
Mechanismen bei strukturellen Phasenübergängen

H. Böhm

V. Kahlenberg, J. Kusz, O. Pawlig, M. Riester

Definition

Strukturelle Phasenumwandlung:

Sie erfolgt bei einer plötzlichen Symmetrieänderung als Folge einer Änderung von Druck und/oder Temperatur.

Mit der Symmetrieänderung ist eine Änderung der Struktur verbunden

Klassifizierung

◆ Phasenübergänge 1. Ordnung.

bei der Temperatur T_c : $\Delta S \neq 0$

$$\Delta V \neq 0$$

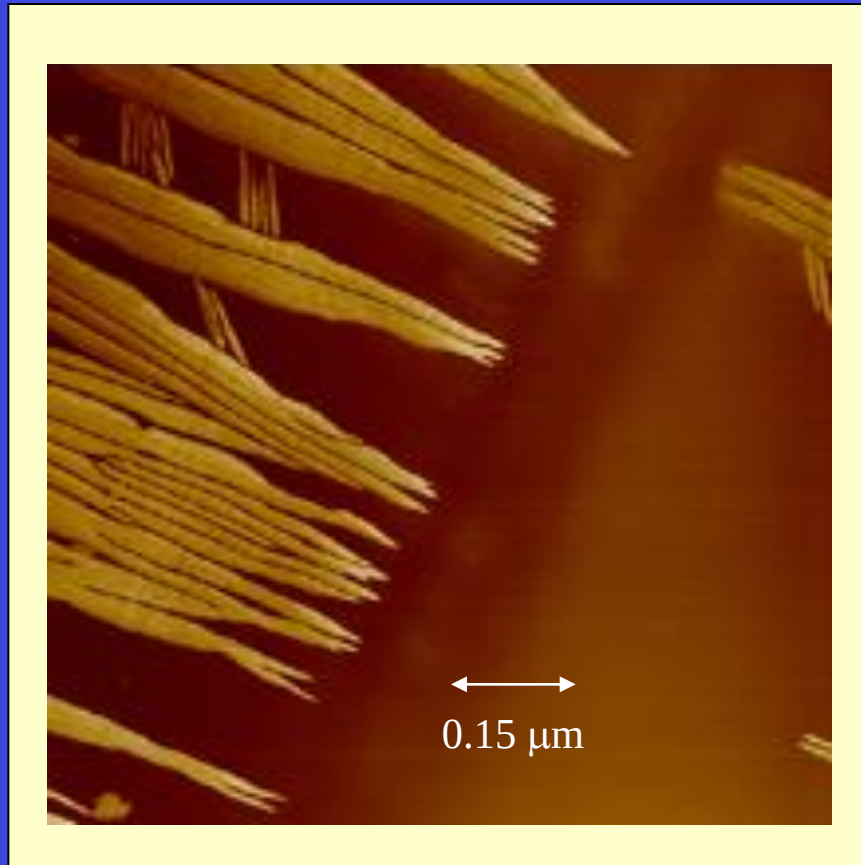
Mechanismus:

Keimbildung und Wachstum

Charakteristisches Merkmal:

Thermische Hysterese

Beispiel



Kraftmikroskopische (AFM) Aufnahme der Umwandlung von Polydiethylsiloxane (PDES) bei $T = -6\text{ °C}$

Klassifizierung

◆ Phasenübergänge 2. Ordnung.

bei der Temperatur T_c : $\Delta S = 0$

$$\Delta V = 0$$

Mechanismus:

Kontinuierliche Umwandlung

Charakteristisches Merkmal:

Keine thermische Hysterese

Landau Theorie findet Anwendung

Beispiel

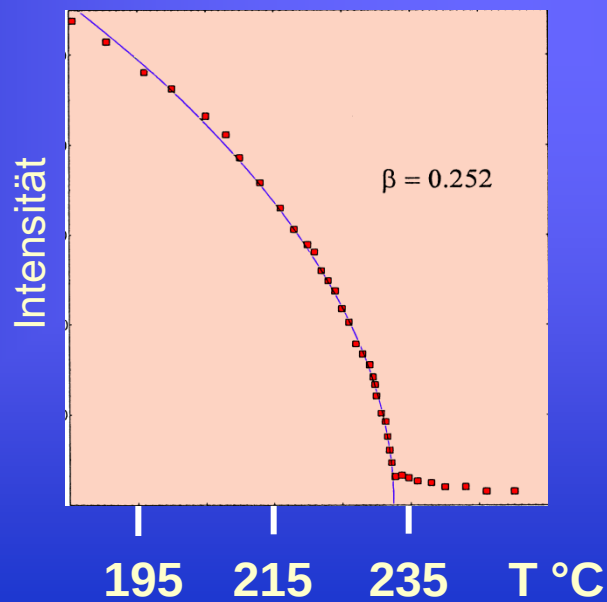


Phasenabfolge

α - Phase
C2/c

$$c_0(\alpha) = 2 c_0(\beta)$$
$$T_c = 233 \text{ }^\circ\text{C}$$

β - Phase
C2/m

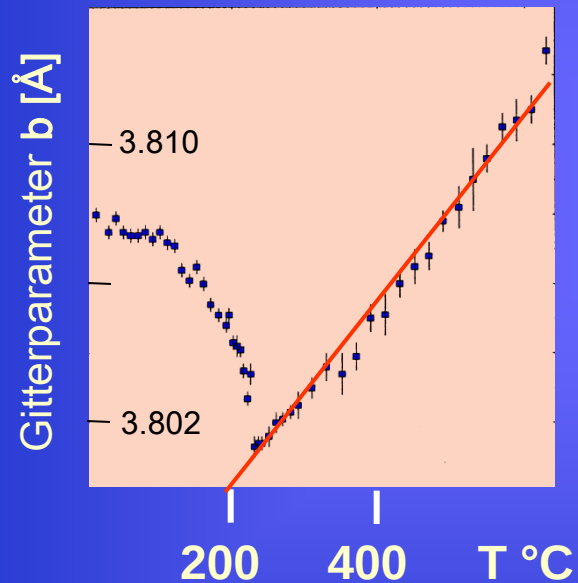


Überstrukturreflex

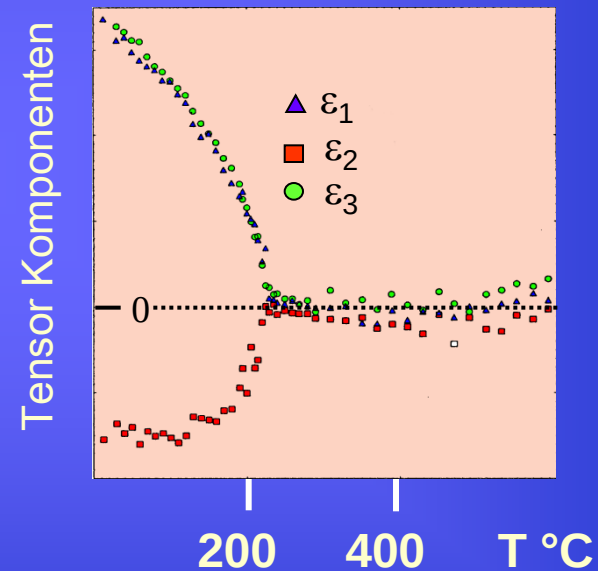
Beispiel



Gitterparameter b



Spontane Dehnung

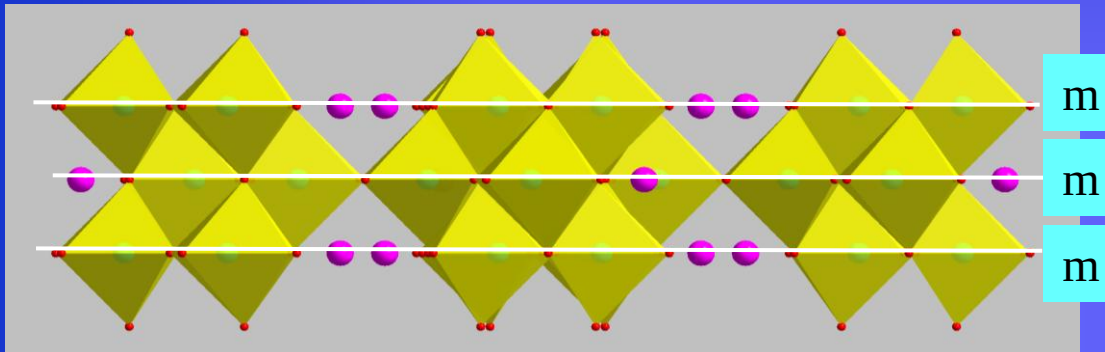


Keine thermische Hysterese:
Phasenumwandlung 2. Ordnung

Beispiel

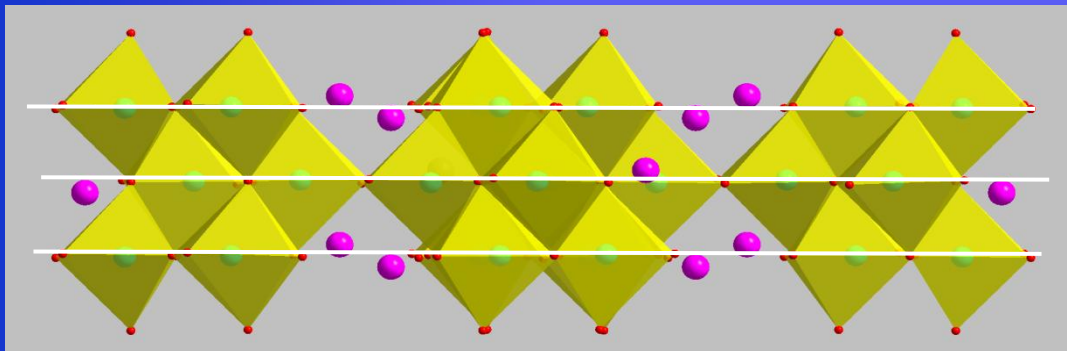


Struktur : β -Phase



Struktur : α -Phase

Bi - Atome



Mechanismus:

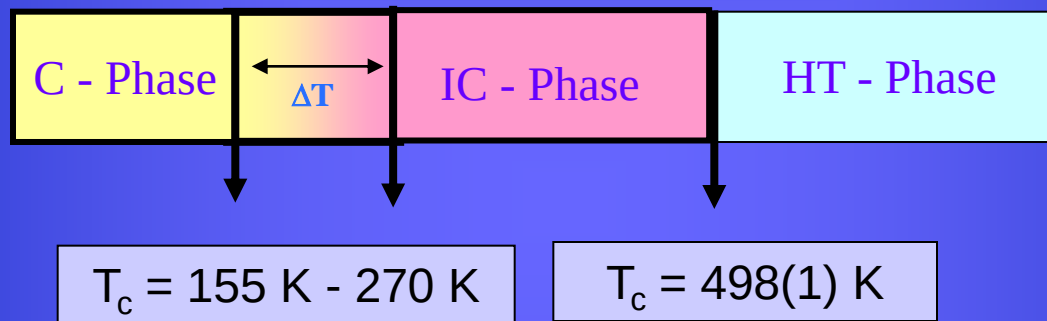
Kontinuierliche Verschiebung der Bi-Atome aus der Spiegelebene.

Die Phasenumwandlung wird ausgelöst durch das "einsame Elektronenpaar" des Bi.

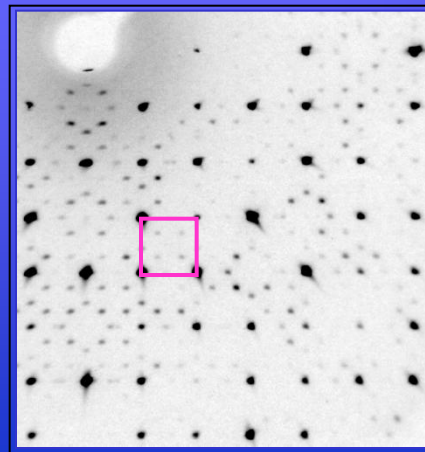
Beispiel



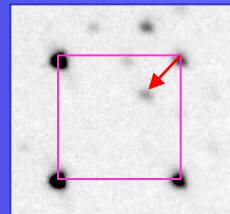
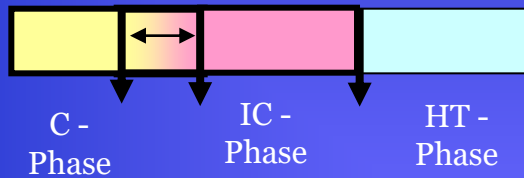
Abfolge von Phasen:



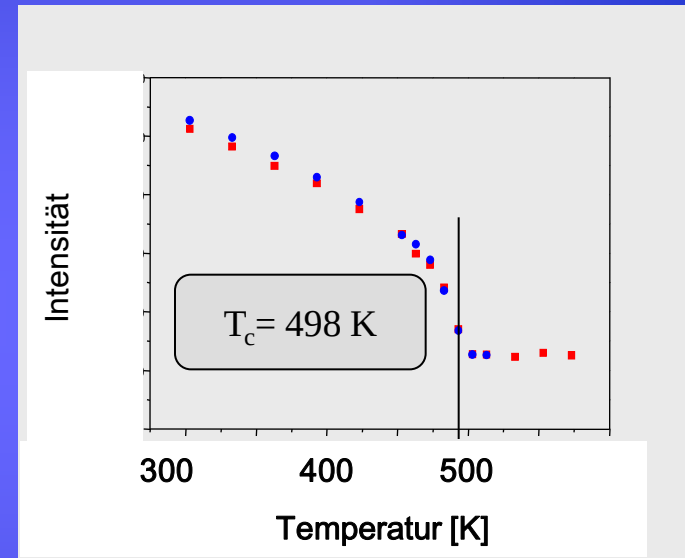
Beugungsdiagramm
bei RT:



Beispiel



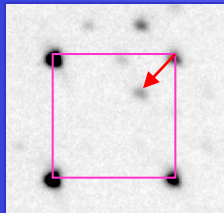
Satelliten-Intensität



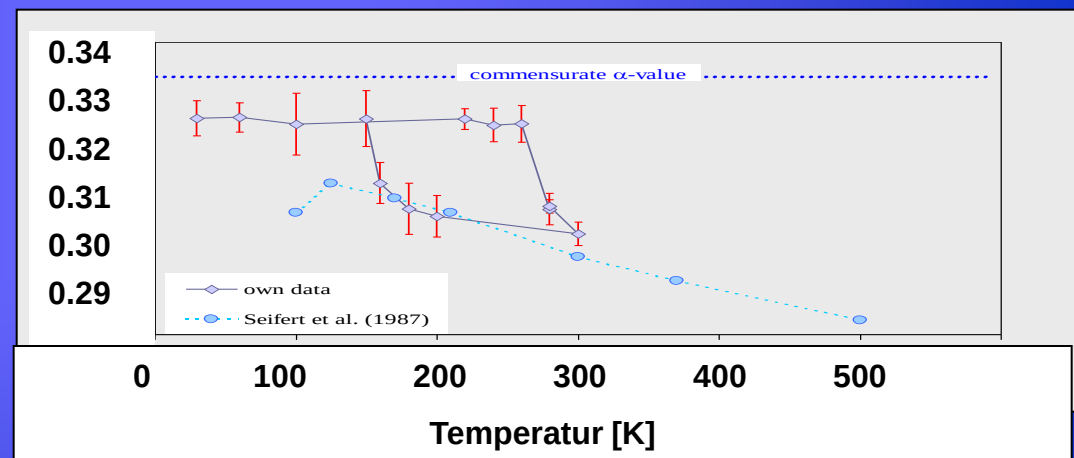
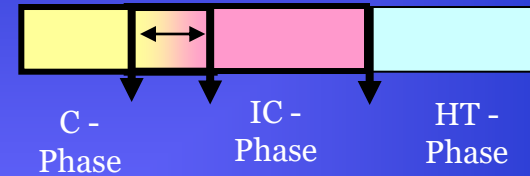
Phasenumwandlung bei ca. 500 K

Keine thermische Hysterese:
Phasenumwandlung 2. Ordnung

Beispiel



Variation des q-Vektors



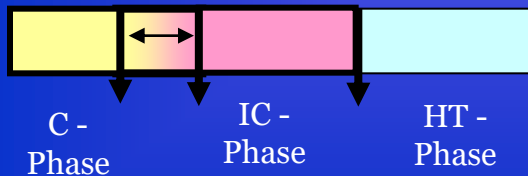
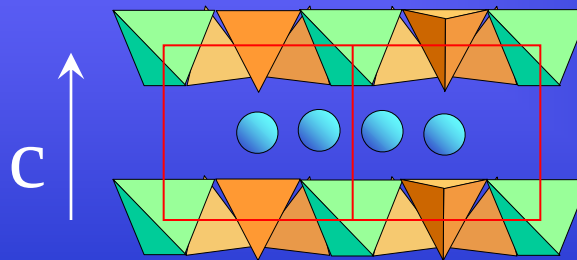
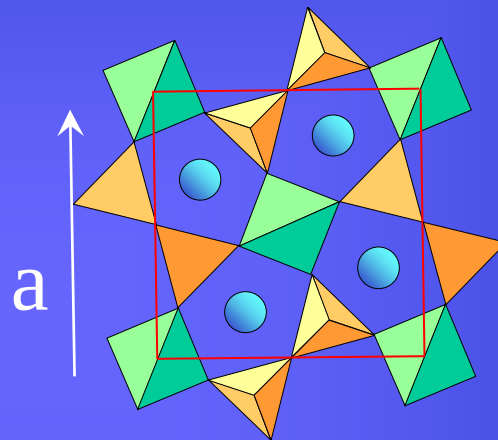
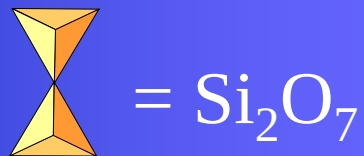
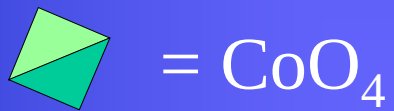
Phasenumwandlung
zwischen 155 K und 270 K

Thermische Hysterese:
Phasenumwandlung 1. Ordnung

Beispiel



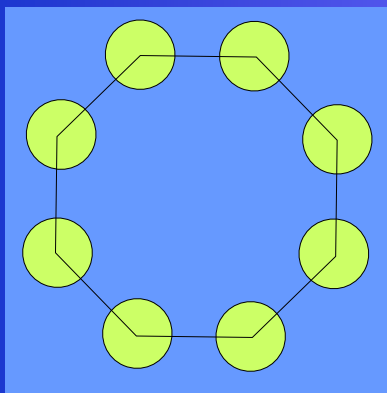
HT - Phase



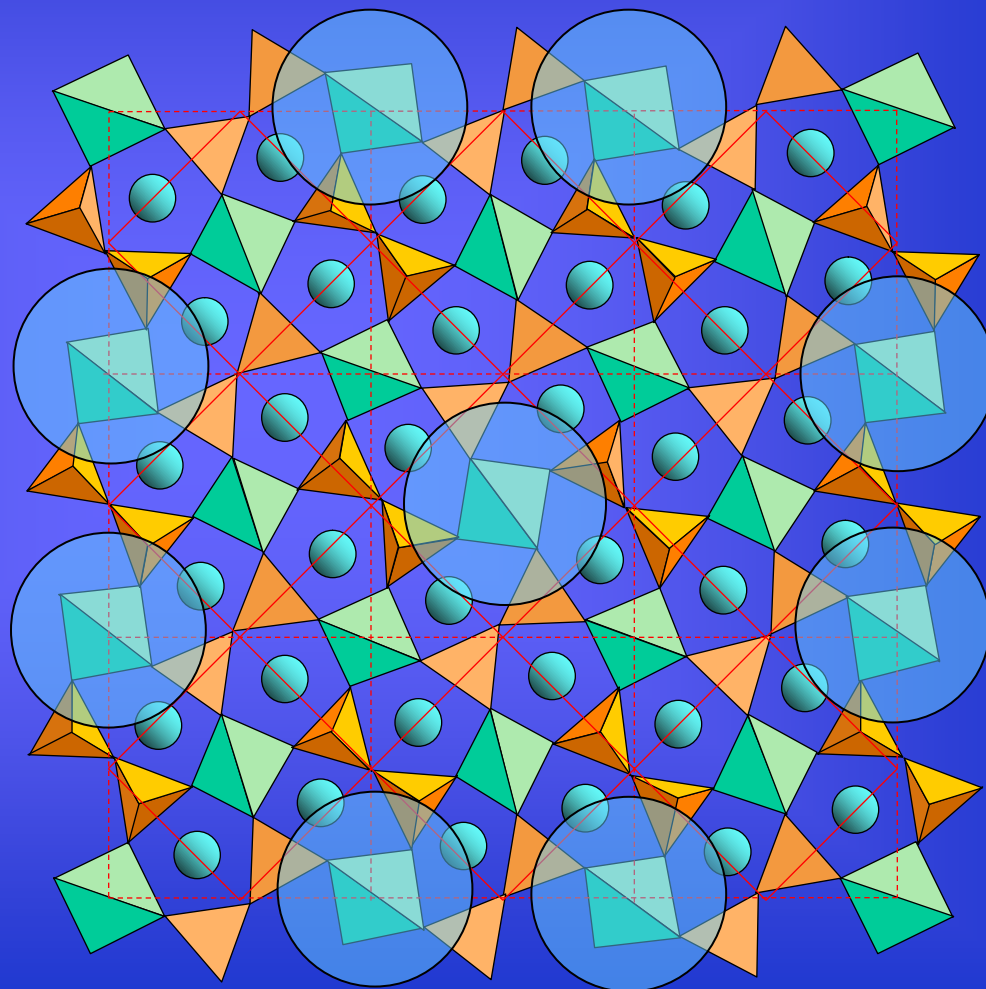
Beispiel



C - Phase



3·a

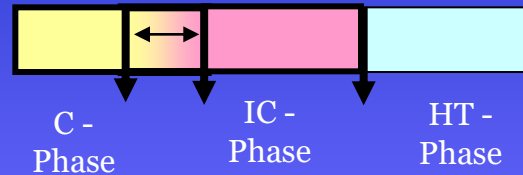


C -
Phase

IC -
Phase

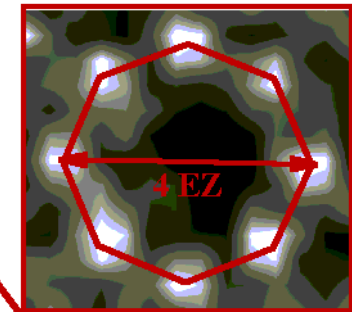
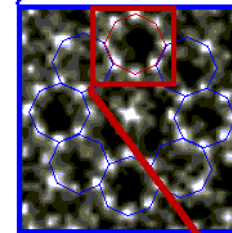
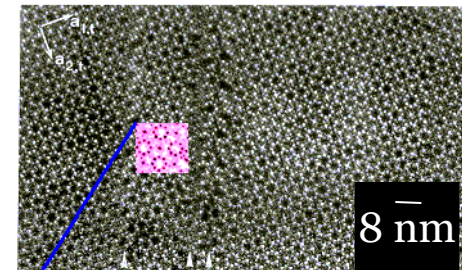
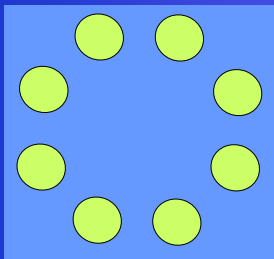
HT -
Phase

Beispiel



IC - Phase

TEM Aufnahme bei Raumtemperatur:
Sie zeigt oktagonale Ringe.

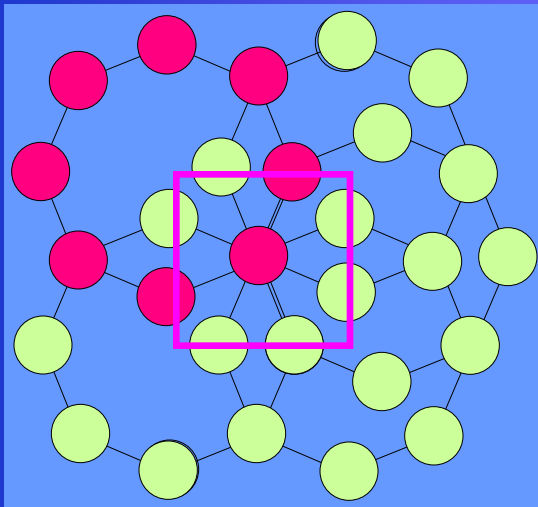
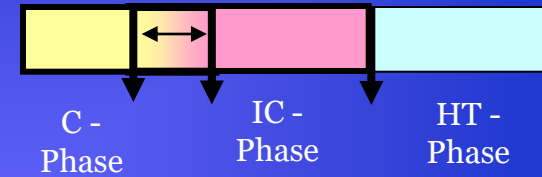


Van Heurk et al., 1992

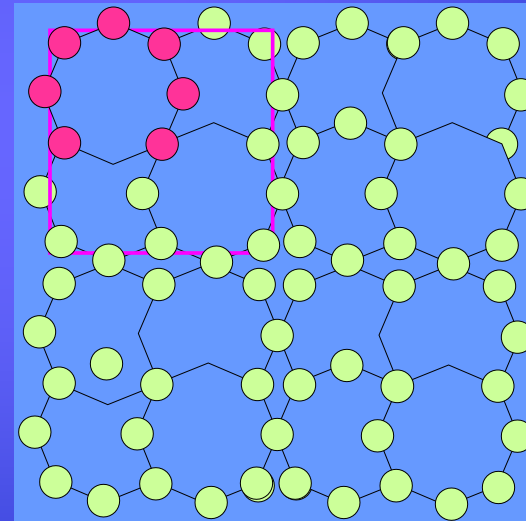
Beispiel



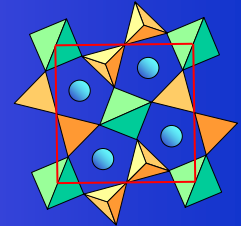
Verwandtschaft der Strukturen



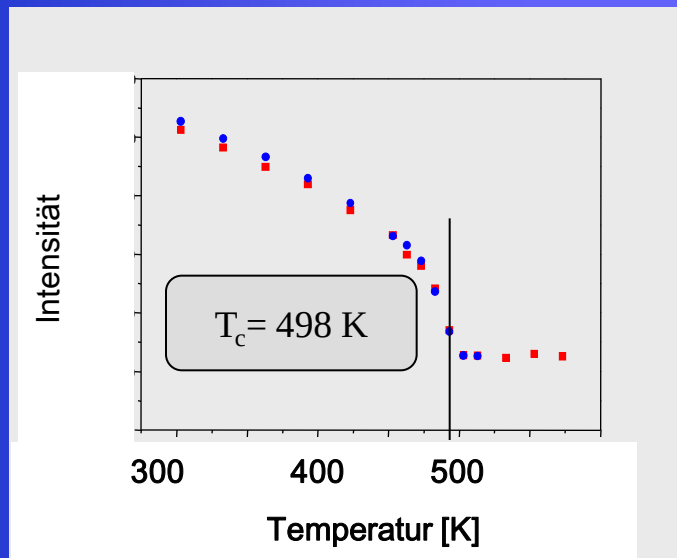
C-Phase: Eine geordnete Überlagerung von oktagonalen Ringen.



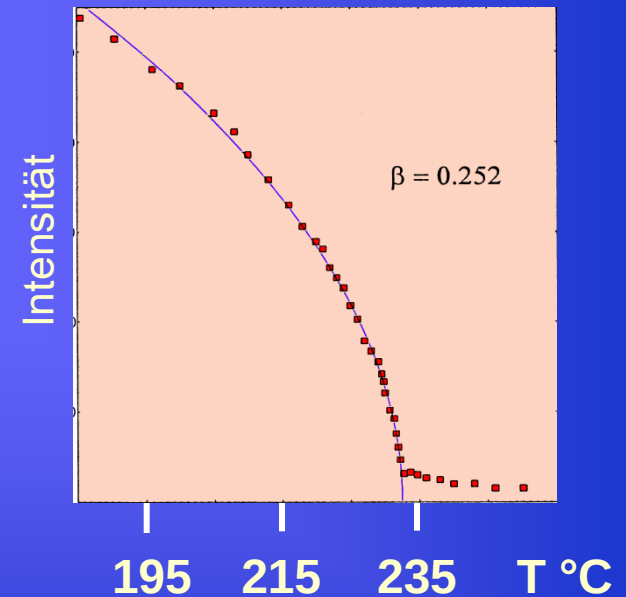
IC-Phase: Eine zufällige Überlagerung von oktagonalen Ringen.



Mechanismen

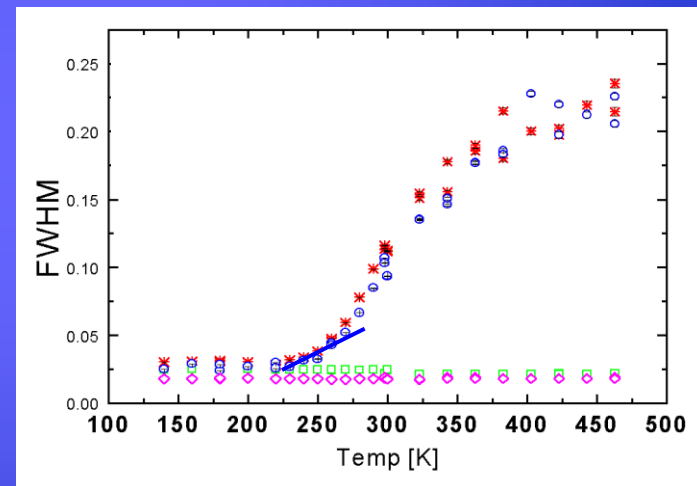
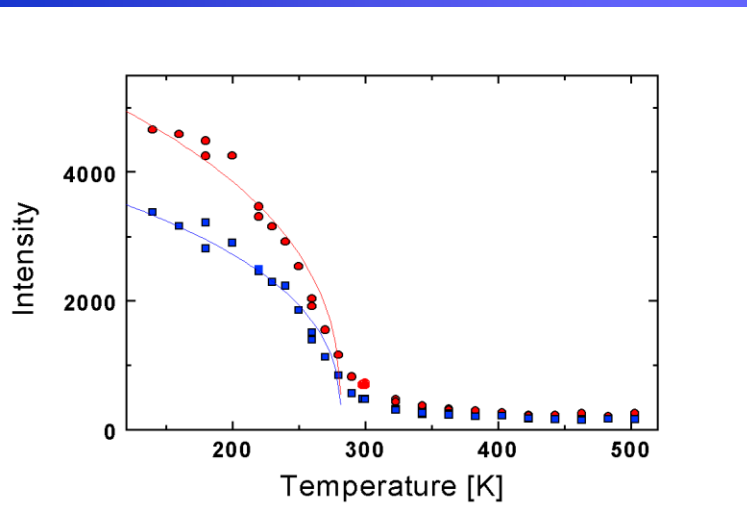
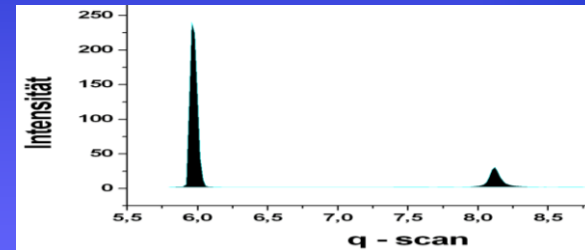
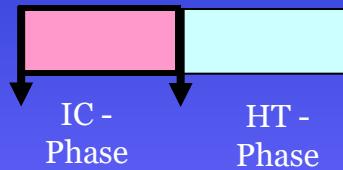
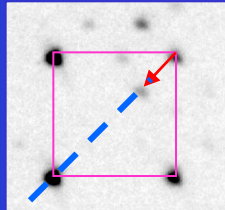


Satellitenreflex



Überstrukturreflex

Mechanismen



$T_c = 277 \text{ K}$

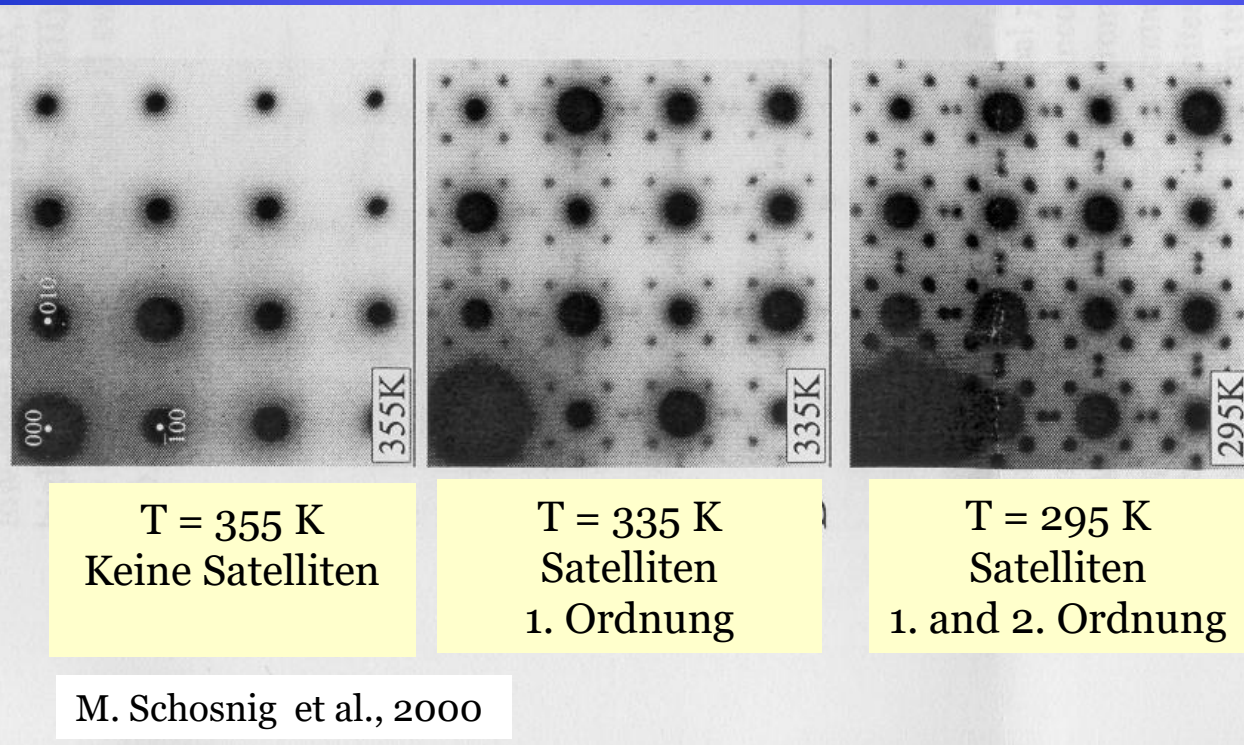


$T_c = 250 \text{ K}$

Transformationstemperatur

Mechanismen

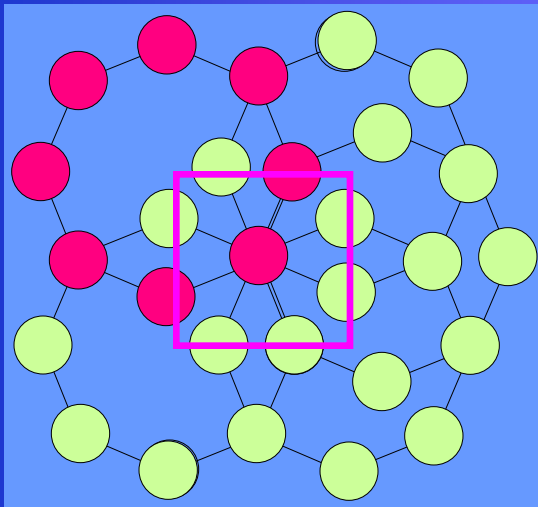
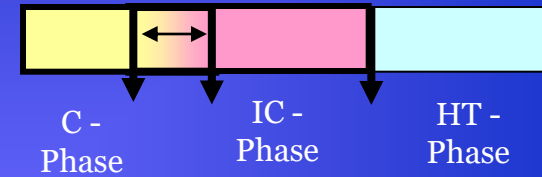
TEM, IC- und HT-Phase: Elektronenbeugung
am $(\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x)_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$.



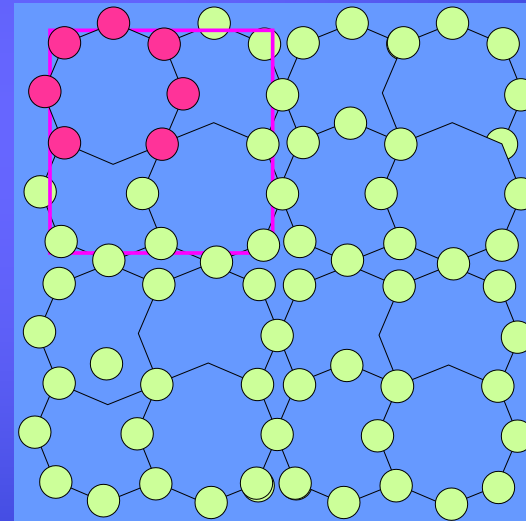
Beispiel



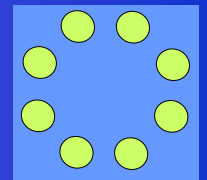
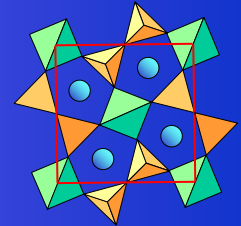
Verwandtschaft der Strukturen



C-Phase: Eine geordnete Überlagerung von oktagonalen Ringen.



IC-Phase: Eine zufällige Überlagerung von oktagonalen Ringen.



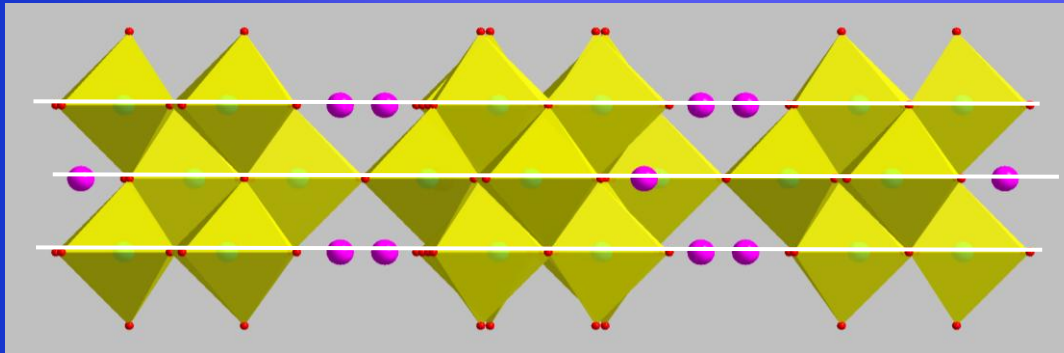
Beispiel



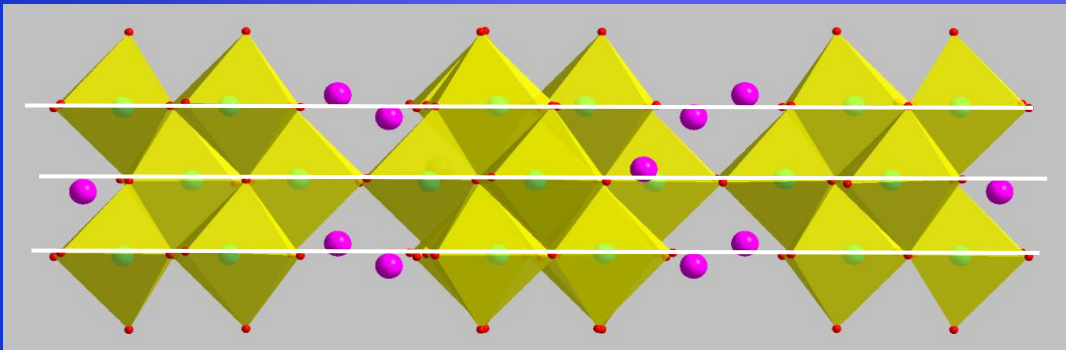
Struktur : β -Phase



Bi - Atome



Struktur : α -Phase



Mechanismus:

Kontinuierliche Verschiebung der Bi-Atome aus der Spiegelebene.

Die Phasenumwandlung wird ausgelöst durch das "einsame Elektronenpaar" des Bi.