associata al modello considerato. Per $\varepsilon \rightarrow 0$ vogliamo quindi sostituire (1.1) con un problema *limite* del tipo

$$\min \left\{ F(u) : u \in X \right\} \quad (1.2)$$

che sia possibilmente più semplice da risolvere e che preservi le caratteristiche rilevanti dei punti di minimo u_ε dei funzionali F_ε corrispondenti. Più precisamente vogliamo identificare un funzionale limite F in modo che, per $\varepsilon \rightarrow 0$, sia garantita a priori la convergenza dei minimi e dei punti di minimo di F_ε verso quelli di F : se $u_\varepsilon \in X_\varepsilon$ è tale che

$$F_\varepsilon(u_\varepsilon) = \min_{v \in X_\varepsilon} F_\varepsilon(v) \quad \text{e} \quad u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u \in X,$$

allora si ha anche

$$F_\varepsilon(u_\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \min_{v \in X} F(v) = F(u). \quad (1.3)$$

Vogliamo inoltre che questa nozione di convergenza sia, in un senso opportuno, stabile rispetto alle perturbazioni:

$$F_\varepsilon \text{ "}\longrightarrow\text{" } F \quad \implies \quad F_\varepsilon + G \text{ "}\longrightarrow\text{" } F + G, \quad \forall G. \quad (1.4)$$

A seconda del contesto, i funzionali G possono descrivere, ad esempio, l'azione di campi di forze esterne, di campi magnetici applicati, oppure insiemi di vincoli sugli spazi delle configurazioni in cui si cercano le soluzioni di un dato problema. La proprietà (1.4) è quindi molto utile nelle applicazioni, perché permette di associare questi contributi aggiuntivi direttamente al funzionale limite F . In questo modo la convergenza di una famiglia di problemi del tipo (1.1) non è legata tanto ad una specifica situazione quanto al modello preso in considerazione, cosicché il corrispondente problema (1.2) risulta essere particolarmente adatto a descrivere una vera e propria *teoria limite*.

Notiamo che, in queste considerazioni, gioca un ruolo fondamentale il comportamento asintotico, per $\varepsilon \rightarrow 0$, delle successioni $\{u_\varepsilon\}$ di minimo. Indipendentemente dal fatto che tali successioni esistano o meno (e che sussista

la convergenza dei relativi valori minimi verso l'estremo inferiore di F), bisogna garantire innanzitutto l'esistenza dei loro limiti, tramite un'opportuna nozione di convergenza sulle funzioni. Da questo segue che la scelta dello spazio X nel problema limite (1.2) è guidata proprio dalle proprietà di *compattezza* della sua topologia. Notiamo inoltre che, al variare di ε , i funzionali F_ε possono essere definiti su spazi X_ε tutti diversi tra loro e diversi da X . Pertanto la topologia di X deve anche gestire la convergenza di funzioni appartenenti a spazi differenti. Solitamente, nei problemi di minimo, si sceglie uno spazio X sufficientemente grande da contenere tutti gli X_ε e si estende ad X ogni funzionale F_ε :

$$\bar{F}_\varepsilon(u) := \begin{cases} F_\varepsilon(u) & \text{se } u \in X_\varepsilon, \\ +\infty & \text{se } u \in X \setminus X_\varepsilon. \end{cases}$$

A questo punto rimane da chiarire come ottenere il funzionale limite F . Si procede cercando innanzitutto la limitazione dal basso (un *lower bound*), ovvero un funzionale F' tale che

$$F'(u) \leq \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon), \quad (1.5)$$

per ogni successione $\{u_\varepsilon\}$ tale che $u_\varepsilon \rightarrow u$ in X . Notiamo che questa condizione non riguarda solo le successioni minimizzanti, ma una qualunque successione convergente: essa da un lato assicura la proprietà di stabilità (1.4) rispetto alle perturbazioni *X-continue*, dall'altro suggerisce una proprietà strutturale del limite F , la *semicontinuità inferiore* (sempre rispetto alla topologia definita su X), fondamentale per l'applicazione del metodo diretto del calcolo delle variazioni.

Occorre quindi ottimizzare il ruolo di F' in (1.5): questo procedimento può variare da caso a caso, ma richiede sempre un argomento di minimizzazione. Una volta calcolato, il funzionale F' ottimale suggerisce la forma delle successioni minimizzanti (un *ansatz*), con cui è possibile costruire, per ogni $u \in X$, una particolare successione $\{\bar{u}_\varepsilon\}$ convergente ad u , detta successione *ottimale*. Allora si ottiene che la migliore approssimazione di F dall'alto (*upper bound*) è data dal funzionale $F''(u) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(\bar{u}_\varepsilon)$, ovvero risulta

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) \leq F''(u), \quad (1.6)$$

per ogni successione $\{u_\varepsilon\}$ tale che $u_\varepsilon \rightarrow u$ in X . Se dunque i funzionali F' e F'' coincidono, possiamo definire $F := F' = F''$, ovvero il $\Gamma(X)$ -*limite* per $\varepsilon \rightarrow 0$ della famiglia di funzionali F_ε . Come vedremo, tutti i modelli considerati in questa tesi saranno descritti da funzionali di energia non negativi, definiti sullo spazio metrico $X = L^1(\Omega)$ (Ω sarà sempre un dominio regolare di \mathbb{R}^n), munito della topologia generata dalla convergenza forte L^1 . Questa è la topologia naturale che garantirà

non solo la pre-compattezza delle successioni minimizzanti, ma anche quella di tutte le successioni ad energia uniformemente limitata in ε , la cosiddetta proprietà di *equicoercività uniforme* dei funzionali F_ε :

$$\sup_{\varepsilon > 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) < +\infty \quad \Longrightarrow \quad \exists \{u_{\varepsilon_k}\} \subseteq \{u_\varepsilon\} \quad \text{tale che} \quad u_{\varepsilon_k} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} u \quad \text{in } L^1.$$

Adottiamo quindi la seguente definizione di Γ -convergenza su spazi metrici.

Definizione 1.1 *Sia (X, d) uno spazio metrico e sia $F_\varepsilon : X \rightarrow [0, +\infty]$ una famiglia di funzionali parametrizzata da un numero reale $\varepsilon > 0$.*

Diremo che F_ε Γ -converge ad F per $\varepsilon \rightarrow 0$, nella topologia generata dalla metrica d (in simboli $F_\varepsilon \xrightarrow{\Gamma(d)} F$), se sussistono le due condizioni seguenti:

i) Per ogni $u \in X$ e per ogni successione $\{u_\varepsilon\} \subseteq X$ tale che $u_\varepsilon \xrightarrow{d} u$ risulta

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) \geq F(u).$$

ii) Per ogni $u \in X$ esiste $\{u_\varepsilon\} \subseteq X$ tale che $u_\varepsilon \xrightarrow{d} u$ e risulta

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) = F(u).$$

Il funzionale limite F dipende chiaramente dalla metrica d e quindi dalla topologia definita su X . Notiamo inoltre che la condizione (i), detta *disuguaglianza del Γ -lim inf*, ci dice che F è proprio un lower bound per i funzionali F_ε . D'altra parte la condizione (ii), nel caso in cui sussista la (i), si può ridurre a

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) \leq F(u).$$

Tale relazione, detta *disuguaglianza del Γ -lim sup*, assicura che F è anche un upper bound ottimale, dal momento che esiste almeno una successione ottimale che realizza l'uguaglianza (ii). Pertanto la Definizione 1.1 riassume efficacemente quanto detto finora, descrivendo una vera e propria *procedura costruttiva* per identificare un Γ -limite, che possiamo sintetizzare come segue:

$$\text{Compattezza} \quad \longrightarrow \quad \Gamma\text{-lim inf} \quad \longrightarrow \quad \Gamma\text{-lim sup} \quad (1.7)$$

Tuttavia, nelle applicazioni, occorre considerare un altro aspetto importante, il cosiddetto problema del *riscaldamento ottimale*. Anche se abbiamo scelto su X una topologia con buone proprietà di compattezza, può infatti accadere che il passaggio al limite produca un funzionale F banale, ad esempio un funzionale ovunque costante. In questo modo si ha quindi un'eccessiva perdita di informazioni, dal momento che un

qualunque elemento di X risulta essere un punto di minimo di F . Notiamo allora che, se da un lato la moltiplicazione di ogni funzionale F_ε per un numero reale positivo λ_ε non altera certamente i corrispondenti punti di minimo, dall'altro il Γ -limite di $\lambda_\varepsilon F_\varepsilon$ può variare drasticamente in funzione del carattere della successione $\{\lambda_\varepsilon\}$. In questo senso la scelta di un opportuno fattore di riscaldamento può generare un funzionale limite non banale, che porti in sè il maggior numero possibile di informazioni utili alla comprensione del problema considerato.

Nella proposizione seguente abbiamo rimesso insieme tutte le proprietà discusse precedentemente, che a questo punto risultano essere semplici conseguenze della stessa definizione di Γ -convergenza.

Proposizione 1.1 *La nozione di Γ -convergenza gode delle seguenti proprietà:*

1) Semicontinuità inferiore:

ogni $\Gamma(d)$ -limite risulta essere sempre semicontinuo inferiormente rispetto alla topologia generata dalla metrica d .

2) Stabilità rispetto alle perturbazioni continue:

se F_ε $\Gamma(d)$ -converge ad F e G è un funzionale d -continuo, allora $F_\varepsilon + G$ $\Gamma(d)$ -converge ad $F + G$.

3) Stabilità dei punti di minimo e dei valori minimi:

se F_ε $\Gamma(d)$ -converge ad F e $\{u_\varepsilon\}$ è una successione che minimizza F_ε su X , tale che $u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u$, allora u minimizza F su X e risulta

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \min_{v \in X} F_\varepsilon(v) = \min_{v \in X} F(v) = F(u).$$

Vale la pena osservare che, in generale, l'approccio costruttivo alla Γ -convergenza descritto dalla procedura (1.7) non sempre risulta di facile applicabilità. A seconda della famiglia di funzionali F_ε considerata può infatti capitare che il problema di ottimizzazione che conduce alla disuguaglianza del Γ -lim inf non sia esplicitamente risolvibile. Come vedremo in seguito, il modello vettoriale delle dislocazioni studiato in questa tesi costituisce un esempio concreto di questa situazione. Occorre quindi affrontare il problema della Γ -convergenza tramite un approccio astratto, ovvero non costruttivo, con cui è comunque possibile ottenere informazioni importanti sul comportamento asintotico dei funzionali F_ε e delle loro successioni minimizzanti. A tale scopo si può provare l'esistenza di un Γ -limite tramite risultati di compattezza e di rappresentazione. Concludiamo quindi questa sezione presentando una definizione di Γ -convergenza particolarmente adatta a questo contesto più generale.

Poniamo innanzitutto

$$F'(u) := \inf \left\{ \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) : u_\varepsilon \xrightarrow{d} u \right\},$$

$$F''(u) := \inf \left\{ \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) : u_\varepsilon \xrightarrow{d} u \right\}.$$

Notiamo che questi due funzionali, detti rispettivamente il $\Gamma(d)$ -limite inferiore e il $\Gamma(d)$ -limite superiore della famiglia F_ε , sono sempre ben definiti, in quanto composizioni di operatori di tipo inf e sup. Inoltre si verifica facilmente che essi sono sempre d -semicontinui inferiormente e che soddisfano le due condizioni seguenti, analoghe a quelle della Definizione 1.1:

i) $\forall u \in X$ e $\forall \{u_\varepsilon\} \subseteq X$ tale che $u_\varepsilon \xrightarrow{d} u$ risulta

$$F'(u) \leq \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon), \quad F''(u) \leq \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon);$$

ii) $\forall u \in X \quad \exists \{u'_\varepsilon\}, \{u''_\varepsilon\} \subseteq X$ tali che $u'_\varepsilon, u''_\varepsilon \xrightarrow{d} u$ e risulta

$$F'(u) = \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u'_\varepsilon), \quad F''(u) = \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u''_\varepsilon).$$

Le due successioni $\{u'_\varepsilon\}$ e $\{u''_\varepsilon\}$ sono dette successioni ottimali rispettivamente per F' e F'' . Adottiamo quindi la seguente definizione.

Definizione 1.2 Diremo che la famiglia di funzionali $F_\varepsilon : X \rightarrow [0, +\infty]$ $\Gamma(d)$ -converge per $\varepsilon \rightarrow 0$ se e soltanto se per ogni $u \in X$ risulta $F'(u) = F''(u)$ e porremo

$$F(u) := \Gamma(d)\text{-}\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u) = F'(u) = F''(u).$$

Enunciamo infine la cosiddetta proprietà di compattezza della Γ -convergenza, valida in un qualunque spazio metrico (X, d) separabile.

Proposizione 1.2 Sia (X, d) uno spazio metrico separabile e sia $F_\varepsilon : X \rightarrow [0, +\infty]$ una famiglia di funzionali parametrizzata da un parametro reale $\varepsilon > 0$. Per ogni successione $\{\varepsilon_n\} \subseteq \mathbb{R}$ tale che $\varepsilon_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ esiste una sotto-successione $\{\varepsilon_{n_k}\}$ tale che il $\Gamma(d)$ -limite

$$\Gamma(d)\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_{n_k}}(u)$$

esiste per ogni $u \in X$.

1.2 Funzionali integrali definiti sulle partizioni

Questa sezione è dedicata ad una importante classe di funzionali integrali, con cui è possibile affrontare rigorosamente numerosi problemi della fisica matematica, come ad esempio la segmentazione delle immagini, oppure la determinazione delle configurazioni di equilibrio dei cristalli liquidi e delle miscele di fluidi. In particolare, come vedremo successivamente, appartengono a questa classe anche i Γ -limiti di tutti i modelli di transizione di fase analizzati in questa tesi.

Innanzitutto introduciamo alcune notazioni e richiamiamo alcuni concetti e risultati fondamentali della teoria geometrica della misura. Per approfondimenti rinviamo il lettore interessato ai testi di Federer [19] ed Evans [18].

Consideriamo un aperto limitato $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e denotiamo con $\mathcal{A}(\Omega)$ e $\mathcal{B}(\Omega)$ rispettivamente le classi di tutti i sottoinsiemi aperti e boreliani di Ω . Per ogni insieme $E \in \mathcal{B}(\Omega)$ indichiamo con $|E|$ la sua misura di Lebesgue n -dimensionale, con $\mathcal{H}^{n-1}(E)$ la sua misura di Hausdorff $(n-1)$ -dimensionale e con χ_E la sua funzione caratteristica. Definiamo inoltre la *frontiera essenziale* di E ponendo

$$\partial^* E := \left\{ x \in \mathbb{R}^n \quad : \quad \limsup_{\rho \rightarrow 0^+} \frac{|B_\rho(x) \setminus E|}{\rho^n} > 0 \quad \text{e} \quad \limsup_{\rho \rightarrow 0^+} \frac{|B_\rho(x) \cap E|}{\rho^n} > 0 \right\},$$

dove $B_\rho(x)$ è la palla centrata in x e di raggio ρ . Infine denotiamo con S^{n-1} la sfera unitaria di \mathbb{R}^n . Diremo allora che E è un insieme di *perimetro finito* in Ω , o insieme di Caccioppoli, se risulta

$$\mathcal{P}_\Omega(E) := \sup \left\{ \int_E \operatorname{div} f \, dx \quad : \quad f \in C_0^1(\Omega, \mathbb{R}^n), |f| \leq 1 \right\} < +\infty.$$

In particolare, la derivata distribuzionale di χ_E è una misura vettoriale su Ω a variazione totale $|D\chi_E|$ limitata, che può essere rappresentata come

$$D\chi_E = n_E \mathcal{H}^{n-1} \llcorner \partial^* E,$$

dove il simbolo \llcorner indica la restrizione di \mathcal{H}^{n-1} a $\partial^* E$ e dove $n_E \in S^{n-1}$ è la normale interna ad E , definita \mathcal{H}^{n-1} -quasi ovunque su $\partial^* E$ da

$$n_E(x) := \lim_{\rho \rightarrow 0^+} \frac{D\chi_E(B_\rho(x))}{|D\chi_E|(B_\rho(x))}.$$

D'altra parte l'insieme $\partial^* E$ risulta essere *rettificabile*, nel senso che esiste una successione $\{\Gamma_i\}$ di iper-superfici di classe C^1 tali che $\mathcal{H}^{n-1}(\partial^* E \setminus \cup_{i=1}^\infty \Gamma_i) = 0$, ed inoltre si ha $\mathcal{P}_\Omega(E) = |D\chi_E|(\Omega) = \mathcal{H}^{n-1}(\partial^* E \cap \Omega)$.

Sia dunque $\mathbb{E} := \{E_i\}$ una *partizione* di Ω , ovvero una famiglia numerabile di sottoinsiemi di Ω tale che

$$E_i \in \mathcal{B}(\Omega) \quad \forall i, \quad E_i \cap E_j = \emptyset \quad \forall i \neq j \quad \text{e} \quad \bigcup E_i = \Omega.$$

Diremo che \mathbb{E} è una *partizione di Caccioppoli* se risulta $\mathcal{P}_\Omega(E_i) < \infty$ per ogni i . Consideriamo quindi la seguente classe di funzionali integrali definiti su questo tipo di partizioni:

$$F(\mathbb{E}) = \sum_{i,j \in \mathcal{I}, i \neq j} \int_{\partial^* E_i \cap \partial^* E_j} \varphi(x, i, j, n_i) d\mathcal{H}^{n-1}, \quad (1.8)$$

dove n_i è la normale interna a E_i , $\varphi : \Omega \times \mathcal{I} \times \mathcal{I} \times S^{n-1} \rightarrow [0, +\infty)$ è una densità di energia definita sulle interfacce di separazione tra gli elementi di \mathbb{E} e \mathcal{I} è un insieme di indici. Solitamente, nelle applicazioni, l'insieme \mathcal{I} viene identificato con un sottoinsieme numerabile $\{u_i\} \subset \mathbb{R}^m$ di valori ammissibili per un dato sistema fisico, corrispondenti ad esempio a particolari gradazioni di colore, orientazioni o concentrazioni. Possiamo allora riscrivere la (1.8) in una forma più maneggevole, introducendo le funzioni a *variazione limitata*. Qui ci limitiamo a ricordare la definizione e alcune proprietà. Per una trattazione approfondita sull'argomento si veda ad esempio [21]. Una funzione $u \in L^1(\Omega, \mathbb{R}^m)$ si dice a variazione limitata (in simboli $u \in BV(\Omega, \mathbb{R}^m)$) se la sua derivata distribuzionale è una misura a variazione totale limitata. Consideriamo dunque il sottospazio delle funzioni $u \in BV(\Omega, \mathbb{R}^m)$ costanti a tratti a valori in \mathcal{I} , che denotiamo con $BV(\Omega, \mathcal{I})$, associate alle partizioni di Caccioppoli \mathbb{E} di Ω ponendo $u := \sum_{i \in \mathcal{I}} u_i \chi_{E_i}$. In questo caso l'*insieme singolare* di u è dato semplicemente da

$$Su := \bigcup_{i \in \mathcal{I}} \partial^* \{u = u_i\} = \bigcup_{i,j \in \mathcal{I}} \partial^* \{u = u_i\} \cap \partial^* \{u = u_j\}.$$

Inoltre per \mathcal{H}^{n-1} -quasi ogni $x \in Su$ esistono $u^+, u^- \in \mathcal{I}$ e $n_u \in S^{n-1}$ tali che

$$\lim_{\rho \rightarrow 0^+} \rho^{-n} \int_{B_\rho^{n_u}(x)} |u(y) - u^+| dy = 0 \quad \text{e} \quad \lim_{\rho \rightarrow 0^+} \rho^{-n} \int_{B_\rho^{-n_u}(x)} |u(y) - u^-| dy = 0,$$

dove $B_\rho^{n_u}(x) = \{y \in B_\rho(x) : (y-x) \cdot n_u > 0\}$ e dove il simbolo \cdot indica il prodotto scalare tra vettori. u^+ e u^- sono i cosiddetti valori approssimati di u sulle due facce di Su , mentre n_u è la direzione normale ad Su . La terna (u^+, u^-, n_u) è univocamente determinata a meno di un cambiamento di segno di n_u e di uno scambio tra u^+ e u^- e risulta

$$(u^+, u^-, n_u) = (u_i, u_j, n_i) \quad \mathcal{H}^{n-1}\text{-quasi ovunque su } \partial^* E_i \cap \partial^* E_j \cap \Omega.$$

Denotiamo con $[u](x) := u^+(x) - u^-(x)$ il salto di u in $x \in Su$ lungo la direzione $n_u(x)$. La variazione totale di u è una misura su Ω a valori nello spazio delle matrici $m \times n$, che possiamo rappresentare come

$$Du = [u] \otimes n_u \mathcal{H}^{n-1} \llcorner Su,$$

dove il simbolo \otimes indica il prodotto tensoriale tra vettori, definito per ogni $a \in \mathbb{R}^m$ e $b \in \mathbb{R}^n$ da $a \otimes b := (a_i b_j)_{j=1, \dots, n}^{i=1, \dots, m}$. In particolare risulta

$$|Du|(\Omega) = \int_{Su \cap \Omega} |[u]| d\mathcal{H}^{n-1}.$$

Allora la (1.8) si riduce a

$$F(u, A) = \int_{Su \cap A} \varphi(x, u^+, u^-, n_u) d\mathcal{H}^{n-1}, \quad u \in BV(\Omega, \mathcal{I}), \quad A \in \mathcal{A}(\Omega), \quad (1.9)$$

in cui abbiamo esplicitato la dipendenza di F dall'insieme d'integrazione, definendo così la sua *localizzazione* sugli aperti di Ω .

Ambrosio e Braides ([9],[10]) hanno incluso questa classe di funzionali nell'ambito dei metodi diretti del calcolo delle variazioni, dimostrando che, in analogia con i classici funzionali definiti sugli spazi di Sobolev, è possibile esprimere le proprietà di coercività e di semicontinuità inferiore in termini di opportune condizioni sulla densità φ . Più precisamente si può ottenere la coercività rispetto alla convergenza forte L^1 richiedendo che φ soddisfi, per qualche costante $C > 0$, una condizione di crescita del tipo

$$\int_{Su \cap \Omega} \varphi(x, u^+, u^-, n_u) d\mathcal{H}^{n-1} \geq C \left(|Du|(\Omega) + \mathcal{H}^{n-1}(Su \cap \Omega) \right)$$

e utilizzando risultati di compattezza relativi alle funzioni BV (si veda ad esempio [8]). D'altra parte la semicontinuità inferiore può essere caratterizzata tramite la seguente nozione di *BV-ellitticità*. Sia $(x_0, u_i, u_j, n_0) \in \Omega \times \mathcal{I} \times \mathcal{I} \times S^{n-1}$ con $u_i \neq u_j$ e sia $u_0 : \Omega \rightarrow \mathcal{I}$ la funzione definita da

$$u_0(x) := \begin{cases} u_i & \text{se } (x - x_0) \cdot n_0 > 0, \\ u_j & \text{se } (x - x_0) \cdot n_0 \leq 0. \end{cases} \quad (1.10)$$

Diremo che una funzione $\varphi : \Omega \times \mathcal{I} \times \mathcal{I} \times S^{n-1} \rightarrow [0, +\infty)$ è *BV-ellittica* se per ogni (x_0, u_i, u_j, n_0) risulta

$$\int_{Su \cap \Omega} \varphi(x, u^+, u^-, n_u) d\mathcal{H}^{n-1} \geq \int_{Su_0 \cap \Omega} \varphi(x, u_0^+, u_0^-, n_0) d\mathcal{H}^{n-1},$$

dove $u \in BV(\Omega, \mathcal{I})$ è una qualunque funzione che possiede la stessa traccia di u_0 sul bordo $\partial\Omega$. Vale dunque il seguente risultato.

Teorema 1.1 *Sia $F : BV(\Omega, \mathcal{I}) \times \mathcal{A}(\Omega) \rightarrow [0, +\infty)$ un funzionale della forma (1.9), definito da una funzione di densità φ continua in $x \in \Omega$. Allora $F(\cdot, \Omega)$ è L^1 -semicontinuo inferiormente se e soltanto se φ è BV-ellittica.*

Viceversa, assegnato un generico funzionale $F : BV(\Omega, \mathcal{I}) \times \mathcal{B}(\Omega) \rightarrow [0, +\infty)$, è possibile ottenere una rappresentazione integrale del tipo (1.9) verificando che F soddisfi una lista di proprietà astratte. Questo risultato, enunciato nel teorema seguente, sarà utile più avanti, quando affronteremo il problema della Γ -convergenza per il modello delle dislocazioni planari descritto nel capitolo successivo.

Teorema 1.2 *Sia $F : BV(\Omega; \mathcal{I}) \times \mathcal{B}(\Omega) \rightarrow [0, +\infty)$ un funzionale che soddisfi le seguenti proprietà:*

- i) $F(u, \cdot)$ è una misura su Ω per ogni $u \in BV(\Omega, \mathcal{I})$;*
- ii) F è locale su $\mathcal{A}(\Omega)$, i.e. $F(u, A) = F(v, A)$ per ogni $A \in \mathcal{A}(\Omega)$ e ogni $u, v \in BV(\Omega, \mathcal{I})$ tali che $u = v$ quasi ovunque su A ;*
- iii) $F(\cdot, A)$ è L^1 -semicontinuo inferiormente su $BV(\Omega; \mathcal{I})$ per ogni $A \in \mathcal{A}(\Omega)$;*
- iv) esistono due costanti positive c_1 e c_2 tali che, per ogni $u \in BV(\Omega; \mathcal{I})$ e $B \in \mathcal{B}(\Omega)$, risulta*

$$c_1 \left(\mathcal{H}^{n-1}(B \cap Su) + |Du|(B) \right) \leq F(u, B) \leq c_2 \left(\mathcal{H}^{n-1}(B \cap Su) + |Du|(B) \right).$$

Allora F ammette la seguente rappresentazione integrale:

$$F(u, B) = \int_{S_u \cap B} \varphi(x, u^+, u^-, n_u) d\mathcal{H}^{n-1}, \quad u \in BV(\Omega, \mathcal{I}), \quad B \in \mathcal{B}(\Omega),$$

con $\varphi : \Omega \times \mathcal{I} \times \mathcal{I} \times S^{n-1}$ definita da

$$\varphi(x, i, j, \nu) = \limsup_{\rho \rightarrow 0^+} \frac{1}{\rho^{n-1}} \min \left\{ F(u, \overline{Q_\rho^\nu(x)}) : u \in \mathcal{X} \right\} \quad (1.11)$$

e

$$\mathcal{X} = \left\{ u \in BV(\Omega, \mathcal{I}) : u = u_0 \text{ su } \Omega \setminus Q_\rho^\nu(x) \right\},$$

dove $Q_\rho^\nu(x)$ indica il quadrato di lato ρ , centrato in x e con un lato parallelo a ν , $\overline{Q_\rho^\nu(x)}$ è la sua chiusura e u_0 è la funzione definita in (1.10).

Capitolo 2

Il modello di transizione di fase delle dislocazioni

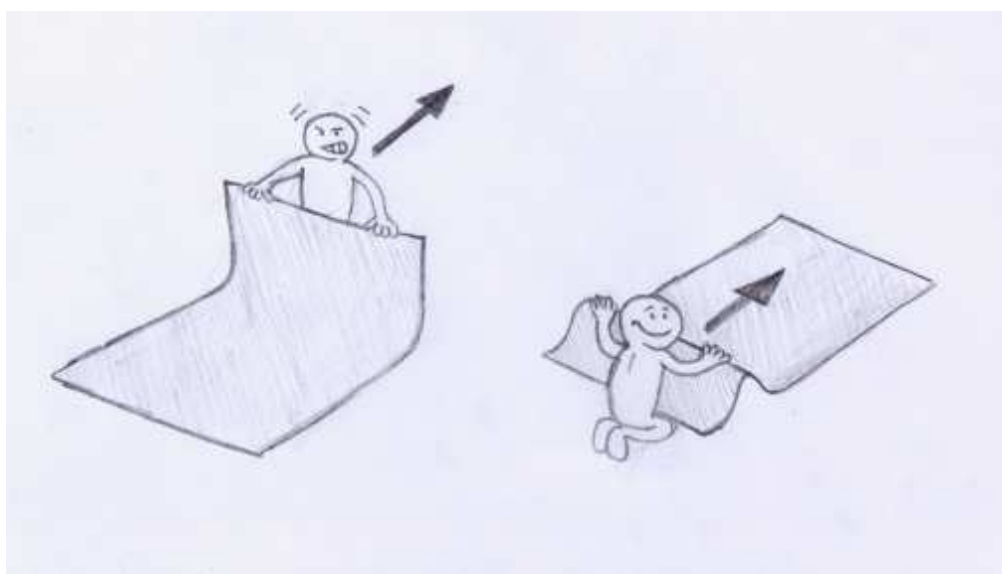
Questo capitolo è dedicato ad una derivazione formale del modello proposto da Koslowski, Cuitiño e Ortiz in [25] per la descrizione delle linee di dislocazione planari all'interno di un cristallo. Prima di entrare nei dettagli introdurremo brevemente alcuni concetti di teoria delle dislocazioni che risultano indispensabili per la comprensione del modello stesso (si veda ad esempio [23]). Successivamente descriveremo il problema variazionale associato al funzionale di energia delle dislocazioni ed infine illustreremo una sua applicazione ad alcune particolari strutture cristalline, i cosiddetti "Twist Boundaries".

2.1 Dislocazioni

La nascita della teoria delle dislocazioni è attribuita a Volterra intorno al 1905, anche se venne sviluppata sistematicamente solo più tardi, a partire dal 1934 dai tre ricercatori Taylor, Orowan e Polyani, per spiegare numerosi fatti sperimentali relativi allo studio delle proprietà plastiche dei cristalli, materiali che presentano cioè una struttura atomica estremamente ordinata. Per fare un esempio, nella modellizzazione di un campione di metallo come un cristallo periodico, formato da celle cubiche in cui gli atomi occupano esattamente i vertici del reticolo, i calcoli hanno mostrato una resistenza al taglio molto maggiore di quella reale (circa quattro ordini di grandezza). I metalli sono quindi molto più teneri di quanto previsto, il che indica la presenza di un qualche tipo di legame debole nelle loro strutture che porta ad una facile scindibilità.

Almeno teoricamente questo tipo di incongruenze fu superato assumendo che le strutture atomiche dei cristalli fossero sì molto ordinate, ma non perfette. Tale ipotesi fu confermata successivamente dalla microscopia a scansione elettronica, che

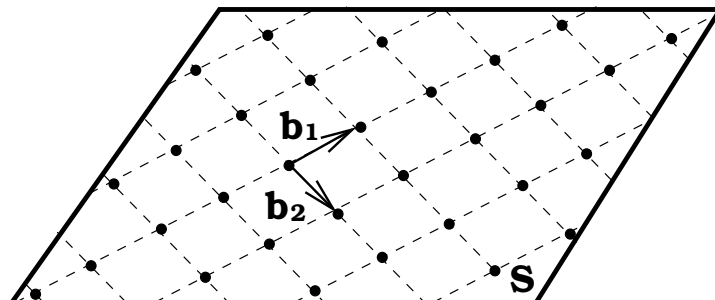
ha reso visibili imperfezioni cristalline di varia natura topologica. In particolare le *dislocazioni* sono difetti dei reticoli cristallini di carattere unidimensionale che, in presenza di uno stress applicato dall'esterno, facilitano notevolmente lo scorrimento relativo degli atomi appartenenti a piani reticolari adiacenti. Questo meccanismo può essere concretamente visualizzato tramite un classico esempio: spostare un tappeto trascinandolo sul pavimento è molto più faticoso che spostarlo creando una piccola piega ondulata (ovvero una imperfezione sostanzialmente unidimensionale) e spingendola fino all'altro capo.



Ne deduciamo quindi che maggiore è la mobilità di una dislocazione, minore è la resistenza del cristallo agli sforzi esterni. Tuttavia è possibile ottenere l'effetto esattamente opposto, il cosiddetto *indurimento* (hardening) del cristallo, aumentando il numero di dislocazioni al suo interno: dal momento che il reticolo cristallino risulta deformato attorno ad una dislocazione, due diverse dislocazioni possono respingersi se troppo vicine, laddove troppe dislocazioni vicine possono anche intrappolarsi a vicenda fino all'immobilità.

E' stato osservato che il moto delle dislocazioni risulta essere sostanzialmente planare e questo dipende dal fatto che la particolare geometria di una struttura cristallina vincola le deformazioni del reticolo proprio lungo dei piani preferenziali; essa inoltre determina su ognuno di questi piani le direzioni lungo le quali, sotto l'azione di forze esterne, è favorito lo scorrimento degli atomi (i sistemi di slittamento). Questo processo è noto come *slittamento cristallografico* e i piani suddetti vengono chiamati *piani di slittamento*.

Consideriamo ad esempio un cristallo ideale che possiede un piano di slittamento S in cui gli atomi sono disposti sui vertici di un reticolo rettangolare.



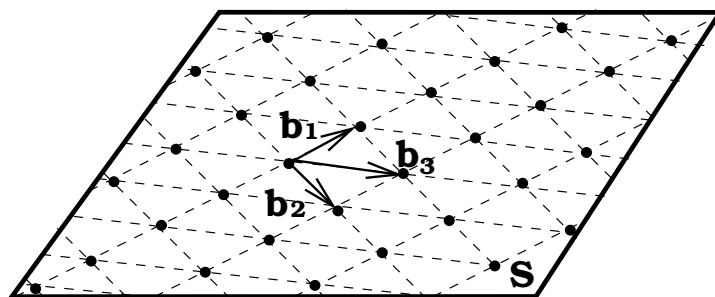
I due vettori \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 sono detti vettori di Burgers e identificano con il loro modulo le due distanze atomiche caratteristiche di questa geometria.

E' chiaro allora che lo slittamento cristallografico su S può essere descritto in termini di \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 da una funzione ζ del tipo

$$\zeta = \zeta_1 \mathbf{b}_1 + \zeta_2 \mathbf{b}_2 \quad \text{con} \quad \zeta_1, \zeta_2 : S \rightarrow \mathbb{R}.$$

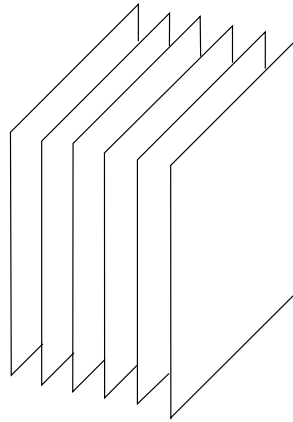
Notiamo che per valori interi fissati di ζ_1 e ζ_2 si ottengono slittamenti uniformi che riallineano il reticolo.

Analogamente nella figura seguente è illustrato il caso di un reticolo triangolare in cui lo slittamento cristallografico è determinato dall'attivazione di tre vettori di Burgers.

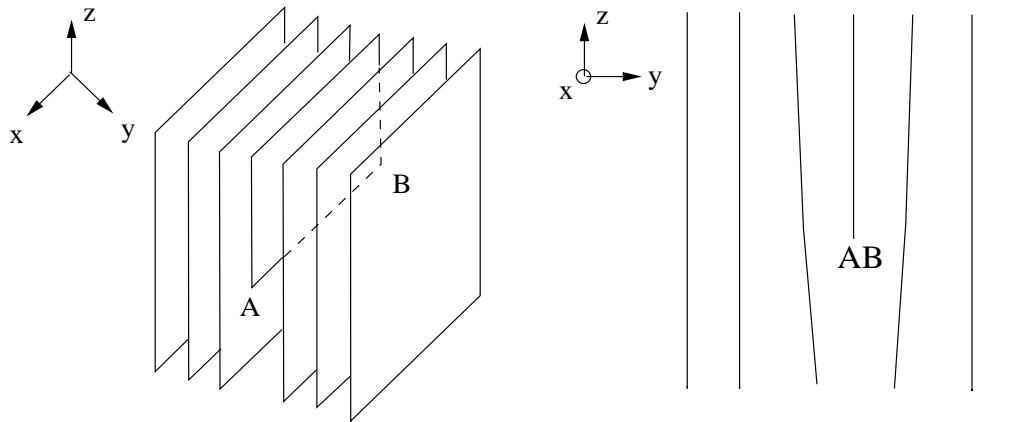


Nei cristalli reali possono essere presenti numerosissimi piani di slittamento e su ognuno di essi può essere attivo più di un vettore di Burgers. Quando le forze esterne che agiscono sul cristallo inducono slittamenti non uniformi sui piani di slittamento, il reticolo cristallino può risultare drasticamente deformato: si generano così difetti più o meno estesi tra cui le stesse dislocazioni.

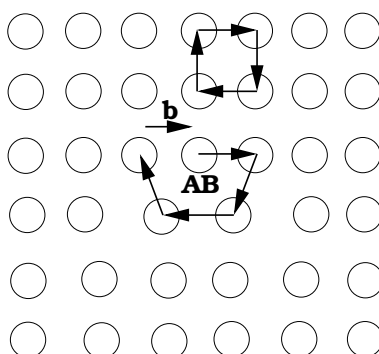
Il più semplice tipo di dislocazione da visualizzare è la *dislocazione a spigolo* (edge-dislocation). Consideriamo un reticolo cubico perfetto come modello di un cristallo ideale e rappresentiamolo mettendone in evidenza alcuni piani atomici verticali.



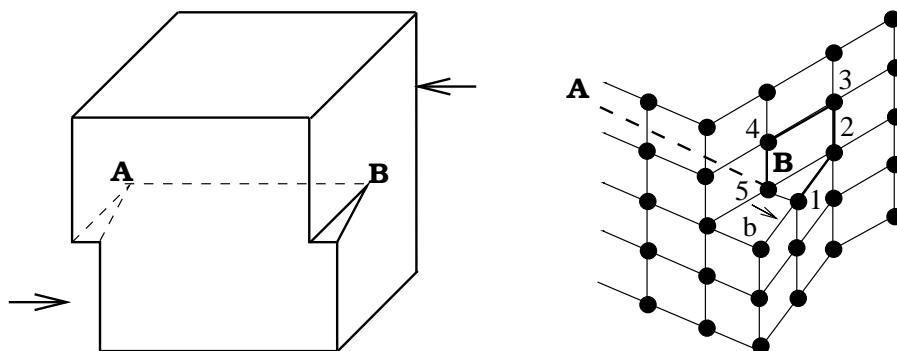
Se effettuiamo un taglio inserendo un semipiano addizionale, le interazioni elastiche con gli atomi appartenenti ai piani adiacenti modificano la posizione di equilibrio, deformando il reticolo intorno alla linea AB .



Questa zona deformata, detta *core* della dislocazione, risulta essere nei cristalli reali molto circoscritta e pertanto può essere considerata una imperfezione di tipo unidimensionale; la dislocazione a spigolo è quindi definita proprio dalla linea AB . Più in generale possiamo caratterizzare rigorosamente una qualunque dislocazione tramite un vettore di Burgers. A tal proposito consideriamo la rappresentazione atomistica di una sezione del cristallo (vedi figura seguente) in cui la linea di dislocazione AB è ortogonale alla sezione stessa. Notiamo quindi che, in una qualunque regione non deformata dalla dislocazione, il circuito ottenuto congiungendo i punti reticolari con una traslazione unitaria in ogni direzione è sempre chiuso, ma se ripetiamo la stessa procedura partendo da un atomo che giace sulla dislocazione, il circuito non si chiuderà. Possiamo allora definire il vettore di Burgers \mathbf{b} della dislocazione come quello necessario a chiudere il circuito; esso



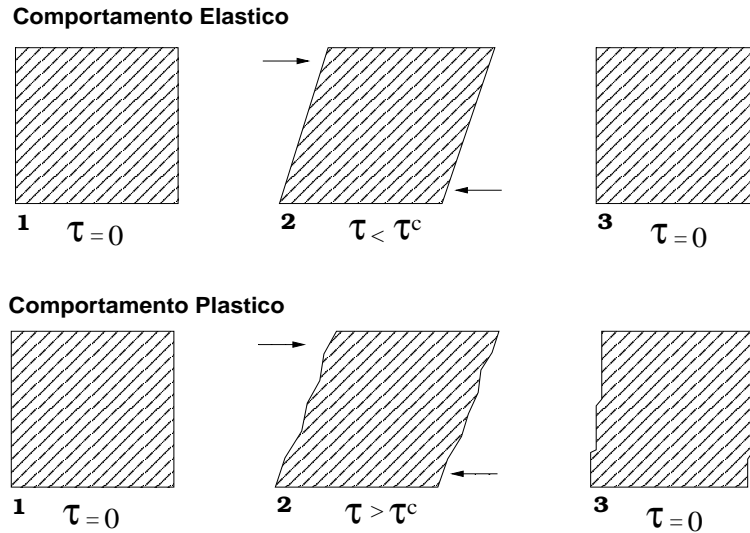
quantifica col suo modulo la deformazione del reticolo originata dalla dislocazione. Dalla figura precedente si evince che, nel caso di una dislocazione di tipo edge, il vettore di Burgers risulta essere ortogonale alla dislocazione stessa. L'altro caso estremo è quello della *dislocazione a vite* (screw-dislocation), rappresentata nella figura seguente dalla linea AB . Notiamo che la porzione del cristallo davanti a questa



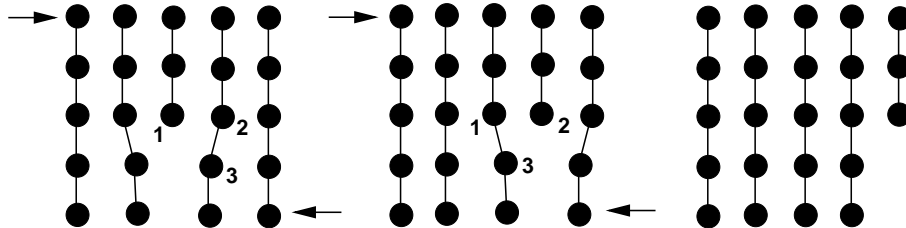
linea ha già subito uno slittamento, mentre quella posteriore è ancora a riposo. Nella rappresentazione atomistica di questa configurazione abbiamo evidenziato il circuito 1-2-3-4-5, formato da traslazioni unitarie in ogni direzione. Poichè tale circuito non si chiude, il vettore di Burgers \mathbf{b} della dislocazione a vite è individuato dalla direzione e dal modulo del legame atomico 1-5 ed è evidentemente parallelo alla dislocazione stessa. In generale, anche nel caso di una dislocazione non rettilinea, il vettore di Burgers resta costante per tutta la lunghezza del difetto e questo permette di classificare ogni altra dislocazione, che chiameremo mista, in funzione dell'angolo $\theta \in (0, \frac{\pi}{2})$ che essa individua col corrispondente vettore di Burgers.

Le dislocazioni a spigolo e a vite ci aiutano a comprendere meglio l'effetto che le dislocazioni hanno sulle proprietà meccaniche dei cristalli, il cosiddetto *effetto tappeto* accennato precedentemente. E' noto che in presenza di uno sforzo esterno applicato τ , il comportamento di una struttura cristallina può essere di natura elastica o plastica, al variare dell'intensità dello sforzo stesso: le deformazioni del reticolo sono cioè sostanzialmente reversibili per piccole sollecitazioni, ma se lo stress

supera una soglia critica τ^c , caratteristica del materiale, il cedimento dei legami atomici provoca nel reticolo una deformazione permanente.

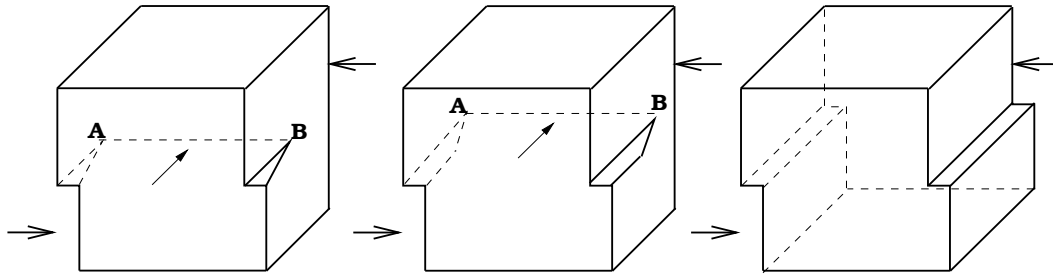


Supponiamo quindi di applicare uno sforzo di taglio ad un campione di cristallo che presenta al suo interno una dislocazione a spigolo. La figura seguente mostra come, rompendo semplicemente il legame atomico 2-3 e formando il legame 1-3, il semipiano che ha generato la dislocazione può slittare di una unità nella direzione di taglio.



L'iterazione di questo processo sposta quindi la dislocazione fino alla superficie esterna del cristallo. Anche nel caso di una dislocazione a vite, la rottura di un piccolo numero di legami atomici rende possibile il movimento della dislocazione verso l'esterno, in direzione trasversale rispetto al taglio, estendendo la deformazione del reticolo lungo tutta la superficie laterale (vedi figura seguente).

In altre parole, con una minima spesa energetica, come ad esempio piccoli sforzi protratti su un lungo periodo di tempo, si possono generare e muovere lentamente le dislocazioni fino a provocare lo sfaldamento completo del cristallo. Questo tipo di considerazioni lascia intuire perché la teoria delle dislocazioni sia diventata un argomento di così grande interesse nello studio della plasticità dei materiali.



Da un punto di vista matematico la descrizione delle linee di dislocazione è un problema di grande complessità, basti pensare alla geometria tridimensionale fortemente strutturata di un cristallo, al fatto che le dislocazioni presenti su un piano di slittamento possono interagire sia tra loro sia con quelle appartenenti ad altri piani; oppure si pensi agli effetti termici: l'agitazione degli atomi di un cristallo sottoposto ad alte temperature può riconfigurare il reticolo cristallino e anche cancellare completamente ogni dislocazione preesistente; e infine, forse l'aspetto più importante, si pensi alla natura evidentemente dinamica di questi difetti. E' quindi inevitabile introdurre nei modelli innumerevoli semplificazioni e idealizzazioni, eppure i problemi che ne derivano sono matematicamente non banali e spesso portano a soluzioni che descrivono strutture non così diverse da quelle reali.

2.2 Il modello bi-dimensionale

Come annunciato, questa sezione è dedicata alla derivazione formale del funzionale di energia proposto da Koslowski, Cuitiño e Ortiz in [25] per la descrizione delle linee di dislocazione all'interno di un cristallo elastico, deformato plasticamente dall'azione di un campo di forze esterne. Si tratta di un modello variazionale: si assume cioè che la temperatura del sistema sia prossima allo zero assoluto, in modo da trascurare gli effetti dinamici e ottenere le configurazioni di equilibrio tramite la minimizzazione dell'energia. Il cristallo considerato possiede un singolo piano di slittamento S , mentre lo slittamento cristallografico è descritto da un campo vettoriale ζ definito su S e tangente ad S : esso quantifica in ogni punto l'entità e la direzione della deformazione subita dal reticolo cristallino sottostante. Inoltre sul piano S può essere attivo un numero N arbitrario di vettori di Burgers $\{\mathbf{b}^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,N}$, cosicché se scriviamo

$$\zeta = \sum_{\alpha=1}^N \zeta_\alpha \mathbf{b}^\alpha, \quad \text{con } \zeta_\alpha : S \rightarrow \mathbb{R}, \quad \alpha = 1, \dots, N,$$

il campo di slittamento ζ può essere rappresentato anche dal campo vettoriale $\Phi_\zeta := (\zeta_1, \dots, \zeta_N)$. Notiamo però che solo due degli N vettori di Burgers possono essere linearmente indipendenti e questo implica che due campi vettoriali Φ_1 e Φ_2 distinti possono definire lo stesso slittamento.

Come sarà chiaro dall'espressione dell'energia, gli slittamenti uniformi, ovvero quelli che riallineano il reticolo senza generare deformazioni (corrispondenti ai campi costanti $\Phi_C \equiv C$, con $C \in \mathbb{Z}^N$), risultano essere configurazioni di minimo assoluto e definiscono le *fasi* ammissibili del sistema. In generale, però, le forze esterne applicate al cristallo inducono su S slittamenti non uniformi e pertanto ci aspettiamo configurazioni a minima energia descritte da campi non costanti a valori in \mathbb{Z}^N , detti appunto *campi di fase*. Questo tipo di rappresentazione risulta allora particolarmente efficace, perché permette di identificare le dislocazioni generate da uno slittamento ζ come l'insieme dei punti di salto di Φ_ζ . Inoltre, guardando separatamente gli insiemi di salto di ogni componente $\Phi_\zeta^\alpha = \zeta_\alpha$, è possibile selezionare, tra tutte le dislocazioni, solo quelle di tipo α determinate dal corrispondente vettore di Burgers \mathbf{b}^α . Queste configurazioni, tuttavia, non producono valori finiti dell'energia, proprio a causa delle loro singolarità: i minimi sono infatti raggiunti da campi, vicini agli interi \mathbb{Z}^N , che effettuano rapide transizioni tra le fasi all'interno di regioni di ampiezza proporzionale alla distanza tra gli atomi del reticolo. Utilizzando la terminologia descritta nella sezione precedente, queste regioni sono esattamente i *core* delle dislocazioni.

Vale la pena osservare che questo modello, pur descrivendo un problema statico e dimensionalmente ridotto, è stato utilizzato come problema di riferimento nello

studio dei sistemi dissipativi necessari a caratterizzare l'evoluzione temporale delle dislocazioni, anche in presenza di sistemi di dislocazioni secondarie (non appartenenti al piano di slittamento S) e in funzione di carichi esterni crescenti o ciclici; esso inoltre ha permesso l'implementazione di alcune simulazioni numeriche che hanno riprodotto, qualitativamente in accordo con i risultati sperimentali, alcuni fenomeni tipici dei cristalli reali, tra cui l'indurimento e l'isteresi.

L'energia totale del cristallo elastico, deformato plasticamente sul piano di slittamento S , si scrive come somma di tre termini:

$$E = E^{INT} + E^{CORE} + E^{EXT}, \quad (2.1)$$

dove E^{INT} è l'energia di interazione elastica a lungo raggio indotta dalle dislocazioni, E^{CORE} è l'energia di interazione a corto raggio in prossimità dei core delle dislocazioni, e infine E^{EXT} è l'energia di interazione con un campo di sforzo esterno applicato. Vediamo allora come sia possibile esprimere ogni termine dell'energia E in funzione di un campo di slittamento ζ assegnato su S .

2.2.1 L'energia di interazione elastica a lungo raggio

Assumiamo che le deformazioni del cristallo siano descritte da un campo di spostamento $U : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ e decomponiamo il gradiente di deformazione ∇U nella forma additiva di Kröner, data dalla relazione

$$\nabla U = \beta^e + \beta^p, \quad (2.2)$$

dove abbiamo indicato con β^e e β^p rispettivamente i tensori di distorsione elastica e plastica. Dal momento che lo slittamento cristallografico è interamente supportato su S , scriviamo la distorsione plastica come

$$\beta^p = ([U] \otimes \hat{n}) \mathcal{H}^2 \llcorner S, \quad (2.3)$$

dove $[U]$ è il salto del campo di spostamento U in corrispondenza del piano S e \hat{n} è la normale ad S . Scegliamo un sistema di riferimento in modo che S sia proprio il piano coordinato di equazione $\{x_3 = 0\}$ e imponiamo alle deformazioni plastiche di aver luogo solo su S ; in altre parole, assumiamo che $[U]$ sia un campo di slittamento definito su S :

$$[U](x_1, x_2) = ([U_1](x_1, x_2), [U_2](x_1, x_2), 0).$$

Allora, tenendo conto che $\hat{n} = (0, 0, 1)$, la (2.3) si riduce a

$$\beta^p(x_1, x_2, x_3) = \delta_0(x_3) \begin{pmatrix} 0 & 0 & [U_1](x_1, x_2) \\ 0 & 0 & [U_2](x_1, x_2) \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

dove δ_0 indica la delta di Dirac concentrata nell'origine. Infine, vista la (2.2), riscriviamo il tensore di distorsione elastica come

$$\beta^e = \nabla U - \beta^p.$$

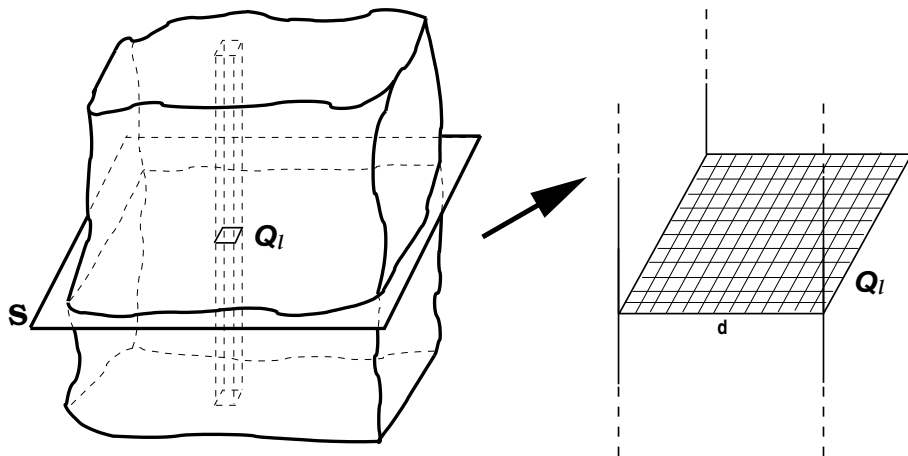
Possiamo allora ottenere l'energia di interazione elastica a lungo raggio E^{INT} , determinata da un qualunque campo di slittamento $\zeta : S \rightarrow \mathbb{R}^2$, risolvendo il seguente problema di minimo:

$$E^{INT}(\zeta) = \min_{[U]=\zeta} \mathcal{E}(U), \quad (2.5)$$

dove $\mathcal{E}(U)$ è, ad esempio, l'energia elastica lineare isotropa definita da

$$\mathcal{E}(U) = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\mu |e(\beta^e)|^2 + \frac{\lambda}{2} |tr e(\beta^e)|^2 \right) dx_1 dx_2 dx_3, \quad (2.6)$$

in cui $e(\beta^e) = \frac{1}{2}(\beta^e + \beta^{eT})$ è il tensore della deformazione elastica simmetrizzata, $tr(\cdot)$ indica la traccia di matrice, il simbolo $(\cdot)^T$ la trasposizione e μ, λ sono i coefficienti di Lamé del cristallo considerato. Per poter calcolare esplicitamente il valore di $E^{INT}(\zeta)$ in (2.5) occorre fare una ipotesi aggiuntiva. Se in prossimità del piano di slittamento S consideriamo regioni molto piccole rispetto alle dimensioni dell'intero cristallo, è ragionevole pensare che le sue proprietà meccaniche non cambino in modo apprezzabile da una regione all'altra. Pertanto, se fissiamo una scala di osservazione mesoscopica, intermedia tra la microscopica e la macroscopica, ovvero una lunghezza l tale che $d \ll l \ll 1$, dove d è proporzionale alla distanza tra gli atomi, e consideriamo un quadrato $Q_l \subset S$ di lato l , possiamo assumere che gli slittamenti cristallografici siano descritti da campi Q_l -periodici e che il cristallo si estenda indefinitamente fuori dal piano di slittamento.



L'energia E^{INT} di un periodo è data quindi da

$$E^{INT}(\zeta) = \min_{[U]=\zeta} \mathcal{E}^l(U), \quad (2.7)$$

con

$$\mathcal{E}^l(U) = \int_{Q_l \times \mathbb{R}} \left(\mu |e(\beta^e)|^2 + \frac{\lambda}{2} |\text{tr } e(\beta^e)|^2 \right) dx_1 dx_2 dx_3.$$

Possiamo inoltre traslare il sistema di coordinate su S in modo che Q_l sia centrato nell'origine, i.e. $Q_l = (-\frac{l}{2}, \frac{l}{2})^2$, e considerare i campi U e ζ come funzioni definite sul toro $T_l^2 = \mathbb{R}^2 / l\mathbb{Z}^2$. Questo permette di risolvere il problema (2.7) attraverso le variabili di Fourier. Dal momento che $\mathcal{E}^l(U)$ è quadratica in U , utilizzando l'identità di Parseval si ha

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^l(U) = \overline{\mathcal{E}^l}(\widehat{U}) := & \frac{l^2}{(2\pi)^3} \frac{\mu}{2} \sum_{k_1, k_2 \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} \left\{ |k|^2 (|\widehat{U}_1|^2 + |\widehat{U}_2|^2 + |\widehat{U}_3|^2) + \right. \\ & + \frac{1}{1-2\nu} (k_1 |\widehat{U}_1|^2 + k_2 |\widehat{U}_2|^2 + k_3 |\widehat{U}_1|^3) + \\ & \left. + |\widehat{\beta}_{13}^p|^2 + |\widehat{\beta}_{23}^p|^2 - 2i (k_3 \widehat{U}_1 + k_1 \widehat{U}_3) \widehat{\beta}_{13}^{p*} - 2i (k_3 \widehat{U}_2 + k_2 \widehat{U}_3) \widehat{\beta}_{23}^{p*} \right\} dk_3, \end{aligned} \quad (2.8)$$

dove $\widehat{U}(k) = (\widehat{U}_1(k), \widehat{U}_2(k), \widehat{U}_3(k))$ si ottiene dal campo di spostamento U calcolando i suoi coefficienti di Fourier nelle variabili x_1, x_2 e la sua trasformata di Fourier nella variabile x_3 :

$$\widehat{U}(k) = \widehat{U}(k_1, k_2, k_3) = \int_{T_l^2} \int_{\mathbb{R}} U(x_1, x_2, x_3) e^{-i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3)} dx_1 dx_2 dx_3.$$

Il vettore $k = (k_1, k_2, k_3) \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z} \times \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z} \times \mathbb{R}$ è il numero d'onda, il parametro $\nu = \frac{\lambda}{2(\mu+\lambda)} \in (-1, 1/2)$ è il rapporto di Poisson del cristallo e infine il simbolo $*$ indica la coniugazione complessa. Per semplicità di notazione poniamo $\widehat{\beta}_1 := \widehat{\beta}_{13}^p$ e $\widehat{\beta}_2 := \widehat{\beta}_{23}^p$. Allora, calcolando in (2.8) la variazione prima rispetto a $\widehat{U}(k_1, k_2, \cdot)$ per ogni $(k_1, k_2) \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2$ fissato, otteniamo che il minimo di $\mathcal{E}^l(U)$ è raggiunto dalla soluzione del seguente sistema di equilibrio di Eulero-Lagrange:

$$\left(|k|^2 \text{Id} + \frac{1}{1-2\nu} \mathcal{K} \right) \widehat{U} = \mathcal{B}, \quad (2.9)$$

dove Id è la matrice identità, mentre \mathcal{K} e \mathcal{B} sono dati rispettivamente da

$$\mathcal{K}(k) = \begin{pmatrix} k_1^2 & k_1 k_2 & k_1 k_3 \\ k_1 k_2 & k_2^2 & k_2 k_3 \\ k_1 k_3 & k_2 k_3 & k_3^2 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B}(k) = \begin{pmatrix} i k_3 \widehat{\beta}_1^* \\ i k_3 \widehat{\beta}_2^* \\ i k_1 \widehat{\beta}_1^* + i k_2 \widehat{\beta}_2^* \end{pmatrix}.$$

Invertendo la (2.9) otteniamo quindi il campo di spostamento

$$\widehat{U}(k) = \widehat{\mathcal{G}}(k)\mathcal{B}(k), \quad (2.10)$$

dove

$$\widehat{\mathcal{G}}(k) = \frac{1}{|k|^2} \text{Id} - \frac{1}{2(1-\nu)|k|^4} \mathcal{K}$$

è la trasformata di Fourier del tensore di elasticità lineare di Green. Inserendo la (2.10) in (2.8) risulta

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{E}^l}(\widehat{U}) &= \overline{\mathcal{E}^l}(\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2) = \frac{l^2}{(2\pi)^3} \frac{\mu}{2} \sum_{k_1, k_2 \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} \left\{ |\widehat{\beta}_1|^2 \left(\frac{2}{1-\nu} \frac{k_1^2 k_3^2}{|k|^4} + \frac{k_2^2}{|k|^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + |\widehat{\beta}_2|^2 \left(\frac{2}{1-\nu} \frac{k_2^2 k_3^2}{|k|^4} + \frac{k_1^2}{|k|^2} \right) + 2 \widehat{\beta}_1 \widehat{\beta}_2^* \left(\frac{2}{1-\nu} \frac{k_1 k_2 k_3^2}{|k|^4} - \frac{k_1 k_2}{|k|^2} \right) \right\} dk_3. \end{aligned}$$

A questo punto riguardiamo la (2.4) e il vincolo $[U] = \zeta$ nella (2.7). Se scriviamo ζ nelle coordinate della base canonica di \mathbb{R}^2 , i.e. $\zeta = (\zeta_1, \zeta_2)$, si ha

$$\beta_i(x_1, x_2, x_3) = [U_i](x_1, x_2) \delta_0(x_3) = \zeta_i(x_1, x_2) \delta_0(x_3), \quad i = 1, 2,$$

da cui

$$\widehat{\beta}_i(k_1, k_2, k_3) = \widehat{\zeta}_i(k_1, k_2) \widehat{\delta}_0(k_3), \quad i = 1, 2,$$

e poiché risulta

$$\widehat{\delta}_0(k_3) = \int_{\mathbb{R}} e^{-ik_3 x_3} d\delta_0(x_3) = 1 \quad \forall k_3 \in \mathbb{R},$$

concludiamo che $\widehat{\beta}_1$ e $\widehat{\beta}_2$ dipendono solo da (k_1, k_2) e che quindi

$$\begin{aligned} E^{INT}(\zeta) &= \overline{\mathcal{E}^l}(\widehat{\zeta}_1, \widehat{\zeta}_2) = \frac{l^2}{(2\pi)^2} \frac{\mu}{2} \sum_{k_1, k_2 \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}} \left\{ |\widehat{\zeta}_1|^2 \left(\frac{2}{1-\nu} \frac{k_1^2}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{k_3^2}{|k|^4} dk_3 + \frac{k_2^2}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk_3}{|k|^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + |\widehat{\zeta}_2|^2 \left(\frac{2}{1-\nu} \frac{k_2^2}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{k_3^2}{|k|^4} dk_3 + \frac{k_1^2}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk_3}{|k|^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \widehat{\zeta}_1 \widehat{\zeta}_2^* \left(\frac{2}{1-\nu} \frac{k_1 k_2}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{k_3^2}{|k|^4} dk_3 - \frac{k_1 k_2}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk_3}{|k|^2} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Gli integrali nella variabile k_3 dell'espressione precedente si calcolano esplicitamente:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{k_3^2}{|k|^4} dk_3 = \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, \quad \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk_3}{|k|^2} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}.$$

Ridefinendo $k := (k_1, k_2)$ otteniamo quindi che l'energia di interazione elastica a lungo raggio E^{INT} , in funzione del campo di slittamento ζ , si scrive come

$$E^{INT}(\widehat{\zeta}) = \frac{l^2}{(2\pi)^2} \frac{\mu}{4} \sum_{k \in \frac{2\pi}{l} \mathbb{Z}^2} \widehat{\zeta}(k)^T \widehat{\mathcal{A}}(k) \widehat{\zeta}^*(k), \quad (2.11)$$

dove la matrice di interazione $\widehat{\mathcal{A}}$ è data da

$$\widehat{\mathcal{A}}(k) = \begin{pmatrix} \frac{1}{1-\nu} \frac{k_1^2}{|k|} + \frac{k_2^2}{|k|} & \frac{\nu}{1-\nu} \frac{k_1 k_2}{|k|} \\ \frac{\nu}{1-\nu} \frac{k_1 k_2}{|k|} & \frac{1}{1-\nu} \frac{k_2^2}{|k|} + \frac{k_1^2}{|k|} \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Si verifica facilmente che $\widehat{\mathcal{A}}$ possiede i due autovalori

$$\lambda_1 = |k|, \quad \lambda_2 = \frac{1}{1-\nu} |k|, \quad \text{con } \nu \in (-1, 1/2),$$

e pertanto l'espressione (2.11) definisce una forma quadratica positiva. Più precisamente si ha

$$C_1 [\zeta]_{H^{\frac{1}{2}}(T_l^2)}^2 \leq E^{INT}(\widehat{\zeta}) \leq C_2 [\zeta]_{H^{\frac{1}{2}}(T_l^2)}^2, \quad (2.13)$$

dove

$$C_1 = \frac{l^2}{(2\pi)^2} \frac{\mu}{4}, \quad C_2 = \frac{1}{1-\nu} \frac{l^2}{(2\pi)^2} \frac{\mu}{4}$$

e

$$[\zeta]_{H^{\frac{1}{2}}(T_l^2)} = \left(\sum_{k \in \frac{2\pi}{l} \mathbb{Z}^2} |k| |\widehat{\zeta}(k)|^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.14)$$

Quindi l'energia E^{INT} del campo di slittamento ζ risulta essere equivalente al quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}(T_l^2)$ del campo stesso.

Per concludere occorre riscrivere la (2.11) nelle coordinate spaziali, ovvero in funzione di ζ . Innanzitutto scriviamo per esteso

$$\begin{aligned} E^{INT}(\widehat{\zeta}) = & \frac{l^2}{(2\pi)^2} \frac{\mu}{4} \sum_{k \in \frac{2\pi}{l} \mathbb{Z}^2} \left\{ \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \widehat{\zeta}_1(k) \widehat{\zeta}_1^*(k) + \right. \\ & \left. + 2\widehat{\mathcal{A}}_{12}(k) \widehat{\zeta}_1(k) \widehat{\zeta}_2^*(k) + \widehat{\mathcal{A}}_{22}(k) \widehat{\zeta}_2(k) \widehat{\zeta}_2^*(k) \right\}. \end{aligned}$$

Ricordiamo che il simbolo \cdot indica il prodotto scalare tra vettori. Si ha

$$\sum_{k \in \frac{2\pi}{l} \mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \widehat{\zeta}_1(k) \widehat{\zeta}_1^*(k) = \sum_{k \in \frac{2\pi}{l} \mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \left(\int_{T_l^2} \zeta_1(x) e^{-ik \cdot x} dx \int_{T_l^2} \zeta_1(y) e^{ik \cdot y} dy \right) =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \left(\int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \zeta_1(x) \zeta_1(y) e^{-ik \cdot (x-y)} dx dy \right) = \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \left(\int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \left\{ |\zeta_1(x) - \zeta_1(y)|^2 - \zeta_1^2(x) - \zeta_1^2(y) \right\} e^{-ik \cdot (x-y)} dx dy \right) = \\
&= -\frac{1}{2} \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \left(\sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(-k) e^{ik \cdot (x-y)} \right) |\zeta_1(x) - \zeta_1(y)|^2 dx dy + \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{T_l^2} \sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \left(\int_{T_l^2} e^{ik \cdot y} dy \right) \zeta_1^2(x) e^{-ik \cdot x} dx + \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{T_l^2} \sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \left(\int_{T_l^2} e^{-ik \cdot x} dx \right) \zeta_1^2(y) e^{ik \cdot y} dy. \tag{2.15}
\end{aligned}$$

Dalla (2.12) risulta chiaramente $\widehat{\mathcal{A}}_{11}(-k) = \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k)$ e quindi

$$\sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(-k) e^{ik \cdot (x-y)} = \frac{(2\pi)^2}{l^2} \mathcal{A}_{11}(x-y).$$

Inoltre, indicando con $\delta_{0,k}$ la delta di Kroneker, si ha

$$\int_{T_l^2} e^{ik \cdot y} dy \stackrel{[y=-x]}{=} \int_{T_l^2} e^{-ik \cdot x} dx = \widehat{1}(k) = \delta_{0,k},$$

da cui

$$\frac{1}{2} \int_{T_l^2} \sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \left(\int_{T_l^2} e^{ik \cdot y} dy \right) \zeta_1^2(x) e^{-ik \cdot x} dx = \frac{1}{2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(0) \int_{T_l^2} \zeta_1^2(x) dx = 0,$$

dove l'ultima uguaglianza segue dal fatto che $\widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) = \mathcal{O}(|k|)$ per $k \rightarrow 0$. Allora la (2.15) si riduce a

$$\sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{11}(k) \widehat{\zeta}_1(k) \widehat{\zeta}_1^*(k) = -\frac{(2\pi)^2}{2l^2} \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \mathcal{A}_{11}(x-y) |\zeta_1(x) - \zeta_1(y)|^2 dx dy.$$

Analogamente si ottiene

$$\sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{22}(k) \widehat{\zeta}_2(k) \widehat{\zeta}_2^*(k) = -\frac{(2\pi)^2}{2l^2} \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \mathcal{A}_{22}(x-y) |\zeta_2(x) - \zeta_2(y)|^2 dx dy,$$

e

$$\sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{A}}_{12}(k) \widehat{\zeta}_1(k) \widehat{\zeta}_2^*(k) = -\frac{(2\pi)^2}{2l^2} \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \mathcal{A}_{12}(x-y) (\zeta_1(x) - \zeta_1(y)) (\zeta_2(x) - \zeta_2(y)) dx dy,$$

da cui segue che

$$E^{INT}(\zeta) = \frac{\mu}{2} \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} (\zeta(x) - \zeta(y))^T \mathcal{J}(x-y) (\zeta(x) - \zeta(y)) dx dy, \quad (2.16)$$

dove la matrice $\mathcal{J} : T_l^2 \rightarrow \mathcal{M}^{2 \times 2}(\mathbb{R})$ è definita, in termini di coefficienti di Fourier, da

$$\widehat{\mathcal{J}}(k) = -\frac{1}{4} \widehat{\mathcal{A}}(k). \quad (2.17)$$

Utilizzando la formula di somma di Poisson e la (2.17) si ha

$$\mathcal{J}(x) = \frac{l^2}{(2\pi)^2} \sum_{k \in \frac{2\pi}{l} \mathbb{Z}^2} \widehat{\mathcal{J}}(k) e^{ik \cdot x} = -\frac{1}{4} \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} A(x + kl), \quad (2.18)$$

dove adesso $A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathcal{M}^{2 \times 2}(\mathbb{R})$ è l'antitrasformata di Fourier della matrice \widehat{A} che si ottiene dalla $\widehat{\mathcal{A}}$ sostituendo la variabile discreta $k \in \frac{2\pi}{l} \mathbb{Z}^2$ con una variabile continua $\xi \in \mathbb{R}^2$. Definiamo la seguente funzione:

$$H(x) := \frac{1}{2\pi|x|}.$$

Se mostriamo che $\widehat{H}(\xi) = \frac{1}{|\xi|}$, allora risulta

$$\widehat{H_{x_i x_j}} = -i \xi_i \widehat{H_{x_j}} = -\xi_i \xi_j \widehat{H} = -\frac{\xi_i \xi_j}{|\xi|}, \quad i, j = 1, 2,$$

da cui, vista la (2.12), otteniamo

$$A(x) = - \begin{pmatrix} \frac{1}{1-\nu} H_{x_1 x_1}(x) + H_{x_2 x_2}(x) & \frac{\nu}{1-\nu} H_{x_1 x_2}(x) \\ \frac{\nu}{1-\nu} H_{x_1 x_2}(x) & \frac{1}{1-\nu} H_{x_2 x_2}(x) + H_{x_1 x_1}(x) \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Dal momento che la funzione H non decade bene all'infinito, per calcolare la sua trasformata di Fourier è necessario utilizzare una regolarizzazione. Poniamo quindi

$$H_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi|x|} e^{-\varepsilon|x|}.$$

Poiché H_ε è radiale, anche \widehat{H}_ε sarà radiale e pertanto è sufficiente effettuare il calcolo lungo una qualunque direzione, ad esempio $\mathbf{e}_2 = (0, 1)$. Utilizzando coordinate polari (ρ, θ) si ha per ogni $t \in \mathbb{R}^+$

$$\widehat{H}_\varepsilon(t\mathbf{e}_2) = \int_{\mathbb{R}^2} H_\varepsilon(x) e^{-it\mathbf{e}_2 \cdot x} dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{1}{2\pi\rho} e^{-\varepsilon\rho} e^{-it\rho\sin\theta} \rho d\rho d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} e^{(-\varepsilon-it\sin\theta)\rho} d\rho d\theta = \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\varepsilon + it\sin\theta} = \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\varepsilon + it\sin\theta} \stackrel{[\sin\theta=y]}{=} \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\varepsilon + ity} \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}}.
\end{aligned}$$

Fissiamo $\delta > 0$ sufficientemente piccolo e poniamo

$$A_\delta = \{\delta < |y| < 1\}, \quad B_\delta = \{|y| \leq \delta\},$$

$$I_{A_\delta}^\varepsilon(t) := \int_{A_\delta} \frac{1}{\varepsilon + ity} \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}}, \quad I_{B_\delta}^\varepsilon(t) := \int_{B_\delta} \frac{1}{\varepsilon + ity} \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}},$$

cosicch 

$$\widehat{H}_\varepsilon(t\mathbf{e}_2) = \frac{1}{\pi} \left(I_{A_\delta}^\varepsilon(t) + I_{B_\delta}^\varepsilon(t) \right). \quad (2.20)$$

Si ha

$$|I_{A_\delta}^\varepsilon| \leq \int_{A_\delta} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + t^2\delta^2}} \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \leq \frac{1}{t\delta} \int_{A_\delta} \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \leq C(t, \delta)$$

e per convergenza dominata

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} I_{A_\delta}^\varepsilon(t) = \frac{1}{it} \int_{A_\delta} \frac{dy}{y\sqrt{1-y^2}} = 0, \quad (2.21)$$

poich  la funzione integranda   dispari su un intervallo simmetrico. D'altra parte, sempre per convergenza dominata, risulta

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} I_{B_\delta}^\varepsilon(t) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\delta}^{\delta} \frac{1}{\varepsilon + ity} \left(1 + \mathcal{O}(y^2)\right) dy = \\
&= \frac{1}{it} \int_{-\delta}^{\delta} \frac{dy}{y} + \frac{1}{it} \int_{-\delta}^{\delta} \mathcal{O}(y) dy = \frac{1}{it} i\pi \operatorname{Res}_0(1/z) + o(\delta) = \frac{\pi}{t} + o(\delta),
\end{aligned} \quad (2.22)$$

dove $\operatorname{Res}_0(1/z)$ indica il residuo in 0 dell'estensione complessa di $1/y$. Dal momento che δ   arbitrario, dalla (2.20), (2.21) e (2.22) concludiamo che

$$\widehat{H}(\xi) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \widehat{H}_\varepsilon(\xi) = \frac{1}{|\xi|}.$$

Inoltre risulta

$$H_{x_i x_i}(x) = \frac{1}{2\pi} \left(-\frac{1}{|x|^3} + 3\frac{x_i^2}{|x|^5} \right), \quad i = 1, 2 \quad \text{e} \quad H_{x_1 x_2}(x) = \frac{3}{2\pi} \frac{x_1 x_2}{|x|^5},$$

cosicch  da (2.18) e (2.19) ricaviamo esplicitamente la matrice di interazione \mathcal{J} nell'energia (2.16):

$$\mathcal{J}(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} \mathcal{J}_0(x + kl), \quad (2.23)$$

dove \mathcal{J}_0 è la matrice omogenea di grado -3 definita da

$$\mathcal{J}_0(x) = \frac{1}{8\pi(1-\nu)|x|^3} \begin{pmatrix} \nu + 1 - 3\nu \frac{x_2^2}{|x|^2} & 3\nu \frac{x_1 x_2}{|x|^2} \\ 3\nu \frac{x_1 x_2}{|x|^2} & \nu + 1 - 3\nu \frac{x_1^2}{|x|^2} \end{pmatrix}.$$

Valgono inoltre le seguenti proprietà:

- i) \mathcal{J} è Q_l -periodica, i.e. definita su T_l^2 ;
- ii) $\mathcal{J}(x) = \mathcal{O}(|x|^{-3})$ per $|x| \rightarrow 0$;
- iii) \mathcal{J} definisce una forma quadratica positiva equivalente al quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}$;
- iv) per ogni $\sigma > 0$ e uniformemente su $\{x \in \mathbb{R}^2 : |x| \leq \sigma\}$ si ha

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta^3 \mathcal{J}(\delta x) = \mathcal{J}_0(x).$$

Le proprietà (i) e (ii) sono evidenti, la (iii) è esattamente la (2.13), mentre la (iv) segue dalla formula di somma di Poisson. Infatti, se $|x|$ è sufficientemente piccolo, si ha

$$|\mathcal{J}(x) - \mathcal{J}_0(x)| \leq \sum_{k \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}} \frac{C}{|k|^3} \leq C,$$

da cui, utilizzando l'omogeneità di \mathcal{J}_0 , risulta

$$-C\delta^3 \leq \delta^3 \mathcal{J}(\delta x) - \mathcal{J}_0(x) \leq C\delta^3.$$

Notiamo infine che anche la seminorma $H^{\frac{1}{2}}$ può essere espressa in coordinate spaziali tramite un nucleo di interazione. Possiamo infatti ripetere tutti gli argomenti descritti finora ed ottenere che

$$\begin{aligned} [\zeta]_{H^{\frac{1}{2}}(T_l^2)}^2 &= \min \left\{ \int_{T_l^2 \times \mathbb{R}} |\nabla U|^2 dx_1 dx_2 dx_3 \quad : \quad U|_{\{x_3=0\}} = \zeta \right\} = \\ &= \int_{T_l^2 \times \mathbb{R}} |\nabla U_\zeta|^2 dx_1 dx_2 dx_3 = \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \mathbb{K}(x-y) |\zeta(x) - \zeta(y)|^2 dx dy, \end{aligned} \quad (2.24)$$

dove $U_\zeta \in H^1(T_l^2 \times \mathbb{R})$ è il campo di deformazione che realizza il minimo, la cosiddetta *estensione armonica* di ζ , mentre il nucleo $\mathbb{K} : T_l^2 \rightarrow (0, +\infty)$ è dato da

$$\mathbb{K}(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} \mathbb{K}_0(x + kl), \quad \text{con} \quad \mathbb{K}_0(x) = \frac{1}{16\pi|x|^3}, \quad (2.25)$$

e soddisfa chiaramente le stesse proprietà di \mathcal{J} .

2.2.2 L'energia dei core delle dislocazioni

Nella teoria di Peierls-Nabarro il termine E^{CORE} dell'energia tiene conto delle interazioni a corto raggio tra gli atomi del cristallo, dovute alle deformazioni del reticolo cristallino. Queste deformazioni definiscono i core delle dislocazioni e sono descritte dai campi di slittamento $\zeta : T_l^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$. Pertanto E^{CORE} può essere espresso tramite un potenziale W che misura la distanza di ζ dal reticolo non deformato. Più precisamente assumiamo che lo slittamento cristallografico sia attivato da un sistema di N vettori di Burgers $\{\mathbf{b}^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,N}$. Possiamo quindi utilizzare un campo vettoriale $\Phi_\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_N)$ per rappresentare lo slittamento ζ :

$$\zeta = \sum_{\alpha=1}^N \zeta_\alpha \mathbf{b}^\alpha.$$

D'altra parte, se pensiamo $\{\mathbf{b}^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,N}$ come un sistema di coordinate sul piano di slittamento, possiamo localizzare esattamente gli atomi del reticolo non deformato tramite N -ple di numeri interi. Allora gli slittamenti ζ tali che $\Phi_\zeta(x) \in \mathbb{Z}^N$ per ogni $x \in T_l^2$ non producono alcuna interazione a corto raggio e pertanto definiscono i minimi del potenziale W :

$$W(\zeta) = 0 \iff \Phi_\zeta \in \mathbb{Z}^N.$$

In particolare i campi interi costanti corrispondono agli slittamenti uniformi che riallineano il reticolo.

Per quanto riguarda il profilo del potenziale W , utilizziamo una funzione quadratica della distanza di Φ_ζ dagli interi: come vedremo successivamente, questa scelta permette di risolvere analiticamente il problema variazionale associato a (2.1) tramite l'applicazione della serie di Fourier. Assumiamo quindi che W sia della forma

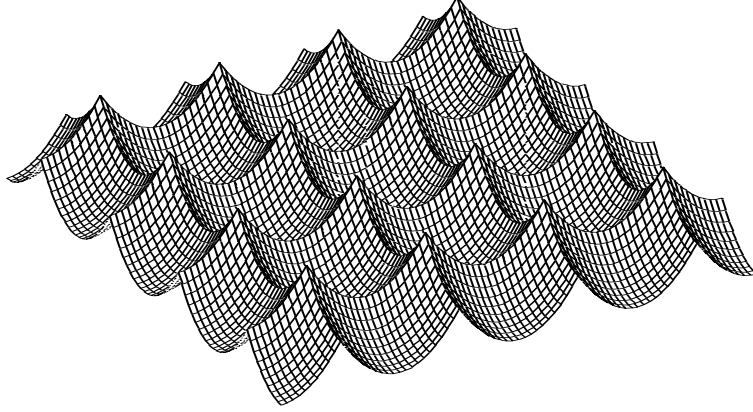
$$W(\zeta) = \frac{\mu}{2d} \sum_{\alpha=1}^N |\mathbf{b}^\alpha|^2 \min_{\xi_\alpha \in \mathbb{Z}} |\zeta_\alpha - \xi_\alpha|^2,$$

dove d è la distanza interplanare, ovvero la distanza tra due piani atomici contigui, proporzionale alle distanze tra gli atomi del reticolo cristallino.

L'energia dei core delle dislocazioni si scrive quindi come

$$E^{CORE}(\zeta) = \int_{T_l^2} W(\zeta(x)) dx. \quad (2.26)$$

Nella figura seguente è illustrato il caso $N = 2$. Notiamo che W è non convesso, periodico, e possiede una quantità numerabile di minimi.



2.2.3 Forze esterne

Il termine E^{EXT} dell'energia, come annunciato, tiene conto delle interazioni con un campo di forze esterne applicato al cristallo.

Se assumiamo che su $Q_l \subset S$ sia definita una distribuzione di trazioni $\mathcal{T} : T_l^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, allora E^{EXT} è semplicemente l'opposto del lavoro che \mathcal{T} deve compiere affinché il reticolo cristallino subisca lo slittamento descritto dal campo ζ :

$$E^{EXT}(\zeta) = - \int_{T_l^2} \mathcal{T}(x) \cdot \zeta(x) dx. \quad (2.27)$$

2.3 Il funzionale di energia

Inseriamo (2.16), (2.26) e (2.27) nella (2.1). Allora l'energia E associata al campo di slittamento $\zeta : T_l^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ si scrive come

$$\begin{aligned} E(\zeta) = & \frac{\mu}{2} \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} (\zeta(x) - \zeta(y))^T \mathcal{J}(x-y) (\zeta(x) - \zeta(y)) dx dy + \\ & + \int_{T_l^2} W(\zeta(x)) dx - \int_{T_l^2} \mathcal{T}(x) \cdot \zeta(x) dx. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Se invece utilizziamo la rappresentazione di ζ nel sistema di coordinate dei vettori di Burgers $\{\mathbf{b}^\alpha\}_{\alpha=1, \dots, N}$, i.e.

$$\zeta := \begin{pmatrix} \zeta^1 \\ \zeta^2 \end{pmatrix} = \sum_{\alpha=1}^N \zeta_\alpha \begin{pmatrix} b_1^\alpha \\ b_2^\alpha \end{pmatrix},$$

possiamo esplicitare la dipendenza di E dal campo $\Phi_\zeta = (\Phi_\zeta^1, \dots, \Phi_\zeta^N) := (\zeta_1, \dots, \zeta_N)$. Infatti risulta

$$\begin{aligned} (\zeta(x) - \zeta(y))^T \mathcal{J}(x-y) (\zeta(x) - \zeta(y)) &= \sum_{i,j=1,2} \mathcal{J}_{ij}(x-y) (\zeta^i(x) - \zeta^i(y)) (\zeta^j(x) - \zeta^j(y)) = \\ &= \sum_{i,j=1,2} \mathcal{J}_{ij}(x-y) \left(\sum_{\alpha=1}^N (\zeta_\alpha(x) - \zeta_\alpha(y)) b_i^\alpha \right) \left(\sum_{\beta=1}^N (\zeta_\beta(x) - \zeta_\beta(y)) b_j^\beta \right) = \\ &= \sum_{\alpha,\beta=1}^N \left(\sum_{i,j=1,2} \mathcal{J}_{ij}(x-y) b_i^\alpha b_j^\beta \right) (\zeta_\alpha(x) - \zeta_\alpha(y)) (\zeta_\beta(x) - \zeta_\beta(y)) = \\ &= \left(\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y) \right)^T \mathbb{J}(x-y) \left(\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y) \right), \end{aligned}$$

dove

$$\left(\mathbb{J}(x) \right)_{\alpha\beta} := \sum_{i,j=1,2} \mathcal{J}_{ij}(x) b_i^\alpha b_j^\beta, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N,$$

soddisfa le stesse proprietà della matrice \mathcal{J} . Inoltre

$$W(\zeta) = \frac{\mu}{2d} \sum_{\alpha=1}^N |\mathbf{b}^\alpha|^2 \min_{\xi_\alpha \in \mathbb{Z}} |\zeta_\alpha - \xi_\alpha|^2 = \min_{\xi \in \mathbb{Z}^N} \frac{\mu}{2d} \left(\Phi_\zeta - \xi \right)^T \mathbb{B} \left(\Phi_\zeta - \xi \right) =: \mathbb{W}(\Phi_\zeta), \quad (2.29)$$

dove

$$\left(\mathbb{B} \right)_{\alpha\beta} := |\mathbf{b}^\alpha| |\mathbf{b}^\beta| \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N.$$

Infine

$$\mathcal{T} \cdot \zeta = \sum_{i=1,2} \mathcal{T}_i \sum_{\alpha=1}^N \zeta_\alpha b_i^\alpha = \sum_{\alpha=1}^N \zeta_\alpha \sum_{i=1,2} \mathcal{T}_i b_i^\alpha = \Phi_\zeta \cdot \mathbb{T},$$

con

$$\mathbb{T} := \left(\sum_{i=1,2} \mathcal{T}_i b_i^1, \dots, \sum_{i=1,2} \mathcal{T}_i b_i^N \right).$$

Otteniamo quindi

$$\begin{aligned} E(\Phi_\zeta) &= \frac{\mu}{2} \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \left(\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y) \right)^T \mathbb{J}(x-y) \left(\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y) \right) dx dy + \\ &\quad + \int_{T_l^2} \mathbb{W}(\Phi_\zeta(x)) dx - \int_{T_l^2} \mathbb{T}(x) \cdot \Phi_\zeta(x) dx. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Da un punto di vista strettamente matematico l'energia E si colloca nella classe dei funzionali a buche multiple perturbati da termini di ordine superiore. Infatti \mathbb{W} possiede \mathbb{Z}^N buche di potenziale, mentre il primo termine di E risulta essere equivalente al quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}$ del campo Φ_ζ . A differenza degli altri

due contributi esso è *non-locale*, nel senso che la sua densità di energia in ogni punto $x \in T_l^2$ non dipende solo dal valore $\Phi_\zeta(x)$, ma anche dai valori che il campo Φ_ζ assume in tutti gli altri punti $y \in T_l^2$. Inoltre la deformazione relativa $\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y)$ è pesata in modo non uniforme dal nucleo \mathbb{J} in funzione dello spostamento $x - y$. Nel linguaggio della teoria dell'elasticità questo comportamento è noto come *anisotropia* delle interazioni elastiche.

In assenza di forze esterne, i.e. per $\mathbb{T} \equiv 0$, risulta

$$E(\Phi_\zeta) \geq 0, \quad \forall \Phi_\zeta : T_l^2 \rightarrow \mathbb{R}^N,$$

dal momento che la matrice \mathbb{J} è definita positiva e il potenziale \mathbb{W} è non negativo. Inoltre per costruzione si ha $\mathbb{W}(\Phi_\zeta) = 0$ se e solo se $\Phi_\zeta(x) \in \mathbb{Z}^N$ per ogni $x \in T_l^2$. Poiché le funzioni costanti a tratti non sono in $H^{\frac{1}{2}}$, concludiamo che

$$E(\Phi_\zeta) = 0 \iff \Phi_\zeta \equiv C \in \mathbb{Z}^N,$$

e pertanto i campi a valori in \mathbb{Z}^N costanti individuano le configurazioni di minimo assoluto dell'energia, le cosiddette *fasi* del sistema. In questo modo lo slittamento cristallografico viene interpretato come un problema di transizione di fase.

2.4 Il problema variazionale

Quando il campo di forze esterne \mathbb{T} è non nullo, i primi due termini in (2.30) entrano in competizione nel processo di minimizzazione dell'energia che seleziona le configurazioni di equilibrio: da un lato il potenziale \mathbb{W} forza il campo Φ_ζ ad assumere ovunque valori interi, comprimendo i core delle dislocazioni; dall'altro il nucleo \mathbb{J} preferisce ridurre le interazioni a lungo raggio, i.e. la seminorma $H^{\frac{1}{2}}$ di Φ_ζ , separando il più possibile le fasi. L'equilibrio è raggiunto quindi in corrispondenza di campi a valori vicini agli interi, che effettuano opportune transizioni di fase. Così il termine non-locale dell'energia, interpretato come una perturbazione del funzionale a pure fasi descritto da \mathbb{W} , ha l'effetto di una regolarizzazione. Consideriamo infatti il problema variazionale associato a (2.30) :

$$\min_{\Phi_\zeta : T_l^2 \rightarrow \mathbb{R}^N} E(\Phi_\zeta). \tag{2.31}$$

Nella (2.29) notiamo che il potenziale \mathbb{W} è a sua volta definito da un problema di minimo:

$$\mathbb{W}(\Phi_\zeta) = \min_{\xi \in \mathbb{Z}^N} \frac{\mu}{2d} (\Phi_\zeta - \xi)^T \mathbb{B} (\Phi_\zeta - \xi).$$

Quindi ad ogni Φ_ζ corrisponde un campo $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_N)$ a valori in \mathbb{Z}^N . Come discusso precedentemente ξ è detto *campo di fase* e individua uno slittamento non

uniforme del reticolo cristallino, in termini di multipli interi dei vettori di Burgers. Possiamo pertanto identificare le linee di dislocazione, generate dal campo di forze esterne \mathbb{T} , come l'insieme dei punti di salto di ξ . Inoltre l'insieme di salto di ogni componente ξ_α caratterizza esattamente il tipo di dislocazione, tramite l'angolo che essa forma col vettore di Burgers \mathbf{b}^α .

Allora in (2.31) possiamo invertire l'ordine di minimizzazione e scrivere il problema variazionale in funzione del campo di fase:

$$\min_{\xi: T_l^2 \rightarrow \mathbb{Z}^N} E(\xi), \quad (2.32)$$

dove adesso

$$E(\xi) := \min_{\Phi_\zeta: T_l^2 \rightarrow \mathbb{R}^N} E(\xi, \Phi_\zeta), \quad (2.33)$$

con

$$\begin{aligned} E(\xi, \Phi_\zeta) := & \frac{\mu}{2} \int_{T_l^2} \int_{T_l^2} \left(\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y) \right)^T \mathbb{J}(x-y) \left(\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y) \right) dx dy + \\ & + \frac{\mu}{2d} \int_{T_l^2} \left(\Phi_\zeta(x) - \xi(x) \right)^T \mathbb{B} \left(\Phi_\zeta(x) - \xi(x) \right) dx - \int_{T_l^2} \mathbb{T}(x) \cdot \Phi_\zeta(x) dx. \end{aligned}$$

Dal momento che \mathbb{W} è una funzione quadratica, possiamo risolvere esplicitamente il problema di minimo (2.33) tramite le variabili di Fourier. Infatti, utilizzando l'identità di Parseval, si ottiene (per i dettagli si veda [25])

$$\begin{aligned} E(\xi) = & \frac{l^2}{(2\pi)^2} \sum_{k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2} \min_{\widehat{\Phi}_\zeta(k)} \left\{ \mu \widehat{\Phi}_\zeta^T(k) \widehat{\mathbb{J}}(k) \widehat{\Phi}_\zeta^*(k) + \right. \\ & \left. + \frac{\mu}{2d} \left(\widehat{\Phi}_\zeta(k) - \widehat{\xi}(k) \right)^T \mathbb{B} \left(\widehat{\Phi}_\zeta^*(k) - \widehat{\xi}^*(k) \right) - \widehat{\mathbb{T}}(k) \cdot \widehat{\Phi}_\zeta(k) \right\}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

da cui, calcolando la variazione prima rispetto a $\widehat{\Phi}_\zeta(k)$ per ogni $k \in \frac{2\pi}{l}\mathbb{Z}^2$ fissato, otteniamo il seguente sistema di equilibrio di Eulero-Lagrange:

$$\left(\mathbb{B} + 2d \widehat{\mathbb{J}}(k) \right) \widehat{\Phi}_\zeta(k) = \mathbb{B} \widehat{\xi}(k) + (d/\mu) \widehat{\mathbb{T}}(k).$$

Allora

$$E(\xi) = E(\xi, \Phi_\xi) \quad \text{con} \quad \widehat{\Phi}_\xi = \left(\mathbb{B} + 2d \widehat{\mathbb{J}} \right)^{-1} \left(\mathbb{B} \widehat{\xi} + (d/\mu) \widehat{\mathbb{T}} \right). \quad (2.35)$$

Se infine poniamo

$$\widehat{\mathbb{M}}_d(k) = \left(\mathbb{B} + 2d \widehat{\mathbb{J}}(k) \right)^{-1} \mathbb{B},$$

concludiamo che

$$\Phi_\xi = \mathbb{M}_d * \xi + (d/\mu) \mathbb{M}_d * \mathbb{B}^{-1} \mathbb{T},$$

dove il simbolo $*$ indica il prodotto di convoluzione. Dal momento che $\widehat{\mathbb{J}}$ definisce una forma quadratica equivalente al quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}$, per $k \rightarrow 0$ si ha

$$v^T \widehat{\mathbb{J}}(k) v = \mathcal{O}(|k|)|v|^2, \quad \forall v \in \mathbb{R}^N,$$

da cui segue che $\widehat{\mathbb{M}}_d(0) = \text{Id}$. Inoltre per ogni k risulta $\lim_{d \rightarrow 0} \widehat{\mathbb{M}}_d(k) \equiv \text{Id} = \widehat{\delta}_0(k)\text{Id}$ nel senso delle distribuzioni e pertanto il campo Φ_ξ risulta essere una mollificazione su scala d del campo di fase ξ . Così, per effetto di questa regolarizzazione, le linee di dislocazione descritte da ξ acquistano un core di ampiezza proporzionale alla distanza interplanare d . D'altra parte il problema di minimo (2.32) non può essere risolto esplicitamente, a causa del vincolo non lineare $\xi \in \mathbb{Z}^N$ imposto sui campi di fase. Tuttavia esso si presta bene ad una risoluzione di tipo numerico per la descrizione di una interessante applicazione del modello presentata nella sezione seguente (si veda anche [26], [31]).

2.4.1 Applicazione del modello ai "Twist Boundaries"

I *Twist Boundaries* sono particolari strutture cristalline periodiche, in cui una porzione di ogni cella di periodicità, per effetto di uno stress esterno, subisce una ben precisa torsione, descritta da un angolo θ .

Questo vincolo di torsione, in corrispondenza di un piano di slittamento del cristallo, forza la rotazione degli atomi del reticolo sottostante, che invece preferiscono slittare lungo le direzioni individuate da un qualche sistema di vettori di Burgers.

La competizione viene risolta da particolari configurazioni atomiche di equilibrio che, al variare di θ , possono risultare fortemente strutturate; è possibile osservare, ad esempio, un gran numero di regioni regolari, delimitate e separate tra loro da linee di dislocazione altrettanto regolari. D'altra parte le dislocazioni possono incurvarsi, addensarsi e anche sovrapporsi, soprattutto lungo i contorni della regione in cui la torsione è prescritta.

Possiamo simulare un semplice twist boundary quadrato di lato l , identificandolo con $Q_l = (-l/2, l/2)^2$ (scelto come dominio di riferimento per il toro T_l^2) e considerando ad esempio un reticolo atomico quadrato il cui slittamento cristallografico è descritto da due vettori di Burgers $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$.

Per semplicità assumiamo che questi vettori abbiano lo stesso modulo e siano paralleli rispettivamente ai versori $\mathbf{e}_1 = (1, 0)$, $\mathbf{e}_2 = (0, 1)$ di \mathbb{R}^2 , i.e.

$$\mathbf{b}_1 = b \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{b}_2 = b \mathbf{e}_2, \quad \text{con } b = |\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2|.$$

Con questa scelta i campi di fase $\xi : T_l^2 \rightarrow \mathbb{Z}^2$ si scrivono nella forma

$$\xi = \xi_1 \mathbf{b}_1 + \xi_2 \mathbf{b}_2 = b(\xi_1, \xi_2). \quad (2.36)$$

A questo punto fissiamo $r < l/2$ e scegliamo il disco D_r , centrato nell'origine di Q_l e di raggio r , come la regione in cui imporre una fissata torsione del reticolo cristallino, che possiamo descrivere tramite il seguente campo di slittamento

$$\zeta_\theta(x) := \theta x^\perp \chi_{D_r}(x),$$

dove θ è un angolo fissato e x^\perp è il vettore ortogonale ad x .

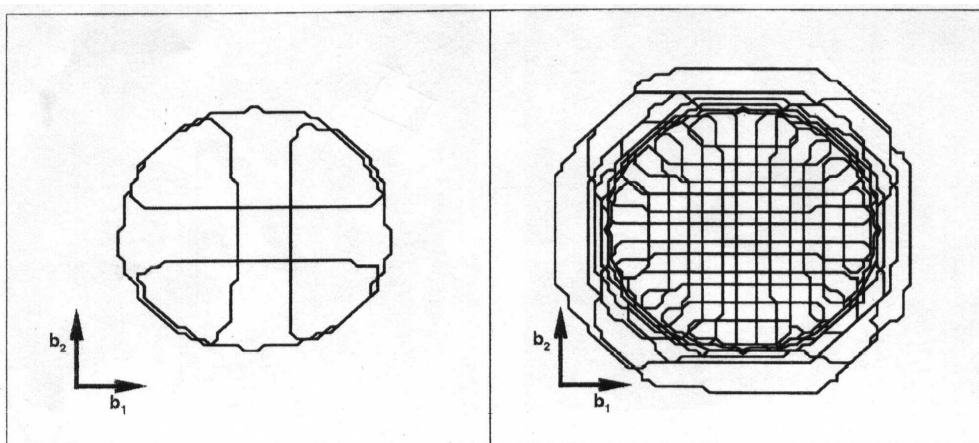
Chiaramente ζ_θ salta sul bordo di D_r e pertanto non definisce una funzione $H^{\frac{1}{2}}(T_l^2)$. Questo vincolo non può essere quindi assengato puntualmente, ma possiamo richiedere ad esempio che i campi Φ_ζ definiscano slittamenti ζ vicini a ζ_θ su D_r , il che corrisponde ad aggiungere all'energia un termine del tipo

$$\lambda \int_{D_r} |\zeta(x) - \zeta_\theta(x)|^2 dx, \quad \lambda > 0. \quad (2.37)$$

Una soluzione del seguente problema di minimo (con $E(\Phi_\zeta)$ corrispondente alla scelta $\mathbb{T} = 0$ in (2.30))

$$\min_{\Phi_\zeta: T_l^2 \rightarrow \mathbb{R}^N} E(\Phi_\zeta) + \lambda \int_{D_r} |\zeta(x) - \zeta_\theta(x)|^2 dx \quad (2.38)$$

è suggerita da alcune simulazioni numeriche, presentate in [26] allo scopo di illustrare l'abilità dell'approccio di tipo phase-field nel predire complessi arrangiamenti delle linee di dislocazione, qualitativamente in accordo con le osservazioni sperimentali. La figura seguente mostra, ad esempio, le simulazioni corrispondenti ai due valori $\theta = 0.01$ e $\theta = 0.05$ dell'angolo di torsione, con $b = 2.56 \times 10^{-10} m$, $l = 10^3 b$, $r = l/4$, $\mu = 5.5 \times 10^{10} N/m^2$ e $\nu = 0.324$.



I segmenti rappresentano le linee di dislocazione, ovvero l'insieme di salto del campo di fase ξ che minimizza l'energia. Si vede chiaramente che, all'interno del disco D_r ,

queste linee seguono le direzioni dei due vettori di Burgers \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 e formano, al variare di θ , delle reti (*network*) approssimativamente quadrate. Sul bordo di D_r notiamo invece degli impilamenti più o meno densi, che servono a raccordare la regione di torsione con quella a riposo.

Capitolo 3

Funzionali a buche multiple: analisi di alcuni risultati noti

Riprendiamo il funzionale di energia delle dislocazioni ottenuto nel capitolo precedente, assumendo che il campo di forze esterne \mathbb{T} applicato al cristallo sia nullo:

$$E(\Phi_\zeta) = \frac{\mu}{2} \int_{T^2} \int_{T^2} \left(\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y) \right)^T \mathbb{J}(x-y) \left(\Phi_\zeta(x) - \Phi_\zeta(y) \right) dx dy + \int_{T^2} \mathbb{W}(\Phi_\zeta(x)) dx.$$

Possiamo ottenere un'espressione di E matematicamente più maneggevole introducendo le seguenti semplificazioni. Supponiamo che gli N vettori di Burgers che definiscono il sistema di slittamento su T^2 abbiano lo stesso modulo b e riscaliamo il sistema di coordinate sul toro unitario T^2 . A questo punto dividiamo E per il fattore costante $\mu b^2 l / 2$ e definiamo $\varepsilon := d/l$. Infine, per semplicità di notazione, poniamo $u := \Phi_\zeta$. Otteniamo così il seguente funzionale vettoriale:

$$F_\varepsilon(u) = \int_{T^2} \int_{T^2} \left(u(x) - u(y) \right)^T \mathbb{J}(x-y) \left(u(x) - u(y) \right) dx dy + \quad (3.1) \\ + \frac{1}{\varepsilon} \int_{T^2} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}^N) dx.$$

Come discusso nel capitolo precedente F_ε si colloca in una classe di funzionali che ha suscitato grande interesse negli ultimi anni, quella delle energie a buche multiple perturbate da termini regolarizzanti di ordine superiore. A partire dai lavori di Modica e Mortola ([28],[29]) si è sviluppata una vastissima letteratura sui funzionali che possiedono un insieme finito di buche di potenziale e sono regolarizzati da termini locali del tipo integrale di Dirichlet (si veda ad esempio [30],[24],[14],[20]) oppure da termini non locali descritti da nuclei anisotropi regolari ([2],[3]). Il funzionale F_ε costituisce una duplice generalizzazione: da un lato il

nucleo di interazione \mathbb{J} è singolare e definisce un termine non locale equivalente al quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}$, dall'altro il termine locale è descritto da un potenziale che possiede una quantità numerabile di buche (si veda anche [6],[22],[27],[29]). In questo capitolo ci avvicineremo al tema centrale di questa tesi, lo studio del comportamento asintotico per $\varepsilon \rightarrow 0$, tramite Γ -convergenza, del funzionale F_ε . Analizzeremo infatti alcuni modelli di transizione di fase ad esso correlati, al fine di sottolineare le caratteristiche dei due termini dell'energia ed il ruolo cruciale della loro interazione per la determinazione del Γ -limite. Più precisamente descriveremo il funzionale di Cahn-Hilliard (o di Ginzburg-Landau scalare), una sua versione non-locale dovuta ad Alberti, Bouchitté e Seppecher e infine l'equivalente scalare di F_ε . In particolare l'analisi dei risultati ottenuti da Garroni e Müller in [22] per quest'ultimo modello ci è servita per comprendere a fondo il caso vettoriale e le sue difficoltà specifiche, evidenziate dall'esempio della transizione a bassa energia limite costruita nel Capitolo 5.

A questo livello vedremo che il funzionale delle dislocazioni, a causa della perturbazione $H^{\frac{1}{2}}$, necessita un riscaldamento ottimale di tipo logaritmico, che ha l'effetto di rendere il funzionale limite indipendente dalla forma precisa del potenziale. A tal proposito ricordiamo che la funzione quadratica $\text{dist}^2(\cdot, \mathbb{Z}^N)$ è stata scelta in [25] solo per motivi computazionali, ma in generale esiste un'ampia letteratura fisica ed ingegneristica che si occupa del problema di determinare esattamente la struttura dei potenziali per questo tipo di modelli, le cosiddette Gamma Surfaces (si veda ad esempio []).

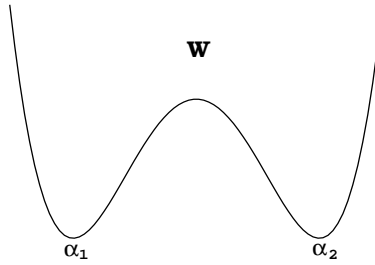
3.1 Il funzionale di Cahn-Hilliard

Si tratta di uno dei modelli più noti in letteratura, proposto originariamente da Cahn e Hilliard in [13], che descrive le transizioni di un fluido a due fasi confinato all'interno di un contenitore $\Omega \subset \mathbb{R}^3$:

$$E_\varepsilon(u) = \varepsilon^2 \int_{\Omega} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{\Omega} W(u(x)) dx. \quad (3.2)$$

La funzione $u : \Omega \rightarrow [\alpha_1, \alpha_2]$ è un parametro d'ordine che quantifica in ogni punto di Ω la concentrazione delle due fasi ammissibili α_1, α_2 , mentre $W : \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty)$ è un potenziale a doppio pozzo i cui minimi corrispondono esattamente alle fasi, i.e. $\{W = 0\} = \{\alpha_1, \alpha_2\}$ (vedi figura successiva).

Notiamo che, formalmente, il primo termine dell'energia tende a zero per $\varepsilon \rightarrow 0$ e pertanto costituisce una perturbazione singolare del funzionale a pure fasi descritto da W . Così, la struttura di E_ε suggerisce che le configurazioni a minima energia sono quelle che risolvono la competizione tra i due termini. Infatti W forza il parametro



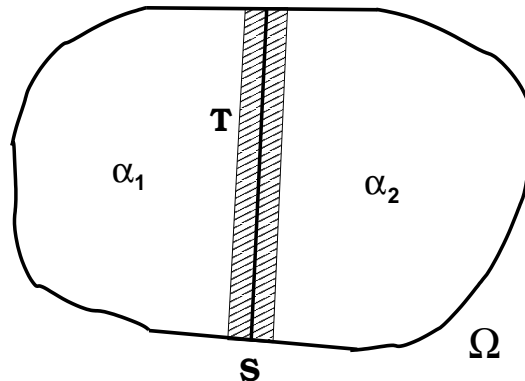
d'ordine u ad assumere valori vicini alle fasi α_1 e α_2 , laddove l'integrale di Dirichlet penalizza la pendenza delle transizioni.

Il funzionale di Cahn-Hilliard nasce come un modello alternativo a quello classico di tensione superficiale, descritto dal funzionale

$$E(u) = \sigma \mathcal{H}^2(Su),$$

in cui $u : \Omega \rightarrow \{\alpha_1, \alpha_2\}$ può assumere solo i due valori corrispondenti alle fasi α_1, α_2 , definendo così una partizione del volume Ω . L'insieme Su rappresenta la superficie di separazione tra le due fasi, ovvero l'insieme dei punti di salto di u , mentre $\mathcal{H}^2(Su)$ è la misura di Hausdorff 2-dimensionale di tale superficie. Infine la costante σ è la cosiddetta tensione superficiale, vale a dire la densità di energia per unità di superficie che il sistema spende per separare le due fasi del fluido. È chiaro allora che, in presenza di forze esterne, oppure di un qualche vincolo di volume sulla concentrazione relativa delle due fasi, la migliore configurazione u del sistema (che minimizza $E(u)$) è quella che minimizza la superficie di contatto Su . È ben noto che i modelli qui sopra citati sono tra loro profondamente connessi; sappiamo infatti che E_ε ed E descrivono il medesimo fenomeno su due scale differenti, rispettivamente la scala mesoscopica e quella macroscopica.

Consideriamo ad esempio, al variare di $\delta > 0$, una transizione u_δ localizzata all'interno di un δ -intorno T di una qualche superficie S .



Dal momento che fuori da T la funzione u_δ è costante e $W(u_\delta) = 0$, risulta

approssimativamente

$$E_\varepsilon(u_\delta) = \varepsilon^2 \int_T |\nabla u_\delta|^2 + \int_T W(u_\delta) \sim C\left(\frac{\varepsilon^2}{\delta^2} + 1\right)|T| = C\left(\frac{\varepsilon^2}{\delta} + \delta\right)|S|,$$

da cui, minimizzando in δ , si ottiene

$$-\frac{\varepsilon^2}{\delta^2} + 1 = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \delta \sim \varepsilon,$$

e

$$E_\varepsilon(u_\varepsilon) \sim \varepsilon C|S|. \quad (3.3)$$

Per $\varepsilon \rightarrow 0$ deduciamo quindi che le transizioni u_ε che minimizzano E_ε avvengono su striscie di larghezza proporzionale ad ε , riducendo l'area della superficie di separazione S , il che rispecchia esattamente il comportamento dei punti di minimo di E .

Questo argomento può essere reso rigoroso utilizzando la Γ -convergenza: si tratta del famoso teorema di Modica e Mortola ([30]), che enunciamo qui di seguito, dopo aver notato che la (3.3) suggerisce $\frac{1}{\varepsilon}$ come il giusto fattore di riscaldamento per E_ε , al fine di ottenere un Γ -limite non banale.

Teorema 3.1 *Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ e sia $W : \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty)$ tale che $\{W = 0\} = \{\alpha_1, \alpha_2\}$ e $W(u) \geq C(|u|^2 - 1)$ con $C > 0$. Allora il funzionale*

$$\frac{1}{\varepsilon} E_\varepsilon(u) = \begin{cases} \varepsilon \int_\Omega |\nabla u|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_\Omega W(u) dx & \text{se } u \in H^1(\Omega) \\ +\infty & \text{altrimenti in } L^1(\Omega), \end{cases}$$

$\Gamma(L^1)$ -converge a

$$E(u) = \begin{cases} \sigma \mathcal{H}^2(Su) & \text{se } u \in BV(\Omega, \{\alpha_1, \alpha_2\}) \\ +\infty & \text{altrimenti in } L^1(\Omega), \end{cases}$$

dove

$$\sigma = 2 \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \sqrt{W(t)} dt.$$

Il Γ -limite del funzionale di Cahn-Hilliard restituisce quindi il modello di tensione superficiale per le transizioni di fase di un fluido: l'energia diffusa nelle regioni in cui il parametro d'ordine u non è costante si concentra al limite sulla superficie di separazione tra le due fasi ammissibili, producendo una ben precisa tensione superficiale σ , che dipende dai valori assunti dal potenziale W tra α_1 e α_2 .

Questa proprietà segue da un argomento di riscaldamento che illustriamo con un

esempio nel caso unidimensionale. Sia dunque $\Omega = (-1, 1) \subset \mathbb{R}$. Consideriamo la seguente funzione $BV(\Omega, \{\alpha_1, \alpha_2\})$:

$$u_0(x) = \begin{cases} \alpha_1 & \text{se } x \leq 0, \\ \alpha_2 & \text{se } x > 0. \end{cases}$$

Si ha evidentemente

$$Su_0 = \{0\} \quad \text{e} \quad E(u_0) = \sigma \mathcal{H}^0(Su_0) = \sigma,$$

dove \mathcal{H}^0 è la misura di Hausdorff 0-dimensionale che conta il numero dei punti di salto. Per ogni $u \in H_{loc}^1(\mathbb{R})$ tale che $u(-\infty) = \alpha_1$ e $u(+\infty) = \alpha_2$, costruiamo la successione $\{u_\varepsilon\}$ ponendo semplicemente $u_\varepsilon := u(x/\varepsilon)$.

Allora risulta $u_\varepsilon \rightarrow u_0$ in $L^1(\Omega)$ e

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} E_\varepsilon(u_\varepsilon, \Omega) &= \frac{1}{\varepsilon} \int_{-1}^1 (u'(x/\varepsilon))^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_{-1}^1 W(u(x/\varepsilon)) dx \stackrel{[x=\varepsilon y]}{=} \\ &= \int_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} (u'(y))^2 dy + \int_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} W(u(y)) dy = E_1(u, \Omega_{1/\varepsilon}), \end{aligned}$$

da cui

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} E_\varepsilon(u_\varepsilon, \Omega) = E_1(u, \mathbb{R}).$$

Affinché la successione $\{u_\varepsilon\}$ sia ottimale per il Γ -limite occorre quindi ottimizzare in u il secondo membro dell'espressione precedente, ovvero risolvere il cosiddetto problema del *profilo ottimale*:

$$\inf \left\{ \int_{\mathbb{R}} (u')^2 + W(u) dx : u \in H_{loc}^1(\mathbb{R}), u(-\infty) = \alpha_1, u(+\infty) = \alpha_2 \right\}.$$

Utilizzando la disuguaglianza $a^2 + b^2 \geq 2ab$, si ha

$$\int_{\mathbb{R}} (u')^2 + W(u) dx \geq 2 \int_{\mathbb{R}} \sqrt{W(u)} u' dx \stackrel{[u(x)=t]}{=} 2 \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \sqrt{W(t)} dt = \sigma.$$

Chiaramente la disuguaglianza precedente si riduce ad una uguaglianza se e soltanto se $a = b$, ovvero se e soltanto se u risolve

$$\begin{cases} u' = \sqrt{W(u)}, \\ u(-\infty) = \alpha_1, \\ u(+\infty) = \alpha_2. \end{cases}$$

Questo problema ai limiti ammette un'unica soluzione (a meno di traslazioni in x) e pertanto concludiamo che esiste una successione $\{u_\varepsilon\}$ tale che

$$u_\varepsilon \xrightarrow{L^1(\Omega)} u_0 \quad \text{e} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} E_\varepsilon(u_\varepsilon, \Omega) = \sigma = E(u_0).$$

3.2 Un funzionale non-locale di tipo Cahn-Hilliard

Il modello di Cahn-Hilliard è stato generalizzato in varie direzioni, al fine di descrivere sistemi in particolari condizioni fisiche.

Alberti, Bouchitté e Seppecher hanno considerato in [5] un termine aggiuntivo nell'energia (3.2) che tiene conto delle interazioni del fluido con le pareti del contenitore Ω . Questo contributo è descritto da un secondo potenziale V , opportunamente penalizzato, definito sulle tracce del parametro d'ordine sul bordo $\partial\Omega$. Inoltre V possiede le stesse caratteristiche del potenziale di volume W e si annulla in corrispondenza di due fasi α'_1, α'_2 , possibilmente diverse da α_1, α_2 .

Un passo preliminare per lo studio di questo modello consiste nella caratterizzazione del Γ -limite del seguente funzionale unidimensionale, ottenuto tramite la tecnica dello slicing:

$$E_\varepsilon(u) := \int_I \int_I \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^2} dx dy + \frac{1}{\varepsilon} \int_I V(u(x)) dx, \quad (3.4)$$

dove $I = (a, b)$ è un intervallo di \mathbb{R} e $u : I \rightarrow [\alpha'_1, \alpha'_2]$.

Confrontando E_ε col funzionale di Cahn-Hilliard (3.2) notiamo che l'integrale di Dirichlet è stato sostituito da un termine non-locale che è esattamente il quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}(I)$ del parametro d'ordine u . Questa modifica, come illustrato qui di seguito, comporta una sostanziale differenza rispetto al caso locale.

Consideriamo nuovamente una transizione u_δ tra le fasi α'_1 e α'_2 che avviene in un δ -intorno di un qualche punto $x_0 \in I$. Partizioniamo l'intervallo I ponendo

$$A_\delta = (a, x_0 - \delta/2), \quad B_\delta = (x_0 + \delta/2, b), \quad C_\delta = [x_0 - \delta/2, x_0 + \delta/2].$$

Dal momento che su $A_\delta \cup B_\delta$ la funzione u_δ è costante e $V(u_\delta) = 0$, risulta approssimativamente

$$\begin{aligned} E_\varepsilon(u_\delta) &= 2 \int_{A_\delta} \int_{B_\delta} \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^2} dx dy + 2 \int_{C_\delta} \int_{A_\delta} \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^2} dx dy + \\ &+ 2 \int_{C_\delta} \int_{B_\delta} \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^2} dx dy + 2 \int_{C_\delta} \int_{C_\delta} \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^2} dx dy + \\ &+ \frac{1}{\varepsilon} \int_I V(u(x)) dx \sim C \left(\int_{A_\delta} \int_{B_\delta} \frac{dx dy}{|x - y|^2} + 1 + \frac{\delta}{\varepsilon} \right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Inoltre

$$\int_{A_\delta} \int_{B_\delta} \frac{dx dy}{|x - y|^2} \stackrel{[z=x-y]}{=} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{z^2} \left(\int_{A_\delta \cap (B_\delta - z)} dx \right) dz = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{z^2} |A_\delta \cap (B_\delta - z)| dz.$$

Si vede facilmente che l'insieme $A_\delta \cap (B_\delta - z)$ è non vuoto se e solo se $z \in (\delta, b - a)$ ed è un intervallo di ampiezza proporzionale a z . Inoltre

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{z^2} |A_\delta \cap (B_\delta - z)| dz \sim \int_\delta^{b-a} \frac{dz}{z} \sim |\log \delta|,$$

da cui segue che

$$E_\varepsilon(u_\delta) \sim C \left(|\log \delta| + 1 + \frac{\delta}{\varepsilon} \right).$$

Ottimizzando in δ l'espressione precedente si ha

$$-\frac{1}{\delta} + \frac{1}{\varepsilon} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \delta \sim \varepsilon,$$

e pertanto, anche in questo caso, una transizione u_ε che minimizza E_ε per $\varepsilon \rightarrow 0$, avviene all'interno di una striscia di ampiezza proporzionale ad ε . Più precisamente risulta

$$E_\varepsilon(u_\varepsilon) \sim 2(\alpha'_1 - \alpha'_2)^2 |\log \varepsilon| + C_V, \quad (3.6)$$

dove C_V è una costante che dipende dal potenziale V . A differenza del funzionale di Cahn-Hilliard locale, vista la (3.5), il termine dominante dell'energia è dato dunque dalle interazioni al di fuori della zona di transizione C_δ , dove il potenziale non gioca alcun ruolo. Quindi, se riscaldiamo il funzionale E_ε del fattore $1/|\log \varepsilon|$, la (3.6) suggerisce che il suo Γ -limite non dipenderà affatto dalla forma di V tra le fasi, ma solo dai suoi zeri α'_1, α'_2 . Si può inoltre dimostrare che questo particolare riscaldamento elimina il problema del profilo ottimale e che l'unica caratteristica davvero importante di una successione ottimale è proprio la scala ε su cui avviene la transizione. Per approfondimenti rinviamo il lettore ad un altro lavoro di Alberti, Bouchitté e Seppecher [6], da cui abbiamo estratto il seguente teorema, nella forma che ci sarà utile più avanti.

Teorema 3.2 *Sia $I \subset \mathbb{R}$ un intervallo e sia $W : \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty)$ tale che $\{W = 0\} = \{\alpha'_1, \alpha'_2\}$ e $W(u) \geq C(|u|^2 - 1)$ con $C > 0$. Allora il funzionale*

$$\frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(u) = \begin{cases} \frac{1}{|\log \varepsilon|} \left(\int_I \int_I \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^2} dx dy + \frac{1}{\varepsilon} \int_I W(u) dx \right) & \text{se } u \in H^{\frac{1}{2}}(I) \\ +\infty & \text{altrimenti in } L^1(I), \end{cases}$$

$\Gamma(L^1)$ -converge a

$$E(u) = \begin{cases} 2(\alpha'_2 - \alpha'_1)^2 \mathcal{H}^0(Su) & \text{se } u \in BV(I, \{\alpha'_1, \alpha'_2\}) \\ +\infty & \text{altrimenti in } L^1(I). \end{cases}$$

In particolare ogni successione $\{u_\varepsilon\} \subset L^1(I)$ tale che

$$\sup_{\varepsilon > 0} \frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(u) < +\infty$$

risulta essere pre-compatta fortemente in $L^1(I)$; inoltre ogni punto limite di ogni sotto-successione convergente estratta da $\{u_\varepsilon\}$ appartiene allo spazio $BV(I, \{\alpha'_1, \alpha'_2\})$.

3.3 Il funzionale delle dislocazioni: un caso scalare

In questa sezione concludiamo la nostra breve panoramica sui funzionali a buche multiple, presentando un risultato di Γ -convergenza relativo ad una versione scalare del funzionale delle dislocazioni F_ε definito in (3.1).

Riprendendo la terminologia del Capitolo 2, assumiamo che lo slittamento cristallografico sia attivato da un singolo vettore di Burgers di modulo unitario, che scegliamo per semplicità coincidente col versore \mathbf{e}_1 della base canonica di \mathbb{R}^2 .

Con questa scelta ci stiamo dunque restringendo ai campi di slittamento della forma $u \mathbf{e}_1$, dove adesso $u : T^2 \rightarrow \mathbb{R}$ è un parametro d'ordine scalare 1-periodico.

Il funzionale F_ε si riduce quindi a

$$E_\varepsilon(u) := \int_{T^2} \int_{T^2} J(x-y) |u(x) - u(y)|^2 dx dy + \frac{1}{\varepsilon} \int_{T^2} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}) dx, \quad (3.7)$$

in cui il nucleo $J : T^2 \rightarrow \mathbb{R}$ è semplicemente l'elemento \mathcal{J}_{11} della matrice \mathcal{J} in (2.23), i.e.

$$J(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} J_0(x+k), \quad J_0(x) = \frac{1}{8\pi(1-\nu)|x|^3} \left(\nu + 1 - 3\nu \frac{x_2^2}{|x|^2} \right),$$

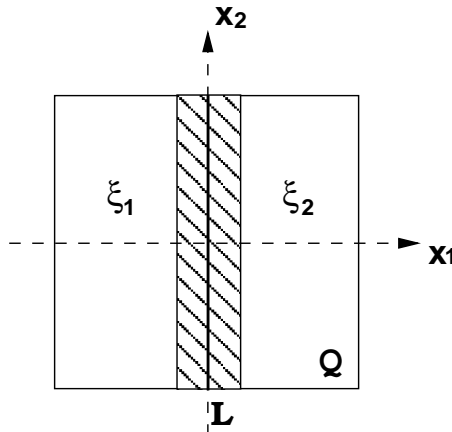
e soddisfa le stesse proprietà, che riscriviamo qui di seguito:

- i) J è 1-periodico;
- ii) $J(x) = \mathcal{O}(|x|^{-3})$ per $|x| \rightarrow 0$;
- iii) J definisce una forma quadratica positiva equivalente al quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}(T^2)$;
- iv) per ogni $\sigma > 0$ e uniformemente su $\{x \in \mathbb{R}^2 : |x| \leq \sigma\}$ si ha

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta^3 J(\delta x) = J_0(x). \quad (3.8)$$

Il comportamento asintotico per $\varepsilon \rightarrow 0$ di E_ε , caratterizzato da Garroni e Müller in [22], è stato il nostro punto di partenza per lo studio dell'analogo funzionale vettoriale F_ε e pertanto merita una particolare attenzione. Discuteremo infatti le tecniche utilizzate in questo lavoro e metteremo in evidenza alcune proprietà di E_ε che non avranno un corrispettivo nel caso vettoriale, a cui saranno dedicati i due capitoli successivi. L'energia E_ε è chiaramente una generalizzazione bi-dimensionale del funzionale di Cahn-Hilliard non-locale descritto precedentemente. Infatti, il termine non-locale è espresso da una forma quadratica *equivalente* alla seminorma $H^{\frac{1}{2}}$, mentre quello locale dipende da un potenziale che possiede una quantità *numerabile* di buche. Queste modifiche, come vedremo, comportano alcune difficoltà nella determinazione del Γ -limite. Nel capitolo precedente abbiamo osservato la struttura dei campi di slittamento che minimizzano l'energia delle dislocazioni: essi possiedono dei core di spessore proporzionale alla distanza interplanare d che degenerano, per $d \rightarrow 0$, producendo linee di dislocazione, interpretate come insiemi di salto dei campi di fase a valori interi. D'altra parte abbiamo visto che le interazioni elastiche a lungo raggio sono anisotrope e dipendono sensibilmente dall'orientazione dei vettori $x - y$ in cui viene valutato il nucleo \mathbb{J} . Queste proprietà suggeriscono che il funzionale Γ -limite di E_ε sarà definito sulle funzioni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z})$ e dipenderà localmente da una densità di energia che tiene conto dei salti di u e dell'orientazione della normale n alle linee di dislocazione individuate da Su .

Prima di enunciare il risultato di Γ -convergenza, mostriamo rapidamente che il giusto fattore di riscalamento per il funzionale E_ε è ancora $1/|\log \varepsilon|$: possiamo ripetere lo stesso argomento del caso unidimensionale, considerando ad esempio una transizione u_δ tra due interi ξ_1 e ξ_2 all'interno di un δ -intorno di una qualche linea di dislocazione L . Scegliamo il quadrato unitario $Q = (-1/2, 1/2)^2$ come dominio di riferimento per il toro T^2 e assumiamo per semplicità che u_δ non dipenda dalla variabile x_2 e che L sia il segmento di lunghezza unitaria $\{0\} \times I \subset Q$, con $I = (-1/2, 1/2)$.



Allora, ponendo

$$A_\delta = (-1/2, -\delta/2) \times I, \quad B_\delta = (\delta/2, 1/2) \times I, \quad C_\delta = [-\delta/2, \delta/2] \times I,$$

e utilizzando l'equivalenza del termine non-locale di E_ε con la seminorma $H^{\frac{1}{2}}(T^2)$, otteniamo approssimativamente

$$\begin{aligned} E_\varepsilon(u_\delta) &\sim C[u_\delta]_{H^{\frac{1}{2}}(T^2)}^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{C_\delta} \text{dist}^2(u_\delta, \mathbb{Z}) dx \sim \\ &\sim C\left([u_\delta]_{H^{\frac{1}{2}}(Q)}^2 + \frac{\delta}{\varepsilon}\right) \sim C\left(\int_{A_\delta} \int_{B_\delta} \frac{dx dy}{|x-y|^3} + 1 + \frac{\delta}{\varepsilon}\right). \end{aligned}$$

Inoltre

$$\int_{A_\delta} \int_{B_\delta} \frac{dx dy}{|x-y|^3} \stackrel{[z=x-y]}{=} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{|z|^3} \left(\int_{A_\delta \cap (B_\delta - z)} dx \right) dz = \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{|z|^3} |A_\delta \cap (B_\delta - z)| dz.$$

L'insieme $A_\delta \cap (B_\delta - z)$ è non vuoto se e solo se $z = (z_1, z_2) \in (\delta, 1) \times (-1, 1)$ ed è un rettangolo di area proporzionale a z_1 . Pertanto

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{|z|^3} |A_\delta \cap (B_\delta - z)| dz &\sim \int_\delta^1 z_1 \int_{-1}^1 \frac{dz_2}{|z|^3} dz_1 \sim \\ &\sim \int_\delta^1 z_1 \int_{\mathbb{R}} \frac{dz_2}{|z|^3} dz_1 - \int_\delta^1 z_1 \int_{(-1,1)^c} \frac{dz_2}{|z|^3} dz_1, \end{aligned}$$

dove il simbolo c nell'espressione precedente indica chiaramente l'insieme complementare. Dal momento che la funzione $|z|^{-3}$ è omogenea di grado -3 , risulta

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz_2}{|z|^3} = \frac{C}{z_1^2},$$

da cui segue che

$$\int_\delta^1 z_1 \int_{\mathbb{R}} \frac{dz_2}{|z|^3} dz_1 = C \int_\delta^1 \frac{dz_1}{z_1} = C |\log \delta|.$$

D'altra parte $|z|^{-3} \leq |z_2|^{-3}$ e quindi

$$\int_\delta^1 z_1 \int_{(-1,1)^c} \frac{dz_2}{|z|^3} dz_1 \geq 2 \int_\delta^1 z_1 \int_1^{+\infty} \frac{dz_2}{z_2^3} dz_1 \geq C.$$

Concludiamo che

$$E_\varepsilon(u_\delta) \sim C \left(|\log \delta| + C + \frac{\delta}{\varepsilon} \right), \quad (3.9)$$

da cui, ottimizzando in δ , si ha

$$-\frac{1}{\delta} + \frac{1}{\varepsilon} = 0 \quad \iff \quad \delta \sim \varepsilon.$$

Allora la (3.9) da un lato suggerisce il riscaldamento $1/|\log \varepsilon|$ per il funzionale E_ε , dall'altro conferma che, per $\varepsilon \rightarrow 0$, le transizioni u_ε minimizzanti possiedono dei core di spessore proporzionale ad ε (e quindi alla distanza interplanare d). Vale dunque il seguente teorema.

Teorema 3.3 *Sia E_ε l'energia definita in (3.7). Allora Il funzionale*

$$I_\varepsilon(u) = \begin{cases} \frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(u) & \text{se } u \in H^{\frac{1}{2}}(T^2) \\ +\infty & \text{altrimenti in } L^1(T^2), \end{cases}$$

$\Gamma(L^1)$ -converge a

$$I(u) = \begin{cases} \int_{Su} \gamma(n) |[u]| d\mathcal{H}^1 & \text{se } u \in BV(T^2, \mathbb{Z}) \\ +\infty & \text{altrimenti in } L^1(T^2), \end{cases}$$

dove $n \in S^1$ è la normale definita su Su , $[u]$ è il salto di u attraverso Su nella direzione n e dove la tensione lineare anisotropa $\gamma(n)$ dipende soltanto dal nucleo J :

$$\gamma(n) := 2 \lim_{\delta \rightarrow 0} \delta^2 \int_{x \cdot n = \delta} J(x) d\mathcal{H}^1 = 2 \int_{x \cdot n = 1} J_0(x) d\mathcal{H}^1. \quad (3.10)$$

Più precisamente si ha:

i) **Compattezza:** per ogni successione $\{u_\varepsilon\} \subseteq L^1(T^2)$ tale che

$$\sup_{\varepsilon > 0} I_\varepsilon(u_\varepsilon) < +\infty$$

esiste una successione $a_\varepsilon \in \mathbb{Z}$ tale che $\{u_\varepsilon - a_\varepsilon\}$ è limitata in $L^2(T^2)$ e pre-compatta fortemente in $L^1(T^2)$; ogni punto limite di ogni sotto-successione da essa estratta appartiene allo spazio $BV(T^2, \mathbb{Z})$.

ii) **Γ -liminf:** per ogni successione $\{u_\varepsilon\} \subseteq L^1(T^2)$ e ogni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z})$ tale che $u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u$ in $L^1(T^2)$ risulta

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} I_\varepsilon(u_\varepsilon) \geq I(u).$$

iii) **Γ -limsup:** per ogni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z})$ esiste una successione $\{u_\varepsilon\} \subseteq L^1(T^2)$ tale che $u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u$ in $L^1(T^2)$ e risulta

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} I_\varepsilon(u_\varepsilon) = I(u).$$

Il punto (i) del Teorema 3.3 si basa essenzialmente su un argomento di troncatura e su una stima a priori. Data una qualunque funzione $u \in L^1(T^2)$ definiamo per ogni $k \in \mathbb{Z}$ la sua troncata tra i livelli k e $k + 1$:

$$T_k u := \min \left\{ \max\{u, k\}, k + 1 \right\}. \quad (3.11)$$

Allora risulta

$$|u(x) - u(y)|^2 \geq \sum_{k \in \mathbb{Z}} |T_k u(x) - T_k u(y)|^2$$

e

$$\int_{T^2} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}) dx = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_{T^2} \text{dist}^2(T_k u(x), \{k, k + 1\}) dx,$$

da cui segue che

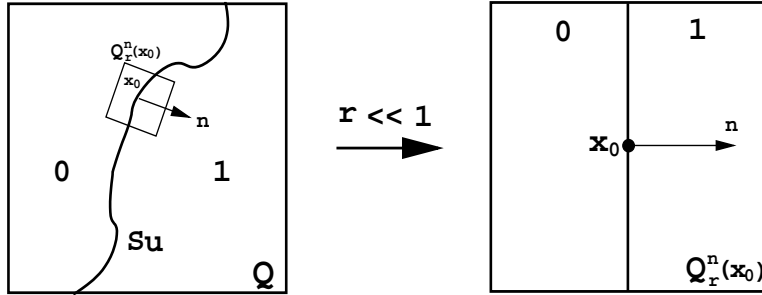
$$I_\varepsilon(u) \geq \sum_{k \in \mathbb{Z}} I_\varepsilon(T_k u).$$

Se $\{u_\varepsilon\}$ è una successione tale $\sup_{\varepsilon > 0} I_\varepsilon(u_\varepsilon) < +\infty$, allora risulta anche $\sup_{\varepsilon > 0} I_\varepsilon(T_k u_\varepsilon) < +\infty$ per ogni $k \in \mathbb{Z}$ e pertanto la compattezza di ogni troncata può essere dimostrata applicando una versione bi-dimensionale dell'analogo risultato contenuto nel Teorema 3.2 di Alberti, Bouchitté e Seppecher, relativo ai potenziali a doppio pozzo. Tuttavia la compattezza delle troncate non è sufficiente a garantire la convergenza di $\{u_\varepsilon\}$ e pertanto buona parte del lavoro di Garroni e Müller consiste nel dimostrare una limitazione L^2 su tutte le successioni ad energia finita. Questo risultato, come vedremo nel capitolo successivo, sarà indispensabile per dimostrare un analogo teorema di compattezza per il funzionale vettoriale F_ε delle dislocazioni.

La disuguaglianza del Γ -lim inf per il funzionale I_ε (punto (ii) del Teorema 3.3) si basa invece sul cosiddetto metodo di blow-up, descritto qui di seguito. Osserviamo innanzitutto che il funzionale I_ε è invariante per traslazioni intere, i.e.

$$I_\varepsilon(u + z) = I_\varepsilon(u), \quad \forall z \in \mathbb{Z}. \quad (3.12)$$

Scegliamo il quadrato $Q = (-1/2, 1/2)^2$ come dominio fondamentale del toro T^2 e denotiamo con $Q_r^n(x_0)$ il quadrato di lato r , centrato in x_0 e con un lato parallelo al versore $n \in S^1$. Sia dunque $\{u_\varepsilon\}$ una successione tale che $u_\varepsilon \rightarrow u$ in $L^1(T^2)$ con $u \in BV(T^2, \mathbb{Z})$. Per ogni $k \in \mathbb{Z}$ la troncata $T_k u_\varepsilon$ converge a $u_k := T_k u \in BV(Q, \{k, k + 1\})$ e quindi, vista la (3.12), non è restrittivo supporre che $u_\varepsilon \in L^1(Q, [0, 1])$ e $u \in BV(Q, \{0, 1\})$. Se guardiamo un piccolo intorno di $x_0 \in Su$, ad esempio $Q_r^n(x_0)$ con $r \ll 1$, si ha che u è vicina alla funzione caratteristica $u_{x_0}^n(x) := \chi_{\{(x-x_0) \cdot n > 0\}}$ (detta anche funzione *step*), dove $n = n(x_0)$ è la normale a Su in x_0 .



L'idea è che per ottenere la disuguaglianza del Γ -lim inf è sufficiente stimare l'energia di interazione elastica associata a piccole perturbazioni delle funzioni step. A tale scopo, per ogni coppia di insiemi aperti $A, B \subseteq Q$, definiamo la seguente misura su $Q \times Q$:

$$\mu_\varepsilon(A \times B) := \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_A \int_B J(x-y) |u_\varepsilon(x) - u_\varepsilon(y)|^2 dx dy. \quad (3.13)$$

Ponendo $v_\varepsilon(x) = u_\varepsilon(rx + x_0)$ e ricordando che J è approssimato dal nucleo omogeneo J_0 (proprietà (iv) in (3.8)), risulta

$$\begin{aligned} \mu_\varepsilon(Q_r^n(x_0) \times Q_r^n(x_0)) &= \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{Q_r^n(x_0)} \int_{Q_r^n(x_0)} J(x-y) |u_\varepsilon(x) - u_\varepsilon(y)|^2 dx dy = \\ &\stackrel{[Q_r^n(x_0) \rightarrow Q_1^n(0) =: Q^n]}{=} \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{Q^n} \int_{Q^n} r^4 J(r(x-y)) |v_\varepsilon(x) - v_\varepsilon(y)|^2 dx dy = \\ &= \frac{r}{|\log \varepsilon|} \int_{Q^n} \int_{Q^n} J_0(x-y) |v_\varepsilon(x) - v_\varepsilon(y)|^2 dx dy + o(r). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Notiamo che la successione riscalata $\{v_\varepsilon\}$ è per definizione vicina alle fasi $\{0, 1\}$ e approssima su Q^n la funzione step $u_0^n(x) = \chi_{\{x \cdot n > 0\}}$. Vale dunque il seguente risultato.

Lemma 3.1 *Siano $\delta \in (0, \frac{1}{2})$ e $\alpha \in (\frac{1}{2}, 1)$. Esistono due costanti positive δ_0 e ε_0 tali che per ogni $n \in S^1$, per ogni $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$ e per ogni $u \in L^1(Q^n; [0, 1])$ che soddisfa*

$$\int_{Q^n} |u - u_0^n| dx \leq \delta_0 \quad e \quad \int_Q \text{dist}^2(u, \mathbb{Z}) dx \leq \varepsilon^\alpha \quad (3.15)$$

risulta

$$\int_{Q^n} \int_{Q^n} J_0(x-y) |u(x) - u(y)|^2 dx dy \geq \gamma(n) \alpha (1 - \delta)^2 |\log \varepsilon|,$$

dove

$$\gamma(n) := 2 \int_{x \cdot n = 1} J_0(x) d\mathcal{H}^1(x).$$

È interessante notare che la densità $\gamma(n)$ non dipende da J , ma solo dalla sua parte omogenea J_0 . Deduciamo quindi che le condizioni periodiche assunte sul bordo non influenzano affatto il problema e che il Teorema 3.3 continua a valere per un qualunque nucleo equivalente alla seminorma $H^{\frac{1}{2}}$ che approssima, nel senso della (3.8), una funzione omogenea di grado -3 .

La dimostrazione del lemma qui sopra enunciato è piuttosto sofisticata, dal momento che l'ipotesi (3.15) costituisce solamente un vincolo sulla misura dell'insieme su cui u si discosta dalla funzione step u_0^n . Se per ogni $\delta \in (0, 1/2)$ poniamo

$$A_\delta = \left\{ x \in Q^n \quad : \quad u(x) \leq \frac{\delta}{2} \right\} \quad \text{e} \quad B_\delta = \left\{ x \in Q^n \quad : \quad u(x) \geq 1 - \frac{\delta}{2} \right\},$$

si ha

$$\begin{aligned} \int_{Q^n} \int_{Q^n} J_0(x-y) |u(x) - u(y)|^2 dx dy &\geq 2(1-\delta)^2 \int_{A_\delta} \int_{B_\delta} J_0(x-y) dx dy \geq \\ &\stackrel{[z=x-y]}{\geq} 2(1-\delta)^2 \int_{\mathbb{R}^2} J_0(z) |A_\delta \cap (B_\delta - z)| dz. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Poiché u non può assumere valori al di fuori dell'intervallo $[0, 1]$, la (3.15) implica che la misura dell'insieme $E = Q^n \setminus (A_\delta \cup B_\delta)$ è piccola, dell'ordine di ε^α , una proprietà indispensabile per confrontare la funzione caratteristica χ_{B_δ} con u_0^n ed ottenere un controllo dal basso per $|A_\delta \cap (B_\delta - z)|$ in funzione di $|E|$. Qui ci limitiamo a descrivere il semplice caso in cui u dipende solo dalla variabile parallela alla normale n ed E è una striscia di spessore ε^α . Per approfondimenti rinviamo il lettore al lavoro di Garroni e Müller [22]. Tramite una rotazione del sistema di coordinate possiamo ricondurci al caso $n = \mathbf{e}_1$. Allora, sostituendo la funzione $|z|^{-3}$ con il nucleo J_0 nel conto che ci ha portato alla stima (3.9), otteniamo per ε sufficientemente piccolo

$$\int_{\mathbb{R}^2} J_0(z) |A_\delta \cap (B_\delta - z)| dz \geq \int_{\varepsilon^\alpha}^1 z_1 \int_{\mathbb{R}} J_0(z) dz_2 dz_1. \quad (3.17)$$

Ma J_0 è una funzione omogenea di grado -3 e pertanto

$$\int_{\mathbb{R}} J_0(z) dz_2 = \frac{C_0}{z_1^2},$$

da cui segue che

$$C_0 = \lim_{z_1 \rightarrow 1} \int_{\mathbb{R}} J_0(z_1, z_2) dz_2 = \int_{\mathbb{R}} J_0(1, z_2) dz_2 = \int_{z \cdot \mathbf{e}_1 = 1} J_0(z) dz =: \frac{\gamma(\mathbf{e}_1)}{2}.$$

Infine si ha

$$\int_{\varepsilon^\alpha}^1 z_1 \int_{\mathbb{R}} J_0(z) dz_2 dz_1 = \frac{\gamma(\mathbf{e}_1)}{2} \int_{\varepsilon^\alpha}^1 \frac{dz_1}{z_1} = \frac{\gamma(\mathbf{e}_1)}{2} \alpha |\log \varepsilon|,$$

che insieme a (3.16) e (3.17) implica

$$\int_{Q^n} \int_{Q^n} J_0(x-y) |u(x) - u(y)|^2 dx dy \geq \gamma(\mathbf{e}_1) \alpha (1-\delta)^2 |\log \varepsilon|.$$

A questo punto torniamo alla misura μ_ε definita in (3.13). Si può dimostrare che essa converge debolmente, per $\varepsilon \rightarrow 0$ e a meno di sottosuccessioni, ad una misura μ concentrata sulla diagonale $\Delta = \{(x, x) : x \in Q\}$. Quindi se definiamo $\lambda(A) = \mu(A \times A)$ si può far vedere che essa è concentrata su Su . Inoltre, applicando il Lemma 3.16, dalla (3.14) otteniamo che per $\delta \rightarrow 0$, $\alpha \rightarrow 1$ e per \mathcal{H}^1 -quasi ogni $x_0 \in Su$ risulta

$$\frac{d\lambda}{d\mathcal{H}^1} = \liminf_{r \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mu_\varepsilon(Q_r^n(x_0) \times Q_r^n(x_0))}{r} \geq \gamma(n). \quad (3.18)$$

Da questo, notando che $[u] = 1$ \mathcal{H}^1 -q.o. su Su , segue che

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} I_\varepsilon(u_\varepsilon) \geq \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} \mu_\varepsilon(Q \times Q) \geq \lambda(Q) \geq \int_{Su \cap Q} \gamma(n) |[u]| d\mathcal{H}^1.$$

Nel caso generale possiamo applicare questo argomento a tutte le troncate di u_ε . Poiché risulta $Su = \cup_{k \in \mathbb{Z}} Su_k$ e $[u] = \sum_{k \in \mathbb{Z}} |[u_k]|$, si conclude che

$$\begin{aligned} \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} I_\varepsilon(u_\varepsilon) &\geq \sum_{k \in \mathbb{Z}} \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} I_\varepsilon(T_k u_\varepsilon) \geq \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_{Su_k \cap Q} \gamma(n) |[u_k]| d\mathcal{H}^1 = \\ &= \int_{Su \cap Q} \gamma(n) |[u]| d\mathcal{H}^1 =: I(u). \end{aligned}$$

Concludiamo questa sezione con un accenno alla dimostrazione della disuguaglianza del Γ -lim sup (punto (iii) del Teorema 3.3). Tramite un argomento standard di densità ci si riduce a considerare funzioni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z}) \cap L^\infty(T^2)$ tali che Su è poligonale con un numero finito di lati. Inoltre, il fatto che la troncatura sugli interi non aumenta il valore dell'energia, suggerisce che una buona classe densa con cui dimostrare la stima dall'alto è quella delle u tali che $[u] = 1$ \mathcal{H}^1 -quasi ovunque su Su . Si sceglie quindi una qualunque funzione non negativa $\varphi \in C_0^\infty(B_1(0))$ tale che $\int_{B_1(0)} \varphi(x) dx = 1$ e si costruisce $\{u_\varepsilon\}$ semplicemente *mollificando* u , i.e.

$$u_\varepsilon = \varphi_\varepsilon * u, \quad \text{con} \quad \varphi_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-2} \varphi(x/\varepsilon),$$

cosicché il profilo della transizione è del tutto arbitrario. Per definizione u_ε coincide con u fuori da un ε -intorno di Su (che indichiamo con $\varepsilon-Su$) e pertanto il potenziale $\text{dist}^2(u_\varepsilon, \mathbb{Z})$ è non nullo solo in corrispondenza del core della transizione stessa. Inoltre risulta

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon|\log \varepsilon|} \int_{T^2} \text{dist}^2(u_\varepsilon(x), \mathbb{Z}) dx &= \frac{1}{\varepsilon|\log \varepsilon|} \int_{\varepsilon-Su} \text{dist}^2(u_\varepsilon(x), \mathbb{Z}) dx \leq \\ &\leq \frac{C}{\varepsilon|\log \varepsilon|} |\varepsilon-Su| \leq \frac{C}{|\log \varepsilon|} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 . \end{aligned}$$

Infine si può mostrare con un conto esplicito che la disuguaglianza (3.18) è ottimale, ovvero che per \mathcal{H}^1 -q.o. $x_0 \in Su$ si ha

$$\liminf_{r \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mu_\varepsilon(B_r(x_0) \times B_r(x_0))}{\mathcal{H}^1(B_r(x_0))} \leq \gamma(n),$$

dove μ_ε è la misura definita in (3.13). Da questo segue che la successione $\{u_\varepsilon\}$ è ottimale. Quindi, come nel caso del funzionale di Cahn-Hilliard non-locale, questo argomento prova che il riscaldamento logaritmico del funzionale scalare delle dislocazioni elimina il problema del profilo ottimale: l'unica caratteristica davvero importante affinché $\{u_\varepsilon\}$ sia una successione ottimale per il Γ -limite, è proprio lo spessore ε del suo core. Fenomeni analoghi sono stati osservati anche in altri modelli di transizione di fase, ad esempio per il funzionale di Ginzburg-Landau ([1], [11]).

Capitolo 4

Il Γ -limite del funzionale delle dislocazioni

In questo capitolo daremo un risultato di Γ -convergenza che descriverà il comportamento asintotico del funzionale vettoriale (3.1) delle dislocazioni planari di un cristallo, introdotto nel Capitolo 2, che riscriviamo qui di seguito introducendo il fattore di riscaldamento logaritmico:

$$F_\varepsilon(u) = \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{T^2} \int_{T^2} \left(u(x) - u(y) \right)^T \mathbb{J}(x - y) \left(u(x) - u(y) \right) dx dy + \quad (4.1)$$
$$+ \frac{1}{\varepsilon |\log \varepsilon|} \int_{T^2} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}^N) dx.$$

Si tratta di un risultato ottenuto attraverso un approccio astratto, basato su un argomento di compattezza e di rappresentazione, che ci permetterà di esprimere il $\Gamma(L^1)$ -limite F di F_ε , a meno di sottosuccessioni in ε , come l'integrale di una densità di energia $\varphi : \mathbb{Z}^N \times S^1 \rightarrow [0, +\infty)$, concentrata sulle linee di dislocazione associate agli insiemi singolari Su dei campi di fase $u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$:

$$F(u) = \int_{Su} \varphi([u], n_u) d\mathcal{H}^1.$$

In analogia col Γ -limite della versione scalare di F_ε (Teorema 3.3), la funzione di densità $\varphi(s, n)$ misura in ogni punto $x_0 \in Su$ le interazioni elastiche anisotrope del cristallo, in termini della direzione $n = n_u(x_0)$ normale ad Su e del salto $s = [u](x_0)$ in corrispondenza delle dislocazioni stesse.

Prima di enunciare il nostro risultato di Γ -convergenza introduciamo le seguenti notazioni per semplificare l'esposizione

$$\mathbb{J}_\varepsilon[u](x, y) := \frac{1}{|\log \varepsilon|} \left(u(x) - u(y) \right)^T \mathbb{J}(x - y) \left(u(x) - u(y) \right),$$

$$\mathbb{W}_\varepsilon[u](x) := \frac{1}{\varepsilon |\log \varepsilon|} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}^N)$$

e notiamo che il funzionale F_ε è invariante rispetto alle traslazioni intere, i.e.

$$F_\varepsilon(u + c) = F_\varepsilon(u), \quad \forall c \in \mathbb{Z}^N.$$

Ricordiamo inoltre che il nucleo \mathbb{J} definisce una forma quadratica equivalente al quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}(T^2)$. In particolare $\mathbb{J}(x) = \mathcal{O}(|x|^{-3})$ per $|x| \rightarrow 0$ ed esistono due costanti $C_1, C_2 > 0$ tali che

$$\frac{C_1}{|x|^3} |v|^2 \leq v^T \mathbb{J}(x) v \leq \frac{C_2}{|x|^3} |v|^2, \quad \forall v \in \mathbb{R}^N \text{ e } \forall x \in T^2. \quad (4.2)$$

Infine denotiamo con $\mathcal{A}(T^2)$ e $\mathcal{B}(T^2)$ rispettivamente le classi di tutti gli insiemi aperti e di tutti gli insiemi boreliani di T^2 e definiamo la localizzazione del funzionale F_ε , ponendo per ogni $(u, A) \in L^1(T^2) \times \mathcal{A}(T^2)$

$$F_\varepsilon(u, A) := \begin{cases} \int_{A \times A} \mathbb{J}_\varepsilon[u](x, y) dx dy + \int_A \mathbb{W}_\varepsilon[u](x) dx & \text{se } u \in H^{\frac{1}{2}}(T^2), \\ +\infty & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (4.3)$$

Vale dunque il seguente teorema.

Teorema 4.1 *Per ogni successione infinitesima di numeri reali $\{\varepsilon_n\}$ esiste una sotto-successione, denotata ancora con $\{\varepsilon_n\}$, tale che il funzionale F_{ε_n} definito in (4.3) $\Gamma(L^1)$ -converge per $n \rightarrow \infty$. Più precisamente sussistono le seguenti proprietà:*

*i) **Compattezza:** per ogni successione $\{u_n\} \subseteq L^1(T^2)$ tale che*

$$\sup_{n \in \mathbb{N}} F_{\varepsilon_n}(u_n, T^2) < +\infty$$

esiste una successione $\{a_n\} \subset \mathbb{Z}^N$ tale che $\{u_n - a_n\}$ è limitata in $L^2(T^2)$ e pre-compatta fortemente in $L^1(T^2)$; ogni punto limite di ogni sotto-successione da essa estratta appartiene allo spazio $BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$.

*ii) **Γ -convergenza:** esiste una funzione di densità $\varphi : \mathbb{Z}^N \times S^1 \rightarrow [0, +\infty)$ tale che, per $n \rightarrow \infty$, il $\Gamma(L^1)$ -limite F del funzionale F_{ε_n} esiste per ogni $(u, B) \in L^1(T^2) \times \mathcal{B}(T^2)$ e si scrive come*

$$F(u, B) = \begin{cases} \int_{S_u \cap B} \varphi([u], n_u) d\mathcal{H}^1 & \text{se } u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N), \\ +\infty & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (4.4)$$

In particolare, per ogni $s \in \mathbb{Z}^N$ ed ogni $n \in S^1$, risulta

$$\varphi(s, n) = F(u_s^n, Q^n), \quad (4.5)$$

dove Q^n è il quadrato unitario centrato nell'origine e con un lato parallelo ad n e dove $u_s^n(x) = s\chi_{\{x \cdot n > 0\}}$.

Osserviamo che la condizione (4.2) sul nucleo \mathbb{J} è l'unica ipotesi che useremo per dimostrare il risultato appena enunciato, che pertanto si presta a studiare anche casi differenti, come ad esempio problemi con diverse condizioni al bordo. Lo stesso discorso vale per il potenziale $\text{dist}^2(\cdot, \mathbb{Z}^N)$, che può essere sostituito con una qualunque funzione non negativa che si annulla esattamente su \mathbb{Z}^N .

Abbiamo suddiviso la dimostrazione del Teorema 4.1 in tre parti. Più precisamente la Sezione 4.1 è dedicata al risultato di compattezza, che si basa sostanzialmente sull'analogo risultato (Teorema 3.3) dimostrato da Garroni e Müller nel caso scalare. Nella Sezione 4.2 otterremo invece la cosiddetta *stima fondamentale* per il funzionale F_ε , con cui proveremo l'esistenza, a meno di sottosuccessioni, del suo Γ -limite rispetto alla convergenza forte L^1 . Infine nella Sezione 4.3 proveremo, tramite l'applicazione del Teorema 1.2 per i funzionali definiti sulle partizioni di Caccioppoli, che il funzionale Γ -limite di F_ε ammette la rappresentazione integrale (4.4).

4.1 Compattezza

Questa sezione, come annunciato, è dedicata al risultato di compattezza contenuto nel Teorema 4.1. Notiamo innanzitutto che, per ogni successione $\{u_\varepsilon\} \subset L^1(T^2)$ tale che $\sup_{\varepsilon>0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, T^2) \leq M$ per qualche $M > 0$, risulta

$$\int_{T^2} \text{dist}^2(u_\varepsilon, \mathbb{Z}^N) dx \leq \varepsilon |\log \varepsilon| M$$

e da questo segue che, per $\varepsilon \rightarrow 0$, il funzionale F_ε costringe la successione $\{u_\varepsilon\}$ ad addensarsi sui campi di fase, ovvero ad assumere quasi ovunque valori vicini agli interi. Tuttavia il potenziale $\text{dist}^2(\cdot, \mathbb{Z}^N)$ non è coercivo, a causa della sua struttura periodica, e pertanto per garantire la convergenza di $\{u_\varepsilon\}$ un passo fondamentale è la ricerca di un'opportuna stima a priori. Successivamente si procede con un argomento di troncatura e di slicing e si ottiene, tramite l'applicazione del Teorema 3.2 di Alberti, Bouchitté e Seppecher, che u_ε converge a meno di sotto-successioni e di traslazioni intere ad una funzione $u \in BV(T^2, \mathbb{Z})$. Questa è sostanzialmente la strategia utilizzata da Garroni e Müller per il caso scalare, che possiamo applicare alle singole componenti di $\{u_\varepsilon\}$. Tuttavia in [22] l'argomento di slicing non viene presentato esplicitamente e pertanto riporteremo per completezza la sua dimostrazione. A tale scopo introduciamo alcune notazioni e presentiamo alcuni utili risultati (per i dettagli si veda [5]). Scegliamo il quadrato unitario $Q = (-1/2, 1/2)^2$ come dominio fondamentale del toro T^2 e poniamo $I := (-1/2, 1/2)$. Per ogni $x_1, x_2 \in I$ consideriamo quindi le seguenti sezioni di Q :

$$Q^{x_1} := \{x_1\} \times I \quad \text{e} \quad Q^{x_2} := I \times \{x_2\}.$$

Per ogni funzione $u : Q \rightarrow \mathbb{R}$ denotiamo le sue restrizioni su Q^{x_1} e Q^{x_2} con

$$u^{x_1}(x_2) := u(x_1, x_2) \quad \forall x_2 \in I \quad \text{e} \quad u^{x_2}(x_1) := u(x_1, x_2) \quad \forall x_1 \in I.$$

Diremo inoltre che due successioni $\{u_\varepsilon\}, \{v_\varepsilon\} \subset L^1(Q)$ sono δ -vicine se risulta $\int_Q |u_\varepsilon - v_\varepsilon| dx < \delta$ uniformemente in ε . Vale dunque il seguente criterio di compattezza forte L^1 .

Proposizione 4.1 *Sia data una successione $\{u_\varepsilon\} \subset L^1(Q)$. Per ogni $\delta > 0$ sia $\{u_{\delta, \varepsilon}\} \subset L^1(Q)$ una successione δ -vicina ad $\{u_\varepsilon\}$ tale che*

$$\{u_{\delta, \varepsilon}^{x_1}\} \text{ è pre-compatta in } L^1(Q^{x_1}) \text{ per q.o. } x_1 \in I,$$

$$\{u_{\delta, \varepsilon}^{x_2}\} \text{ è pre-compatta in } L^1(Q^{x_2}) \text{ per q.o. } x_2 \in I.$$

Allora $\{u_\varepsilon\}$ è pre-compatta in $L^1(Q)$.

La proposizione seguente ci permette di caratterizzare una funzione $BV(Q)$ tramite le sue restrizioni.

Proposizione 4.2 *Sia $u \in L^1(Q)$. Allora risulta $u \in BV(Q)$ se e soltanto se*

$$\begin{aligned} u^{x_1} \in BV(Q^{x_1}) \quad \text{per q.o. } x_1 \in I & \quad e \quad \int_I |Du^{x_1}|(Q^{x_1}) dx_1 < \infty, \\ u^{x_2} \in BV(Q^{x_2}) \quad \text{per q.o. } x_2 \in I & \quad e \quad \int_I |Du^{x_2}|(Q^{x_2}) dx_2 < \infty. \end{aligned}$$

Infine il lemma seguente è stato estratto dal lavoro di Garroni e Müller [22] e fornisce una stima a priori L^2 per il funzionale scalare delle dislocazioni.

Lemma 4.1 *Sia $\{u_\varepsilon\} \subset L^1(T^2, \mathbb{R})$. Dati $M > 0$ e $\varepsilon_0 > 0$ esiste una costante $C(M, \varepsilon_0) > 0$ tale che, se $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$, $|\{u_\varepsilon > 0\}| > \frac{1}{2}$, $|\{u_\varepsilon < 1\}| > \frac{1}{2}$ ed inoltre*

$$\frac{1}{|\log \varepsilon|} \left([u_\varepsilon]_{H^{\frac{1}{2}}(T^2)}^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{T^2} \text{dist}^2(u_\varepsilon, \mathbb{Z}) dx \right) \leq M,$$

allora risulta

$$\int_{T^2} |u_\varepsilon|^2 dx \leq C(M, \varepsilon_0).$$

Siamo dunque in grado di provare il risultato di compattezza.

Teorema 4.2 *Per ogni successione $\{u_\varepsilon\} \subseteq L^1(T^2)$ tale che*

$$\sup_{\varepsilon > 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, T^2) < +\infty$$

esiste una successione $\{a_\varepsilon\} \subset \mathbb{Z}^N$ tale che $\{u_\varepsilon - a_\varepsilon\}$ è limitata in $L^2(T^2)$ e pre-compatta fortemente in $L^1(T^2)$. Ogni punto limite di ogni sotto-successione da essa estratta appartiene allo spazio $BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$.

Dimostrazione.

Non è restrittivo assumere che $F_\varepsilon(u_\varepsilon, T^2) \leq M$ uniformemente in ε per qualche $M > 0$. Utilizzando l'equivalenza del termine non locale di F_ε con il quadrato della seminorma $H^{\frac{1}{2}}(T^2)$ ed il fatto che $\text{dist}^2(u_\varepsilon, \mathbb{Z}^N) = \sum_{i=1}^N \text{dist}^2(u_\varepsilon^i, \mathbb{Z})$, si ha

$$M \geq F_\varepsilon(u_\varepsilon, T^2) \geq C \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\log \varepsilon|} F_\varepsilon^{\mathbb{K}}(u_\varepsilon^i), \quad (4.6)$$

dove C è una costante positiva,

$$F_\varepsilon^{\mathbb{K}}(u_\varepsilon^i) := \int_{T^2} \int_{T^2} \mathbb{K}(x-y) |u_\varepsilon^i(x) - u_\varepsilon^i(y)|^2 dx dy + \frac{1}{\varepsilon} \int_{T^2} \text{dist}^2(u_\varepsilon^i(x), \mathbb{Z}) dx \quad (4.7)$$

e dove \mathbb{K} è il nucleo definito in (2.25) che esprime la seminorma $H^{\frac{1}{2}}(T^2)$. Dal momento che F_ε è invariante rispetto alle traslazioni intere, possiamo assumere che ogni componente $\{u_\varepsilon^i\}$ soddisfi le condizioni $|\{u_\varepsilon^i > 0\}| > \frac{1}{2}$ e $|\{u_\varepsilon^i < 1\}| > \frac{1}{2}$, altrimenti sostituiamo $\{u_\varepsilon^i\}$ con la successione $\{u_\varepsilon^i - a_\varepsilon^i\}$, dove

$$a_\varepsilon^i = \max \left\{ a \in \mathbb{Z} \quad : \quad |\{u_\varepsilon^i - a\}| \geq \frac{1}{2} \right\}.$$

Allora, applicando il Lemma 4.1, otteniamo che $\{u_\varepsilon^i\}$ è limitata in $L^2(T^2, \mathbb{R})$ ed esiste $u^i \in L^2(T^2, \mathbb{R})$ tale che, a meno di sotto successioni, $u_\varepsilon^i \rightharpoonup u^i$ in $L^2(T^2, \mathbb{R})$ per ogni $i = 1, \dots, N$. Introduciamo l'operatore di troncatura tra gli interi:

$$T_k u_\varepsilon^i := \min \left\{ \max\{u_\varepsilon^i, k\}, k + 1 \right\}, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, \dots, N.$$

Si ha

$$|u_\varepsilon^i(x) - u_\varepsilon^i(y)|^2 \geq \sum_{k \in \mathbb{Z}} |T_k u_\varepsilon^i(x) - T_k u_\varepsilon^i(y)|^2$$

e

$$\int_{T^2} \text{dist}^2(u_\varepsilon^i(x), \mathbb{Z}) dx = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_{T^2} \text{dist}^2(T_k u_\varepsilon^i(x), \{k, k + 1\}) dx,$$

da cui, vista la (4.7), segue che

$$F_\varepsilon^{\mathbb{K}}(u_\varepsilon^i) \geq \sum_{k \in \mathbb{Z}} F_\varepsilon^{\mathbb{K}}(T_k u_\varepsilon^i). \quad (4.8)$$

Sempre in virtù dell'invarianza di F_ε per traslazioni intere non è restrittivo considerare successioni $\{u_\varepsilon\}$ tali che $0 \leq u_\varepsilon^i \leq 1$ per ogni $i \in \{1, \dots, N\}$. Per semplicità di notazione poniamo $v \equiv v_\varepsilon := u_\varepsilon^i$ e consideriamo la sua estensione armonica $U_v \in H^1(T^2 \times \mathbb{R})$. Si ha

$$F_\varepsilon^{\mathbb{K}}(v) = \int_{T^2 \times \mathbb{R}} |\nabla U_v|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_{T^2} \text{dist}^2(\mathcal{T}U_v, \{0, 1\}) dx,$$

con $\mathcal{T}U_v = v$, dove \mathcal{T} indica l'operatore di traccia su $\{x_3 = 0\}$. Siano $U_v^{x_1}, U_v^{x_2}$ e v^{x_1}, v^{x_2} le rispettive restrizioni di U_v e v sulle sezioni $Q^{x_1} \times \mathbb{R}, Q^{x_2} \times \mathbb{R}, Q^{x_1}$ e Q^{x_2} . Allora risulta (si veda ad esempio [5]):

$$U_v^{x_1} \in H^1(Q^{x_1} \times \mathbb{R}), \quad \nabla U_v^{x_1} = (\partial_{x_2} U_v^{x_1}, \partial_{x_3} U_v^{x_1}), \quad v^{x_1} = \mathcal{T}U_v^{x_1}, \quad \text{per q.o. } x_1 \in I,$$

$$U_v^{x_2} \in H^1(Q^{x_2} \times \mathbb{R}), \quad \nabla U_v^{x_2} = (\partial_{x_1} U_v^{x_2}, \partial_{x_3} U_v^{x_2}), \quad v^{x_2} = \mathcal{T}U_v^{x_2}, \quad \text{per q.o. } x_2 \in I.$$

Dal momento che $|\nabla U_v|^2 \geq |\nabla U_v^{x_1}|^2$, utilizzando il teorema di Fubini, otteniamo

$$F_\varepsilon^{\mathbb{K}}(v) \geq \int_I \left(\int_{Q^{x_1} \times \mathbb{R}} |\nabla U_v^{x_1}|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{Q^{x_1}} \text{dist}^2(\mathcal{T}U_v^{x_1}, \{0, 1\}) \right) dx \geq \quad (4.9)$$

$$\geq C \int_I \left(\int_{Q^{x_1}} \int_{Q^{x_1}} \frac{|v^{x_1}(x_2) - v^{x_1}(y_2)|^2}{|x_2 - y_2|^2} dx_2 dy_2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{Q^{x_1}} \text{dist}^2(v^{x_1}(x_2), \{0, 1\}) dx_2 \right) dx_1,$$

dove quest'ultima disuguaglianza segue dal fatto che

$$\begin{aligned} \int_{Q^{x_1} \times \mathbb{R}} |\nabla U_v^{x_1}|^2 dx_2 dx_3 &\geq \min \left\{ \int_{Q^{x_1} \times \mathbb{R}} |\nabla U|^2 dx_2 dx_3 \quad : \quad U|_{\{x_3=0\}} = v^{x_1} \right\} = \\ &= \int_{Q^{x_1}} \int_{Q^{x_1}} \mathbb{k}(x_2 - y_2) |v^{x_1}(x_2) - v^{x_1}(y_2)|^2 dx_2 dy_2, \end{aligned}$$

in cui il nucleo \mathbb{k} , che esprime la seminorma unidimensionale $H^{\frac{1}{2}}(Q^{x_1})$, è tale che $\mathbb{k}(x) \geq C|x|^{-2}$ per qualche costante $C > 0$.

Notiamo che il termine tra parentesi tonde qui sopra è esattamente il funzionale di Cahn-Hilliard non locale E_ε definito in (3.4), valutato sulla restrizione v^{x_1} , sulla sezione Q^{x_1} e corrispondente alla scelta $W(\cdot) = \text{dist}^2(\cdot, \{0, 1\})$ del potenziale a doppio pozzo. Allora, ragionando in maniera analoga per v^{x_2} , si ha

$$F_\varepsilon^{\mathbb{K}}(v) \geq C \int_I E_\varepsilon(v^{x_1}, Q^{x_1}) dx_1 \quad \text{e} \quad F_\varepsilon^{\mathbb{K}}(v) \geq C \int_I E_\varepsilon(v^{x_2}, Q^{x_2}) dx_2. \quad (4.10)$$

Ricordando che $v \equiv v_\varepsilon$, da (4.6)-(4.10) si ottiene quindi

$$\int_I \frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(v_\varepsilon^{x_1}, Q^{x_1}) dx_1 \leq C, \quad (4.11)$$

uniformemente in ε e per qualche $C > 0$. Per ogni $\delta > 0$ definiamo la successione $\{v_{\delta, \varepsilon}\}$ ponendo

$$v_{\delta, \varepsilon}^{x_1} := \begin{cases} v_\varepsilon^{x_1} & \text{se } \frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(v_\varepsilon^{x_1}, Q^{x_1}) \leq \frac{C}{\delta} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad \text{per q.o. } x_1 \in I. \quad (4.12)$$

Notiamo che $v_{\delta, \varepsilon}^{x_1}$ coincide con $v_\varepsilon^{x_1}$ a meno di un insieme di misura minore di δ . Infatti, se $E = \{x_1 \in I : E_\varepsilon(v_\varepsilon^{x_1}, Q^{x_1})/|\log \varepsilon| > C/\delta\}$, risulta

$$|E| \frac{C}{\delta} = \int_E \frac{C}{\delta} dx_1 < \int_E \frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(v_\varepsilon^{x_1}, Q^{x_1}) \leq C \implies |E| < \delta.$$

Allora, ricordando che $v_\varepsilon \in [0, 1]$ e utilizzando il teorema di Fubini, otteniamo che

$$\|v_{\delta, \varepsilon} - v_\varepsilon\|_{L^1(T^2)} = \int_I \int_{Q^{x_1}} |v_{\delta, \varepsilon}^{x_1} - v_\varepsilon^{x_1}| dx_2 dx_1 = \int_E \int_{Q^{x_1}} |v_\varepsilon^{x_1}| dx_2 dx_1 \leq |E| < \delta,$$

ovvero che $\{v_{\delta, \varepsilon}\}$ è δ -vicina a $\{v_\varepsilon\}$ per ogni $\delta > 0$. D'altra parte, per ogni $\varepsilon > 0$ e per quasi ogni $x_1 \in I$, si ha

$$\frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(v_{\delta, \varepsilon}^{x_1}, Q^{x_1}) = \frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(v_\varepsilon^{x_1}, Q^{x_1}) \chi_{I \setminus E} \leq \frac{C}{\delta}.$$

Pertanto, dal Teorema 3.2 di Alberti, Bouchitté e Seppecher, segue che $\{v_{\delta,\varepsilon}^{x_1}\}$ è pre-compatta fortemente in $L^1(Q^{x_1})$ per ogni $\delta > 0$ e per quasi ogni $x_1 \in I$. Analogamente si definisce $\{v_{\delta,\varepsilon}^{x_2}\}$ e si ottiene che essa è pre-compatta fortemente in $L^1(Q^{x_2})$ per ogni $\delta > 0$ e per quasi ogni $x_2 \in I$. Dalla Proposizione 4.1 concludiamo che $\{v_\varepsilon\}$ è pre-compatta fortemente in $L^1(T^2)$.

Sia dunque v il limite di $\{v_\varepsilon\}$ a meno di sottosuccessioni in ε . Per quasi ogni $x_1 \in I$ si ha $v_\varepsilon^{x_1} \rightarrow v^{x_1}$ in $L^1(Q^{x_1})$ ed inoltre, sempre per il Teorema 3.2, risulta $v^{x_1} \in BV(Q^{x_1}, \{0, 1\})$ e

$$\begin{aligned} \int_I |Dv^{x_1}|(Q^{x_1}) dx_1 &= \int_I \mathcal{H}^0(Sv^{x_1}) dx_1 \leq C \int_I \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(v_\varepsilon^{x_1}, Q^{x_1}) dx_1 \leq \\ &\leq C \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_I \frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(v_\varepsilon^{x_1}, Q^{x_1}) dx_1 \leq C, \end{aligned}$$

dove la penultima disuguaglianza segue dal lemma di Fatou. Analogamente, per quasi ogni $x_2 \in I$, risulta $v_\varepsilon^{x_2} \rightarrow v^{x_2}$ in $L^1(Q^{x_2})$ con

$$v^{x_2} \in BV(Q^{x_2}, \{0, 1\}) \quad \text{e} \quad \int_I |Dv^{x_2}|(Q^{x_2}) dx_2 \leq C.$$

Dalla Proposizione 4.2 concludiamo che $v \in BV(T^2, \{0, 1\})$. Abbiamo quindi provato che $T_k u_\varepsilon^i \rightarrow u_k^i$ in $L^1(T^2, \mathbb{R})$ con $u_k^i \in BV(T^2, \{k, k+1\})$ per ogni $i = 1, \dots, N$ e ogni $k \in \mathbb{Z}$. Allora, ponendo per ogni $M \in \mathbb{N}$

$$T^M u_\varepsilon^i := \min \left\{ M, \max \{ u_\varepsilon^i, -M \} \right\},$$

si ha che $T^M u_\varepsilon^i \rightarrow u_M^i$ in $L^1(T^2, \mathbb{R})$ con $u_M^i \in BV(T^2, \mathbb{Z})$ e $i \in \{1, \dots, N\}$. D'altra parte $\{u_\varepsilon^i\}$ è limitata in $L^2(T^2, \mathbb{R})$ e converge debolmente ad u^i . Quindi, utilizzando la semicontinuità della norma $L^1(T^2, \mathbb{R})$ ed il fatto che $|u_\varepsilon^i| \leq |u_\varepsilon^i|^2/M$ sull'insieme $\{u_\varepsilon^i > M\}$, otteniamo

$$\begin{aligned} \|u_M^i - u^i\|_{L^1(T^2, \mathbb{R})} &\leq \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} \|T^M u_\varepsilon^i - u_\varepsilon^i\|_{L^1(T^2, \mathbb{R})} \leq \\ &\leq 2 \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\{|u_\varepsilon^i| > M\}} |u_\varepsilon^i| \leq \frac{2}{M} \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{T^2} |u_\varepsilon^i|^2 \leq \frac{C}{M}, \end{aligned}$$

da cui, ponendo $u_\varepsilon^i - u^i = (u_\varepsilon^i - T^M u_\varepsilon^i) + (T^M u_\varepsilon^i - u_M^i) + (u_M^i - u^i)$, segue che

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \|u_\varepsilon^i - u^i\|_{L^1(T^2, \mathbb{R})} \leq \frac{2C}{M}.$$

Dal momento che M è arbitrario concludiamo che $u_\varepsilon^i \rightarrow u^i$ fortemente in $L^1(T^2, \mathbb{R})$. Infine, per ogni $k \in \mathbb{Z}$ e $i \in \{1, \dots, N\}$, risulta $T_k u^i = u_k^i$, cosicché $u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$. Questo completa la dimostrazione del teorema. \square

4.2 Esistenza: La stima fondamentale

In questa sezione proveremo l'esistenza, a meno di sotto-successioni in ε e per ogni $(u, A) \in L^1(T^2) \times \mathcal{A}(T^2)$, del $\Gamma(L^1)$ -limite del funzionale $F_\varepsilon(u, A)$ definito in (4.3). Consideriamo innanzitutto, per ogni successione infinitesima di numeri reali $\{\varepsilon_n\}$, i due funzionali $\Gamma(L^1)$ -limite inferiore e superiore di F_{ε_n} localizzati sugli insiemi aperti:

$$F'(u, A) := \inf \left\{ \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_{\varepsilon_n}, A) : u_{\varepsilon_n} \xrightarrow{L^1} u \right\}, \quad (4.13)$$

$$F''(u, A) := \inf \left\{ \limsup_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_{\varepsilon_n}, A) : u_{\varepsilon_n} \xrightarrow{L^1} u \right\}.$$

Dal momento che il funzionale F_{ε_n} è non negativo, si verifica facilmente che, per ogni $u \in L^1(T^2)$, le funzioni $F'(u, \cdot)$ e $F''(u, \cdot)$ sono crescenti rispetto all'inclusione tra insiemi:

$$F'(u, A) \leq F'(u, B), \quad F''(u, A) \leq F''(u, B), \quad \forall A, B \in \mathcal{A}(T^2) : A \subseteq B.$$

Il passo fondamentale consiste nel dimostrare che F' e F'' soddisfano la seguente proprietà di *regolarità interna*:

$$F'(u, A) = \sup \left\{ F'(u, A') : A' \in \mathcal{A}(T^2), A' \subset\subset A \right\}, \quad (4.14)$$

$$F''(u, A) = \sup \left\{ F''(u, A') : A' \in \mathcal{A}(T^2), A' \subset\subset A \right\},$$

dove la notazione $A' \subset\subset A$ indica che A' è compattamente contenuto in A . Questa proprietà, come vedremo, è garantita dalla *stima fondamentale* per il funzionale F_ε , contenuta nella proposizione successiva, che presentiamo dopo aver adottato la seguente definizione.

Definizione 4.1 *Siano $A, A' \in \mathcal{A}(T^2)$ con $A' \subset\subset A$. Diremo che una funzione $\varphi : A \rightarrow \mathbb{R}$ è un cut-off tra A' e A se $\varphi \in C_0^\infty(A)$, $0 \leq \varphi \leq 1$ e $\varphi \equiv 1$ su A' .*

Teorema 4.3 (Stima fondamentale) *Per ogni $A, A', B \in \mathcal{A}(T^2)$ con $A' \subset\subset A$ e per ogni $\sigma > 0$, esiste una costante positiva $C_\sigma = C(\sigma, A, A', B)$ tale che, per ogni $u, v \in L^1(T^2)$, esiste un cut-off φ tra A' e A tale che*

$$F_\varepsilon(\varphi u + (1 - \varphi)v, A' \cup B) \leq \quad (4.15)$$

$$(1 + \sigma) \left(F_\varepsilon(u, A) + F_\varepsilon(v, B) \right) + \frac{C_\sigma}{|\log \varepsilon|} \left(\int_A |u|^2 dx + \int_B |v|^2 dx \right).$$

Dimostrazione.

Per definizione di F_ε è sufficiente considerare coppie di funzioni $u, v \in H^{\frac{1}{2}}(T^2)$, altrimenti la (4.15) è banalmente verificata. Poniamo $\delta = \text{dist}(A', \partial A)$, scegliamo un numero $n \in \mathbb{N}$ e definiamo i seguenti insiemi:

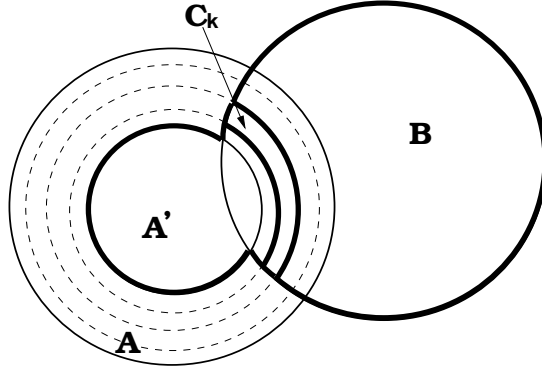
$$A_0 = A', \quad A_k = \left\{ x \in A \quad : \quad \text{dist}(x, A') < k \frac{\delta}{n} \right\}, \quad k \in \{1, \dots, n\}.$$

Per $k \in \{1, \dots, n\}$ fissato sia $\varphi \equiv \varphi_k$ un cut-off tra A_{k-1} e A_k tale che $|\nabla \varphi| \leq \frac{n}{\delta}$ e poniamo

$$C_i = (A_i \setminus A_{i-1}) \cap B, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$U = A_0 \cup \bigcup_{i=1}^{k-1} C_i, \quad V = B \setminus A_k.$$

In questo modo $\{U, C_k, V\}$ risulta essere una partizione di $A' \cup B$, come illustrato nella figura seguente.



Se per semplicità di notazione poniamo $w := \varphi u + (1 - \varphi)v$, risulta

$$\begin{aligned} F_\varepsilon(w, A' \cup B) &= \int_{A' \cup B} \int_{A' \cup B} \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) \, dx \, dy + \int_{A' \cup B} \mathbb{W}_\varepsilon[w](x) \, dx \leq \\ &\leq \int_U \int_U \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) \, dx \, dy + \int_{C_k} \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) \, dx \, dy + \int_V \int_V \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) \, dx \, dy + \\ &+ 2 \int_U \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) \, dx \, dy + 2 \int_V \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) \, dx \, dy + 2 \int_U \int_V \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) \, dx \, dy + \\ &\quad + \int_A \mathbb{W}_\varepsilon[w](x) \, dx + \int_B \mathbb{W}_\varepsilon[w](x) \, dx. \end{aligned}$$

Per definizione di φ risulta $w = u$ su U , $w = v$ su V ed inoltre $U \subset A$ e $V \subset B$. Allora, dalla disuguaglianza precedente, segue che

$$F_\varepsilon(w, A' \cup B) \leq F_\varepsilon(u, A) + F_\varepsilon(v, B) + \int_{C_k} \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) \, dx \, dy + \quad (4.16)$$

$$+2 \int_U \int_V \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) dx dy + 2 \int_U \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) dx dy + 2 \int_V \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[w](x, y) dx dy..$$

Utilizzando la stima (4.2) sul nucleo \mathbb{J} , i quattro integrali doppi nella disuguaglianza (4.16) si stimano dall'alto rispettivamente con

$$I_1 := \frac{C_2}{|\log \varepsilon|} \int_{C_k} \int_{C_k} \frac{|w(x) - w(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy, \quad I_2 := \frac{2C_2}{|\log \varepsilon|} \int_U \int_V \frac{|w(x) - w(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy,$$

$$I_3 := \frac{2C_2}{|\log \varepsilon|} \int_U \int_{C_k} \frac{|w(x) - w(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy, \quad I_4 := \frac{2C_2}{|\log \varepsilon|} \int_V \int_{C_k} \frac{|w(x) - w(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy.$$

Valutiamo quindi le differenze $|w(x) - w(y)|^2$ in ogni integrale. Per ogni $(x, y) \in C_k \times C_k$ si ha

$$\begin{aligned} |w(x) - w(y)|^2 &= \sum_{i=1}^N |w^i(x) - w^i(y)|^2 = \\ &= \sum_{i=1}^N \left| \varphi(x)u^i(x) + (1 - \varphi(x))v^i(x) - \varphi(y)u^i(y) - (1 - \varphi(y))v^i(y) \right|^2 = \\ &= \sum_{i=1}^N \left| \varphi(x)(u^i(x) - u^i(y)) + (1 - \varphi(x))(v^i(x) - v^i(y)) + (\varphi(x) - \varphi(y))(u^i(y) - v^i(y)) \right|^2 \leq \\ &\leq C \sum_{i=1}^N \left(|u^i(x) - u^i(y)|^2 + |v^i(x) - v^i(y)|^2 + |\varphi(x) - \varphi(y)|^2 |u^i(y) - v^i(y)|^2 \right), \end{aligned}$$

da cui segue che

$$\begin{aligned} I_1 \leq \frac{C}{|\log \varepsilon|} \int_{C_k} \int_{C_k} \left\{ \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^3} + \frac{|v(x) - v(y)|^2}{|x - y|^3} + \right. \\ \left. + \frac{|\varphi(x) - \varphi(y)|^2}{|x - y|^3} (|u(y)|^2 + |v(y)|^2) \right\} dx dy. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Per ogni $(x, y) \in U \times V$ si ha

$$|w(x) - w(y)|^2 = \sum_{i=1}^N \left| u^i(x) - v^i(y) \right|^2 \leq C \left(|u(x)|^2 + |v(y)|^2 \right),$$

e quindi

$$I_2 \leq \frac{C}{|\log \varepsilon|} \int_U \int_V \frac{|u(y)|^2 + |v(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy.. \quad (4.18)$$

Per ogni $(x, y) \in U \times C_k$ si ha

$$|w(x) - w(y)|^2 = \sum_{i=1}^N \left| u^i(x) - \varphi(y)u^i(y) - (1 - \varphi(y))v^i(y) \right|^2 =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^N \left| \left(u^i(x) - u^i(y) \right) + (1 - \varphi(y)) \left(u^i(y) - v^i(y) \right) \right|^2 \leq \\
&\leq C \sum_{i=1}^N \left(|u^i(x) - u^i(y)|^2 + |\varphi(x) - \varphi(y)|^2 |u^i(y) - v^i(y)|^2 \right)
\end{aligned}$$

da cui otteniamo

$$I_3 \leq \frac{C}{|\log \varepsilon|} \int_U \int_{C_k} \left(\frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^3} + \frac{|\varphi(x) - \varphi(y)|^2}{|x - y|^3} (|u(y)|^2 + |v(y)|^2) \right) dx dy. \quad (4.19)$$

Analogamente, nel caso in cui $(x, y) \in V \times C_k$, risulta

$$I_4 \leq \frac{C}{|\log \varepsilon|} \int_V \int_{C_k} \left(\frac{|v(x) - v(y)|^2}{|x - y|^3} + \frac{|\varphi(x) - \varphi(y)|^2}{|x - y|^3} (|u(y)|^2 + |v(y)|^2) \right) dx dy. \quad (4.20)$$

Rimettiamo insieme le disuguaglianze (4.17)-(4.20) e poniamo $I := I_1 + I_2 + I_3 + I_4$.

Si ha

$$\begin{aligned}
I \leq & \frac{C}{|\log \varepsilon|} \left\{ \int_{U \cup C_k} \int_{C_k} \frac{|u(x) - u(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy + \int_{V \cup C_k} \int_{C_k} \frac{|v(x) - v(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy + \right. \\
& \left. + \int_{A' \cup B} \int_{C_k} |\varphi(x) - \varphi(y)|^2 \frac{|u(y)|^2 + |v(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy + \int_U \int_V \frac{|u(x)|^2 + |v(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy \right\},
\end{aligned}$$

da cui, utilizzando nuovamente la stima (4.2) sul nucleo \mathbb{J} ed il fatto che $U \cup C_k \subset A$, $V \cup C_k \subset B$, otteniamo

$$\begin{aligned}
I \leq & C \left(\int_A \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[u](x, y) dx dy + \int_B \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[v](x, y) dx dy \right) + \quad (4.21) \\
& + \frac{C}{|\log \varepsilon|} \int_{A' \cup B} \int_{C_k} |\varphi(x) - \varphi(y)|^2 \frac{|u(y)|^2 + |v(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy + \\
& + \frac{C}{|\log \varepsilon|} \int_U \int_V \frac{|u(x)|^2 + |v(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy.
\end{aligned}$$

A questo punto, osservando che

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=1}^n \left(\int_A \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[u](x, y) dx dy + \int_B \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[v](x, y) dx dy \right) \leq \\
& \leq \int_A \int_A \mathbb{J}_\varepsilon[u](x, y) dx dy + \int_B \int_B \mathbb{J}_\varepsilon[v](x, y) dx dy \leq F_\varepsilon(u, A) + F_\varepsilon(v, B),
\end{aligned}$$

possiamo scegliere $k \in \{1, \dots, n\}$ tale che

$$\int_A \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[u](x, y) dx dy + \int_B \int_{C_k} \mathbb{J}_\varepsilon[v](x, y) dx dy \leq \frac{1}{n} \left(F_\varepsilon(u, A) + F_\varepsilon(v, B) \right). \quad (4.22)$$

D'altra parte il cut-off φ soddisfa per costruzione

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq \frac{n}{\delta}|x - y|$$

ed inoltre risulta

$$\int_{A' \cup B} \frac{dx}{|x - y|} \stackrel{[z=x-y]}{=} \int_{(A' \cup B) - y} \frac{dz}{|z|} \leq \int_D \frac{dz}{|z|} \leq C,$$

dove D è un disco di raggio opportuno che contiene l'insieme $(A' \cup B) - y$ per ogni $y \in C_k$. Allora si ha

$$\begin{aligned} & \int_{A' \cup B} \int_{C_k} \frac{|\varphi(x) - \varphi(y)|^2}{|x - y|^3} (|u(y)|^2 + |v(y)|^2) dx dy \leq \quad (4.23) \\ & \leq \left(\frac{n}{\delta}\right)^2 \int_{C_k} \left(\int_{A' \cup B} \frac{dx}{|x - y|} \right) (|u(y)|^2 + |v(y)|^2) dy \leq C \left(\frac{n}{\delta}\right)^2 \int_{C_k} (|u(y)|^2 + |v(y)|^2) dy. \end{aligned}$$

Infine per ogni $(x, y) \in U \times V$ risulta $|x - y| > \frac{\delta}{n}$ e pertanto otteniamo che

$$\begin{aligned} & \int_U \int_V \frac{|u(x)|^2 + |v(y)|^2}{|x - y|^3} dx dy \leq \left(\frac{n}{\delta}\right)^3 \left(|V| \int_U |u(x)|^2 dx + |U| \int_V |v(y)|^2 dy \right) \leq \quad (4.24) \\ & \leq \max\{|A|, |B|\} \left(\frac{n}{\delta}\right)^3 \left(\int_U |u(x)|^2 dx + \int_V |v(y)|^2 dy \right). \end{aligned}$$

Poniamo quindi

$$\bar{C} = \bar{C}(n, A, A', B) = \max \left\{ C \left(\frac{n}{\delta}\right)^2, C \max\{|A|, |B|\} \left(\frac{n}{\delta}\right)^3 \right\}$$

e rimettiamo insieme le stime (4.16) e (4.21)-(4.24). Si ha

$$\begin{aligned} F_\varepsilon(\varphi u + (1 - \varphi)v, A' \cup B) & \leq \left(1 + \frac{C}{n}\right) \left(F_\varepsilon(u, A) + F_\varepsilon(v, B) \right) + \\ & + \frac{\bar{C}}{|\log \varepsilon|} \left(\int_{U \cup C_k} |u|^2 dx + \int_{V \cup C_k} |v|^2 dx \right). \end{aligned}$$

Dal momento che n è arbitrario, scegliamo $n = n_\sigma := [C/\sigma] + 1$ (il simbolo $[\cdot]$ indica la parte intera) e definiamo $C_\sigma := \bar{C}(n_\sigma, A, A', B)$. Ricordando che $U \cup C_k \subset A$ e $V \cup C_k \subset B$ possiamo finalmente concludere che

$$\begin{aligned} & F_\varepsilon(\varphi u + (1 - \varphi)v, A' \cup B) \leq \\ & \leq (1 + \sigma) \left(F_\varepsilon(u, A) + F_\varepsilon(v, B) \right) + \frac{C_\sigma}{|\log \varepsilon|} \left(\int_A |u|^2 dx + \int_B |v|^2 dx \right). \quad \square \end{aligned}$$

A questo punto, come annunciato, siamo in grado di dimostrare la regolarità interna dei Γ -limiti inferiore e superiore di F_ε .

Proposizione 4.3 *Per ogni $u \in L^1(T^2)$ le funzioni d'insieme $F'(u, \cdot)$, $F''(u, \cdot) : \mathcal{A}(T^2) \rightarrow [0, +\infty]$ definite in (4.13) soddisfano la proprietà di regolarità interna (4.14).*

Dimostrazione.

In virtù del risultato di compattezza (Teorema 4.2) è sufficiente considerare funzioni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$. Per ogni successione infinitesima $\{\varepsilon_n\} \subset \mathbb{R}$ e per ogni $A, B \in \mathcal{A}(T^2)$ siano $\{u_n\}, \{v_n\} \subset L^1(T^2)$ due successioni ottimali per $F'(u, A)$ e $F''(u, B)$ rispettivamente:

$$\begin{aligned} u_n &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} u \text{ in } L^1(T^2), & F'(u, A) &= \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, A), \\ v_n &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} u \text{ in } L^1(T^2), & F''(u, B) &= \limsup_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(v_n, B). \end{aligned}$$

Per ogni $n \in \mathbb{N}$ applichiamo la stima fondamentale (4.15) alle funzioni u_n e v_n : per ogni $A' \in \mathcal{A}(T^2)$ con $A' \subset\subset A$ e per ogni $\sigma > 0$ esiste una costante $C_\sigma > 0$ tale che

$$\begin{aligned} &F_{\varepsilon_n}(\varphi_n u_n + (1 - \varphi_n)v_n, A' \cup B) \leq \tag{4.25} \\ &\leq (1 + \sigma)(F_{\varepsilon_n}(u_n, A) + F_{\varepsilon_n}(v_n, B)) + \frac{C_\sigma}{|\log \varepsilon_n|} \left(\int_A |u_n|^2 + \int_B |v_n|^2 \right), \end{aligned}$$

dove $\{\varphi_n\}$ è una opportuna successione di funzioni cut-off tra A' e A . Inoltre risulta

$$|\varphi_n u_n + (1 - \varphi_n)v_n - u| \leq |\varphi_n||u_n - u| + |1 - \varphi_n||v_n - u| \leq |u_n - u| + |v_n - u|,$$

da cui segue che anche $\varphi_n u_n + (1 - \varphi_n)v_n$ converge ad u in $L^1(T^2)$. D'altra parte, sempre per il Teorema 4.2, le successioni $\{u_n\}$ e $\{v_n\}$ sono limitate in $L^2(T^2)$ e pertanto, passando al limite per $n \rightarrow \infty$ nella (4.25), otteniamo

$$\begin{aligned} &F'(u, A' \cup B) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(\varphi_n u_n + (1 - \varphi_n)v_n, A' \cup B) \leq \\ &\leq (1 + \sigma) \left(\liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, A) + \limsup_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(v_n, B) \right) \leq (1 + \sigma) \left(F'(u, A) + F''(u, B) \right), \end{aligned}$$

per ogni $\sigma > 0$, dove la prima disuguaglianza sussiste per definizione di F' . Dal momento che σ è arbitrario concludiamo che

$$F'(u, A' \cup B) \leq F'(u, A) + F''(u, B). \tag{4.26}$$

Analogamente, se $\{u_n\}$ e $\{v_n\}$ sono successioni ottimali per $F''(u, A)$ e $F'(u, B)$ rispettivamente, otteniamo anche

$$F''(u, A' \cup B) \leq F''(u, A) + F'(u, B). \tag{4.27}$$

A questo punto, ricordando che F' e F'' sono funzioni crescenti rispetto all'inclusione tra insiemi, per ogni $W, A \in \mathcal{A}(T^2)$ con $A \subset\subset W$ si ha

$$F'(u, W) \geq F'(u, A), \quad F''(u, W) \geq F''(u, A),$$

da cui segue

$$F'(u, W) \geq \sup \left\{ F'(u, A) : A \subset\subset W \right\}, \quad (4.28)$$

$$F''(u, W) \geq \sup \left\{ F''(u, A) : A \subset\subset W \right\}.$$

Per ottenere la regolarità interna occorre quindi provare le disuguaglianze opposte. A tale scopo consideriamo un insieme compatto K e $A', A, W \in \mathcal{A}(T^2)$ tali che $K \subset\subset A' \subset\subset A \subset\subset W$. Applicando (4.26) e (4.27) con $B = W \setminus K$ otteniamo

$$F'(u, W) \leq F'(u, A) + F''(u, W \setminus K),$$

$$F''(u, W) \leq F''(u, A) + F''(u, W \setminus K),$$

da cui, passando all'estremo superiore su tutti gli aperti $A \subset\subset W$, segue che

$$F'(u, W) \leq \sup \left\{ F'(u, A) : A \subset\subset W \right\} + F''(u, W \setminus K), \quad (4.29)$$

$$F''(u, W) \leq \sup \left\{ F''(u, A) : A \subset\subset W \right\} + F''(u, W \setminus K).$$

Dimostriamo allora che il termine $F''(u, W \setminus K)$ tende a zero al crescere di K in W . Per ogni successione $\{u_n\}$ convergente ad u in $L^1(T^2)$, utilizzando la non negatività di F_ε e la stima (4.2) sul nucleo \mathbb{J} , si ottiene

$$0 \leq F_{\varepsilon_n}(u_n, W \setminus K) \leq C \sum_{i=1}^N I_{\varepsilon_n}(u_n^i, W \setminus K), \quad (4.30)$$

dove I_{ε_n} è esattamente la localizzazione su $W \setminus K$ del funzionale scalare di Garroni e Müller, valutato sulle componenti di $\{u_n\}$, che corrisponde alla scelta $J(x) = |x|^{-3}$ del nucleo di interazione elastica. Dal momento che per ogni $n \in S^1$ risulta

$$\gamma(n) := 2 \int_{x \cdot n = 1} |x|^{-3} d\mathcal{H}^1(x) = 2 \int_{\mathbb{R}} (1 + x_2^2)^{-\frac{3}{2}} dx_2 = 4 \left[x_2 (1 + x_2^2)^{-\frac{1}{2}} \right]_0^{+\infty} = 4,$$

applicando il Teorema 3.3, otteniamo che il funzionale I_{ε_n} $\Gamma(L^1)$ -converge a

$$I(v, W \setminus K) = 4 \int_{Sv \cap (W \setminus K)} |[v]| d\mathcal{H}^1, \quad \forall v \in BV(T^2, \mathbb{Z}).$$

Scegliamo quindi $\{u_n\}$ in modo che, per ogni $i = 1, \dots, N$, la successione $\{u_n^i\}$ sia ottimale per $I(u^i, W \setminus K)$. Allora, passando al limite per $n \rightarrow \infty$ nella (4.30), concludiamo che

$$\begin{aligned} 0 \leq F''(u, W \setminus K) &\leq \limsup_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, W \setminus K) \leq \\ &\leq C \sum_{i=1}^N \int_{Su^i \cap (W \setminus K)} |[u^i]| d\mathcal{H}^1 \leq C |Du|(W \setminus K), \end{aligned} \quad (4.31)$$

dove la seconda disuguaglianza sussiste per definizione di F'' . Infine, passando all'estremo superiore su tutti i compatti $K \subset W$, l'ultimo termine in (4.31) tende a zero e questo conclude la dimostrazione. \square

A questo punto l'esistenza del Γ -limite del funzionale F_ε è una semplice conseguenza della Proposizione 4.3.

Proposizione 4.4 *Sia $F_\varepsilon(u, A) : L^1(T^2) \times \mathcal{A}(T^2) \rightarrow [0, +\infty]$ il funzionale definito in (4.3). Per ogni successione infinitesima di numeri reali $\{\varepsilon_n\}$ esiste una sotto-successione, denotata ancora con $\{\varepsilon_n\}$, tale che il Γ -limite*

$$F(u, A) = \Gamma(L^1)\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u, A) \quad (4.32)$$

esiste per ogni $(u, A) \in L^1(T^2) \times \mathcal{A}(T^2)$.

Dimostrazione.

Sia $\{\varepsilon_n\}$ una successione infinitesima. Indichiamo con $\mathcal{R}(T^2)$ una famiglia densa e numerabile di insiemi aperti di T^2 e notiamo che $L^1(T^2)$ è uno spazio metrico separabile. In virtù della proprietà di compattezza della Γ -convergenza (Proposizione 1.2) e tramite un argomento di diagonalizzazione, possiamo estrarre da $\{\varepsilon_n\}$ una sotto-successione, che denotiamo ancora con $\{\varepsilon_n\}$, tale che il limite

$$F(u, R) = \Gamma(L^1)\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u, R) = F'(u, R) = F''(u, R)$$

esiste per ogni $u \in L^1(T^2)$ ed ogni $R \in \mathcal{R}(T^2)$. Per ogni $A', A \in \mathcal{A}(T^2)$ con $A' \subset\subset A$ esiste per definizione un aperto $R \in \mathcal{R}(T^2)$ tale che $A' \subset\subset R \subset\subset A$. Allora, sfruttando la regolarità interna di F' e F'' , risulta

$$\begin{aligned} F'(u, A) &= \sup \{F'(u, A') : A' \subset\subset A\} = \sup \{F'(u, R) : R \subset\subset A\} = \\ &= \sup \{F''(u, R) : R \subset\subset A\} = \sup \{F''(u, A') : A' \subset\subset A\} = F''(u, A), \end{aligned}$$

cosicché

$$F(u, A) := F'(u, A) = F''(u, A), \quad \forall (u, A) \in L^1(T^2) \times \mathcal{A}(T^2). \quad \square$$

4.3 Rappresentazione Integrale

In questa sezione completeremo la dimostrazione del Teorema 4.1, ricavando la rappresentazione integrale (4.4) per il Γ -limite del funzionale F_ε costruito nella sezione precedente. A tale scopo utilizzeremo il Teorema 1.2 relativo ai funzionali definiti sulle partizioni di Caccioppoli, che enunciamo qui di seguito in una forma adatta al nostro contesto.

Teorema 4.4 *Sia $G : BV(T^2, \mathbb{Z}^N) \times \mathcal{B}(T^2) \rightarrow [0, +\infty)$ un funzionale che soddisfa le seguenti proprietà:*

- i) $G(u, \cdot)$ è una misura su T^2 per ogni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$;
- ii) G è locale su $\mathcal{A}(T^2)$, i.e. $G(u, A) = G(v, A)$ per ogni $A \in \mathcal{A}(T^2)$ e ogni $u, v \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$ tali che $u = v$ quasi ovunque su A ;
- iii) $G(\cdot, A)$ è L^1 -semicontinuo inferiormente su $BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$ per ogni $A \in \mathcal{A}(T^2)$;
- iv) esistono due costanti positive c_1 e c_2 tali che, per ogni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$ e $B \in \mathcal{B}(\Omega)$, risulta

$$c_1 \left(\mathcal{H}^{n-1}(B \cap Su) + |Du|(B) \right) \leq G(u, B) \leq c_2 \left(\mathcal{H}^{n-1}(B \cap Su) + |Du|(B) \right).$$

Allora G ammette la seguente rappresentazione integrale:

$$G(u, B) = \int_{S_u \cap B} \varphi(x, u^+, u^-, n_u) d\mathcal{H}^1, \quad u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N), \quad B \in \mathcal{B}(T^2), \quad (4.33)$$

con $\varphi : \Omega \times \mathbb{Z}^N \times \mathbb{Z}^N \times S^1$ definita da

$$\varphi(x, i, j, \nu) = \limsup_{\rho \rightarrow 0^+} \frac{1}{\rho} \min \left\{ G(u, \overline{Q}_\rho^\nu(x)) : u \in \mathcal{X} \right\} \quad (4.34)$$

e

$$\mathcal{X} = \left\{ u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N) : u = u_{ij}^{\nu, x} \text{ su } \Omega \setminus Q_\rho^\nu(x) \right\}, \quad (4.35)$$

dove $Q_\rho^\nu(x)$ indica il quadrato di lato ρ , centrato in x e con un lato parallelo a ν , $\overline{Q}_\rho^\nu(x)$ è la sua chiusura e $u_{ij}^{\nu, x} : \Omega \rightarrow \mathbb{Z}^N$ è la funzione step definita da

$$u_{ij}^{\nu, x}(y) := \begin{cases} i & \text{se } (y - x) \cdot \nu > 0, \\ j & \text{se } (y - x) \cdot \nu \leq 0. \end{cases}$$

Utilizzeremo inoltre un risultato dovuto a De Giorgi e Letta ([16]), che permette di caratterizzare le misure come funzioni d'insieme che soddisfano speciali proprietà. Innanzitutto introduciamo la seguente definizione.

Definizione 4.2 Sia $\alpha : \mathcal{A}(\Omega) \rightarrow [0, +\infty)$ una funzione d'insieme. Diremo che α è

i) crescente se

$$\alpha(\emptyset) = 0 \quad e \quad \alpha(A) \leq \alpha(B) \quad \forall A, B \in \mathcal{A}(\Omega);$$

ii) sub-additiva se

$$\alpha(A \cup B) \leq \alpha(A) + \alpha(B) \quad \forall A, B \in \mathcal{A}(\Omega);$$

iii) super-additiva se

$$\alpha(A \cup B) \geq \alpha(A) + \alpha(B) \quad \forall A, B \in \mathcal{A}(\Omega) \quad \text{con} \quad A \cap B = \emptyset;$$

iv) regolare interna se

$$\alpha(A) = \sup \{ \alpha(A') : A' \in \mathcal{A}(\Omega), A' \subset\subset A \} \quad \forall A \in \mathcal{A}(\Omega).$$

Vale il seguente risultato.

Lemma 4.2 Sia $\alpha : \mathcal{A}(\Omega) \rightarrow [0, +\infty)$ una funzione crescente d'insieme. Allora le due affermazioni seguenti sono equivalenti:

a) α è la restrizione su $\mathcal{A}(\Omega)$ di una misura di Borel su Ω ,

b) α è sub-additiva, super-additiva e regolare interna.

Possiamo dunque procedere con la dimostrazione del risultato di rappresentazione integrale contenuto nel Teorema 4.1.

Proposizione 4.5 Il $\Gamma(L^1)$ -limite F ottenuto in (4.32) ammette, per ogni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$ e ogni $B \in \mathcal{B}(T^2)$, la seguente rappresentazione integrale:

$$F(u, B) = \int_{S_u \cap B} \varphi([u], n_u) d\mathcal{H}^1.$$

La densità di energia $\varphi : \mathbb{Z}^N \times S^1 \rightarrow [0, +\infty)$ è data da

$$\varphi(s, n) = F(u_s^n, Q^n), \tag{4.36}$$

dove Q^n è il quadrato unitario centrato nell'origine e con un lato parallelo ad n e dove $u_s^n(x) = s\chi_{\{x \cdot n > 0\}}$.

Dimostrazione.

Verifichiamo che il funzionale F soddisfa le proprietà (i)-(iv) del Teorema 4.4. Innanzitutto notiamo che per definizione F eredita da F' e F'' la regolarità interna (Proposizione 4.3). In particolare, sostituendo F'' con F nella (4.27), si ha

$$F(u, A' \cup B) \leq F(u, A) + F(u, B),$$

da cui, passando all'estremo superiore su tutti gli $A' \in \mathcal{A}(T^2)$ tali che $A' \subset\subset A$ e utilizzando la regolarità interna, otteniamo che F è sub-additiva. Per ogni $A, B \in \mathcal{A}(T^2)$ con $A \cap B = \emptyset$ consideriamo una successione $\{u_n\}$ ottimale per $F(u, A \cup B)$. Risulta

$$\begin{aligned} F(u, A \cup B) &= \lim_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, A \cup B) = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\int_{A \cup B} \int_{A \cup B} \mathbb{J}_{\varepsilon_n}[u_n](x, y) dx dy + \int_{A \cup B} \mathbb{W}_{\varepsilon_n}[u_n](x) dx \right) = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(F_{\varepsilon_n}(u_n, A) + F_{\varepsilon_n}(u_n, B) + 2 \int_A \int_B \mathbb{J}_{\varepsilon_n}[u_n](x, y) dx dy \right) \geq \\ &\geq \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, A) + \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, B) \geq F(u, A) + F(u, B), \end{aligned}$$

dove abbiamo usato la positività della forma quadratica $\mathbb{J}_{\varepsilon_n}$ e la disuguaglianza del Γ -lim inf per il funzionale F_{ε_n} . In virtù del Lemma 4.2 $F(u, \cdot)$ definisce una misura di Borel su T^2 e questo completa la verifica della proprietà (i). D'altra parte le proprietà (ii) e (iii) seguono direttamente dalla definizione stessa di Γ -convergenza, dal momento che $F(u, A)$ è il $\Gamma(L^1)$ -limite del funzionale $F_{\varepsilon_n}(u, A)$ localizzato sugli aperti. Infine, utilizzando la stima (4.2) sul nucleo \mathbb{J} e ragionando come in (4.30) e (4.31), si ha

$$C_1 |Du|(A) \leq F(u, A) \leq C_2 |Du|(A),$$

da cui, ricordando che $|Du|(A) = \int_{A \cap Su} |[u]| d\mathcal{H}^1$ e che $|[u]| \geq 1$ \mathcal{H}^1 -quasi ovunque su Su , otteniamo

$$\frac{C_1}{2} \left(\mathcal{H}^1(A \cap Su) + |Du|(A) \right) \leq F(u, A) \leq C_2 \left(\mathcal{H}^1(A \cap Su) + |Du|(A) \right),$$

ovvero la proprietà (iv) ristretta a $\mathcal{A}(T^2)$, che si estende a $\mathcal{B}(T^2)$ utilizzando il fatto che $F(u, \cdot)$ è una misura. Abbiamo dunque la rappresentazione integrale (4.33) per il funzionale F . Per concludere occorre provare che la formula generale (4.34) per la densità φ si riduce nel nostro caso alla (4.36). Innanzitutto esplicitiamo nella (4.35) i parametri che definiscono la classe di funzioni \mathcal{X} , ponendo $\mathcal{X} = \mathcal{X}(x, s_1, s_2, n, \rho)$ con $x \in T^2$, $s_1, s_2 \in \mathbb{Z}^N$, $n \in S^1$ e $\rho > 0$. Notiamo inoltre che per valutare $F(u, \cdot)$ sugli insiemi chiusi $\overline{Q_\rho^n}(x)$ possiamo restringerci, per approssimazione dall'esterno,

agli aperti $A \in \mathcal{A}(T^2)$ tali che $Q_\rho^n(x) \subset\subset A$. La dimostrazione è suddivisa in tre passi.

Passo 1: φ non dipende da $s_1, s_2 \in \mathbb{Z}^N$ separatamente, ma solo da $s := s_1 - s_2$.

Fissiamo $(x, n) \in T^2 \times S^1$. Per ogni $s_1, s_2 \in \mathbb{Z}^N$, $A \in \mathcal{A}(T^2)$ tale che $Q_\rho^n(x) \subset\subset A$ e ogni $u \in \mathcal{X}(x, s_1, s_2, n, \rho)$, consideriamo una successione $\{u_n\}$ ottimale per $F(u, A)$. Per ogni costante $c \in \mathbb{Z}^N$ risulta $u_n + c \rightarrow u + c$ in $L^1(T^2)$ e

$$F(u + c, A) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n + c, A) = \lim_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, A) = F(u, A),$$

dove abbiamo usato la disuguaglianza del Γ -lim inf e l'invarianza di F_{ε_n} rispetto alle traslazioni intere. Scambiando il ruolo tra u e $u + c$ si ottiene la disuguaglianza opposta e pertanto anche il funzionale F è invariante per traslazioni intere. Scegliamo $c = -s_2$ e poniamo $v := u + c$. Allora risulta $v \in \mathcal{X}(x, s_1 - s_2, 0, n, \rho)$ e

$$\begin{aligned} & \min \left\{ F(u, \overline{Q_\rho^n}(x)) : u \in \mathcal{X}(x, s_1, s_2, n, \rho) \right\} = \\ & = \min \left\{ F(v, \overline{Q_\rho^n}(x)) : v \in \mathcal{X}(x, s_1 - s_2, 0, n, \rho) \right\}, \end{aligned}$$

da cui, vista la (4.36), segue che

$$\varphi(x, s_1, s_2, n) = \varphi(x, s_1 - s_2, 0, n).$$

Passo 2: φ non dipende da $x \in T^2$.

Fissiamo $(s, n) \in \mathbb{Z}^N \times S^1$ e poniamo, con un piccolo abuso di notazione, $\mathcal{X}(x, s, n, \rho) = \mathcal{X}(x, s, 0, n, \rho)$ e $\varphi(x, s, n) = \varphi(x, s, 0, n)$. Per ogni $x_0, x_1 \in T^2$, $u \in \mathcal{X}(x_0, s, n, \rho)$ e ogni $A \in \mathcal{A}(T^2)$ tale che $Q_\rho^n(x_0) \subset\subset A$, definiamo le traslazioni

$$\tau[u](x) := u(x + x_0 - x_1) \quad \text{e} \quad \tau^{-1}(A) := A + (x_1 - x_0),$$

cosicché $\tau[u] \in \mathcal{X}(x_1, s, n, \rho)$ e $Q_\rho^n(x_1) \subset\subset \tau^{-1}(A) \in \mathcal{A}(T^2)$. Allora, considerando una successione $\{u_n\}$ ottimale per $F(u, A)$, risulta $\tau[u_n] \rightarrow \tau[u]$ in $L^1(T^2)$ e

$$F(u, A) = \lim_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, A) = \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(\tau[u_n], \tau^{-1}(A)) \geq F(\tau[u], \tau^{-1}(A)),$$

dove abbiamo usato il cambiamento di coordinate $x' = x + x_0 - x_1$ e la disuguaglianza del Γ -lim inf per il funzionale F_ε . Analogamente, scambiando il ruolo tra u e $\tau[u]$, otteniamo la disuguaglianza opposta e pertanto, ponendo $v := \tau[u]$, concludiamo che

$$\begin{aligned} & \min \left\{ F(u, \overline{Q_\rho^n}(x_0)) : u \in \mathcal{X}(x_0, s, n, \rho) \right\} = \\ & = \min \left\{ F(v, \overline{Q_\rho^n}(x_1)) : v \in \mathcal{X}(x_1, s, n, \rho) \right\}, \end{aligned}$$

da cui, vista la (4.36), segue che

$$\varphi(x_0, s, n) = \varphi(x_1, s, n).$$

Passo 3: $\varphi(s, n) = F(u_s^n, Q^n)$ per ogni $s \in \mathbb{Z}^N$ e $n \in S^1$.

Quest'ultimo passo segue banalmente dalla rappresentazione integrale e dal fatto che φ non dipende da x . Infatti

$$F(u_s^n, Q^n) = \int_{S_u \cap Q^n} \varphi(s, n) d\mathcal{H}^1 = \varphi(s, n)$$

e questo completa la dimostrazione. \square

4.4 Osservazioni su alcuni problemi di minimo

Come sottolineato nel Capitolo 1 la Γ -convergenza assicura la convergenza delle successioni minimizzanti e dei relativi minimi, nel caso in cui si possa mostrare una proprietà di equi-coercività della successione di funzionali. Inoltre la Γ -convergenza è stabile rispetto a tutte le perturbazioni continue (vedi Proposizione 1.1). In molti esempi classici di Γ -convergenza, ad esempio quelli relativi all'omogenizzazione di funzionali integrali, queste due proprietà garantiscono la convergenza dei problemi di minimo relativi all'applicazione di una forza esterna, il che corrisponde a sommare al termine principale dell'energia F_ε un termine $G(u)$ dall'andamento lineare (come mostrato nel Sezione 4 del Capitolo 2):

$$\begin{aligned} F_\varepsilon(u) - G(u) &:= \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{T^2} \int_{T^2} \left(u(x) - u(y) \right)^T \mathbb{J}(x - y) \left(u(x) - u(y) \right) dx dy + \\ &+ \frac{1}{\varepsilon |\log \varepsilon|} \int_{T^2} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}^N) dx - \int_{T^2} \mathbb{T}(x) \cdot u(x) dx, \end{aligned}$$

dove $\mathbb{T} : T^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ è ad esempio un campo di forze in $L^2(T^2)$. Questa classe di problemi di minimo non è però nel nostro caso una buona classe dal punto di vista della Γ -convergenza. Infatti è vero che il funzionale $F_\varepsilon(u) - G(u)$ Γ -converge a

$$F(u) - G(u) = \int_{S_u} \varphi([u], n_u) d\mathcal{H}^1 - \int_{T^2} \mathbb{T}(x) \cdot u(x) dx,$$

ma si perde la coercività e il problema limite associato può non ammettere minimo. Infatti, utilizzando la rappresentazione integrale per il funzionale $F(u)$, si deduce che $\varphi(s, n)$ è sub-additiva nel salto, i.e.

$$\varphi(s_1 + s_2, n) \leq \varphi(s_1, n) + \varphi(s_2, n), \quad \forall s_1, s_2 \in \mathbb{Z}^N \quad \text{e} \quad \forall n \in S^1,$$

da cui segue che

$$\varphi(ts, n) \leq t\varphi(s, n) \quad \forall t \in \mathbb{N}.$$

Allora, se per ogni $u \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$ risulta

$$F(u) - G(u) \geq 0,$$

il minimo è banale ed è raggiunto per $u \equiv 0$, mentre se esiste $u_0 \in BV(T^2, \mathbb{Z}^N)$ tale che

$$F(u_0) - G(u_0) < 0,$$

calcolando $F(u) - G(u)$ in tu_0 e prendendo l'estremo superiore su $t \in \mathbb{N}$ si conclude che

$$\inf \left\{ F(u) - G(u) \right\} = -\infty.$$

Un problema che invece è possibile studiare solo nel caso vettoriale è quello del twist boundary descritto nel capitolo 2, che riportiamo qui di seguito

$$\min \left\{ F_\varepsilon(u) + \lambda \int_{D_r} |u(x) - u_\theta(x)|^2 dx \right\}, \quad (4.37)$$

dove λ è un parametro positivo e D_r è il disco di raggio $r < 1/2$ centrato nell'origine che descrive la regione su cui è imposta una torsione di angolo θ del reticolo cristallino, individuata dal campo di slittamento

$$u_\theta(x) := \theta x^\perp \chi_{D_r}(x),$$

dove $\theta \in [0, 2\pi)$ e x^\perp è il vettore ortogonale ad x .

In questo caso il termine perturbativo è chiaramente continuo in $L^1(T^2)$. Inoltre la somma dei due contributi definisce un funzionale coercivo che Γ -converge a

$$\int_{S_u} \varphi([u], n_u) + \lambda \int_{D_r} |u(x) - u_\theta(x)|^2 dx$$

e si ha la convergenza del problema di minimo (4.37). Vorremo quindi determinare, come nel Teorema 3.3 per il caso scalare, la forma esatta della tensione di linea φ , un'informazione che ci permetterebbe anche di eliminare banalmente nel nostro risultato di Γ -convergenza il problema della dipendenza di $F(u)$ dalla scelta della successione ε_n (vedi Teorema 4.1). Tuttavia una caratterizzazione esplicita di φ non può essere ottenuta come nel caso scalare. Nel capitolo successivo discuteremo infatti le difficoltà associate a questo problema.

Capitolo 5

Non ottimalità del profilo unidimensionale per il reticolo cubico

In questo capitolo mostreremo che, in generale, non è possibile calcolare esplicitamente la densità di energia φ ottenuta nel Teorema 4.1, che fornisce la rappresentazione integrale (4.4) per il $\Gamma(L^1)$ -limite del funzionale F_ε delle dislocazioni. Per ogni $s \in \mathbb{Z}^N$ e $n \in S^1$ sappiamo che $\varphi(s, n)$ è definita, implicitamente, come il valore del funzionale limite F in corrispondenza della funzione step $u_s^n = s\chi_{\{x \cdot n > 0\}}$ e pertanto la sua caratterizzazione è equivalente alla costruzione di una successione ottimale, ovvero di una transizione u_ε tale che

$$u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u_s^n \quad \text{e} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q^n) = F(u_s^n, Q^n) = \varphi(s, n).$$

Nel Capitolo 3 abbiamo discusso il risultato di Garroni e Müller (Teorema 3.3), che descrive il Γ -limite della versione scalare di F_ε . In particolare abbiamo visto che la transizione ottimale u_ε possiede un profilo unidimensionale, che si ottiene semplicemente mollificando su scala ε l'interfaccia piatta di u_s^n . Inoltre risulta

$$\varphi(s, n) = \gamma(n)|s|,$$

dove $\gamma(n)$ è la tensione lineare anisotropa (3.10) associata al nucleo di interazione elastica \mathbb{J} . Queste proprietà non sussistono nel caso generale. Come vedremo il problema è legato sostanzialmente alla natura vettoriale dei campi di slittamento e all'anisotropia delle interazioni elastiche del cristallo, che si traduce in un maggior numero di gradi di libertà con cui è possibile riarrangiare la struttura dei core delle transizioni, al fine di ottimizzare il valore dell'energia limite. Più precisamente costruiremo una transizione con un profilo non unidimensionale, che produce asintoticamente un valore di energia strettamente inferiore rispetto a quello associato alla mollificazione di u_s^n , suggerendo che le successioni ottimali possono sviluppare microstrutture. A tale scopo consideriamo il caso di un reticolo cristallino cubico,

il cui slittamento cristallografico è attivato da due vettori di Burgers \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 , scelti per semplicità di modulo unitario e paralleli ai versori della base canonica di \mathbb{R}^2 . Il funzionale F_ε delle dislocazioni localizzato su Q^n si riduce quindi a

$$F_\varepsilon(u, Q^n) = \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{Q^n} \int_{Q^n} (u(x) - u(y))^T J(x-y)(u(x) - u(y)) dx dy + \\ + \frac{1}{\varepsilon |\log \varepsilon|} \int_{Q^n} \text{dist}^2(u(x), \mathbb{Z}^2) dx,$$

dove J è esattamente la matrice ottenuta in (2.23), che riscriviamo qui per comodità:

$$J(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} J_0(x+k), \quad J_0(x) = \frac{1}{8\pi(1-\nu)|x|^3} \begin{pmatrix} \nu + 1 - 3\nu \frac{x_2^2}{|x|^2} & 3\nu \frac{x_1 x_2}{|x|^2} \\ 3\nu \frac{x_1 x_2}{|x|^2} & \nu + 1 - 3\nu \frac{x_1^2}{|x|^2} \end{pmatrix}.$$

La costruzione è suggerita da una sostanziale differenza del caso vettoriale rispetto al caso scalare, illustrata qui di seguito. Fissiamo $s \in \mathbb{Z}^2$ e $n \in S^1$ e consideriamo una qualunque successione $\{u_\varepsilon\}$ tale che $u_\varepsilon \rightarrow u_s^n$ in $L^1(Q^n)$. Allora per ε sufficientemente piccolo risulta $F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q^n) \leq C$, da cui segue che

$$\int_{Q^n} \text{dist}^2(u_\varepsilon(x), \mathbb{Z}^2) dx \leq C\varepsilon |\log \varepsilon| \leq \varepsilon^\alpha, \quad \alpha \in (1/2, 1). \quad (5.1)$$

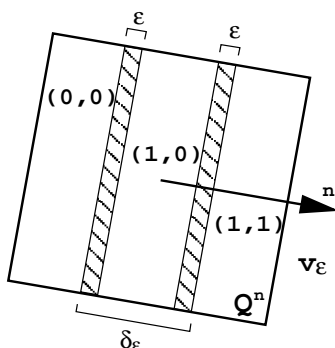
Per ogni $\delta \in (0, \frac{1}{2})$ definiamo gli insiemi

$$A_\delta = \left\{ x \in Q^n : |u_\varepsilon(x)| \leq \delta \right\}, \quad B_\delta = \left\{ x \in Q^n : |u_\varepsilon(x) - s| \leq \delta \right\}.$$

Poiché la matrice J è definita positiva, si ha

$$F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q^n) \geq \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{A_\delta} \int_{B_\delta} \left(u_\varepsilon(x) - u_\varepsilon(y) \right)^T J(x-y) \left(u_\varepsilon(x) - u_\varepsilon(y) \right) dx dy \geq \\ \geq \frac{1}{|\log \varepsilon|} s^T \left(\int_{\mathbb{R}^2} J(z) |A_\delta \cap (B_\delta - z)| dz \right) s + o(\delta). \quad (5.2)$$

Vorremmo quindi un risultato analogo al Lemma 3.1 di blow-up del caso scalare, che fornisca una stima dal basso per la misura dell'insieme $A_\delta \cap (B_\delta - z)$. Tuttavia il fatto che u_ε sia vicina a u_s^n e vicina a \mathbb{Z}^2 (vedi (5.1)) non è sufficiente a garantire che la misura dell'insieme $E = Q^n \setminus (A_\delta \cup B_\delta)$ sia di ordine ε^α , proprietà cruciale nella dimostrazione del Lemma 3.1. Possiamo convincerci di questo fatto considerando l'esempio mostrato nella figura seguente.



La successione u_ε è una transizione tra le fasi $(0,0)$ e $(1,1)$ che avviene all'interno di una striscia di spessore $\sigma_\varepsilon \gg \varepsilon$. Al suo interno è inserita la terza fase $(1,0)$ tramite due transizioni più rapide, di ordine ε . È chiaro allora che u_ε è vicina agli interi, vicina alla funzione step $u_{(1,1)}^n$, ma risulta $|E| \sim \sigma_\varepsilon \gg \varepsilon$. Questa differenza rispetto al caso scalare è l'elemento chiave per dimostrare che la struttura di una transizione può avere un ruolo fondamentale nel ridurre il valore limite di $F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q^n)$. Innanzitutto calcoliamo l'energia limite della mollificazione di u_s^n . Scegliamo una qualunque funzione $\phi \in C_0^\infty(Q^n)$ tale che $\phi \geq 0$ e $\int_{Q^n} \phi dx = 1$ e poniamo $u_\varepsilon := u_s^n * \phi_\varepsilon$ con $\phi_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-2} \phi(x/\varepsilon)$. Dal momento che u_ε coincide con u_s^n all'esterno di un ε -intorno di Su_s^n risulta

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon |\log \varepsilon|} \int_{Q^n} \text{dist}^2(u_\varepsilon, \mathbb{Z}^2) dx \leq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{C\varepsilon}{\varepsilon |\log \varepsilon|} = 0.$$

D'altra parte guardando la (5.2) e procedendo come nel conto che ci ha portato alla stima (3.9) otteniamo

$$\begin{aligned} & \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q^n) = \\ & = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\log \varepsilon|} \int_{Q^n} \int_{Q^n} \left(u_\varepsilon(x) - u_\varepsilon(y) \right)^T J_0(x-y) \left(u_\varepsilon(x) - u_\varepsilon(y) \right) dx dy = s^T \gamma(n) s, \end{aligned}$$

dove J_0 è la parte omogenea del nucleo J e dove $\gamma(n)$ è la matrice di tensione lineare anisotropa definita come in (3.10), i.e.

$$\left(\gamma(n) \right)_{ij} := 2 \int_{x \cdot n = 1} \left(J_0(x) \right)_{ij} d\mathcal{H}^1, \quad i, j = 1, 2, \quad (5.3)$$

che può essere calcolata esplicitamente scrivendo il versore $n \in S^1$ nella forma $n = (\cos \theta, \sin \theta)$, con $\theta \in [-\pi, \pi)$, ed effettuando la rotazione oraria del sistema di coordinate che porta n su \mathbf{e}_1 :

$$\begin{cases} x_1 = x'_1 \cos \theta - x'_2 \sin \theta, \\ x_2 = x'_1 \sin \theta + x'_2 \cos \theta. \end{cases}$$

Risulta

$$\gamma_{11}(\theta) = \frac{1}{4\pi(1-\nu)} \int_{x'_1=1} \left\{ \frac{\nu+1}{|x'|^3} - 3\nu \left(\frac{(x'_1)^2}{|x'|^5} \sin^2 \theta + \frac{(x'_2)^2}{|x'|^5} \cos^2 \theta + \frac{x'_1 x'_2}{|x'|^3} \sin 2\theta \right) \right\} dx',$$

$$\gamma_{12}(\theta) = \gamma_{21}(\theta) = \frac{1}{4\pi(1-\nu)} \int_{x'_1=1} 3\nu \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{(x'_1)^2}{|x'|^5} - \frac{(x'_2)^2}{|x'|^5} \right) \sin 2\theta + \frac{x'_1 x'_2}{|x'|^3} \cos 2\theta \right\} dx',$$

$$\gamma_{22}(\theta) = \frac{1}{4\pi(1-\nu)} \int_{x'_1=1} \left\{ \frac{\nu+1}{|x'|^3} - 3\nu \left(\frac{(x'_1)^2}{|x'|^5} \cos^2 \theta + \frac{(x'_2)^2}{|x'|^5} \sin^2 \theta - \frac{x'_1 x'_2}{|x'|^3} \sin 2\theta \right) \right\} dx'.$$

Occorre quindi calcolare i seguenti integrali:

$$\begin{aligned} I_1 &:= \int_{\mathbb{R}} \frac{dx'_2}{(1+(x'_2)^2)^{\frac{5}{2}}}, & I_2 &:= \int_{\mathbb{R}} \frac{dx'_2}{(1+(x'_2)^2)^{\frac{3}{2}}}, \\ I_3 &:= \int_{\mathbb{R}} \frac{(x'_2)^2}{(1+(x'_2)^2)^{\frac{5}{2}}} dx'_2, & I_4 &:= \int_{\mathbb{R}} \frac{x'_2}{(1+(x'_2)^2)^{\frac{5}{2}}} dx'_2. \end{aligned}$$

Si ha

$$I_1 = 2 \left[\frac{x'_2(3+2(x'_2)^2)}{3(1+(x'_2)^2)^{\frac{3}{2}}} \right]_0^{+\infty} = \frac{4}{3}, \quad I_2 = 2 \left[\frac{x'_2}{(1+(x'_2)^2)^{\frac{1}{2}}} \right]_0^{+\infty} = 2,$$

$$I_3 = I_2 - I_1 = 2 - \frac{4}{3} = \frac{2}{3}.$$

Infine $I_4 = 0$, poiché la funzione integranda è dispari. Allora concludiamo che

$$\gamma(n) = \gamma(\theta) = \frac{1}{4\pi(1-\nu)} \begin{pmatrix} 2 - 2\nu \sin^2 \theta & \nu \sin 2\theta \\ \nu \sin 2\theta & 2 - 2\nu \cos^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

Più in generale, considerando una qualunque funzione $u \in BV(Q, \mathbb{Z}^2)$ e ragionando come nella (3.14) del caso scalare, otteniamo per $r \rightarrow 0$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u * \phi_\varepsilon, Q_r^n(x_0)) = r \left([u]^T \gamma(n) [u] \right) + o(r) \quad \text{per } \mathcal{H}^1\text{-q.o. } x_0 \in Su,$$

da cui segue che

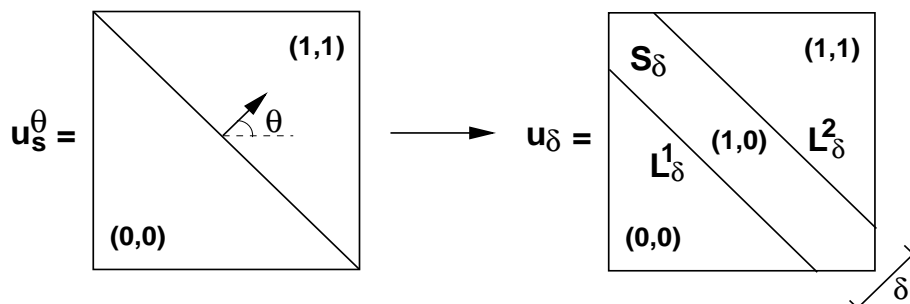
$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u * \phi_\varepsilon, Q) = \int_{Su} [u]^T \gamma(n) [u] d\mathcal{H}^1 =: F_{flat}(u), \quad (5.5)$$

dove abbiamo usato il termine *flat* per ricordare che il profilo della transizione $u_\varepsilon = u * \phi_\varepsilon$ è sostanzialmente un raccordo tra u^- e u^+ , in prossimità di Su , che varia soltanto nella direzione della normale n . Notiamo che il funzionale F_{flat} è non negativo, dal momento che la matrice $\gamma(n)$ eredita dal nucleo J_0 la proprietà di essere

definita positiva. D'altra parte, ricordando che il rapporto di Poisson $\nu \in (-1, 1/2)$, si vede facilmente che $\gamma_{11}(\theta)$ e $\gamma_{22}(\theta)$ sono entrambi strettamente positivi per ogni $\theta \in [-\pi, \pi)$, mentre il termine $\gamma_{12}(\theta)$ può cambiare segno. Per ogni $s = (s_1, s_2) \in \mathbb{Z}^2$ poniamo con un piccolo abuso di notazione $u_s^\theta := u_s^n$. Si ha

$$F_{flat}(u_s^\theta) = (\gamma_{11}(\theta)s_1^2 + 2\gamma_{12}(\theta)s_1s_2 + \gamma_{22}(\theta)s_2^2)|Q \cap L_\theta|,$$

dove L_θ è chiaramente la retta passante per l'origine con pendenza $\tan \theta$. Osserviamo che il termine $2\gamma_{12}(\theta)s_1s_2$ nell'espressione precedente è sempre nullo se $s_1 = 0$ oppure $s_2 = 0$, ovvero se salta solo una delle due componenti di u_s^θ . Questa caratteristica suggerisce quindi che, nei casi in cui $\gamma_{12}(\theta)s_1s_2 > 0$, è possibile ridurre il valore limite di F_ε approssimando u_s^θ con una successione le cui componenti non saltano mai contemporaneamente. Fissiamo ad esempio $\theta = \pi/4$, $s = (1, 1)$ e supponiamo per semplicità $\nu > 0$. Per ogni $\delta \ll 1$ costruiamo la funzione u_δ come illustrato nella figura seguente.



L'insieme Su_s^θ (la diagonale del quadrato) è sostituito dal suo δ -intorno S_δ , in cui è presente la terza fase $(1, 0)$, cosicché gli insiemi di salto delle due componenti di u_δ sono disgiunti e corrispondono rispettivamente ai segmenti L_δ^1 e L_δ^2 . Per $\delta \rightarrow 0$ si ha chiaramente $u_\delta \rightarrow u_s^\theta$, $L_\delta^1, L_\delta^2 \rightarrow Su_s^\theta$ ed inoltre

$$F_{flat}(u_\delta) = \gamma_{11}(\theta)|Q \cap L_\delta^1| + \gamma_{22}(\theta)|Q \cap L_\delta^2| \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} (\gamma_{11}(\theta) + \gamma_{22}(\theta))|Q \cap Su_s^\theta| < F_{flat}(u_s^\theta),$$

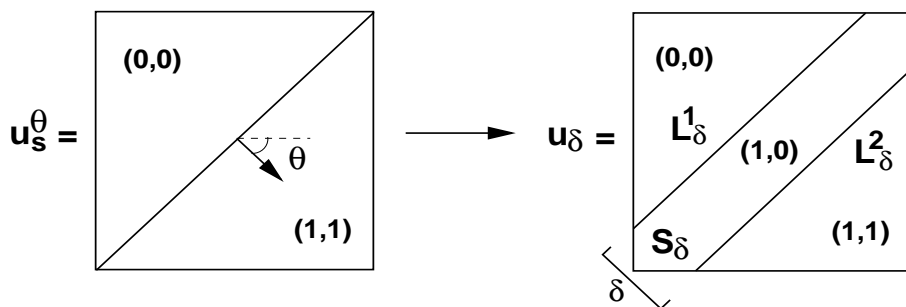
dove l'ultima disuguaglianza segue dal fatto che

$$2\gamma_{12}(\theta)s_1s_2 = \frac{1}{4\pi(1-\nu)}2\nu \sin(\pi/2) = \frac{\nu}{2\pi(1-\nu)} > 0.$$

Scegliamo quindi una successione infinitesima $\delta = \delta_\varepsilon$ tale che $\delta_\varepsilon \gg \varepsilon$ e mollifichiamo u_{δ_ε} su scala ε definendo $u_\varepsilon = u_{\delta_\varepsilon} * \phi_\varepsilon$. Allora concludiamo che

$$u_\varepsilon \rightarrow u_s^\theta \quad \text{e} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q) < F_{flat}(u_s^\theta) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_s^\theta * \phi_\varepsilon, Q).$$

Nei casi in cui $\gamma_{12}(\theta)s_1s_2 < 0$ la situazione s'inverte e la nostra costruzione produce un valore limite dell'energia più grande di $F_{flat}(u_s^\theta)$. Infatti se scegliamo ad esempio $\theta = -\pi/4$, $s = (1, 1)$, $\nu > 0$ e consideriamo la funzione u_δ illustrata in figura



risulta

$$2\gamma_{12}(\theta)s_1s_2 = \frac{1}{4\pi(1-\nu)}2\nu\sin(-\pi/2) = -\frac{\nu}{2\pi(1-\nu)} < 0,$$

da cui segue che

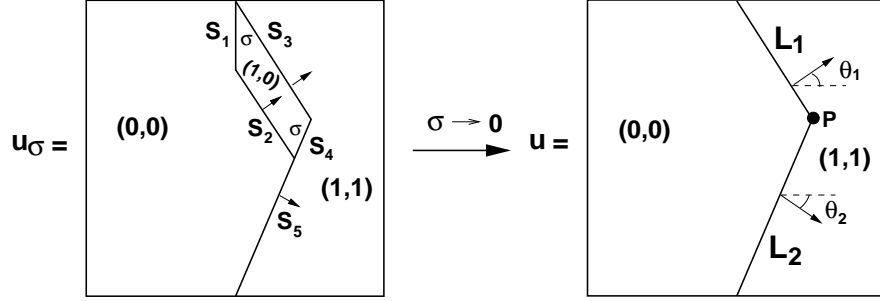
$$\begin{aligned} F_{flat}(u_\delta) &\xrightarrow{\delta \rightarrow 0} (\gamma_{11}(\theta) + \gamma_{22}(\theta))|Q \cap Su_s^\theta| > \\ &> (\gamma_{11}(\theta) + 2\gamma_{12}(\theta)s_1s_2 + \gamma_{22}(\theta))|Q \cap Su_s^\theta| = F_{flat}(u_s^\theta). \end{aligned}$$

Allora, scegliendo $\delta = \delta_\varepsilon \gg \varepsilon$ e definendo $u_\varepsilon = u_{\delta_\varepsilon} * \phi_\varepsilon$, concludiamo che

$$u_\varepsilon \rightarrow u_s^\theta \quad \text{e} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q) > \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_s^\theta * \phi_\varepsilon, Q) = F_{flat}(u_s^\theta).$$

I due esempi precedenti, come annunciato, dimostrano che la semplice mollificazione delle funzioni step non è in grado di descrivere le successioni ottimali e che quindi il funzionale F_{flat} non può essere, come nel caso scalare, il Γ -limite di F_ε . Inoltre, il fatto che il costo della transizione tra le due fasi $(0,0)$ e $(1,1)$ dipenda dalla sua orientazione, suggerisce la costruzione di un esempio più interessante, relativo alla funzione step u_s^θ con $\theta = 0$ e $s = (1,1)$. Notiamo che in questo caso $\gamma_{12}(\theta) = 0$ e pertanto non c'è speranza di ridurre il valore limite di F_ε semplicemente separando gli insiemi di salto delle due componenti di u_s^θ . L'idea è di combinare i due esempi precedenti: otterremo una transizione u_ε dal profilo oscillante a partire da un particolare campo di slittamento \bar{u} . Come vedremo, la maggiore lunghezza di $S\bar{u}$ rispetto a quella di Su_s^θ verrà compensata dalla scelta di opportuni valori della normale ad $S\bar{u}$. Consideriamo innanzitutto il campo a tre fasi $u_\sigma := (u_\sigma^1, u_\sigma^2)$, con $\sigma \ll 1$, illustrato nella figura successiva.

L'insieme di salto Su_σ è composto dai segmenti S_i , con $i = 1, \dots, 5$, di cui primi quattro delimitano una piccola regione in cui è presente la terza fase $(1,0)$. Lungo



S_1 e S_2 salta solo u_σ^1 , lungo S_3 e S_4 salta solo u_σ^2 e lungo S_5 le due componenti di u_σ saltano contemporaneamente. Notiamo che la normale a S_2, S_3 è tale che $\gamma_{12} > 0$, laddove la normale a S_5 è tale che $\gamma_{12} < 0$. Inoltre i contributi su S_1, S_4 sono di ordine σ e pertanto si ha

$$\begin{aligned} \lim_{\sigma \rightarrow 0} F_{flat}(u_\sigma) &= (\gamma_{11}(\theta_1) + \gamma_{22}(\theta_1))|L_1| + \\ &+ (\gamma_{11}(\theta_2) + 2\gamma_{12}(\theta_2) + \gamma_{22}(\theta_2))|L_2| = F_{flat}(u_{zig-zag}^P), \end{aligned} \quad (5.6)$$

dove adesso L_1, L_2 e θ_1, θ_2 indentificano i due segmenti di salto di $u_{zig-zag}^P := \lim_{\sigma \rightarrow 0} u_\sigma$ e gli angoli delle rispettive normali. Abbiamo chiaramente utilizzato il termine *zig-zag* per mettere in evidenza la particolare struttura di questo campo di fase e l'indice P per esprimere la sua dipendenza dal punto $P \in Q \times \{x_1 \geq 0\}$, che ci permette di scrivere esplicitamente $f(P) := F_{flat}(u_{zig-zag}^P)$ in funzione di $P = (x_1, x_2)$. Infatti, per ogni $\theta \in [-\pi, \pi)$, si ha

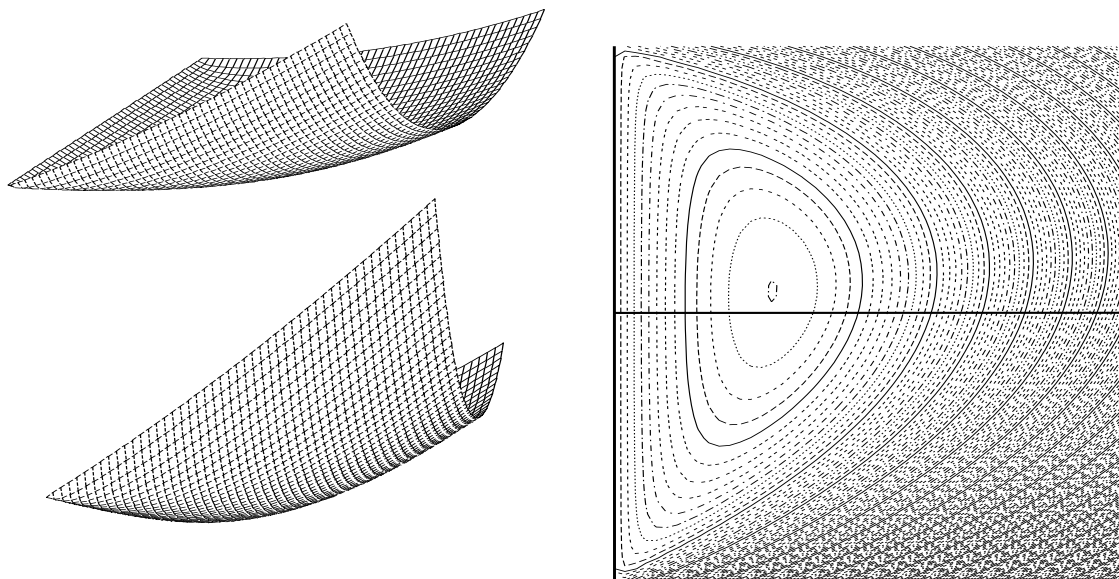
$$\gamma_{11}(\theta) + \gamma_{22}(\theta) = \frac{1}{4\pi(1-\nu)} (2 - 2\nu \sin^2 \theta + 2 - 2\nu \cos^2 \theta) = \frac{2-\nu}{2\pi(1-\nu)}.$$

D'altra parte risulta

$$\begin{aligned} |L_1| &= \sqrt{x_1^2 + (1/2 - x_2)^2}, & |L_2| &= \sqrt{x_1^2 + (1/2 + x_2)^2}, \\ \begin{cases} x_1 = -|L_2| \sin \theta_2 \\ x_2 + 1/2 = |L_2| \cos \theta_2 \end{cases} &\implies \sin 2\theta_2 = 2 \sin \theta_2 \cos \theta_2 = -\frac{x_1(2x_2 + 1)}{x_1^2 + (1/2 + x_2)^2}, \end{aligned}$$

da cui segue che

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= \frac{2-\nu}{2\pi(1-\nu)} \left(\sqrt{x_1^2 + (1/2 - x_2)^2} + \sqrt{x_1^2 + (1/2 + x_2)^2} \right) - \\ &\quad - \frac{\nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(2x_2 + 1)}{\sqrt{x_1^2 + (1/2 + x_2)^2}}. \end{aligned}$$



La figura mostra due diverse visuali di f e le sue curve di livello, da cui deduciamo che esiste un unico punto $\bar{P} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2) \neq (0, 0)$, cui corrisponde un preciso campo di fase $\bar{u} := u_{zig-zag}^{\bar{P}}$, tale che

$$f(\bar{P}) = \min_{Q \times \{x_1 \geq 0\}} f(P).$$

In particolare, per $P = (0, 0)$, risulta

$$|L_1| + |L_2| = 1, \quad \theta_1 = \theta_2 = 0, \quad \gamma_{12}(0) = 0, \quad u_{zig-zag}^P = u_{(1,1)}^0$$

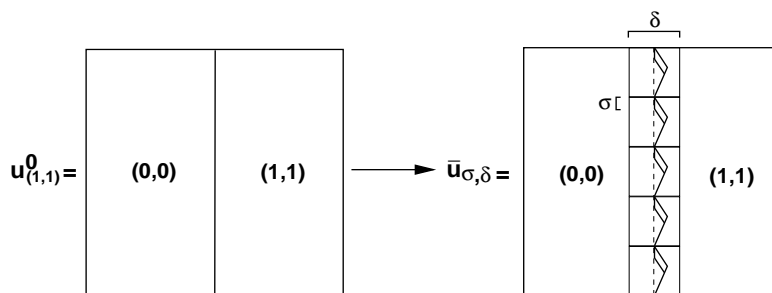
da cui segue che

$$F_{flat}(\bar{u}) < F_{flat}(u_{(1,1)}^0). \quad (5.7)$$

Possiamo allora utilizzare il profilo del campo \bar{u} per costruire una successione u_ϵ che approssima $u_{(1,1)}^0$. Indichiamo con \bar{L}_1, \bar{L}_2 e $\bar{\theta}_1, \bar{\theta}_2$ i due segmenti di salto di \bar{u} e gli angoli delle rispettive normali. Consideriamo quindi l'approssimazione \bar{u}_σ definita precedentemente, che separa i salti di \bar{u} solo lungo \bar{L}_1 , ed estendiamola su \mathbb{R}^2 per periodicità nella variabile x_2 . Per ogni δ tale che $\sigma \ll \delta \ll 1$ definiamo il campo di fase $\bar{u}_{\sigma,\delta}(x) = \bar{u}_\sigma(x/\delta)$ (si veda la figura successiva).

Da (5.6) e (5.7) risulta

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\sigma \rightarrow 0} F_{flat}(\bar{u}_{\sigma,\delta}) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\delta} \right] \left\{ (\gamma_{11}(\bar{\theta}_1) + \gamma_{22}(\bar{\theta}_1)) |\bar{L}_1| \delta + \right. \\ &\left. + (\gamma_{11}(\bar{\theta}_2) + 2\gamma_{12}(\bar{\theta}_2) + \gamma_{22}(\bar{\theta}_2)) |\bar{L}_2| \delta \right\} < F_{flat}(u_{(1,1)}^0). \end{aligned} \quad (5.8)$$



Scegliamo quindi due successioni infinitesime $\sigma = \sigma_\varepsilon$, $\delta = \delta_\varepsilon$ tali che $\varepsilon \ll \sigma_\varepsilon \ll \delta_\varepsilon$ e mollifichiamo $\bar{u}_{\sigma_\varepsilon, \delta_\varepsilon}$ su scala ε definendo $v_\varepsilon = \bar{u}_{\sigma_\varepsilon, \delta_\varepsilon} * \phi_\varepsilon$ e $u_\varepsilon = u_{(1,1)}^0 * \phi_\varepsilon$. Allora da (5.8), concludiamo che

$$v_\varepsilon \rightarrow u_{(1,1)}^0$$

e

$$F_{zig-zag}(u_{(1,1)}^0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(v_\varepsilon, Q) < \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q) = F_{flat}(u_{(1,1)}^0).$$

Questo esempio conferma che F_{flat} non può essere, come nel caso scalare, il Γ -limite del funzionale F_ε delle dislocazioni, mostrando che in generale il profilo di una transizione ottimale non è unidimensionale. Vale la pena osservare che esempi analoghi sono stati trovati in molti modelli vettoriali provenienti da diverse aree della matematica applicata, come la teoria del doppio gradiente per le transizioni di fase e il micromagnetismo (si veda [14],[17],[7]).

Bibliografia

- [1] G. Alberti, S. Baldo, G. Orlando, *Variational convergence for functionals of Ginzburg-Landau type*, Indiana Univ. Math. J. **54** (2005), 1411-1472
- [2] G. Alberti, G. Bellettini, *A non-local anisotropic model for phase transitions: asymptotic behaviour of rescaled energies*, European J. Appl. Math. **9** (1998), 261-284
- [3] G. Alberti, G. Bellettini, *A non-local anisotropic model for phase transitions: the optimal profile problem*, Math. Ann. European J. Appl. Math. **310** (1998), 527-560
- [4] G. Alberti, G. Bellettini, M. Cassandro, E. Presutti *Surface tension in Ising systems with Kac potential*, J. Stat. Phys. **82** (1996), 743-796
- [5] G. Alberti, G. Bouchitté e P. Seppecher, *Phase transitions with line tension effect*, Arch. Rational Mech. Anal. **144** (1998), 1-49
- [6] G. Alberti, G. Bouchitté e P. Seppecher, *Un résultat de perturbations singulières avec la norme $H^{\frac{1}{2}}$* , C. R. Acad. Sci. Paris, **319-I** (1994), 333-338
- [7] F. Alouges, T. Rivière and S. Serfaty, *Néel and cross-tie wall energies for planar magnetic configurations*, ESAIM Control Optim. Calc. Var. **8** (2002) 31-68.
- [8] L. Ambrosio, *A compactness theorem for a new class of functions of bounded variation*, Boll. Un. Mat. Ital. **3-B** (1989), 857-881
- [9] L. Ambrosio and A. Braides, *Functionals defined on partitions of sets of finite perimeter, I: integral representation and Γ -convergence*, J. Math. Pures. Appl. **69** (1990), 285-305.
- [10] L. Ambrosio and A. Braides, *Functionals defined on partitions of sets of finite perimeter, II: semicontinuity, relaxation and homogenization*, J. Math. Pures. Appl. **69** (1990), 307-333.

- [11] F. Bethuel, H. Brezis, F. Hélein, *Ginzburg-Landau vortices*, Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications **13**, Birkhäuser, Basel-Boston, 1994
- [12] A. Braides, *Γ -convergence for beginners*, Oxford Lecture Series in Mathematics and its Applications **22**, Oxford, Oxford University Press, 2002
- [13] J.W. Cahn e J.E. Hilliard, *Free energy of a non-uniform system I - Interfacial free energy*, J. Chem. Phys. **28** (1958), 258-267
- [14] S. Conti, I. Fonseca and G. Leoni, *A Γ -Convergence Result for the Two-Gradient Theory of Phase Transitions*, Comm. Pure Appl. Math. **55** (2002), 857-936
- [15] G. Dal Maso, *An introduction to Γ -convergence*, Birkhäuser, Boston, 1993
- [16] E. De Giorgi, G. Letta, *Une notion générale de convergence faible pour des fonctions croissantes d'ensemble*, Ann. Sc. Norm. Sup. Pisa Cl. Sci. **4** (1977), 61-99
- [17] A. De Simone, R.V. Kohn, S. Müller and F. Otto, *Recent analytical developments in micromagnetics*, preprint, Max Planck Institute, Leipzig
- [18] L.C. Evans e R.F. Gariepy, *Measure theory and fine properties of functions*, Studies in Advanced Mathematics, CRC Press, Boca Raton, 1992
- [19] H. Federer, *Geometric Measure Theory*, Springer-Verlag, New York, 1969
- [20] I. Fonseca, L. Tartar, *The gradient theory of phase transition*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A **111** (1989), 89-102
- [21] E. Giusti, *Minimal Surfaces and Functions of Bounded Variation*, Monographs in Mathematics **80**, Birkhäuser, Basel-Boston, 1984
- [22] A. Garroni e S. Müller, *A variational model for dislocations in the line tension limit*, Arch. Ration. Mech. Anal. **181** (2006), 535-578
- [23] J.P. Hirth e J. Lothe, *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill, New York, 1968
- [24] R.V. Kohn, P. Sternberg, *Local minimizers and singular perturbations*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A **111** (1989), 69-84
- [25] M. Koslowski, A.M. Cuitino e M. Ortiz, *A phase-field theory of dislocation dynamics, strain hardening and hysteresis in ductile single crystals*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids **50** (2002), 2597-2635.

- [26] M. Koslowski e M. Ortiz, *A Multi-Phase Field Model of Planar Dislocation Networks*, preprint, California Institute of Tecnology, Pasadina
- [27] M. Kurzke, *A non local singular perturbation problem with periodic well potential*, preprint, Max Planck Institute, Leipzig
- [28] L. Modica e S. Mortola, *Il limite nella Γ -convergenza di una famiglia di funzionali ellittici*, Boll. Un. Mat. Ital. **14** (1977), 526-529.
- [29] L. Modica e S. Mortola, *Un esempio di Γ -convergenza*, Boll. Un. Mat. Ital. **14** (1977), 285-299.
- [30] L. Modica, *The gradient theory of phase transition and the minimal interface criterion*, Arch. Rational Mech. Anal. **98** (1987), 123-142
- [31] A.A. Pihlaja, *Modeling Grain Boundary Structures Using Energy Minimization*, phd thesis, New York University, New York
- [32] E. Presutti, *From statistical mechanics towards continuum mechanics*, preprint, Max Planck Institute, Leipzig

