

CAPITULO IV

EL MODELO ANNNI

1 INTRODUCCION

Estructuras moduladas con períodos que son inconmensurados (o conmensurados de alto orden) con la red son muy comunes en la física de la materia condensada.

Uno de los modelos más simples que presenta fases inconmensuradas es el ANNNI (sigla que en inglés significa Axial Next-Nearest-Neighbour Ising [1]). Este modelo que tiene en cuenta sólo interacciones de a pares entre espines o dipolos (de aquí en más hablaremos de espines, pero el desarrollo para dipolos es exactamente el mismo), desprecia cualquier tipo de interacción que supere los segundos vecinos. Durante largos años ha sido objeto de estudio debido a su interesante aplicabilidad a, entre otros compuestos, tierras raras magnéticas como CeSb [2], aleaciones binarias como Ag_3Mg [3,4], CuAu [5], Au_4Zn [6], TiAl_3 [7], monocapas de gases raros adsorbidas sobre grafito [8,9] (éstas constituyen una realización bidimensional) y materiales dieléctricos como NaNO_2 [10-12] y K_2SeO_4 [13] (que fueron los primeros en los que se observaron fases inconmensuradas). Distintos son los mecanismos que parecen producir la aparición de estas fases.

En materiales dieléctricos un mecanismo de competencia entre las interacciones dipolares entre primeros y segundos vecinos da cuenta de fases moduladas, al igual que en materiales magnéticos (en este caso interacción espín-espín). En el caso de monocapas adsorbidas, la modulación aparece debido a un acoplamiento entre redes de distintas periodicidades, al igual que en conductores en los que se produce una interacción entre los electrones de conducción y los átomos de la red (mecanismo de Peierls).

La versión tridimensional del modelo ANNNI fue introducida por Elliott [14] en el año 1961, con la intención de explicar algunas de las observaciones experimentales de fases moduladas observadas a bajas temperaturas en el Er, proponiendo un mecanismo de competencia entre espines de primeros y segundos vecinos.

En aquellos años los análisis teóricos de modelos con interacciones competitivas se encontraban restringidos a las aproximaciones de ondas de espín a bajas temperaturas y cálculos de campo medio cercanos a la transición a la fase desordenada. Por otro lado, detalles finos de las estructuras espacialmente moduladas no podían ser resueltos con las técnicas experimentales de la época, por lo que el tema fue perdiendo interés.

Sin embargo, a fines de la década del 70 y principios de la del 80 progresos significativos en varias direcciones revitalizaron las actividades teóricas, que aún siguen desarrollándose. Entre ellos se destacan:

a) El estudio de los fenómenos críticos y las transiciones de fase se encontraba en su apogeo, y se había encontrado que las estructuras moduladas estaban asociadas a un nuevo punto multicrítico, el punto de Lifshitz, introducido por Hornreich, Luban y Shtrikman [15]. En ese contexto, el modelo ANNNI fue estudiado con el propósito de encontrar los puntos de Lifshitz y los exponentes críticos usando desarrollos $1/n$ [16] alrededor del modelo esférico [17], desarrollos

de altas temperaturas [18] y simulación de Monte Carlo [19].

b) Un mejor entendimiento de las estructuras con fases moduladas fue logrado por Aubry [20,21] en un trabajo sobre propiedades del estado fundamental de una cadena armónica en un potencial sinusoidal, lo que lo llevó a importantes conceptos como el de la "escalera del diablo", es decir zonas donde sólo aparecen fases conmensuradas [22]. De esto hablaremos en la sección siguiente.

c) Otra razón para renovar el interés a las estructuras espacialmente moduladas fue el hecho de que los rasgos topológicos podían ser fácilmente visualizados en largas simulaciones computacionales, iniciadas el modelo ANNNI [23].

d) Una nueva línea de investigación fue abierta por Fisher y Selke [1,24] utilizando un desarrollo de bajas temperaturas para estudiar el complejo orden del modelo ANNNI. Se pudo demostrar que un número infinito de distintas fases, cuya periodicidad es conmensurada con la estructura de la red, surgen de un "punto multifase" especial a temperatura cero.

Estos avances teóricos en la comprensión de propiedades complejas de modelos simples con interacciones competitivas fueron corroborados usando técnicas experimentales de alta resolución para estudiar superestructuras en distintos materiales. Esto hace que continuamente se vean motivados los esfuerzos teóricos para identificar los rasgos típicos de modelos simples y acercarse a modelos más realistas que permitan explicar las observaciones experimentales.

2 MODELO Y DIAGRAMA DE FASES

En el caso del modelo ANNNI el Hamiltoniano, en la MFA, para una red tetragonal simple con interacciones competitivas en una dirección (ver figura IV.1) toma

la forma

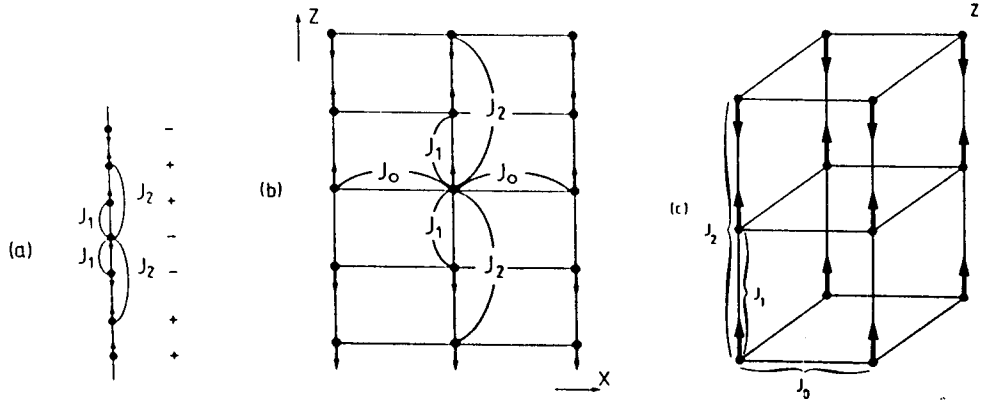


FIGURA IV.1. El modelo ANNNI en una a) red lineal, b) red rectangular, c) red tetragonal.

$$H = - \sum_{i=1}^N [2J_0 M_i^2 + J_1 M_i M_{i+1} + J_2 M_i M_{i+2}] , \quad (4.1)$$

donde M_i representa el valor medio del espín en el sitio i y se ha supuesto que cada espín sólo interactúa con los primeros vecinos en un plano perpendicular a la dirección en que actúan las interacciones competitivas, y que los espines de este plano se encuentran, en promedio, en el mismo estado. Si por simplicidad suponemos que las constantes de acoplamiento J_0 y J_1 son iguales, obtenemos un Hamiltoniano de la forma

$$H/J_1 = - \sum_{i=1}^N [2M_i^2 + M_i M_{i+1} - \kappa M_i M_{i+2}] , \quad (4.2)$$

donde $\kappa = -J_2/J_1$ y hemos supuesto que hay una cierta periodicidad N , de manera que el espín del sitio $N + 1$ está, en promedio, en el mismo estado que el espín del sitio 1.

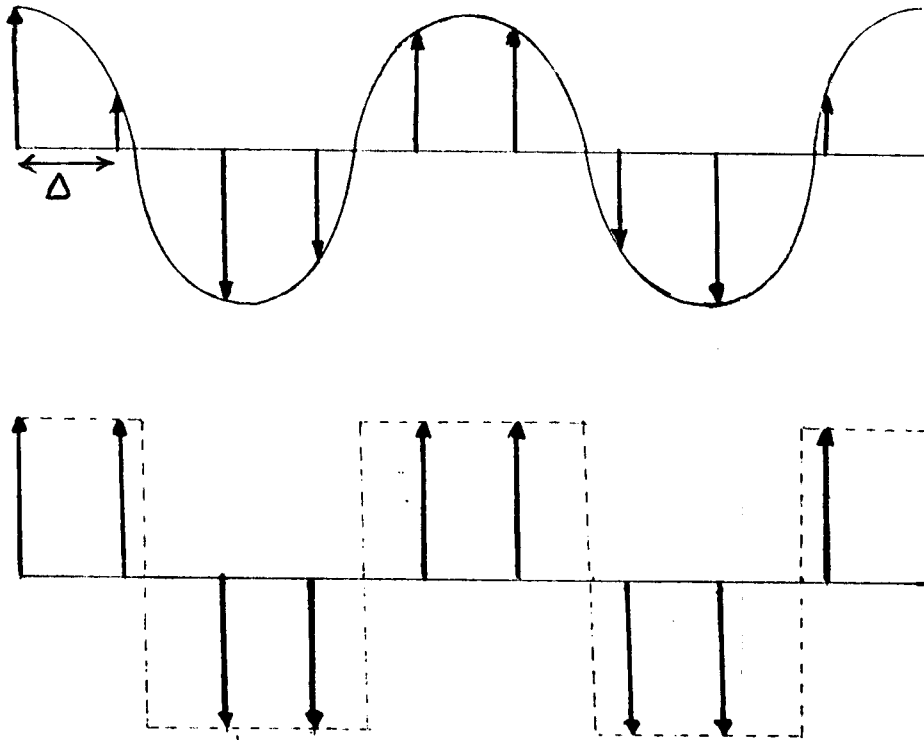


FIGURA IV.2. Modulaciones propuestas a $T = 0$. En el gráfico se tomó como ejemplo $\lambda = 4.5$.

Para el estudio de las configuraciones a $T = 0$ K se han propuesto dos tipos de modulaciones diferentes (figura IV.2), a las que llamamos:

i) Sinusoidal: el espín del sitio l respecto a un origen O será:

$$S_l = S_0 \cos \left[\frac{2\pi}{\lambda} (l - 1) + \phi \right] \quad (4.3)$$

(si bien a $T = 0$ K no existe agitación térmica, uno podría suponer que, por algún mecanismo, una de las componentes (en este caso la z) se encuentra modulada; además para $\kappa \sim 1/2$ las fases moduladas existen hasta temperaturas muy bajas).

ii) Escalón: el valor del espín del sitio l será $+1, 0, -1$ según que el obtenido de 4.3 sea positivo, nulo o negativo respectivamente.

Utilizando la expresión de H dada por la ecuación 4.2 (donde M se reemplaza por S_l) encontramos que siempre las configuraciones moduladas tipo escalón son más estables que las sinusoidales. En la figura IV.3 se muestran las configuraciones de energía mínima en el plano (J_1, J_2) .

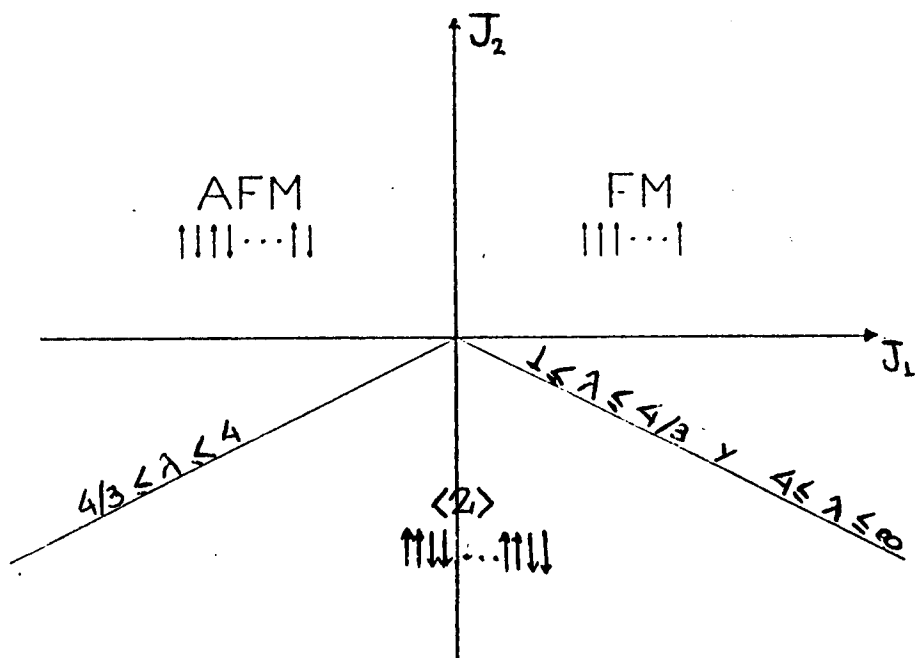


FIGURA IV.3. Configuraciones de energía magnética mínima a $T = 0$ K.

Existen fundamentalmente tres fases: una ferromagnética (FM) para $J_1 > 0$, una antiferromagnética (AFM) para $J_1 < 0$ y una fase del tipo "2 arriba y 2 abajo" (llamada $\langle 2 \rangle$) en la región $|J_2/J_1| < 1/2$.

Las líneas $J_2/J_1 = \pm 1/2$ son infinitamente degeneradas es decir, coexisten en ellas infinitas configuraciones con la misma energía magnética, con la siguiente característica: sobre la línea $J_2/J_1 = +1/2$ se encuentran aquellas configura-

ciones con longitud de onda $4/3 \leq \lambda \leq 4$ y para la línea $J_2/J_1 = -1/2$ se encuentran 2 grupos, uno que tiene $1 \leq \lambda \leq 4/3$ y otro con $4 \leq \lambda \leq \infty$. La explicación para la aparición de determinada longitud de onda en una u otra línea es la siguiente. Si uno considera el grupo de $4/3 \leq \lambda \leq 4$ se ve que el primer vecino del espín del origen cae en la zona en que su valor es -1 (figura IV.4a). Si $J_1 < 0$ esa configuración se ve favorecida, y como $J_2 < 0$, el cociente es positivo y el grupo coexistirá en $J_2/J_1 = +1/2$. Para los otros dos grupos, el razonamiento es similar, y se ve que tanto para $1 \leq \lambda \leq 4/3$ como para $4 \leq \lambda \leq \infty$, el primer vecino tiene su espín con valor +1 (figura IV.4b y 4c), por lo cual las configuraciones coexistirán en la línea $J_2/J_1 = -1/2$.

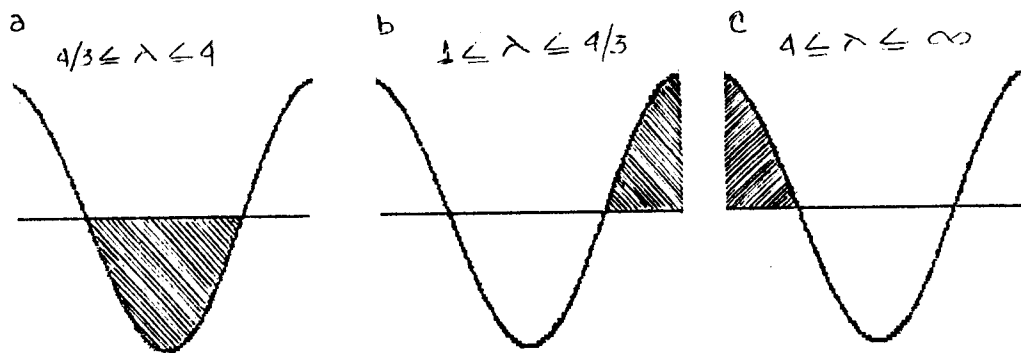


FIGURA IV.4. La zona rayada indica la posición del primer vecino con respecto al espín del origen, de acuerdo a λ .

También se puede observar que existe un isomorfismo entre longitudes de onda (λ') cuyas configuraciones se encuentran sobre la recta $J_2/J_1 = 1/2$ y aquéllas (λ) sobre la recta $J_2/J_1 = -1/2$ [25]. Este isomorfismo hace que bajo una dada transformación $\lambda \rightarrow \lambda'$ y $J_1 \rightarrow -J_1$ la energía magnética no cambie. Esta transformación es

$$\lambda' = \frac{2\lambda}{\lambda - 2}, \quad (4.4)$$

que reemplazada en la ecuación (4.3) da

$$S'_l = (-1)^{l-1} S_l \quad (4.5)$$

Esta transformación nos será de mucha utilidad en el cálculo de la energía libre de las fase moduladas, ya que seguirá siendo válida para $T > 0$ K.

Para el caso de $T \neq 0$ K, uno puede considerar un modelo ANNNI con dos tipos de desorden (tal como lo hemos anticipado en el Capítulo II).

i) Desorden de tipo discreto: el espín sólo puede tomar los valores ± 1 en un eje, por ejemplo el z .

ii) Desorden de tipo continuo: el espín puede desordenarse en forma continua en un plano que contiene al eje donde está presente la competencia, de manera que la proyección sobre uno de los ejes, por ejemplo z , tome cualquier valor entre 1 y -1.

Es conveniente estudiar el diagrama de fases en dos partes:

a) $T \rightarrow T_c$

b) $0 < T < T_c$,

donde T_c es la temperatura crítica del paso de una fase ordenada a la fase paramagnética (PM).

a) El estudio de la línea de transición de la fase ordenada a la PM, se llevará a cabo para los dos tipos de reorientación.

Comencemos con el caso de reorientación discreta. Justo debajo de la línea crítica, se comprueba que la modulación es estrictamente sinusoidal [26], y uno puede reemplazar en la ecuación 2.61 el valor de los M_i como sigue:

$$M_i = A \cos(qi + \phi) \quad (4.6)$$

donde A es constante, $q = \frac{2\pi}{\lambda}$ y ϕ es una fase, que por ahora elegiremos como 0. Poniendo el origen en el i -ésimo espín, y teniendo en cuenta que cuando $T \rightarrow T_c$ todos los $|M_i| \rightarrow 0$, de manera que se puede reemplazar $\tanh x$ por x , se obtiene una expresión de la forma

$$\frac{k_B T_c}{J_0} = 4 + 2 \cos q - 2\kappa \cos 2q \quad (4.7)$$

que da cuenta de cómo varía la temperatura crítica con el vector de onda q , justo por debajo de la línea de transición a la fase PM. Uno puede encontrar el valor de q para el cuál la temperatura crítica es máxima como función de κ , derivando 4.7 respecto de q . Esto da:

$$q = \cos^{-1} \frac{1}{4\kappa} \quad (4.8)$$

Claramente se ve que si uno reemplaza q por 0 (o sea $\lambda = \infty$), el valor de κ es $1/4$, y éste es un punto en el cual coexisten tres fases ("punto de Lifshitz"): FM, PM y modulada.

Reemplazando 4.8 en 4.7, se obtiene una expresión para la temperatura crítica

$$\frac{k_B T_c}{J_0} = 4 + \begin{cases} 2 - 2\kappa & \text{si } \kappa \leq 1/4 \\ 2\kappa + \frac{1}{4\kappa} & \text{si } \kappa \geq 1/4 \end{cases} \quad (4.9)$$

Es decir que por debajo del punto de Lifshitz ($\kappa \leq 1/4$) la temperatura crítica disminuye en forma lineal con κ con pendiente $-2J_0/k_B$, mientras que por encima de dicho punto la temperatura crítica varía en forma hiperbólica y el mínimo de esta curva es hallado derivando la expresión 4.9 respecto de κ , lo que da un valor $\kappa = \sqrt{\frac{1}{8}}$.

Para el caso de desorden continuo ocurre algo bastante similar. La modulación también es sinusoidal cerca de T_c , y esta modulación debe ser reemplazada en la ecuación (2.55) del capítulo II, reescrita de la forma

$$\begin{aligned} k_B T u_i \sin \alpha_i - 4J_0 R(u_i) \text{sen} \alpha_i - 2J_1 R(u_{i+1}) \text{sen} \alpha_{i+1} \\ - 2J_2 R(u_{i+2}) \text{sen} \alpha_{i+2} = 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

El comportamiento de $R(u) = \frac{I_1(u)}{I_0(u)}$ es mostrado en la figura IV.5. Para $u \rightarrow 0$ la función $R(u) \rightarrow u/2$.

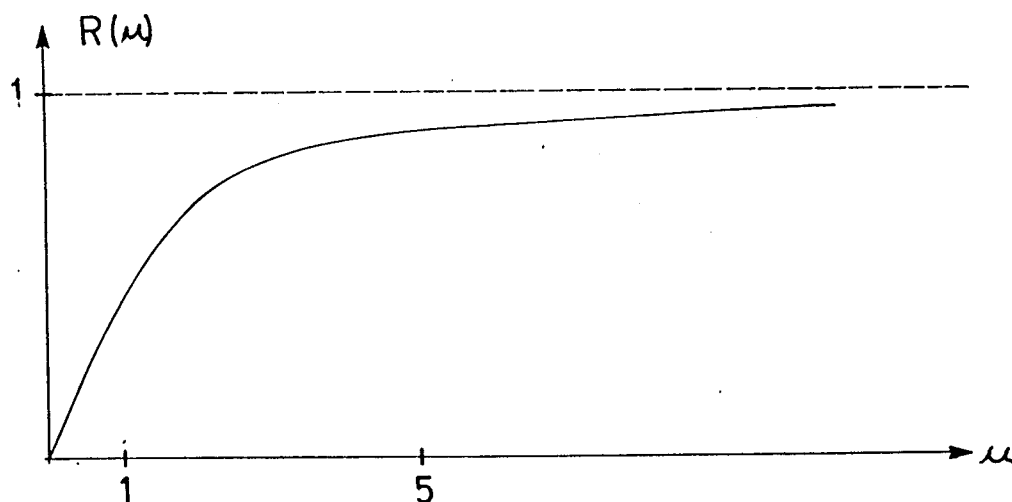


FIGURA IV.5. Comportamiento de la función $R(u) = \frac{I_1(u)}{I_0(u)}$ en función de u .

Para $T \rightarrow T_c$ los valores medios de los espines tienden a 0 como las u_i , lo que nos permite suponer $u_i = A \cos qi$, ($A \rightarrow 0$) y $\alpha = \pi/2$. Reemplazando en 4.10 obtenemos

$$k_B T_c - 2J_0 - J_1 \cos q - J_2 \cos 2q = 0 . \quad (4.11)$$

Haciendo $J_1 = J_0$ se llega a

$$\frac{k_B T_c}{J_0} = 2 + \cos q - \kappa \cos 2q . \quad (4.12)$$

Comparando 4.12 con 4.7 podemos ver que la temperatura crítica con desorden de tipo continuo es la mitad que la del tipo discreto. Esto es razonable si uno piensa que es más sencillo desordenar a un espín o dipolo en una orientación continua que en sólo dos orientaciones. Más adelante volveremos a ocuparnos de

este tema. Para encontrar el valor de q que hace máxima la temperatura crítica, derivamos (4.12) respecto a q e igualamos a 0. Esto da

$$q = \cos^{-1} \frac{1}{4\kappa} , \quad (4.13)$$

que es exactamente igual a 4.8. Reemplazando en 4.12 obtenemos

$$\frac{k_B T_c}{J_0} = 2 + \begin{cases} 1 - \kappa & \text{si } \kappa \leq 1/4 \\ \kappa + \frac{1}{8\kappa} & \text{si } \kappa \geq 1/4 \end{cases} . \quad (4.14)$$

Vemos que la dependencia de la temperatura crítica es similar, aunque en el caso $\kappa \leq 1/4$ la pendiente es $-J_0/k_B$. Si calculamos el punto de Lifshitz utilizando 4.14, llegamos al mismo valor $\sqrt{\frac{1}{8}}$ del caso discreto.

Como conclusión de este punto *a*, podemos decir que el comportamiento del sistema en la línea de transición de una fase ordenada a la fase PM es cualitativamente el mismo ya sea que el sistema pueda desordenarse en forma continua o discreta, mientras que la temperatura crítica del segundo caso es el doble que la del primero. Esto se debe a que las funciones que se hallan presente en los dos tipos de reorientación, $\tanh x$ y $R(x)$, no se comportan de la misma manera cuando uno se acerca a la transición, es decir, $x \rightarrow 0$.

b) Para el caso de temperaturas intermedias, el diagrama de fases suponiendo reorientación discreta, utilizando MFA, es mostrado en la figura IV.6 [2,26].

La ecuación (2.61) es resuelta en forma iterativa para redes finitas de L planos, $L = 2, 3, 4, \dots$, con condiciones de contorno periódicas, de manera de comparar las energías libres de las distintas soluciones. En un análisis completo, todos los L enteros deberían ser considerados. Obviamente esto no es posible y se hace necesario utilizar distintas técnicas de cálculo para ir conformando los rasgos topológicos del diagrama de fases.

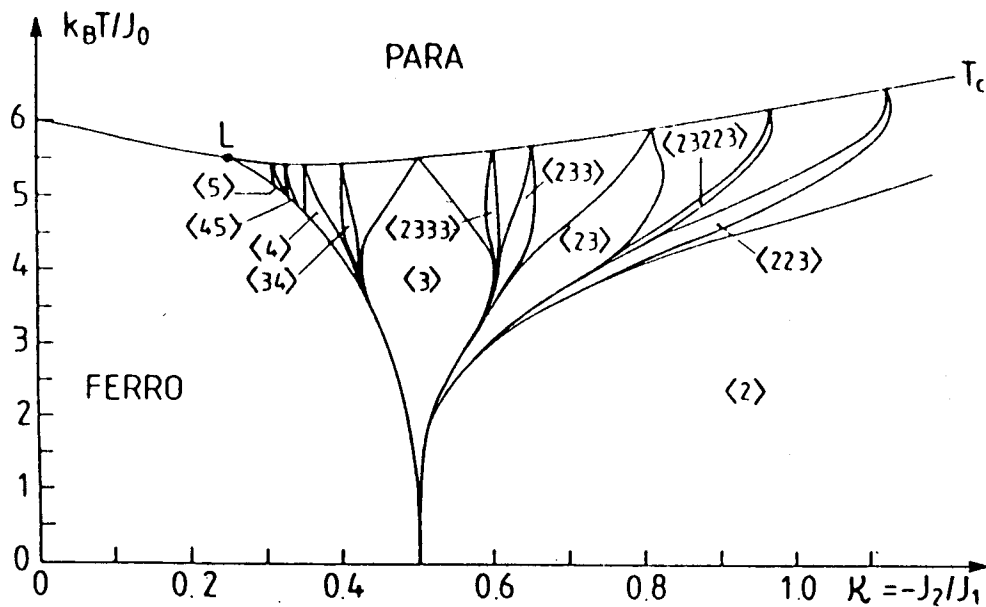


FIGURA IV.6. Diagrama de fases del modelo ANNNI para una red cúbica, para un sistema que puede desordenarse tomando sólo las orientaciones "arriba" y "abajo" [2,26].

Uno puede estudiar la vecindad de una cierta fase conmensurada desarrollando la energía libre cerca del correspondiente valor de q [2]. En particular, tal desarrollo fue hecho alrededor de la fase $\langle 2 \rangle$ considerando una magnetización de la forma

$$M_i = A \cos \left[\frac{\pi i}{2} + \phi_i \right] \quad (4.15)$$

(aquí A es asumida como constante, mientras que ϕ_i puede ser espacialmente dependiente), donde se encuentra que ϕ satisface la ecuación estática de sine-Gordon [2]. De esta manera justo por encima de la fase $\langle 2 \rangle$ pueden aparecer fases moduladas, las que pueden ser descritas en términos de solitones [2]

(solución de la ecuación de sine-Gordon) o paredes de dominios [27]. En términos de solitones, la energía libre puede ser escrita como suma de dos términos correspondientes a la energía de formación del solitón y a la interacción entre solitones. Este método predice que la fase $\langle 2 \rangle$ se transforma en fases moduladas en forma cuasi-continua. A través del uso de una aproximación parabólica de campo medio a bajas temperaturas cercana al punto $\kappa = 1/2, T = 0$, se encuentra que el contorno de la fase $\langle 2 \rangle$ es débilmente de primer orden. La distancia entre las paredes en la transición diverge a medida que T tiende a 0, es decir, la transición se vuelve cuasi-continua en ese límite.

Por último diremos que un desarrollo en serie de bajas temperaturas alrededor de la fase $\langle 2 \rangle$ muestra que sólo fases conmensuradas del tipo $\langle 2^{k-1} 3 \rangle$, con $k = 1, 2, 3, \dots$, surgen del punto multifase $\kappa = 1/2, T = 0$. $\langle 2^{k-1} 3 \rangle$ denota una fase de $k - 1$ sucesivas bandas-2 seguidas por una banda-3 (por ejemplo, $\langle 2^2 3 \rangle$ denota: ...+ + - - + + + - - + + - - -...). El número de onda en la fase $\langle 2^{k-1} 3 \rangle$ es

$$q_k = \frac{\pi k}{(2k + 1)} \quad (4.16)$$

Para explorar temperaturas intermedias, donde aparecen fases conmensuradas más complicadas, es posible, basándose en las fases $\langle 2^{k-1} 3 \rangle$, utilizar un proceso denominado "structure combination branching processes" [24] el que propone que dos fases adyacentes, por ejemplo $\langle 2 3 \rangle$ y $\langle 3 \rangle$ (o en general dos fases A y B) están separadas por encima de un cierto punto, llamado punto de acumulación, por una fase dada por la combinación de ambas, es decir $\langle 2 3 3 \rangle$ (o $\langle A B \rangle$). El punto de acumulación en este caso vale $k_B T / J_0 = 0.851..$ [26]; el nuevo contorno $\langle 2 3 3 \rangle : \langle 2 3 \rangle$ forma la fase $\langle 2 3 2 3 3 \rangle$ en $k_B T / J_0 = 0.882..$; más adelante el contorno $\langle 2 3 2 3 3 \rangle : \langle 2 3 \rangle$ forma la $\langle 2 3 2 3 2 3 3 \rangle$ en $k_B T / J_0 = 1.07\dots$, etc.

El proceso de formación de ramas en el contorno de la fase $\langle 3 \rangle$ fue realizado con fases $\langle 2 3^n \rangle$ con $n \leq 13$. De las temperaturas de las sucesivas formaciones de ramas, es posible extrapolar el punto de acumulación del proceso. Este se encuentra estimado en un valor $k_B T_{ac}/J_0 \sim 2.87$ [26]. A temperaturas por debajo de las del punto de acumulación se encuentra que la fase $\langle 3 \rangle$ se funde a través de una transición de primer orden asociada con el salto en la longitud de onda y en la amplitud de modulación. Por encima de este punto uno puede entrar en una "escalera del diablo completa", es decir, en una región coherente del diagrama de fases donde sólo existen fases conmensuradas con todos los números racionales (en unidades de 2π) entre dos números límite, por ejemplo, entre $1/6$ (fase $\langle 3 \rangle$) y $3/16$ (fase $\langle 2 3 3 \rangle$). Para establecer una escalera del diablo completa deben cumplirse dos condiciones:

1) Todos los puntos de acumulación de los otros procesos de ramas, por ejemplo entre las fases $\langle 3 \rangle$ y $\langle 2 3 3 \rangle$, deben ocurrir debajo de esa región.

2) Las estructuras inconmensuradas son permitidas en zonas de medida nula. De otra manera la escalera del diablo debería ser llamada incompleta.

En la figura IV.7 vemos cómo el proceso de ramas genera, a partir de las fases $\langle 2 \rangle$ y $\langle 3 \rangle$, una sucesiva aparición de fase conmensuradas cercanas al punto $\kappa = 1/2, T = 0$. En la figura IV.8 puede verse cómo se ramifica el diagrama de fases cuando el proceso es realizado cerca de la fase FM. En este caso las combinaciones son hechas con fases del tipo $\langle 3^k 4 \rangle$ y $\langle 3 4^k \rangle$.

Para el caso de espines que puedan reorientarse en forma continua la topología del diagrama de fases es esencialmente la misma, como puede verse en la figura IV.9.

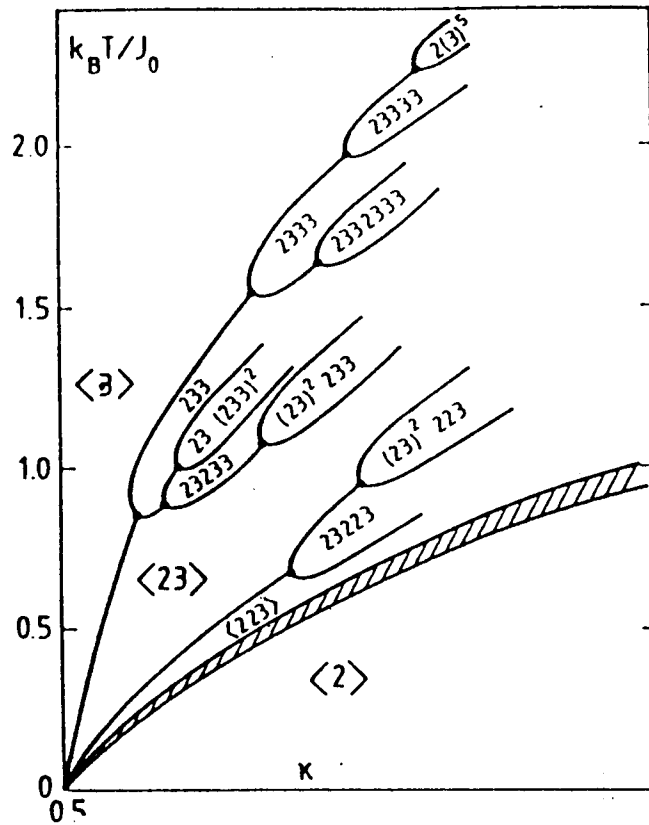


FIGURA IV.7. Proceso de ramas alrededor de las fases $\langle 2 \rangle$ y $\langle 3 \rangle$.

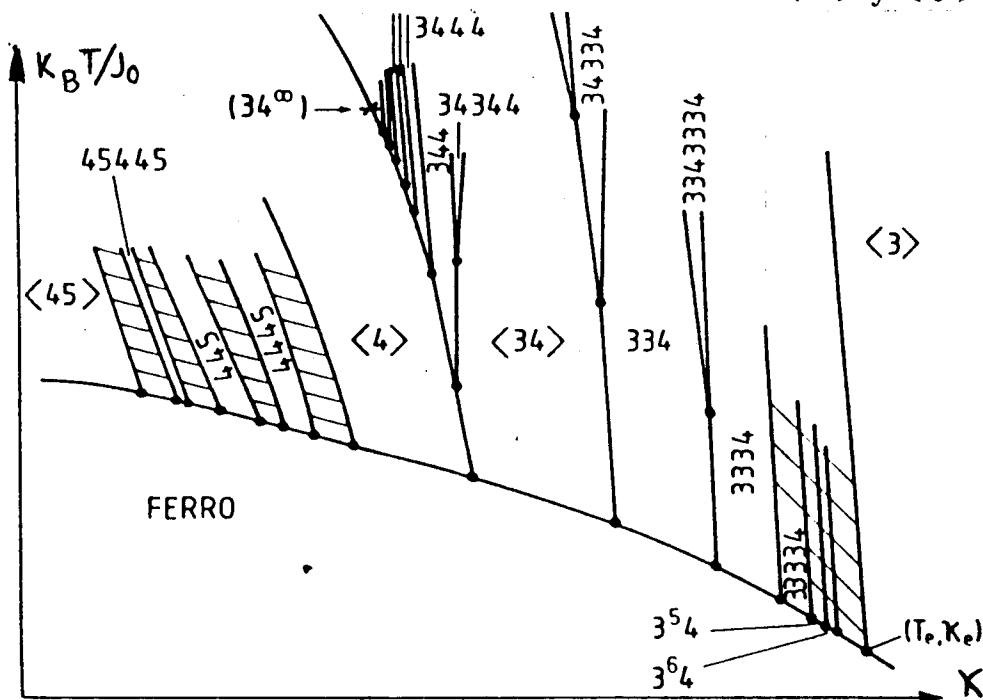


FIGURA IV.8. Proceso de ramas alrededor de la fase FM.

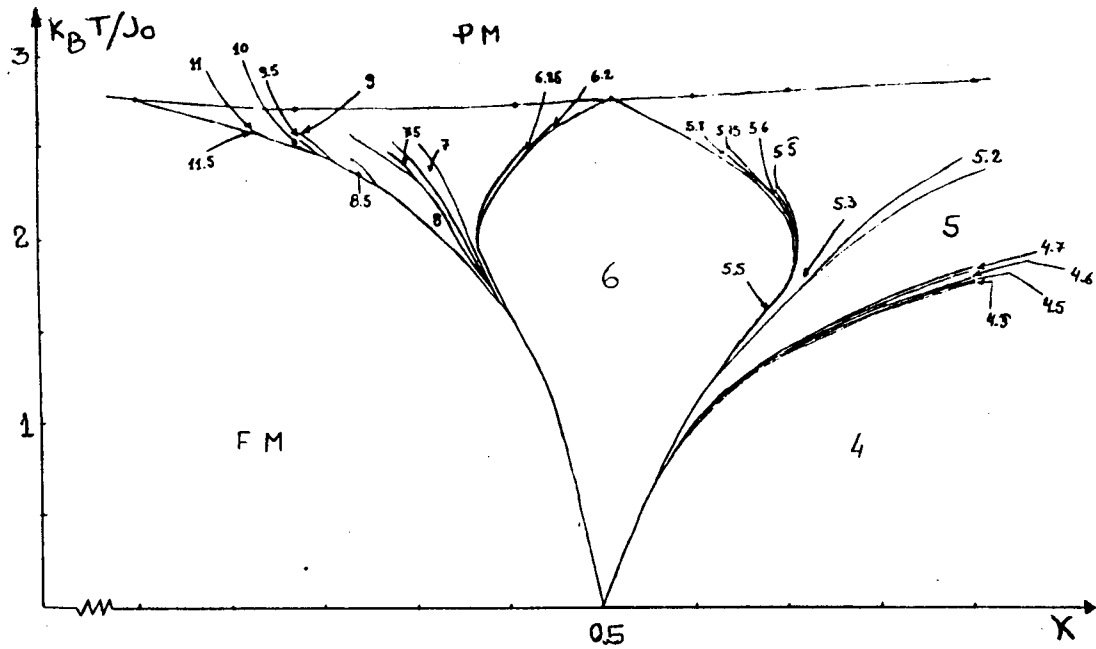


FIGURA IV.9. Diagrama de fases del modelo ANNNI con reorientación continua.

La ecuación a resolver ya fue desarrollada en el capítulo II para el caso general en que una distribución es descrita en términos de sus momentos multipolares reorientables, y ya dijimos cómo adaptarla para espines o dipolos que interactúan de a pares. Esta es

$$\begin{aligned}
 k_B T u_l \text{sen} \alpha_l - 2J_0 \text{sen} \alpha_l R(u_l) - J_1 R(u_{l+1}) \text{sen} \alpha_{l+1} \\
 - J_2 R(u_{l+2}) \text{sen} \alpha_{l+2} = 0
 \end{aligned}
 \tag{4.17}$$

con $l = 1, 2, 3, \dots, N$, donde se ha reemplazado las sumas reticulares por las constantes de acoplamiento J_l . Recordamos que $R(u) = \frac{I_1}{I_0}$ es el cociente entre las funciones de Bessel modificadas de orden 1 y 0. Las incógnitas son las u_l , relacionadas con el grado de desorden del espín del sitio l y α_l , ángulo de orien-

tación más probable. Como lo que se desea comparar son las energías libres de las distintas posibles configuraciones moduladas, y sólo se permite que se module una componente del espín (y no la orientación), los α_l de todas las subredes serán $\pi/2$ o $3\pi/2$.

Para resolver el sistema de ecuaciones utilizamos programas de resolución numérica de sistemas no lineales. De acuerdo a nuestras posibilidades de cálculo hemos resuelto sistemas de hasta 16 incógnitas (por ejemplo el caso $\lambda = 6.2$ donde hay 31 espines en 5 ondas, es decir hay para determinar 16 valores de u independientes), en tiempos de máquina razonables. Sin embargo, es posible considerar fases con mayor cantidad de espines en la celda unidad, para aquellos valores de longitudes de onda cuya transformada dada por (4.4) (que, como ya dijimos, también es válida para temperaturas distintas de 0 K), tenga un número de incógnitas accesible al cálculo. Por ejemplo, si uno quisiera resolver una modulación con $\lambda = 5.2$, con 36 espines en 5 ondas, o sea 18 u independientes, uno puede pasar a la longitud de onda $\lambda' = 13/4$ que tiene 13 espines en 4 ondas y sólo 7 independientes, y con la misma energía libre que la fase con $\lambda = 5.2$. Un caso aún más notable es el de $\lambda = 50/9$, o sea 50 espines en 9 ondas, con 26 independientes, donde se puede pasar a $\lambda' = 25/8$, con 25 espines en 8 ondas, y sólo 13 independientes. Por supuesto, cuando uno usa la transformación debe reemplazar J_1 por $-J_1$ en las ecuaciones a resolver.

Todavía no hemos dicho nada de cómo se proponen las modulaciones, ya que está claro que a bajas temperaturas la modulación no es estrictamente sinusoidal. Como el programa de cálculo requiere de un valor inicial para las u y α adaptamos los valores de partida

$$u_l \propto \text{sen}\left[\frac{2\pi}{\lambda}(l-1) + \phi\right], \quad (4.18)$$

(ya dijimos cómo elegíamos las α). Para la evaluación de la fase ϕ hemos usado un criterio ya estudiado [12] (tiene que ver con que el máximo de la onda coincida o no con la posición de un espín). Para una longitud de onda escrita de la forma $\lambda = \frac{M'}{M}$ (en unidades de la constante de red) el criterio es el siguiente: si M y M' son impares la fase ϕ que hace mínima la energía libre en función de las u es $\phi = 0$; si M es par y M' es impar, dicha fase $\phi = \frac{\pi M'}{2M}$, aunque aquella con $\phi = 0$ sea también solución. Esto ocurre, por ejemplo, para la fase con $\lambda = 6$, donde la fase calculada con $\phi = \frac{\pi}{12}$ es más estable que aquella con $\phi = 0$. Para el caso en que M sea par y M' impar es indistinto usar cualquiera de las dos ϕ mencionadas.

Por supuesto, los valores obtenidos del cálculo de las u no dan una modulación estrictamente sinusoidal (como ya dijimos). Sin embargo, no todas las u que salen del cálculo son independientes, y notamos que hay una relación entre módulos de u de a pares, como si los envolviera una onda sinusoidal, que hace que sólo la mitad más una de las N u_i , si N es par, o la mitad más una de las $N + 1$, si N es impar, sean independientes.

Es interesante analizar algunas zonas del diagrama $k_B T / J_0$, κ , en conexión con la posible aparición de la escalera del diablo. Por ejemplo en aquella zona en que $\kappa = 0.53$ y el rango de temperaturas va de 1.5 a 1.6 uno puede mirar con más detenimiento cómo cambia la energía libre de cada fase a medida que aumenta la temperatura. En este intervalo uno pasa de la fase $\langle 2 \rangle$ a la fase $\langle 3 \rangle$, y es interesante saber qué valores de longitudes de onda intermedios aparecen. En la figura IV.10 puede verse cómo el sistema pasa por diferentes fases moduladas. Allí se encuentra graficada la diferencia entre la energía libre de una fase con una dada longitud de onda, respecto a aquella con $\lambda = 4$ (o sea la fase $\langle 2 \rangle$). Se ve claramente que cerca de $T \sim 1.513$ (círculo con el I) hay un cúmulo de fases con energía libre muy parecida; luego la fase con $\lambda = 5$ se hace estable en

el intervalo de temperatura $1.513 \leq T \leq 1.598$, y alrededor de $T \sim 1.598$ (círculo con el II) otro cúmulo de fases con longitud de onda entre 5 y 6 tienen energía libre muy similar. Al ampliar la zona I, figura IV.11a, se puede ver que la fase con $\lambda = 4.66\dots$ es más estable que las demás, y ampliando nuevamente la zona (figura IV.11b) donde ahora la variación de temperatura es apreciable recién en el cuarto dígito, se ve que las fases $\lambda = 4.333\dots$ y $\lambda = 4.5$ cortan en el mismo punto (al menos dentro de esta precisión) a la fase $\langle 2 \rangle$ y que cerca del punto $T \sim 1.51377$ las fases con $\lambda = 4.666\dots$ y con $\lambda = 4.6$ cortan simultáneamente a la fase con $\lambda = 4.5$. No fue posible tener mejor resolución, de manera que no podemos negar ni afirmar que la fase con $\lambda = 4.333\dots$ ó $\lambda = 4.6$ (por ejemplo) ganen o aparezcan como más estables en algún rango de temperaturas apreciable.

En la figura IV.12a se encuentra ampliada la zona alrededor de $T \sim 1.598$. Aquí parece aún más difícil predecir si todas las longitudes de onda cocientes de racionales (al menos las que hemos podido considerar en el cálculo) ganan en alguna región de temperaturas o no. Cuando se amplía aún más la zona, figura IV.12b, ya con una variación en el cuarto decimal de la temperatura, el gráfico parece no modificarse.

Estos cinco gráficos no permiten, dentro de nuestra precisión, afirmar ni negar la existencia de la escalera del diablo. En efecto, de los mismos no podemos concluir que el sistema pasa, por ejemplo, de la fase $\langle 5 \rangle$ a la $\langle 6 \rangle$ saltando todas o algunas de las intermedias, ni que pasa por cada una de las fases intermedias consideradas. De todos modos vemos que, si hubiera escalera del diablo completa, habría escalones de ancho casi nulo, así como otros muy anchos.

En la figura IV.13a y b se muestra la variación del vector de onda con la temperatura, para valores de $\kappa = 0.53$ y $\kappa = 0.6$. Vemos aquí, tanto como en la figura IV.9, que las fases $\langle n \rangle$ con n entero son estables en un rango de

E. LIBRE Vs TEMPERATURA $J_2/J_1 = -0.53$

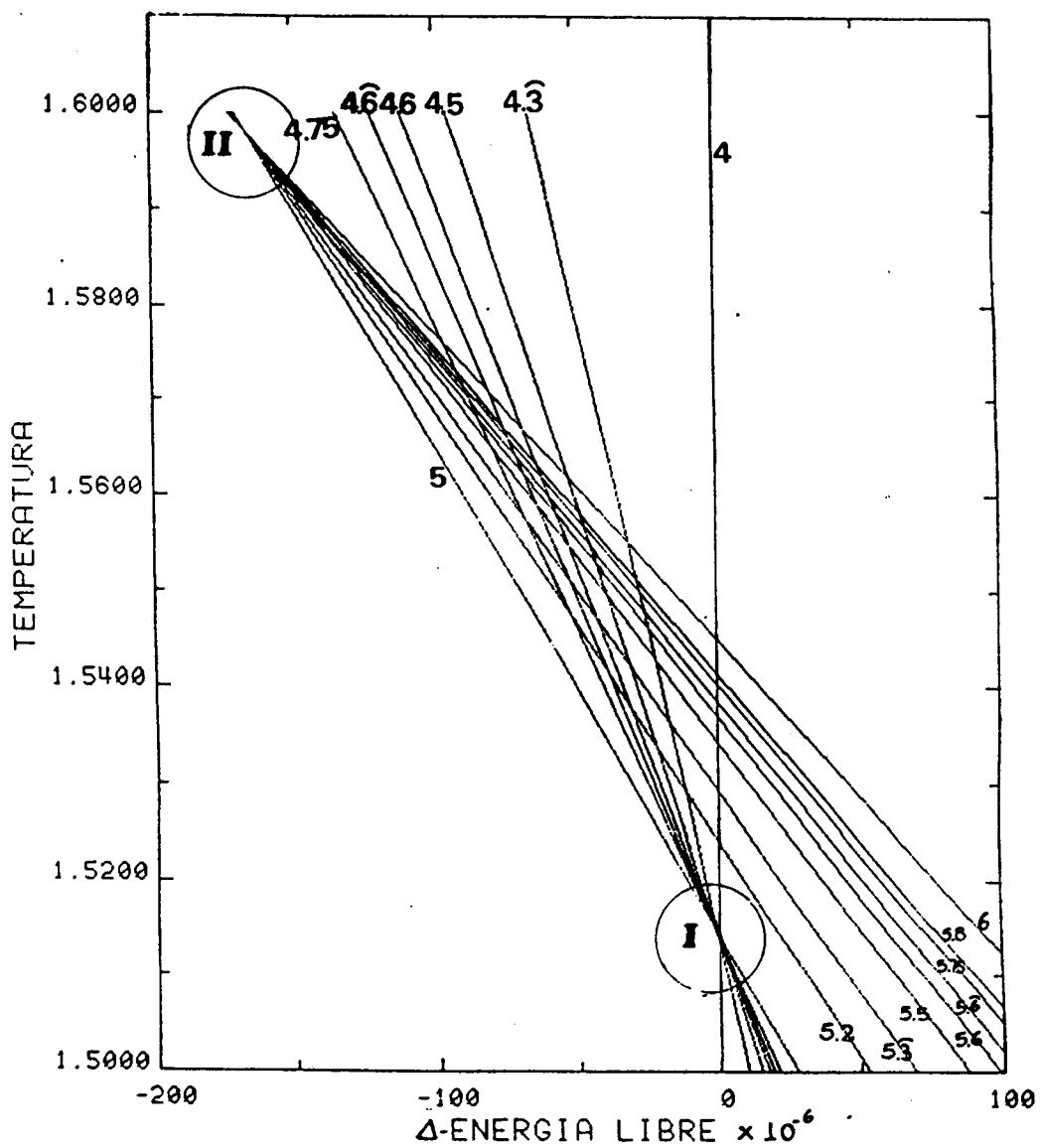


FIGURA IV.10.

E. LIBRE Vs TEMP. $J_2/J_1 = -0.53$ " ZONA I "

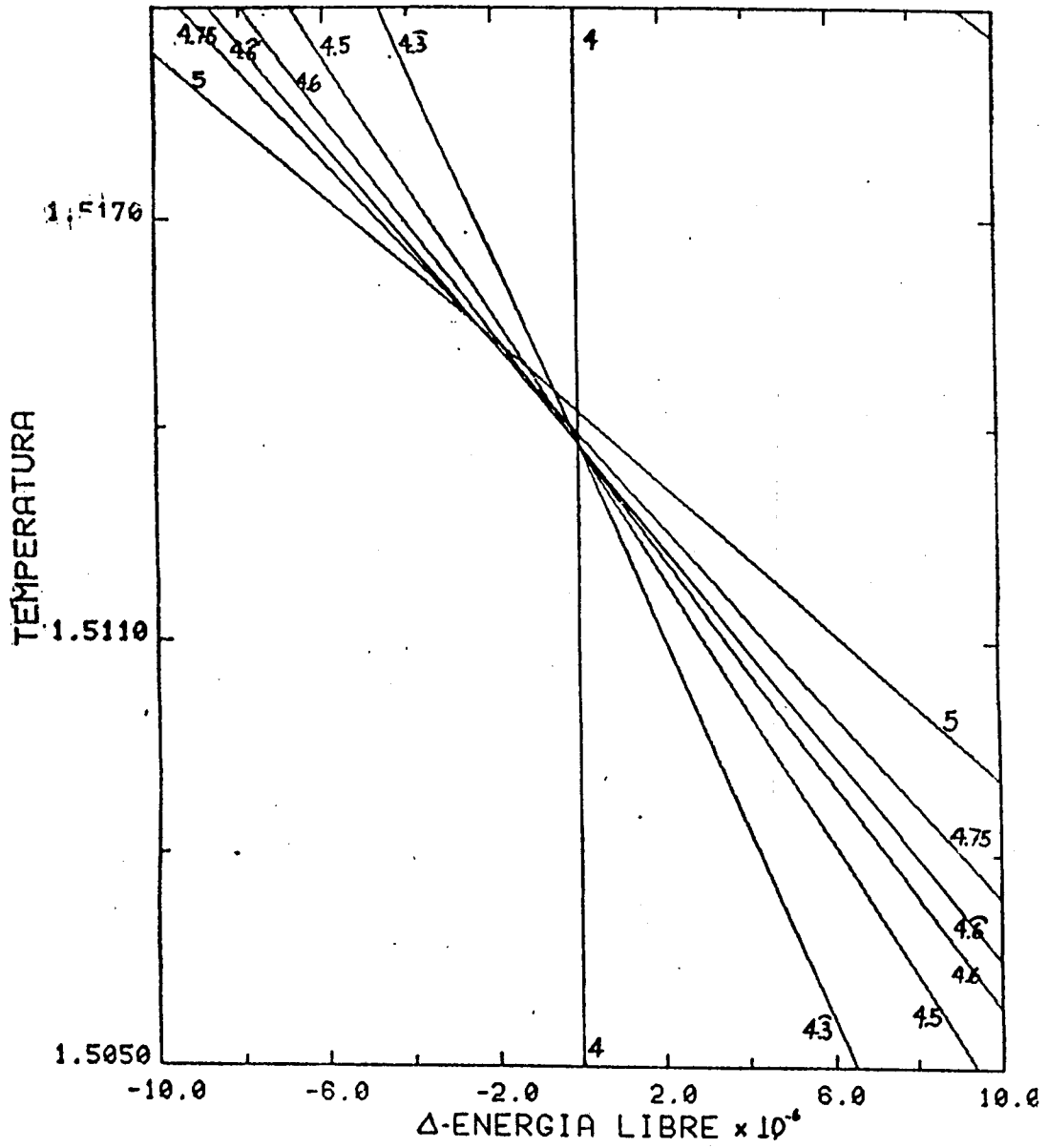


FIGURA IV.11a.

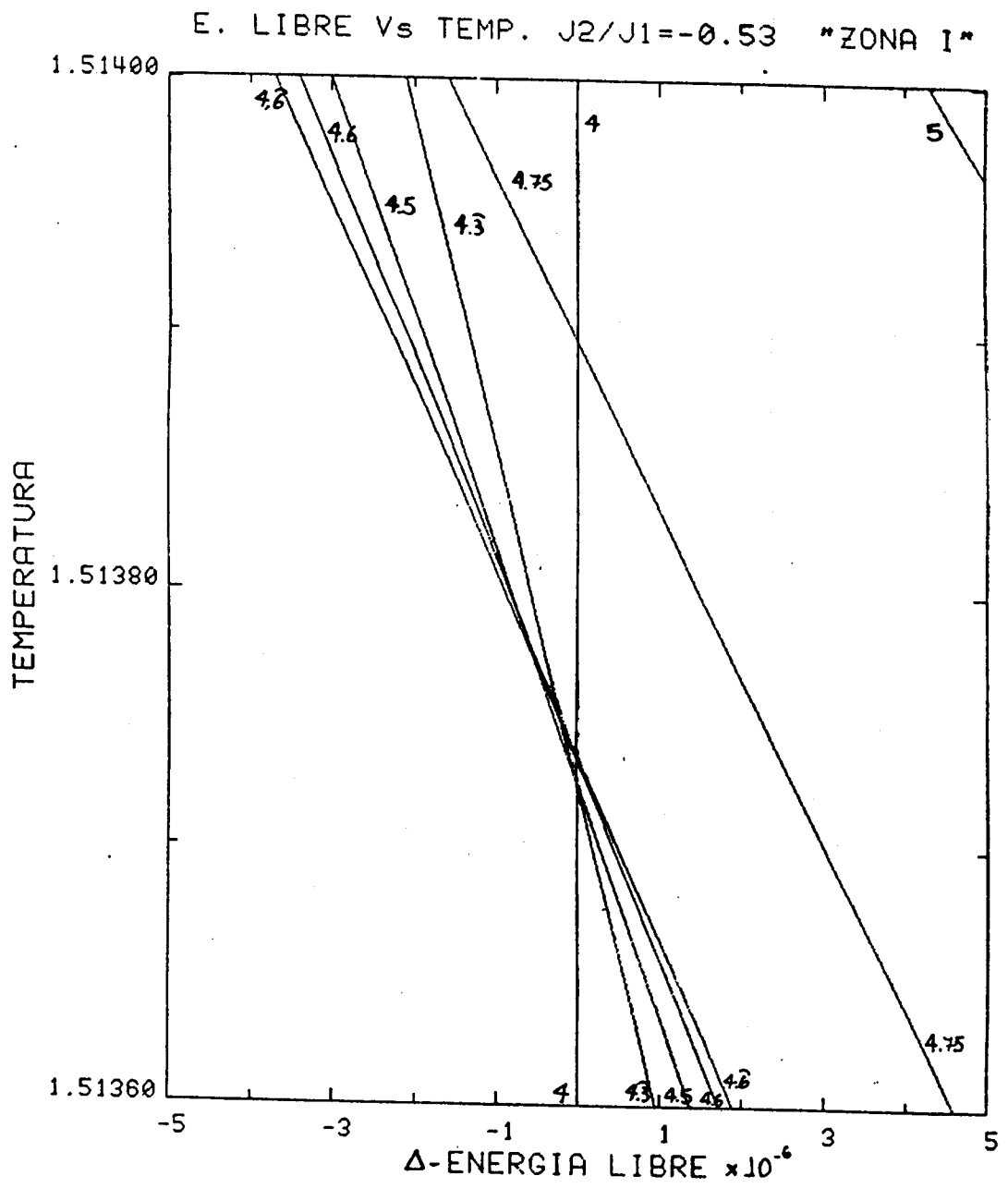


FIGURA IV.11b.

E. LIBRE Vs TEMP. $J_2/J_1 = -0.53$ "ZONA II"

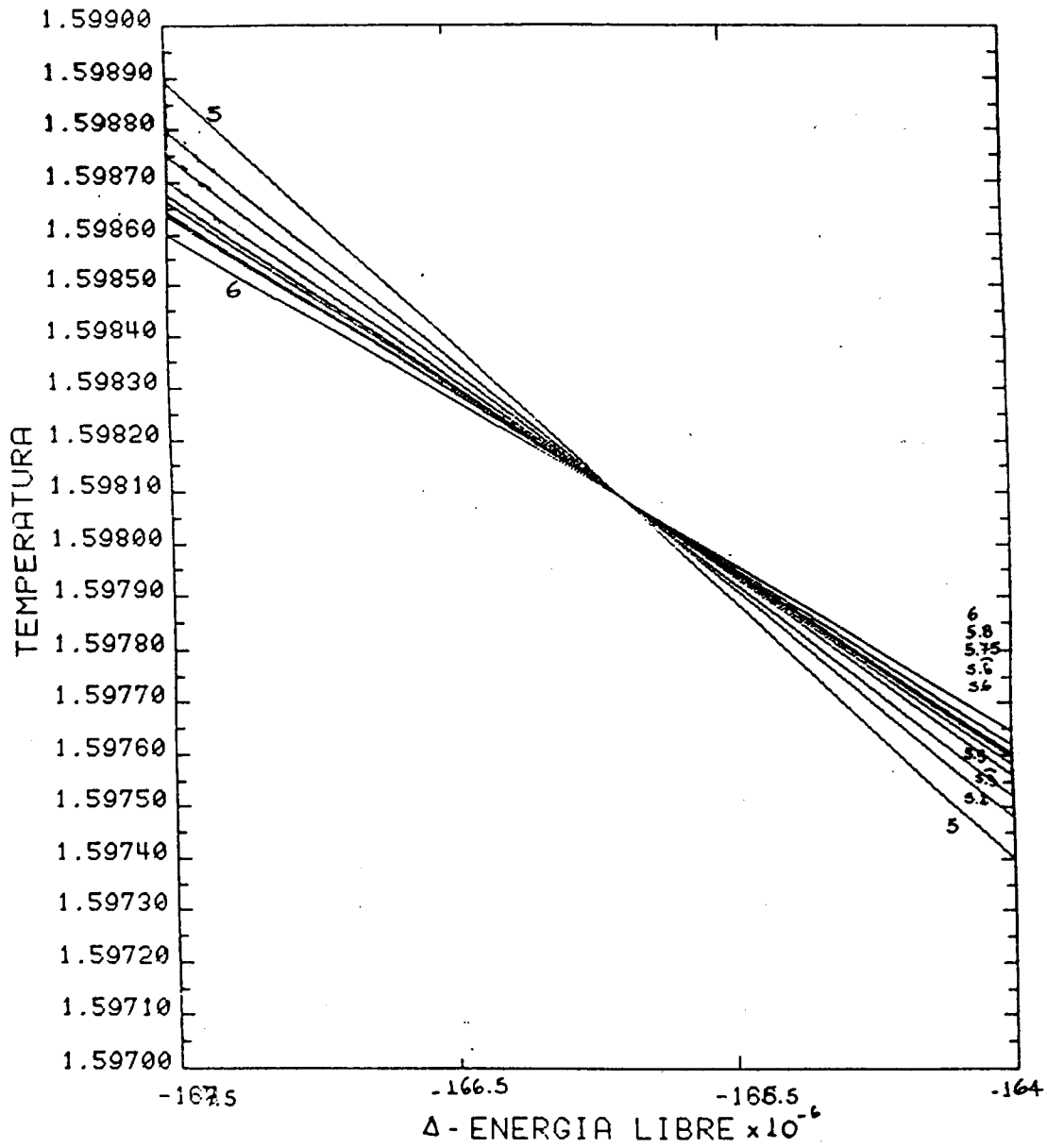


FIGURA IV.12a.

E. LIBRE Vs TEMP. $J_2/J_1 = -0.53$ "ZONA II"

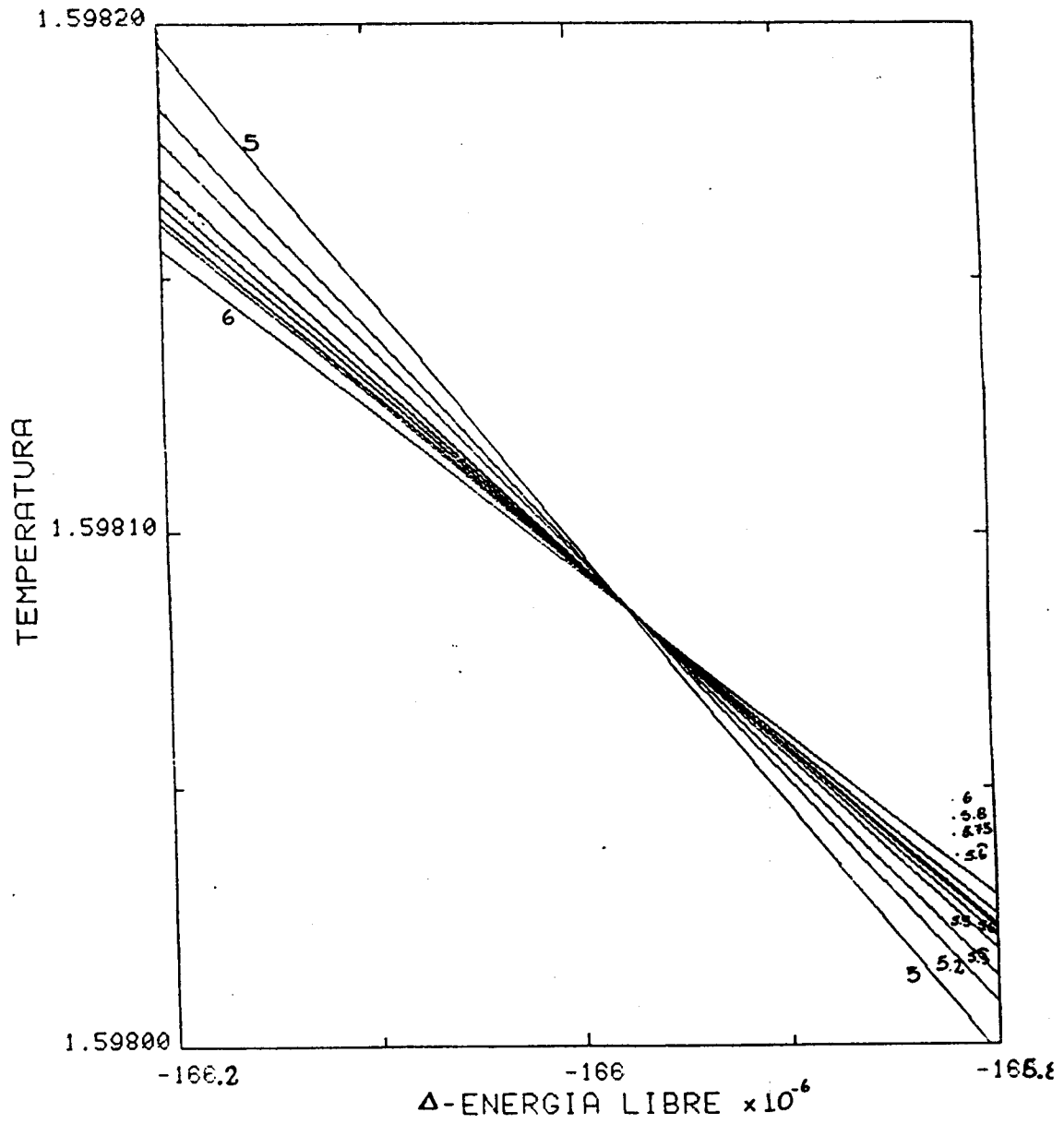


FIGURA IV.12b.

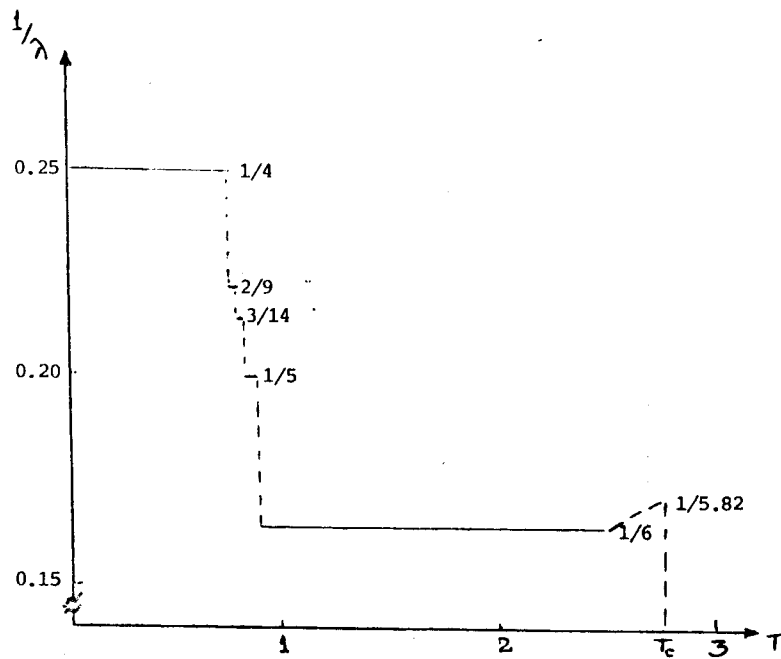


FIGURA IV.13a. Variación del vector de onda con T , para $\kappa = 0.53$.

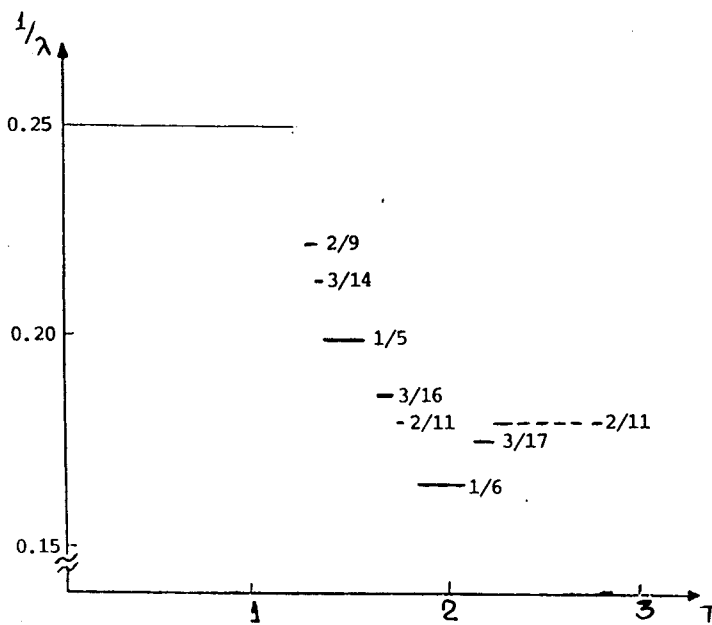


FIGURA IV.13b. Variación del vector de onda con T , para $\kappa = 0.60$.

temperaturas apreciable. Con respecto a la fase $\langle 2 \rangle$ dicha estabilidad ha sido interpretada de acuerdo a un modelo de solitones [2]. Nosotros encontramos una explicación mucho más sencilla, que es la siguiente: para modulación sinusoidal los espines están dados por la 4.6. La energía magnética de una red de espines así modulada es independiente de ϕ y proporcional a A^2 . Ahora bien, si para la fase $\langle 2 \rangle$ se elige $\phi = \pi/4$, es posible reemplazar A por $\sqrt{2}A$, y todavía tener espines de módulo no mayor que A (en este caso, los mismos valen $+A, +A, -A, -A$). Por lo tanto, la fase $\langle 2 \rangle$ se ve beneficiada (en cuanto a su estabilidad) en un factor 2 con respecto a las demás.

Antes de concluir esta sección vale la pena mencionar un hecho que hemos observado. Si uno deja de lado las fases FM y $\langle 2 \rangle$, a $T = 0$, y piensa sólo en una modulación sinusoidal pura, hemos encontrado que aquella longitud de onda que sería la más estable a $T = 0$ K, es la que tiene mayor temperatura crítica, es decir la que sobrevive a temperaturas mayores, para el mismo valor de κ , justo antes de pasar a la fase totalmente desordenada.

3 APLICACION AL NaNO_2

La primera aplicación del modelo ANNNI al NaNO_2 fue sugerida por Yamada et al. [10], quienes, sin embargo, no hicieron ningún cálculo numérico sobre el modelo. Yamada y Yamada [28] discutieron el comportamiento del NaNO_2 considerando un modelo de Ising con interacciones de largo alcance (dipolo-dipolo) y de corto alcance. Ellos notaron que las interacciones dipolo-dipolo entre primeros y segundos vecinos en la dirección x son competitivas, hecho que les hubiera permitido explicar la fase modulada del NaNO_2 usando el modelo ANNNI sólo con

interacciones dipolo-dipolo. Sin embargo, ellos no lo hicieron, tal vez porque encontraron que las interacciones dipolares por sí solas no podían explicar cuantitativamente las dispersiones difusas en sus datos de rayos X. Otra razón podría ser que el valor de κ por ellos calculado con primeros y segundos vecinos (en su notación, $-D_a/8D_I = 1.36$) lleva a que la fase de baja temperatura sea la fase $\langle 2 \rangle$, en lugar de la ferroeléctrica y a una longitud de onda mucho menor que la medida experimentalmente. A partir de allí nadie volvió a retomar el estudio de este compuesto excepto a Selke y Duxbury [26]. Estos autores no intentaron evaluar el valor de las constante de acoplamiento J_0, J_1 y J_2 . Ellos sólo supusieron una red simple con $J_0 = J_1 > 0$ y $J_2 < 0$, y tomaron $\kappa = 0.34$, de manera de obtener la longitud de onda correcta a la temperatura de transición.

Por otro lado, Massidda [11] mostró recientemente que las fases moduladas del NaNO_2 pueden ser cualitativamente explicadas usando sólo interacción dipolo-dipolo. Esto fue hecho utilizando un modelo que difiere del ANNNI no sólo en el rango de interacción sino que además permite a los dipolos reorientarse en un plano en vez de en dos direcciones posibles ($\pm z$). Con estos resultados, discutiremos cómo pueden calcularse las constantes de acoplamiento del modelo ANNNI para el NaNO_2 , suponiendo sólo interacción dipolo-dipolo, cómo comparar la longitud de onda obtenida con los resultados experimentales, y cómo corregirla de manera que se ajuste a éstos últimos [12].

Antes que nada, es importante hacer notar que la red del NaNO_2 es de cuerpo centrada, y no cúbica simple, con constantes de red $a = 3.56, b = 5.23$ y $c = 5.56$ (en Å). Como la modulación ocurre en la dirección x , el primer sitio en la dirección \vec{k} es el $1/2, 1/2, 1/2$, siendo el segundo el $1, 0, 0$. Por lo tanto las constantes de acoplamiento J_1 y J_2 deben ser aquéllas que corresponden a la interacción $0, 0, 0$ por un lado y $1/2, 1/2, 1/2$ y $1, 0, 0$ respectivamente por el otro lado. Esto debe ser así a pesar del hecho de que el sitio más cercano al origen

es el 1, 0, 0 y no el 1/2, 1/2, 1/2. Por otro lado, nosotros no evaluaremos el valor de las J_i como constantes de acoplamiento entre pares individuales de dipolos, sino que consideraremos interacciones entre planos yz . Por ejemplo, en el plano $x = a/2$ hay cuatro sitios $(1/2, \pm 1/2, \pm 1/2)$ igualmente distanciados del origen, todos con dipolos con el mismo valor medio. Es obvio que los cuatro pares deben intervenir en el cálculo de la constante J_1 . Como la interacción dipolo-dipolo es de largo alcance y como en la MFA todos los momentos dipolares en el mismo plano yz están caracterizados por el mismo valor, este razonamiento puede ser extendido a todo el plano $x = a/2$. De esta manera nosotros evaluamos las constantes J_0, J_1 y J_2 como las constantes de acoplamiento entre el dipolo en el origen y aquéllos en los planos $x = 0, x = a/2$ y $x = a$ respectivamente.

La energía electrostática por dipolo viene dada por la expresión (4.1) (debe dividirse por el número de dipolos en la celda unidad, N), donde el índice i rotula planos yz , y los J_i son obtenidos de

$$J_i = \frac{p^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\lambda_2, \lambda_3} ' \frac{3z^2 - r^2}{r^5} \Big|_{\vec{r} = \lambda_2 \vec{b} + \lambda_3 \vec{c} + \vec{r}_i} \quad (i = 1, 2, 3, \dots) \quad (4.19)$$

con $\vec{r}_0 = 0, \vec{r}_1 = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}), \vec{r}_2 = \vec{a}$ y la prima en la sumatoria indica que el término $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ debe omitirse si $i = 0$. Eligiendo unidades de manera que p esté en cargas de protones $\times \text{Å}$ y la energía en eV, obtenemos

$$J_0 = 0.183p^2, J_1 = 0.221p^2 \text{ y } J_2 = -0.0808p^2 .$$

Para tener una idea del error que cometemos al despreciar las interacciones $J_h S_i S_{i+h}$ con $h > 2$, evaluamos J_3, J_4 y J_5 :

$$J_3 = 0.0077p^2, J_4 = -0.00117p^2 \text{ y } J_5 = 0.00015p^2 .$$

El valor de κ calculado es 0.365. La longitud de onda en T_N (temperatura para la transición de la fase inconmensurada a la fase paraeléctrica) es obtenida de

$$q_N = \frac{2\pi a_1}{\lambda_N} = \cos^{-1} \frac{1}{4\kappa} \quad (4.20)$$

($a_1 = \text{espaciado interplanar} = a/2$).

Nosotros obtenemos $q_N = 0.817$ y $\lambda_N = 7.69a_1$.

Nuestro valor de κ es cercano al elegido por Selke y Duxbury [26] ($\kappa = 0.34$) para tener un buen acuerdo entre la teoría y los datos experimentales (en la MFA λ es independiente de J_0). Sin embargo, no hay tal acuerdo, debido a que dichos autores no tomaron en cuenta que el espaciado interplanar a_1 en una red de cuerpo centrado no es lo mismo que la constante de red a , pues $a_1 = a/2$. El valor experimental de λ es $8a$, o sea $16a_1$. Debido a esta discrepancia es evidente que nuestro modelo, que tiene cuenta sólo interacciones dipolares, es muy inadecuado. Sin embargo, el valor de q_N obtenido de (4.19) es, para κ aproximándose a 0.25 desde valores mayores, fuertemente sensible a pequeñas variaciones de κ , de manera que se requiere una pequeña modificación en el valor de las constantes de acoplamiento para obtener $\kappa = 0.27$, es decir, $\lambda = 16a_1$.

La modificación más simple en la cual uno puede pensar consiste en agregar a las constantes de acoplamiento una contribución proveniente de las interacciones de corto alcance entre los grupos NO_2^- . Para simplificar la discusión consideraremos la fase ferroeléctrica. Para los grupos en $(0, 0, 0)$ y $(1, 0, 0)$ la menor distancia interatómica es justamente a , es decir 3.56 \AA . Por otro lado, la distancia entre los nitrógenos de los NO_2^- en $(0, 0, 0)$ y los oxígenos de los NO_2^- en $(1/2, 1/2, 1/2)$ es 3.19 \AA . Nosotros vemos que si uno debe considerar interacciones de corto alcance entre dipolos, uno debería considerar el par $(0, 0, 0) - (1/2, 1/2, 1/2)$, aún sabiendo que la distancia entre los centros de las cargas en $(0, 0, 0) - (1, 0, 0)$ es menor. De este modo, suponemos que la constante J_1 debe ser modificada, y reemplazamos la vieja J_1 por $J_{1,pp} + J_{1,SR}$ (donde $J_{1,pp}$ denota la vieja J_1). Imponiendo

$$-\frac{J_{1,pp} + J_{1,SR}}{J_2} = 4 \cos \frac{\pi}{8} \quad (4.21)$$

obtenemos $J_{1,SR} = 0.0776p^2$. Se ve que modificando J_1 en un 35% se remueve la discrepancia (mayor que el 100 %) entre la longitud de onda calculada usando sólo interacciones dipolares y la observada experimentalmente. La constante de acoplamiento de corto alcance es del tipo ferroeléctrico (es decir $J_{1,SR} > 0$), en acuerdo con las referencias [28] y [29].

Esta modificación en κ además mejora los resultados concernientes al rango de temperaturas de las fases moduladas. De hecho, el último tiende a 0 para $\kappa \rightarrow 0.25^+$, como puede verse de la figura IV.6 o IV.9. De todas maneras, el rango de temperaturas obtenido con este modelo es aún muy grande comparado con el valor experimental (1.5 K).

La temperatura crítica T_N para la transición a la fase paraeléctrica viene dada por

$$k_B T_N = 4J_0 - \frac{J_1^2}{4J_2} - 2J_2 \quad , \quad (4.22)$$

es decir $T_N \simeq 1150p^2$ K.

En resumen, hemos mostrado que las interacciones dipolo-dipolo en una estructura ortorrómbica como la del NaNO_2 compiten unas con otras de manera de poder dar cuenta de las transiciones entre las fases ferroeléctrica, inconmensurada y paraeléctrica. Desde el punto de vista cuantitativo el acuerdo es más bien pobre, pero éste puede ser enormemente mejorado introduciendo una corrección a una de las constantes de acoplamiento, lo cual puede ser atribuido a las interacciones de corto alcance.

4 REORIENTACION CON UN NUMERO FINITO ($\neq 2$) DE ORIENTACIONES.

A lo largo de este trabajo hemos hablado de las reorientaciones discretas, con sólo dos orientaciones posibles ("arriba" y "abajo") para los espines o dipolos, y las reorientaciones continuas en un plano, donde el espín o dipolo puede desordenarse tomando cualquier orientación entre 0 y 2π . Para ambos modelos calculamos la temperatura crítica del sistema cuando pasa de una fase ordenada a una totalmente desordenada, y encontramos que la temperatura crítica del sistema que se desordena en forma continua es la mitad que la de aquél que se desordena tomando sólo dos orientaciones. También en trabajos previos [30] se encontró que cuando a un dipolo se le permite desordenarse en forma continua en el espacio, la temperatura crítica es $1/3$ de la de aquél que sólo puede desordenarse en dos direcciones y $2/3$ de la de aquél que se desordena en forma continua pero en un plano. Esto se debe a que en el caso de desorden en el espacio entra en juego, en el sistema de ecuaciones trascendentes a resolver, la función de Langevin, que se comporta como $L(u) \rightarrow \frac{1}{3}u$ cuando $u \rightarrow 0$, mientras que en el plano, según vimos, esta función es el cociente entre las funciones de Bessel modificadas de primero y segundo orden, cuyo comportamiento en el origen es $R(u) \rightarrow \frac{1}{2}u$, y en un sistema con las orientaciones "arriba" y "abajo" la $\tanh u \rightarrow u$ que se comporta como u para $u \rightarrow 0$.

Analizando estos resultados, nos preguntamos cómo sería la temperatura crítica para un sistema que puede desordenarse tomando un número finito de orientaciones R (incluyendo la paralela al eje x) en el plano xy . Para intentar dar una respuesta a esto consideramos un sistema simplificado, consistente en una red lineal de espines, cada uno de los cuales puede tomar una de las $R \neq 2$ orientaciones, incluyendo la paralela al eje x , en el plano xy . Cada orientación

se denota con el índice r ($r = 0, 1, \dots, R-1$), y el ángulo que esa orientación forma con el eje x es

$$\varphi(r) = \frac{2\pi r}{R} \quad (4.23)$$

Si bien en principio R puede ser cualquier número natural, si queremos que el sistema tenga simetría de inversión (o sea que tanto la orientación x como la $-x$ sean posibles) debemos restringirnos a los valores pares.

Para comenzar el estudio, suponemos que la red tiene una periodicidad Na (donde a es la constante de la red), por lo que el sistema estará formado por N subredes. El espín de la subred l en la celda λ será

$$\vec{\sigma}_{l,\lambda} = \mu (\cos \varphi_{l,\lambda} \vec{e}_x + \text{sen} \varphi_{l,\lambda} \vec{e}_y) \quad (4.24)$$

donde μ es el módulo del del espín σ_l y es el mismo para cada subred. Los espines de los sitios $l, 0$ y m, λ tienen una energía de interacción

$$W_{l_0, m\lambda} = - \sum_{\alpha\beta} \sigma_{l_0,\alpha} \sigma_{m\lambda,\beta} J_{lm,\lambda,\alpha\beta} \quad (4.25)$$

donde α y β rotulan las coordenadas cartesianas x e y .

Sea $n_l(\varphi_r)$ la probabilidad de que el espín en la celda λ y subred l tenga una orientación r . Como hemos supuesto hasta ahora, dicha probabilidad será independiente de λ , debido a la periodicidad de la red. La condición de normalización establece

$$\sum_{r=0}^{R-1} n_l(\varphi_r) = 1 \quad (4.26)$$

De esta manera, la magnetización en la subred l , estará dada por

$$\langle \sigma_l \rangle \equiv M_l = \mu \sum_{r=0}^{R-1} \sum_{\alpha} c_{\alpha}(r) n_l(\varphi_r) \vec{e}_{\alpha} \quad (4.27)$$

donde $c_1(r) = \cos \frac{2\pi r}{R}$ y $c_2(r) = \text{sen} \frac{2\pi r}{R}$, \vec{e}_1 y \vec{e}_2 representan los versores \vec{e}_x y \vec{e}_y , respectivamente.

Ahora podemos calcular la energía media por espín en función de la magnetización M_l :

$$U = -\frac{1}{2N} \sum_{lm} \sum_{\alpha\beta} M_l M_m S_{lm,\alpha\beta} , \quad (4.28)$$

con

$$S_{lm,\alpha\beta} = \sum_{\lambda} J_{lm,\lambda,\alpha\beta} , \quad (4.29)$$

o como función de los $n_l(\varphi_r)$

$$U = -\frac{\mu^2}{2N} \sum_{lm} \sum_{\alpha\beta} \sum_{rr'} c_{\alpha}(r) c_{\beta}(r') n_l(\varphi_r) n_m(\varphi_{r'}) \quad (4.30)$$

(de aquí en más queda sobreentendido que la \sum_r va de 0 a $R-1$).

Por otro lado, la entropía por espín, como función de las $n_l(\varphi_r)$, viene dada por

$$S = -\frac{k}{N} \sum_l \sum_r n_l(\varphi_r) \ln n_l(\varphi_r) . \quad (4.31)$$

Para determinar el conjunto de funciones de distribución $n_l(\varphi_r)$ buscamos, como lo hemos hecho hasta ahora, un extremo para la energía libre $F = U - TS$. Como tenemos la condición de vínculo 4.23, definimos

$$F' = F + \frac{1}{N} \sum_l \lambda_l \sum_r n_l(\varphi_r) , \quad (4.32)$$

donde los λ_l son los multiplicadores de Lagrange, en la cual las $n_l(\varphi_r)$ son consideradas como las variables independientes.

Para hallar el extremo de una función $f(x_1, \dots, x_n)$, con la condición de vínculo $g(x_1, \dots, x_n) = 0$ debe cumplirse simultáneamente que [31]:

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x_1} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x_1} = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x_2} = 0 \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x_n} = 0 \\ g(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (4.33)$$

La solución que encontramos para las $n_l(\varphi_r)$ es la misma que la obtenida en el capítulo II,

$$n_l(\varphi_r) = A_l e^{u_l \cos(\varphi_r - \alpha_l)} \quad (4.34)$$

donde en este caso

$$A_l = \left\{ \sum_r e^{u_l \cos(\varphi_r - \alpha_l)} \right\}^{-1} \quad (4.35)$$

Esto lleva a un sistema de ecuaciones similar a las 2.54-2.55, y que es el siguiente

$$\begin{aligned} k_B T u_l \cos \alpha_l - \mu^2 \sum_m [S_{lm,11} \bar{c}_m + S_{lm,12} \bar{s}_m] &= 0 \\ k_B T u_l \sin \alpha_l - \mu^2 \sum_m [S_{lm,21} \bar{c}_m + S_{lm,22} \bar{s}_m] &= 0 \end{aligned} \quad (4.36)$$

donde \bar{c}_m y \bar{s}_m son los de las expresiones dadas en el capítulo II, excepto que en lugar de tener la integral aparece una suma sobre r . Como por simetría se cumple que $S_{lm,12} = S_{lm,21} = 0$, y si suponemos que en promedio los espines están según la dirección x (esto es, suponemos $S_{lm,11} > S_{lm,22}$), aparece como consecuencia inmediata que $\alpha_l = 0$ o π .

Ahora, como lo que nos interesa es la temperatura crítica, debemos estudiar qué pasa con la función \bar{c}_m cerca del desorden total, es decir cuando el parámetro $u_m \rightarrow 0$. Sea $\Delta_R = \frac{2\pi}{R}$, entonces para \bar{c}_m tenemos

$$\bar{c}_m = \frac{\sum_r \cos(\Delta_R r) e^{u_m \cos(\Delta_R r)}}{\sum_r e^{u_m \cos(\Delta_R r)}} \quad (4.37)$$

y cuando $u_m \rightarrow 0$ puedo desarrollar las exponenciales en serie de manera de tener

$$\begin{aligned} \bar{c}_m &\approx \frac{\sum_r (\cos(\Delta_{Rr}) + u_m \cos^2(\Delta_{Rr}) + \dots)}{\sum_r (1 + u_m \cos(\Delta_{Rr}) + \dots)} \\ &\approx u_m \frac{\sum_r \cos^2(\Delta_{Rr})}{R} \end{aligned} \quad (4.38)$$

donde la \sum_r se hace de 0 a $R - 1$. El término que contiene $\sum_r \cos(\Delta_{Rr})$ se anula pues tenemos la misma cantidad de orientaciones φ_r como de φ_{-r} . Ahora analizamos el término en la sumatoria de 4.38 [30].

$$\sum_{r=0}^{R-1} \cos^2(\Delta_{Rr}) = \begin{cases} 2 & \text{si } R = 2 \\ R & \text{si } R > 2 \end{cases} \quad (4.39)$$

Finalmente tenemos para c_m

$$c_m \longrightarrow \begin{cases} u_m & \text{si } R = 2 \\ \frac{1}{2}u_m & \text{si } R > 2 \end{cases} \quad (4.40)$$

Por lo tanto, concluimos que si el sistema puede desordenarse tomando sólo dos orientaciones "arriba" y "abajo", su temperatura es el doble si puede desordenarse en un plano tomando un número cualquiera (par) de orientaciones, que va desde 4 a ∞ .

5 CONCLUSIONES

En este capítulo hemos estudiado un modelo magnético con interacciones a primeros y segundos vecinos en una dirección, en los casos en que los espines pueden desordenarse entre dos orientaciones o en un continuo (en un plano).

Los diagramas de fases de ambos casos son cualitativamente similares entre sí. La temperatura crítica del primero es el doble que la del segundo. Hemos encontrado que en el caso continuo no se puede concluir mediante cálculos numéricos

que siempre exista, en algún rango de T , una fase modulada con λ cociente de enteros (escalera del diablo). En el caso discreto otros autores encontraron evidencia de la existencia de la misma.

Como aplicación del modelo, hemos mostrado cómo la fase modulada del NaNO_2 puede explicarse teniendo en cuenta sólo interacciones dipolares, y cómo el acuerdo con la experiencia puede ser mejorado agregando una interacción de corto alcance.

Para finalizar, estudiamos un sistema capaz de reorientarse en un plano tomando un número finito ($R \neq 2$) de orientaciones, y encontramos que la T_c del mismo es igual a la del caso continuo (independientemente de R).

BIBLIOGRAFIA

- 1- M.E.Fisher and W.Selke, Phys. Rev. Lett. 44, 1502 (1980).
- 2- P.Bak and J.von Boehm, Phys. Rev. B 21, 5297 (1981).
- 3- J.Kulik, S.Takeda and D.de Fontaine, Acta Metall. 35, 1137 (1987).
- 4- R.Portier, D.Gratias, M.Guymont and W.M.Stobbs, Acta Crystallogr. A36, 190 (1980).
- 5- M.Guymont and D.Gratias, Acta Crystallogr. A35, 181 (1979).
- 6- G.van Tendeloo and S.Amelinckx, Phys. Status Solidi A 43, 553 (1977).
- 7- D.Broodin, G.van Tendeloo, J.van Landuyt, S.Amelinckx, R.Portier, M.Guymont and A.Loiseau, Philos. Mag. A 54, 395 (1986).
- 8- R.Clarke, en "Ordering in two dimensions", pag. 53, ed. S.Sinha, North-Holland (1980).
- 9- H.Zabel, en "Ordering in two dimensions", pag. 61, ed. S.Sinha, North-Holland (1980).
- 10- Y.Yamada, I.Shibuya and S.Hoshino, J. Phys. Soc. Japan 18, 1594 (1963)
- 11- V.Massidda, Physica B 151, 483 (1988).
- 12- V.Massidda and C.Mirasso, aceptada para su publicación en Phys. Rev. B.
- 13- M.Ízumi, J.D.Axel and G.Shirane, Phys. Rev. B 15, 643 (1977).
- 14- R.J.Elliott, Phys. Rev. B 124, 346 (1961).
- 15- R.M.Hornreich, M.Luban and S.Shtrikman, Phys. Rev. Lett. 35, 1678 (1975).
- 16- W.Selke, Z. Phys. B 27, 81 (1977).
- 17- R.M.Hornreich, M.Luban and S.Shtrikman, Physica A 86, 465 (1977).
- 18- S.Redner and H.Stanley, Phys. Rev. B 16, 4901 (1977).
- 19- W.Selke, Z. Phys. B 29, 133 (1978).

- 20- S.Aubry, in "Solitons and Condensed Matter Physics", pag. 264, eds. Bishops and T.Schneider, Springer Berlin (1978).
- 21- S.Aubry J. Physique 44, 147 (1983).
- 22- P.Bak, Rep. Prog. Phys. 45, 587 (1982).
- 23- W.Selke and M.E.Fisher, Phys. Rev. B. 20, 257 (1979).
- 24- M.E.Fisher and W.Selke, Philos. Trans. R. Soc. London 302, 1 (1981).
- 25- S.Redner and H.Stanley, J. Phys. C: Solid St. Phys. 10, 4765 (1977).
- 26- W.Selke and P.M.Duxbury, Z. Phys. B 57, 49 (1984).
- 27- J.Villain and M.Gordon, J. Phys. C: Solid St. Phys. 13, 3117 (1980).
- 28- Y.Yamada and T.Yamada, J. Phys. Soc. Japan 21, 2167 (1966).
- 29- V.Heine, R.M.Lynden-Bell, J.D.C.Mc Connell and I.R.Mc Donald, Z. Phys. B 56, 229 (1984).
- 30- J.A.Hernando and V.Massidda, Physica 94A, 413 (1978).
- 31 P.Morse and H.Feshback. "Methods of theoretical physics", part 1, Mc Graw Hill Book Company Inc. (1953)
- 32- I.S.Gradshteyn and I.M.Ryzhik, "Table of integral, series and product", ed. by Alan Jeffrey, Academic Press, N.Y. (1980)