

Solido/solido fase-trantsizioen iragarpena

Josu M. Igartua Aldamiz

kaleko edozein pertsonari fase-trantsizioa (*F-T*) zer den galdetuz gero, ez dakiela erantzungo du. Dena dela, edo nork daki ura berotuz, baldintza jakinetan, lurrundu egingo dela. Edo neguan, gauez (gehienetan), esaterako, errepideetako ura izoztu egiten dela. Hori gogoraraziz gero, lehengo pertsonak-jakina! esango du, likidotik lurrunerako transformazioaz ari zara, edo likidotik solidorakoaz. Bai. Baina horiek ez dira izadian, berez edo gizakiak eraginda, gertatzen diren transformazio bakarrak; hots, "materiaren egoeren" (solido, likido edo gasa) artekoak. Gainera, aipatukoak garrantzitsuak badira ere, interesgarriagoak direnak gertatzen dira.

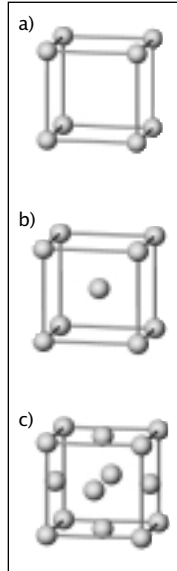
Horixe da solido/solido transformazio-moten kasua (ikus 1. irudia). Solido/solido *F-T*-ak oso garrantzitsuak dira teknologian, barne-egituraren aldaketek teknologikoki erabil daitezkeen fenomeno fisikoak agertaraz baititzakete. Beraz,

garrantzitsua da horrelakoak aztertzea, baita zein baldintzatan agertuko diren jakitea ere. Horretarako, esperimentalki aztertu behar dira. Eta, esperimentalki aztertu gabe, zein baldintzatan agertuko diren iragartzea posiblea izango balitz? Lan (diru) asko aurreztuko litzateke. Berau da lantzen ari garen proiektuaren helburuetako bat: *F-T* jakin batzuk iragari ahal izateko baldintzen bila gabiltza.

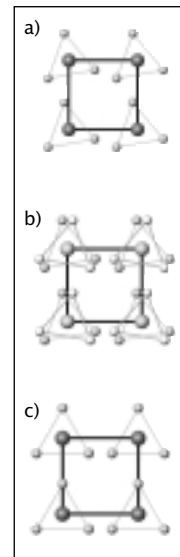
Zenbait metodo proposatu da *F-T*-en iragarpena egiteko. Esaterako, Abrahams-Kurtz-Jamieson hirukoteak 1968. urtean egindako ikerketaren ondorioz, zenbait substantzian aplikagarria zen atomoen desplazamenduen eta *F-T*-aren arteko erlazioa plazaratu egin zuten. Aztertutako materialak ferroelektrokoak ziren, eta, aipatu erlazioa aplikaturik ehun bat substantzia ferroelektroko berri aurkitu dira azken urteotan. Metodoa pseudosimetrian zetzan (ikus 2. irudia). Horixe da geu ere erabiltzen ari garen metodoa. Haatik, gure lana sistematikoa da: egitura atomikoetako datu-baseetako informazioa erabiltzen dugu; eta pseudosimetriaren bilaketa espazio-taldeetako talde-teoria erabiliz egiten

dugu. Dena dela, pseudosimetria aurkitzeak ez du esan nahi derrigor *F-T*-a esperimentalki aurkitu egin behar denik; metodoak baldintza geometrikoak baino ez ditu kontuan hartzen, eta ez baldintza fisikoak. Guk kandidatuez hitz egiten dugu. Kandidatuak izendatutakoan, esperimentalki aztertu behar dira substantziak, iragarritako balizko *F-T*-a agertuko den ala ez behatzeko.

Orain arte, hiru espazio-talderekin lan egin dugu: $P2_12_12_1$, $Pnma$ eta $I4/m$. Guztira 2.000 substantzian bilatu dugu pseudosimetria, eta ehun bat kandidatu berri proposatu ditugu.



1. irudia. Solidoen eredu mikroskopikoak. Substantzia berari zenbait ordenamendu atomiko esle diezaiokegu; esaterako, irudiko sare kubiko bakuna (a), gorputzean zentratutako sare kubikoa (b), edo aldeetan zentratutakoa (c). Horiek dira aipatu barne-egiturak. Zenbait substantziaren gaineko presioa handitzean, barne-egituraren aldaketa eragingo dugu, atomo-ordenamendu ezberdina eratuz, zeinaren ondorioz potentzial-diferentzia ager daitezkeen; hots, efektu elektrikoa sortarazi du presioaren emendioak.



2. irudia. Pseudosimetria. (a) irudiko egitura da datu-basetik ateratakoa. Talde-teoria aplikatuz (b) irudikoa lortuko genuke. (c) irudian pseudosimetria jakineko sarea irudikatu da.

Momentu honetan hirugarren taldea esperimentalki aztertzen ari gara. Konposatu-familia bakarrarekin ari gara, $A_2BB'O_6$ familia, elpasolita izeneko pseudoperovskita bikoitzak (non $A=Ba, Sr, B=Co, Ni, Fe, Zn, Cu, Mn, Mg, Ca, Cd, W=Mo, Te, W$ diren). Guztira 51 konposatu, eta, horien artean, 10 sintetizatu ditugu. *F-T*-a behatzeko, DSC teknika (ekorketa diferentzialaren bidezko kalorimetria) erabili dugu. Faseak aztertzeko X izpien bidezko neurketak egin ditugu. **□**

Proiektuaren izenburua:

Solidoetako Fase-trantsizioak: mekanismoak eta egitura.

Azpi-proiektuaren helburua:

Fase-trantsizioen azterketa teorikoa eta esperimentalta.

Finantziazioa:

DGESIC (Dirección General de Enseñanza Superior e Investigación Científica).

Zuzendaria:

Juan Manuel Pérez Mato.

Azpi-proiektuaren zuzendaria:

Josu M. Igartua Aldamiz

Azpi-proiektuaren ikerketa-taldea:

Josu M. Igartua, Milen Gateshki, Eli Kroumova, Moisés Aroyo.

Departamentua:

Fisika aplikatua II.

Fakultatea:

Zientzia Fakultatea.