Boris Neubert

Symmetriebasierte mikroskopische Modelle für modulierte Materialien

Verlag Pirrot
Saarbrücken

Neubert, Boris:
Symmetriebasierte mikroskopische Modelle für modulierte Materialien/Boris Neubert.– Dudweiler: Pirrot, 1998
ISBN 3-930714-32-9

Alle Rechte vorbehalten. Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlages unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Satz: Boris Neubert, Saarbrücken
Druck und Bindung: Pirrot Verlag & Druck, Trierer Straße 7, Saarbrücken-Dudweiler
Printed in Germany.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis vii

Tabellenverzeichnis viii

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis x

Vorwort xii

Thematik und Aufbau der Arbeit 1

TEIL 1. Modulierte Strukturen 4

Kapitel 1. Materialien 4

1. Beispiele für modulierte Systeme 4
2. Übersicht über uniaxial modulierte Substanzen 5
3. Die Relevanz der Raumgruppe D_{2h}^{16} 5

TEIL 2. Modelle 7

Kapitel 2. Einleitung und Übersicht 7

1. Klassifizierung von theoretischen Beschreibungen strukturell modulierter Systeme 7
2. Phasendiagramme in Theorie und Experiment 8

Kapitel 3. Die Landausche Theorie 11

Kapitel 4. Diskussion und Erweiterung mikroskopischer Ansätze 15

1. Das FRENKEL-KONTOROWA-Modell und die DIFFOUR-Modelle 15
2. Das Modell von CHEN und WALKER 16
3. Der lokale-Moden-Ansatz nach THOMAS 18
4. Erweiterung der vereinheitlichten Theorie nach STAMENKOVIČ et al. 22

Kapitel 5. Ein symmetriebasierter mikroskopischer Modellzugang für uniaxial modulierte Materialien 37

1. Einleitung und Übersicht 37
2. Die Herleitung symmetriekonformer Modell-HAMILTONoperatoren 40
3. Symmetrieeigenschaften der lokalen Moden 49
4. Der effektive HAMILTONoperator mit Pseudoperiodizität 58
5. Zusammenhang von Modellen im Kontext der SALM-Beschreibung 59

Kapitel 6. Ein Modell-Hamiltonoperator für displazive und Ordnungs-Unordnungs-Übergänge 62
1. Diskussion des Modell-HAMILTONoperators 62
2. Numerische Behandlung in Molekularfeldnäherung 63
3. Parameterraum und Phasendiagramme 76

Kapitel 7. Pseudospinmodelle 80
1. Der Pseudospinformalismus 80
2. Pseudospinmodelle für uniaxial modulierte Substanzen 92

TEIL 3. Anwendungen 101

Kapitel 8. Korrespondenz von Modell- und Materialgrößen 101
1. Vorbemerkungen 101
2. Ab initio- und verwandte Methoden 102
3. Ableitung aus Strukturuntersuchungen 103
4. Semiempirische Ansätze 110

Kapitel 9. Anwendung des ANNNI- und des DIS-Modells auf BCCD 115
1. Motivation 115
2. Stand der Anwendung mikroskopischer Modelle 115
3. Theoretische Ableitung von Phasendiagrammen als Funktion experimenteller Kontrollparameter 120
4. Einflüsse der Realstruktur des Kristalls 122
5. Strukturvoraussagen anhand des ANNNI-Modells 123
6. Ausdrücke für die spontane Polarisation 126
7. Anwendung des DIS-Modells 129

Zusammenfassung · Diskussion · Ausblick 135

Anhang A. Die Raumgruppe D_{2h}^{16} 139
1. Allgemeines zu Punkt- und Raumgruppen 139
2. Die Punktgruppe D_{2h} 140
3. Die Struktur der Raumgruppe D_{2h}^{16} 141
4. Irreduzible Darstellungen der Raumgruppen 142
5. Zur Nomenklatur irreduzibler Darstellungen 143

Anhang B. Reduzierte Einheiten 146
1. Einführung geeigneter reduzierter Einheiten 146
2. Vergleich mit anderen Autoren 147

Anhang C. Formelsammlung 148
1. Rekursionsformel für die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators 148
2. FOURIERtransformierte 148
3. Stochastik 150

Anhang D. Uniaxial modulierte Substanzen 151

1. $A'A''BX_4$-Verbindungen 151
2. Andere Verbindungen 160

Anhang E. Numerische Berechnung von Phasendiagrammen 162
1. Übersicht über die Vorgehensweise 162
2. Die Bestimmung der stabilen Struktur 162
3. Die Konstruktion des Phasendiagramms 166

Literatur 169

Abbildungsverzeichnis

2.1 Zusammenhang zwischen einem experimentellen und theoretischen Phasendiagramm. 9

4.1 Temperaturabhängigkeit von $\eta^{\pm}$ und S im STAMENKOVIČ-Modell. 33
4.2 Temperaturabhängigkeit von $\eta^{\pm}$ und S im STAMENKOVIČ-Modell. 34
4.3 Temperaturabhängigkeit von $\eta^{\pm}$ und S im STAMENKOVIČ-Modell. 34

5.1 Wahl der Subzellen für Modulationen entlang **c**. 41
5.2 Schematische Darstellung der Zellmoden. 44
5.3 Veranschaulichung des Falls einer relevanten Variable. 46
5.4 Erweitertes Zonenschema. 57
5.5 Hierarchie von Modellbeschreibungen modulierter Materialien. 60

6.1 2-4-Potentiale in reduzierten Einheiten. 62
6.2 Lokales Potential, Eigenwerte, Wellenfunktionen im EGK-Modell. 66
6.3 Lokales Potential, Eigenwerte, Wellenfunktionen im EGK-Modell. 67
6.4 Lokales Potential, Eigenwerte, Wellenfunktionen im EGK-Modell. 68
6.5 Lokales Potential, Eigenwerte, Wellenfunktionen im EGK-Modell. 69
6.6 Wahrscheinlichkeitsverteilungen im EGK-Modell. 71
6.7 Wahrscheinlichkeitsverteilungen im EGK-Modell. 72
6.8 Verschiebung als Funktion der Kraft im EGK-Modell. 73
6.9 Verschiebung als Funktion der Kraft im EGK-Modell. 74
6.10 Vergleich der Kurvenverläufe von $X(F)$ und $\tanh(-F/\tau)$. 76
6.11 Phasendiagramm für das EGK-Modell. 78
6.12 Phasendiagramm für das EGK-Modell. 78
6.13 Phasendiagramm für das EGK-Modell. 79

7.1 Schematische Darstellung von Zwei- und Vier-Mulden-Potentialen. 84
7.2 Erwartungswert der Amplitude im Potentialtopf. 89
7.3 Phasendiagramm des ANNNI-Modells. 96

7.4 Phasendiagramm des DIS-Modells. 99

8.1 Wahl der Subzellen für Modulationen entlang **a**. 104
8.2 Atompositionen von Rubidiumzinkchlorid in der ungeordneten Hochtemperaturphase. 105
8.3 Mittlere Atompositionen von Rubidiumzinkchlorid und relevante lokale Mode. 106
8.4 Atompositionen von BCCD in der Hochtemperaturphase. 107
8.5 Relevante lokale Moden für BCCD. 109
8.6 Werte der effektiven Kopplungen des ANNNI-Modells als Funktion der mittleren Gitterkonstante. 112
8.7 Ableitung der effektiven Wechselwirkungen aus dem Verlauf der Soft Mode in BCCD. 114

9.1 Experimentelles Druck-Temperatur-Phasendiagramm von BCCD. 116
9.2 Langperiodische Strukturen des ANNNI-Modells im Solitonenbild. 119
9.3 Gemessene und theoretisch ermittelte Verschiebung der Phasengrenzen in BCCD als Funktion der Bromierung. 123
9.4 Struktur der $q = \frac{1}{4}$-Phase in BCCD. 125
9.5 Vergleich gemessener und anhand des ANNNI-Modells berechneter Auslenkungen in der $q = \frac{1}{4}$-Phase von BCCD. 126
9.6 Temperaturabhängigkeit der Pseudospinmittelwerte in der $q = \frac{1}{4}$-Phase des DIS-Modells. 130
9.7 Harmonische in Pseudospinprofilen des DIS-Modells. 131
9.8 Vergleich gemessener und anhand des DIS-Modells berechneter Auslenkungen in der $q = \frac{1}{4}$-Phase von BCCD. 132
9.9 Einfluß von Strahlenschäden auf die T_S-Anomalie in BCCD. 134

A.1 Stereographische Projektion der Punktgruppe D_{2h}. 140
A.2 BRILLOUINzone des primitiven orthorhombischen Gitters. 144

E.1 Symmetrien in einer modulierten Struktur. 165
E.2 Veranschaulichung der Algorithmen zur numerischen Berechnung von Phasendiagrammen. 168

Tabellenverzeichnis

5.1 Transformationsverhalten der Subzellen. 52
5.2 Transformationsverhalten der Schichtmoden. 56
5.3 Die irreduziblen Darstellungen der Punktgruppe C_{1h} und die Kompatibilitätsbeziehungen. 57

7.1 Kritisches Verhalten des ANNNI-Modells. 95

8.1 Vergleich der Variablen verschiedener Modelle für BCCD. 109
8.2 Subzellenauslenkungen für BCCD unter den relevanten lokalen Moden. 110

9.1 Symmetrieerlaubte Komponenten der spontanen Polarisation. 128
9.2 Harmonische in Pseudospinprofilen des DIS-Modells. 131

A.1 Verknüpfungstafel der Punktgruppe D_{2h}. 140
A.2 Aufstellungen der Raumgruppe D_{2h}^{16}. 141
A.3 Irreduzible Darstellungen von D_{2h} und $C_{2\nu}$. 144
A.4 Irreduzible Darstellungen von $C_{2\nu}$ und $\mathfrak{G}(q\mathbf{c}^*)$. 145

B.1 Vergleich von reduzierten Einheiten. 147

D.1 Kalium-Verbindungen. 151
D.2 Rubidium-Verbindungen. 153
D.3 Zäsium-Verbindungen. 155
D.4 Ammonium-Verbindungen. 156
D.5 Tetramethylammonium-Verbindungen. 159
D.6 Andere Verbindungen. 161