Landauova teorija faznih prehodov v feroelektrikih

Matija Kuclar

Prehod prvega reda

Pri prehodih prvega reda je značilno, da so prehodi nezvezni in ob tem se sprošča latentna toplota (npr. izparilna toplota). Seveda se nezvezno spremeni volumen, magnetizacija, polarizacija, itd.

Zapišimo prosto energijo v odsotnosti polja, kjer je $g_4 < 0$ in $g_6 > 0$:

$$F = \frac{\gamma}{2}(T - T_0)P^2 + \frac{g_4}{4}P^4 + \frac{g_6}{6}P^6 \quad (1.)$$

Zdaj odvajamo po parametru reda in iščemo ekstrem

$$0 = \gamma(T - T_0)P + g_4P^3 + g_6P^5 \quad (2.)$$

Nato moramo poiskati ničle, da bomo ustrezali pogoju

$$0 = P(\gamma(T - T_0) + g_4P^2 + g_6P^4) \quad (3.)$$

Prvo ničlo $P_5 = 0$ smo našli z izpostavljanjem izraza. Da najdemo ostale štiri moramo rešiti kvadratno enačbo:

$$P^2_{1,2,3,4} = \frac{-g_4 \pm \sqrt{g_4^2 - 4g_6\gamma(T - T_0)}}{2g_6} \quad (4.)$$

Izračunamo lahko temperaturo T_m nad katero imamo samo en globalni minimum, to bo pa takrat ko bodo ničle $P_{1,2,3,4}$ kompleksne.

$$g_4^2 - 4g_6\gamma(T - T_0) < 0 \quad (5.)$$

Iz tega sledi

$$T_m = T_0 + \frac{g_4^2}{4g_6\gamma} \quad (6.)$$

Če imamo temperaturo pod T_m se nam pojavita še dodatna dva minimuma.
Če je temperatura med $T_m < T < T_c$ (kjer je T_c kritična temperatura) sta minimuma višja oziroma imata višjo prosto energijo kot minimum pri P_5. Temu stanju rečemo urejena faza in to je metastabilno stanje. Pri temperaturi prehoda $T_c = T$ so vsi minimumi pri prosti energiji $F = 0$. Če je $T_0 < T < T_c$ se ponovno pojavi metastabilno stanje, saj imata minimuma manjšo prosto energijo kot pri P_5. Pod temperaturo prehoda, kjer se spremeni predznak pri členu P^2 zaradi $T_0 > T$, pride sistem v stabilno stanje, kjer je zdaj prosta energija pri P_5 lokalni maksimum.

Za konec pa lahko izračunamo še kritično temperaturo. Naš pogoj je, da morajo biti vsi minimumi pri isti vrednosti proste energije. Vzamemo enačbo (1.) in jo postavimo na 0. To se pravi, da je $F = 0$

$$0 = \frac{\gamma}{2}(T - T_0)P^2 + \frac{g_4}{4}P^4 + \frac{g_6}{6}P^6 \quad (7.)$$

Izpostavimo

$$0 = P^2\left(\frac{\gamma}{2}(T - T_0) + \frac{g_4}{4}P^2 + \frac{g_6}{6}P^4\right) \tag{8.}$$

In ponovno rešimo kvadratno enačbo.

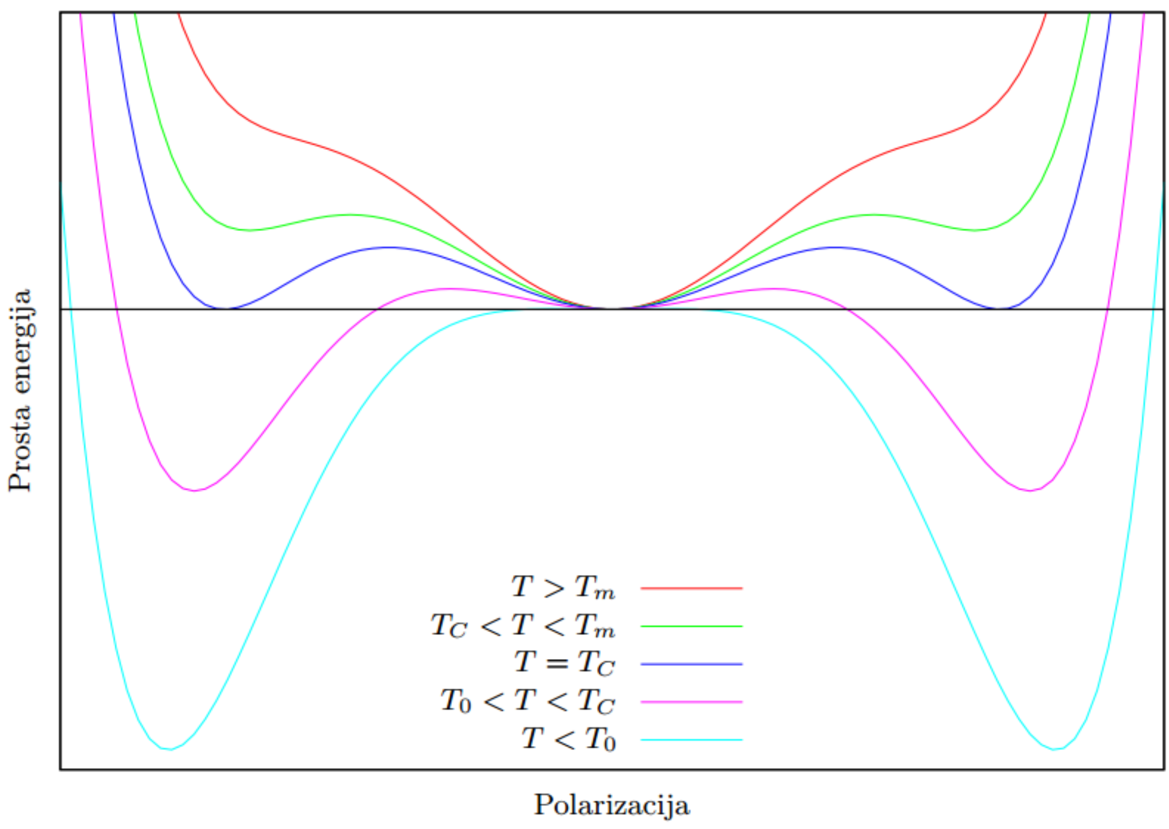
$$P^2_{1,2,3,4} = \frac{-\frac{g_4}{4} \pm \sqrt{\frac{g_4^2}{16} - \frac{4}{2*6}g_6\gamma(T - T_0)}}{\frac{2g_6}{6}} \tag{9.}$$

Ker rabimo dvojne ničle pri isti vrednosti mora biti diskriminanta enaka nič

$$\frac{g_4^2}{16} - \frac{4}{2*6}g_6\gamma(T_c - T_0) = 0 \tag{10.}$$

Tako dobimo kritično temperaturo

$$T_c = T_0 + \frac{3g_4^2}{16\,\gamma\,g_6} \tag{11.}$$



Viri:

Boštjan Mavrič: Landauova teorija faznih prehodov v feroelektrikih 2011

Peter Prelovsek, TEORIJA TRDNE SNOVI, Ljubljana 1999