

INTRODUCCION GENERAL

Muchos de los hechos básicos de las transiciones de fase y los fenómenos críticos fueron observados hace 50 o 100 años. Sin embargo, en años mucho más recientes otros aspectos han sido descubiertos, lo que ha dado al tema un interés relevante dentro de la Física y la Química.

En los primeros tiempos el interés se centró principalmente en sistemas fluidos y ferromagnéticos (FM), a pesar de que se conocía ya una gran variedad de sistemas que presentaban comportamientos críticos. En el primero de éstos la discusión se focalizaba en sus tres fases (sólido, líquido y vapor), en las curvas de coexistencia de las mismas, en el punto triple (donde coexisten las tres) y en el punto crítico líquido-vapor, por encima del cual no existe diferencia entre las fases líquido y vapor. Por otro lado, el descubrimiento de Andrews de la opalescencia crítica en sus estudios sobre el CO_2 también despertó mucho interés entre los investigadores de la época. Andrews observó que cuando el sistema se aproximaba a una temperatura crítica se volvía opalescente al paso de la luz. Además encontró que este fenómeno se producía independientemente de la longitud de onda con la cual se iluminaba al sistema, lo cual llevaba implícito lo que posteriormente se conoció como la "hipotesis de scaling".

Los desarrollos teóricos de los fenómenos críticos en sistemas fluidos comenzaron en el año 1873 con los trabajos de Van der Waals. Poco más adelante se encontró una fuerte analogía entre sistemas fluidos y sistemas magnéticos. En efecto, la aplicación de un campo magnético h a éstos últimos produce un efecto similar (aumento en la magnetización) al producido al aplicar presión a un fluido (aumento de densidad). También ya se observaba en los sistemas magnéticos

un comportamiento divergente de la susceptibilidad magnética cuando la temperatura se aproximaba a un valor crítico. En 1907, pocos años después de los primeros experimentos de Curie, Hopkinson y otros, Pierre Weiss propuso una explicación para el fenómeno del ferromagnetismo empleando, lo que se dio a llamar, la aproximación de campo medio o molecular. En ésta supuso que cada momento magnético interactúa con el campo promedio creado por los restantes. En 1925 Ising investigó un modelo propuesto por Lenz, consistente en una red de espines que sólo pueden tomar dos orientaciones y que sólo interactúan con sus primeros vecinos. Posteriormente sería introducido también el modelo de Heisenberg, similar al de Ising, pero donde el momento magnético del espín está relacionado con las tres componentes del operador cuántico del espín.

Una era moderna del estudio de las transiciones de fase y los fenómenos críticos surge, según algunos autores, en los años '40 con Guggenheim y su demostración de que la curva de coexistencia de un fluido no era cuadrática, como predecía la aproximación de campo medio, sino cúbica, y con la solución exacta de Onsager del modelo de Ising bidimensional. Según otros autores la era moderna comienza en los años '60 cuando Heller, Benedek y Jacrot (junto con los teóricos Domb, Rushbrooke, Fisher y Marshall) definen ciertas cantidades físicas, los exponentes críticos, y destacan su importancia en el estudio de las transiciones de fase. Posteriormente se encontró que estos exponentes presentan un carácter de universalidad, es decir toman el mismo valor, o uno muy cercano, para una gran variedad de materiales. Esto permitió dividir a los sistemas físicos en clases de universalidad, de acuerdo al siguiente criterio:

- a) la dimensión del espacio,
- b) el número de componentes del parámetro de orden, y
- c) la simetría del sistema.

Sin embargo, las teorías existentes hasta ese momento no daban cuenta en

buena forma de lo que acontecía en las vecindades de los puntos críticos (donde la longitud de correlación se hace infinita). Fue recién con el descubrimiento de la "hipótesis de scaling" y el desarrollo de la teoría del grupo de renormalización, hecha por Wilson en el año 1971, que se llegó a una mejor predicción de la ecuación de estado de los sistemas cerca de los puntos críticos, y se obtuvieron resultados que se hallaban en concordancia con las observaciones experimentales. Pero además de esta técnica existen también otras que, a pesar de no ser tan refinadas, en general pueden dar buena cuenta de las observaciones experimentales. La aproximación de campo medio (que es además un muy buen punto de partida de teorías más exactas) sigue siendo una de las más utilizadas dentro de la literatura, desarrollos de altas y bajas temperaturas, simulaciones numéricas con el método de Monte Carlo, etc..

Por qué la aproximación de campo medio?

Cuando uno se halla dispuesto a estudiar un cierto modelo físico sabe de antemano que, en la mayoría de los casos, puede intentar buscar resultados razonables (que muchas veces terminan siendo buenos y hasta a veces muy buenos) utilizando formalismos sencillos y aproximaciones importantes, o intentar llegar a mejores resultados a costa de utilizar modelos más complejos (con aproximaciones más exactas). En este trabajo hemos elegido el primero de los criterios por lo siguiente: a través de la evaluación de la bondad del método, avalada por la experiencia acumulada en nuestro grupo de trabajo, se sabe que esta aproximación da resultados satisfactorios, aún para regiones cercanas a la de la transición, para interacciones de largo alcance como lo son las dipolares y cuadrupolares. En el caso de interacciones de menor alcance, como la interacción espín-espín, no es de esperar buenos resultados cerca de las transiciones de fase, pero sí de que los rasgos topológicos de los diagramas de fases, lejos de estas regiones, sean suficien-

temente buenos como para poder explicar algunas observaciones experimentales. Esto nos motivó a utilizar la aproximación de campo medio en el estudio de algunos modelos aplicados a sistemas que presentan transiciones de fase del tipo orden-desorden orientacional.

El contenido de este trabajo es el que describimos a continuación. En el capítulo I se da una breve introducción a las transiciones de fases y fenómenos críticos, se clasifican las transiciones sólido-sólido y se describe con detalle las dos técnicas más importantes en el estudio de las transiciones orden-desorden: teoría del grupo de renormalización y aproximación de campo medio o molecular. En el capítulo II se introduce el formalismo y se desarrollan las expresiones de la energía interna, la entropía y la energía libre, y se obtienen los sistemas de ecuaciones para la resolución de los modelos de los dos capítulos siguientes. En el capítulo III se estudia un sistema de moléculas con distribuciones de cargas dadas por sus momentos dipolares y cuadrupolares. El formalismo se aplica a una red cuadrada y a una lineal. En ambos casos se obtienen los diagramas de fases, y para la red lineal se investiga la aparición de un doble pozo de potencial y el desordenamiento local de las moléculas. En el capítulo IV se estudia un sistema magnético tridimensional con interacciones a primeros y segundos vecinos en una dirección (modelo ANNNI). A través de la obtención de los diagramas de fases, se compara el comportamiento de un sistema que puede desordenarse en sólo dos direcciones con aquél que puede desordenarse tomando cualquier orientación en un plano, investigando con detalle la gran cantidad de fases que aparecen y discutiendo la eventual aparición de la "escalera de diablo". Posteriormente el modelo es aplicado al NaNO_2 para explicar la transición ferroeléctrica-modulada-paraeléctrica observada experimentalmente. A continuación se investiga el cambio en la tem-

peratura crítica en un sistema que puede tomar un número finito, mayor que 2, de orientaciones en un plano. En el capítulo V se estudia un sistema magnético tridimensional con interacciones de 2 y 4 cuerpos en una dirección (modelo "2+4") sin correlaciones. Se desarrolla el formalismo, se construye el diagrama de fases y se discute la posible aparición de fases moduladas. Finalmente se estudia un modelo unidimensional con interacción de n cuerpos, para dar cuenta de la transición de primer orden que aparece en el modelo "2+4". Sobre la finalización de este trabajo se presentan las conclusiones más importantes y se da una idea de cómo mejorar los resultados obtenidos.

Como bibliografía se utilizaron los siguientes textos:

- H.Stanley, Introduction to phase transitions and critical phenomena, Clarendon Press (1971).
- C.Domb and M.S.Green eds., Phase transitions and critical phenomena, vol 1, Academic Press, N.Y. (1972).
- B.Hu, Phys. Rep. 91, 233 (1982).