

# CONCLUSIONES FINALES

A lo largo de esta tesis hemos trabajado con la aproximación de campo medio, con el objeto de aplicarla a algunos modelos que presentan transiciones de fase orden-desorden orientacional. Para esto hemos desarrollado, en el capítulo II, un formalismo que tiene en cuenta interacciones de a pares entre los constituyentes del sistema, y hemos obtenido la función de distribución en términos de un conjunto de parámetros que dependen de la temperatura. Esta función contiene toda la información termodinámica del sistema.

Este formalismo ha sido aplicado a cristales con moléculas reorientables y a sistemas magnéticos. En los primeros, tratados en el capítulo III, los ángulos de orientación de las moléculas pueden variar en forma continua. En particular, nuestro trabajo sobre estos sistemas se centró en el estudio de una red lineal (como caso límite de una red rectangular) de dipolos y cuadrupolos, que pueden reorientarse en un plano. Para este sistema se obtuvo un diagrama de fases rico en configuraciones. Los rasgos más interesantes ocurren en un intervalo estrecho del cociente  $p/Q$ , y se han detectado dentro de éste, siete fases distintas. Asimismo, hemos observado dos comportamientos de fundamental interés:

a) La aparición de un doble pozo de potencial creado por las distribuciones de carga de las propias moléculas y no por distribuciones externas (hecho no observado en la red cuadrada de dipolos y cuadrupolos).

b) Para un cierto intervalo de valores de  $p/Q$  se produce un ordenamiento local de las moléculas, de dos de las cuatro subredes, cuando aumenta la temperatura. Sin embargo, el resto de las moléculas que componen la celda unidad aumenta su entropía, de manera tal que la entropía total del sistema siempre aumenta.

En el capítulo IV, el formalismo fue aplicado a un sistema magnético 3D con interacciones a primeros y segundos vecinos en una dirección y a primeros en un plano perpendicular, permitiéndosele a los espines desordenarse en un plano tomando un continuo de orientaciones. A través de la obtención del diagrama de fases pudo encontrarse que no existen cambios cualitativos respecto de aquel sistema que puede desordenarse tomando sólo dos orientaciones. Sin embargo, se observó un cambio en un factor  $1/2$  en la temperatura crítica del sistema con desordenamiento continuo respecto al discreto. A través de nuestros cálculos no pudimos llegar a la conclusión de la existencia o no de la "escalera del diablo", pero en caso de que existiera tendría algunos escalones de medida casi nula y otros muy anchos. También en este capítulo se utilizó el modelo para explicar las transiciones de fase ferroeléctrica-modulada-paraeléctrica en el  $\text{NaNO}_2$  y, como la MFA con interacción dipolar pura da resultados que están lejos de los observados experimentalmente, se mostró cómo pueden incluirse interacciones de corto alcance para dar cuenta de la longitud de onda correcta en la fase modulada. Por último discutimos un sistema de espines que puede reorientarse tomando un número  $R \neq 2$  de orientaciones en un plano, y llegamos a la conclusión de que la temperatura crítica de un sistema con estas características es la misma (al menos en la MFA) que la que presenta un sistema con desorden continuo, para cualquier valor de  $R$ .

Por último en el capítulo V investigamos un sistema magnético con interacciones de dos y cuatro cuerpos en una dirección y a primeros vecinos en un plano perpendicular. Desarrollamos con detalle el formalismo, (utilizando una aproximación más fuerte que la del cap. II), y en base a esto obtuvimos la energía libre y la función de distribución. De esta manera nos fue posible construir el diagrama de fases. Si bien éste tiene algunas características que no coinciden con las de los diagramas obtenidos con métodos más precisos (Monte Carlo, finite

size scaling, etc.) aquí también hemos observado la transición de primer orden, muy importante en este tipo de modelos. Para poder entender los mecanismos que la producen estudiamos un modelo lineal con interacción de  $n$  cuerpos. Allí mostramos de una manera muy sencilla que habrá transiciones de primer orden siempre que uno considere un tipo de interacción que involucre un número de cuerpos mayor que dos. Con respecto a la posible aparición de fases moduladas, llegamos a la conclusión de que el modelo "2+4" no las presenta, hecho que concuerda con lo hallado por otros autores.

### Como mejorar los resultados?

Existen dos formas totalmente distintas de obtener resultados mejores que los de la MFA. La primera es utilizar técnicas de cálculos más precisa, como Monte Carlo, finite size scaling, etc., lo que sería apartarse totalmente de la línea de este trabajo. La otra, que significaría una posible continuación de estos cálculos, sería la de introducir el efecto de las correlaciones. Como ya dijimos, es de esperar que los resultados obtenidos en este trabajo no se vean modificados en gran medida cuando el alcance de la interacción es de largo alcance. Sin embargo, en el caso de modelos magnéticos este efecto es muy importante cerca de la transición, por lo que la inclusión del mismo debería mejorar en forma notable los diagramas de fases por nosotros obtenidos, al menos en las proximidades de la zona crítica.

Otra manera de continuar esta línea de trabajo sería, por ejemplo, permitiendo que los momentos multipolares o espines puedan desplazarse de sus posiciones de equilibrio. También el hecho de agregar barreras de potencial, para privilegiar ciertas orientaciones, de modo de representar fuerzas de corto alcance, debería, en principio, mejorar los resultados obtenidos aquí. Algunos de estos aspectos serán tenidos en cuenta como continuación de esta línea de investigación.