**铁磁质相图绘制的原理及方法**

物试51 王成龙

1. **相场的基本运算:**

晶体内部的极化强度为*P=*(*P1,P2,P3*),具体的数值大小与晶面的类型有关，如(001)形晶面在笛卡尔坐标下*P=*(*P1,P2,0*)

使用含时的 Ginzburg–Landau等式可以得到极化强度随时间以及系统自由能随极化强度的变化情况

 (1)

其中*Pi*(*x*,*t*)表示笛卡尔坐标系下在*i*方向的极化强度，在(001)晶面下，*i*=1,2; *L*表示与畴壁迁移率相关的动力力学系数；*F*表示系统的总自由能。

接下来的重点在于求出自由能*F*的表达形式。

首先自用能*F*包含四个部分——体自由能*Fbulk*，畴壁能*Fwall*，弹性能*Fela*以及静电能*Fele*。具体的表达式为

 (2)

其中，应变场*εi*以及极化电场*Ei*完全由极化场产生，可以说*Ei,z*与*εi*是的*Pi*函数。

·体自由能*Fbulk*根据朗道自由能理论可以得到

其中高次项被忽略，其中的*α*可以根据居里韦斯公式被计算，

 (3)

其中*T*为当前温度，*C*为居里常数，*θ*为居里韦斯温度，*ε0*为真空介电常数。文中涉及到的*α*均被给出。

·畴壁能*Fwall* = 2*GijklPi,jPk,l*，在将其简化为各向同性的介质后，公式可以简化为

*fwall* = 0.5*G11*(*P1,12+P1,22+P1,32+P2,12+P2,22+P2,32+P3,12+P3,22+P3,32*) (4)

其中*Gijkl*为梯度自由能系数。

·弹性能*Fela*对于一个给定的极化场*Pi*，则有

 (5)

其中*ε110* = *Q11P12+Q12P22 ε220* = *Q11P22+Q12P12 ε330* = *Q13*(*P12+P22*) *ε120* = *ε210* = 0 *ε130* = *ε310* = 0；*Qij*为静电系数；*cijkl*为弹性刚度张量.

·静电能*Fele*为铁磁性磁畴演变过程中偶极之间的相互作用，可以表示为

 (6)

即就是自发电场与偶极之间的相互作用能，对于经典能的计算相对复杂，首先利用位移电流对后部分进行替换,即，其中为铁薄膜的相对介电常数。在没有空间电荷区的条件下，存在边界条件

 (7)

即介质不存在漂移电流，且电势连续，其中*hf*为薄膜厚度如图1所示

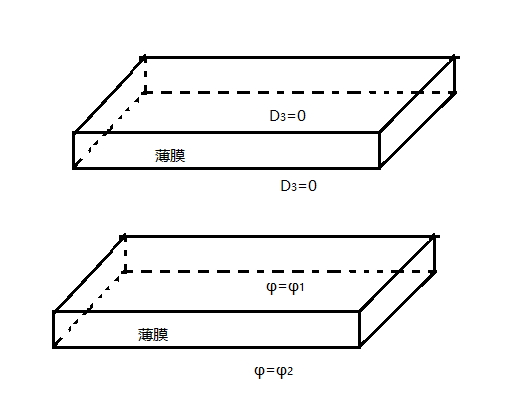


图1 漂移电流及电势在薄膜界面的分布

由此可以得到。

整合上述公式并假设，则有

 (8)

求解该公式的过程同样相当复杂为了在该边界条件下求解以上方程，我们令

(9)

使得

(10)

(11)

首先，应用三维傅里叶变换求解式(10)得到

(12)

(13)

(14)

其中,下一步要做的就是找到满足无限大且厚度为的平面的边界条件的满足

(15)

或

(16)

我们应用二维傅里叶变换来解决这个边值问题

(17)

其中

(18)

式(17)解的形式为

(19)

对式(15)、(16)，应用二维傅里叶变换，我们可以确定未定系数和,在式(19)上应用二维逆傅里叶变换得解

总的可以由和求和得到，从而得到电场强度，从而最终得到静电能。

**二、有限元的划分：**

有限元的划分利用半隐式傅里叶频谱法，将模型划分为128Δ*x*×128Δ*x*×36Δ*x*的有限元，其中薄板厚度*hf*为20Δ*x*，基底形变范围规定在*hs*=12Δ*x*内。藉此，每部分的演化以及梯度的求导例如计算Δ*P*/Δ*x*变为有限数量且较为简单。

**三、相图的构建：**

相图构建的部分存在三个最重要的变量分别为平面应变*ε0*、温度*T*以及晶体的类型，三者通过如下的方式关系在一起：

首先体积自由能*Fbulk*中的*α*与*T*有直接关系；接着根据假设，平面应变*ε11*=*ε22*=*ε0*即就是弹性能*Fela*与*ε0*存在关系；最后晶体的类型决定了极化场*P=*(*P1,P2,P3*)中各项的大小以及存在与否，例如*TP*类型中*P*=(0,0,0)、*TF*类型中*P*=(0,0,±*P3*) ; *O1*类型中*P*=(±*P1*,0,0)/*P*=(0,±*P1*,0,0)。

据此构建坐标系，即可以得到铁磁质相图。