



Study of the Strain - Stress Effect on Ferroelectric Behaviors of PbTiO₃

ARTICLE INFO

Article Type

Original Research

Authors

Araghi H.^{*1} PhD,
Nemati Asl Y.¹ MSc

How to cite this article

Araghi H, Nemati Asl Y. Study of the Strain - Stress Effect on Ferroelectric Behaviors of PbTiO₃. Modares Mechanical Engineering. 2019;19(9): 2149-2154.

ABSTRACT

Lead titanate as an ionic Perovskite is ferroelectric at the lower of the below 766 K, which is called the transition temperature (Curie temperature), and at the above of this temperature is in the paraelectric phase. Studying the influence of mechanical parameters on the ferroelectric properties of PbTiO₃ is important in the industrial application (such as RAM) of PbTiO₃. In this study, using the molecular dynamics simulation method, the stress-strain effects on the polarization of lead titanate in the ferroelectric phase have been investigated. For modeling the atomic potential and interactions between ions in the ferroelectric phase, the short-range Buckingham potential and long-range coulombic potential, and, in addition, the fourth-order potential of oscillatory springs using a shell model (a model for calculating the polarization of a system) has been used. In this study, the effects of mechanical stress-strain action in the ferroelectric phase were investigated in two tensile and compression uniaxial stress-strain. In tensile stress-strain mode, the application of external stress leads to an increase in the polarization of the system, while applying compression stress-strain results in the decrease of the polarization of the system, so that by applying stress-strain, the polarization of the system reaches zero.

Keywords Lead Titanate; Ferroelectric; Molecular Dynamics; Stress-Strain; Polarization

¹Physics Department, Energy Engineering & Physics Faculty, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran

*Correspondence

Address: Physics Department, Energy Engineering and Physics Faculty, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran
Phone: +98 (21) 64545243
Fax: +98 (21) 64545243
araghi@aut.ac.ir

Article History

Received: July 8, 2018
Accepted: February 4, 2019
ePublished: September 01, 2019

CITATION LINKS

[1] Influence of defects on ferroelectric and electrocaloric properties of BaTiO₃ [2] Hysteresis loop behaviors of ferroelectric thin films: A Monte Carlo simulation study [3] Atomistic description for temperature-driven phase transitions in BaTiO₃ [4] Advances in first-principles studies of transducer materials [5] Coupling of surface relaxation and polarization in PbTiO₃ from atomistic simulation [6] Atomic-level simulation of ferroelectricity in oxide materials [7] Shell model potential for PbTiO₃ and its applicability to surfaces and domain walls [8] Atomistic model potential for PbTiO₃ and PMN by fitting first principles results [9] First-principles predictions of structures and piezoelectric properties of PbTiO₃ single crystal [10] Shell model of BaTiO₃ derived from ab-initio total energy calculations

تأثیرات تنش و کرنش بر رفتار فروالکتریک سربتیتانات PbTiO₃

هوشنگ عراقی* PhD

گروه فیزیک، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

یاسر نعمتی اصل MSc

گروه فیزیک، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

چکیده

سرب تیتانات به عنوان یک پروسکایت یونی در پایین‌تر از دمای ۷۶۶ کلوین که موسوم به دمای گذار است در فاز فروالکتریک و در بالای این دما در فاز پارالکتریک است. بررسی تأثیر پارامترهای مکانیکی بر خواص فروالکتریک این ماده اهمیت بسزایی در کاربرد صنعتی آن در قطعات الکترونیکی ذخیره اطلاعات دارد. در این مطالعه با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر تنش-کرنش بر قطبش‌پذیری سرب تیتانات در فاز فروالکتریک بررسی شده است. برای مدل‌سازی پتانسیل بین اتمی، برهم کنش بین یون‌ها در فاز پارالکتریک پتانسیل‌های باکینگهام کوتاه‌برد و کولنی بلندبرد و در فاز فروالکتریک علاوه بر پتانسیل‌های فوق، پتانسیل فتر نیز با استفاده از مدل پوسته‌ای در نظر گرفته شده است. در این مقاله اثرات ناشی از اعمال تنش-کرنش مکانیکی در فاز فروالکتریک و در دو حالت تنش-کرنش تک‌محوری کششی و تراکمی مورد بررسی قرار گرفت. در حالت تنش-کرنش کششی اعمال تنش خارجی منجر به افزایش قطبش PbTiO₃ شد در حالی که با اعمال تنش تراکمی قطبش PbTiO₃ کاهش می‌یابد، تاجایی که با اعمال تنش-کرنش بحرانی قطبش PbTiO₃ به صفر می‌رسد.

کلیدواژه‌ها: سرب تیتانات، فروالکتریک، دینامیک مولکولی، تنش-کرنش، قطبش

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۴/۱۷

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۱۱/۱۵

*نویسنده مسئول: araghi@aut.ac.ir

۱- مقدمه

مواد فروالکتریک همچون سرب‌تیتانات امروزه در قطعات الکترونیکی ذخیره اطلاعات کاربرد گسترده‌ای پیدا کرده‌اند. سرب‌تیتانات در زیر دمای کوری خود (۷۶۶ کلوین) در فاز فروالکتریک است و از خود قطبش ذاتی نشان می‌دهد. برای سرب‌تیتانات برخلاف باریم‌تیتانات فاز فروالکتریک بسته به دمای بلور تنها در ساختار چهارگوشی پدیدار می‌شود. سرب‌تیتانات به‌سادگی تحت تأثیر کرنش خارجی که ممکن است طی فرآیند ساخت مثلاً ناشی از نقابص ساختاری شکل‌گرفته در مرحله لایه نشانی، عدم تطابق ساختاری بین سرب‌تیتانات و زیرلایه یا شرایط کاربری ایجاد می‌شود، قرار بگیرد. بنابراین تنش و کرنش پارامتر مهمی هستند که می‌توانند روی قطبش خودبه‌خودی و دمای بحرانی فروالکتریک سرب‌تیتانات و در نتیجه روی عملکرد قطعات الکترونیکی ذخیره اطلاعات تأثیرگذار باشند. آنا گرین‌بوم و همکاران^[1] نشان‌دادند که افزایش نقص ساختاری در باریم‌تیتانات سبب کاهش دمای گذار و قطبش می‌شود. هینکپی و همکاران^[2] نشان‌دادند مساحت حلقه پسماند با تغییر دما و تنش تغییر می‌کند. کیو و همکاران^[3] اثر جابه‌جایی تیتانیم بر قطبش باریم‌تیتانات را مورد بررسی قرار داده‌اند.

در این مقاله سعی بر آن است که با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی رفتار قطبش سرب‌تیتانات در فاز فروالکتریک به دست آید. در ابتدا قطبش بلور کامل را به دست آورده و سپس تأثیرات دما را روی آن بررسی می‌کنیم، در دمایی که قطبش صفر شود،

دمای گذار فاز را تخمین می‌زنیم. سپس مقدار قطبش را با اعمال میدان تنش-کرنش مکانیکی بررسی می‌کنیم.

۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

۲-۱- مدل و پتانسیل

با توجه به اینکه در فاز فروالکتریک، بلور سرب‌تیتانات (PT) دارای خاصیت فروالکتریسته و قطبش ذاتی است، پس برهم‌کنش‌های بین اتمی که برای این فاز تعریف می‌شود باید بتواند قطبش را برای این بلور در نظر بگیرند. از آنجایی که در بلورهای یونی تنها دو سهم قطبش‌پذیری الکترونی (اتمی) و یونی (جابه‌جایی) وجود دارد و مدل‌های پوسته‌ای همان‌طور که ذکر شد می‌توانند این دو سهم را در یک گام برای بلور لحاظ کنند، بنابراین بهترین راه برای در نظر گرفتن پتانسیل بین اتمی در فاز فروالکتریک تعریف پتانسیل با استفاده از مدل‌های پوسته‌مانند مدل هسته/پوسته بی‌دررو است. بنابراین محققان با استفاده از روش‌هایی مبتنی بر محاسبات کوانتومی، پتانسیل‌های پوسته‌ای متفاوتی برای محاسبه قطبش و پایداری فاز فروالکتریک در زیر دمای کوری پیشنهاد کرده‌اند^[4,5]. از جمله این پتانسیل‌ها می‌توان به پتانسیل آرایه‌شده توسط *سپیلیارسکی* و همکاران^[6] اشاره کرد. در این مدل یک یون را به‌صورت دو یون هسته و پوسته که با یک پیوند نوسانی خطی یا غیرخطی به یکدیگر متصل شده‌اند، در نظر می‌گیرند. سپس جرم بیشتر یون را به هسته و جرم بسیار کمی از آن را به پوسته می‌دهند. سپس، برهم‌کنش‌ها در بلور به این صورت تعریف می‌شوند که بین هسته‌ها و پوسته‌های متفاوت پتانسیل کولنی برقرار است. پوسته‌های مختلف توسط پتانسیل کوتاه‌برد و اندروالسی (باکینگهام یا بورن-مایر) با هم برهم‌کنش می‌کنند. در هر یون که به دو یون هسته و پوسته تقسیم شده است، زوج‌های هسته و پوسته هیچ برهم‌کنش کولنی با یکدیگر ندارند و تنها به‌وسیله یک پتانسیل نوسانی خطی یا غیرخطی برهم‌کنش می‌کنند. در بلور PT در فاز فروالکتریک برهم‌کنش‌های بلند برد از نوع کولنی، برهم‌کنش‌های کوتاه‌برد از نوع باکینگهام و برهم‌کنش نوسانی بین زوج هسته/پوسته یون سرب از نوع نوسانی خطی و بین زوج‌های هسته/پوسته تیتانیم و اکسیژن از نوع نوسانی غیرخطی به‌صورت زیر است^[7]:

پتانسیل بلندبرد کولنی بین هسته‌ها و پوسته‌های مختلف:

$$U_{ij}^C = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |r_{ij}|} \quad (1)$$

پتانسیل کوتاه‌برد باکینگهام بین پوسته‌های مختلف:

$$U_{ij}^B = A \exp\left(\frac{-|r_{ij}|}{\rho}\right) - \frac{C}{|r_{ij}|^6} \quad (2)$$

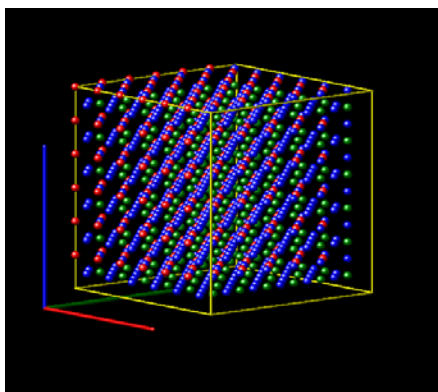
علاوه بر پتانسیل‌های فوق پتانسیل نوسانی غیرخطی و غیرهارمونیک نیز بین زوج‌های هسته/پوسته برای هر یون در این مدل به‌صورت زیر برقرار است:

$$U_{ij}^S = \frac{1}{2} k_2 |r_{ij}|^2 + \frac{1}{24} k_4 |r_{ij}|^4 \quad (3)$$

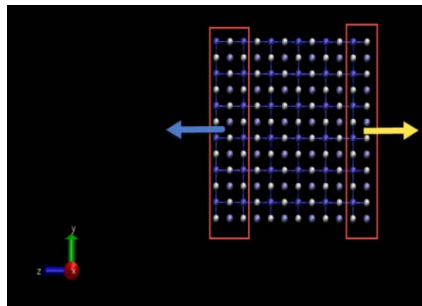
در روابط بالا، q_i و q_j بار یون‌های i ام و j ام بر حسب کولن، ϵ_0

تنش تنها در راستای یک محور بر نمونه وارد می‌شود. در مقاله حاضر با استفاده از نرم‌افزار لمپس این تنش-کرنش‌های مکانیکی در راستای محور Z که همان محور تقارن نمونه است وارد می‌شود. این انتخاب بدین دلیل صورت گرفت که عمده قطبش سرب تیتانات در حالت بالک در راستای محور Z است که با توجه به آن، تأثیرات تنش-کرنش بر قطبش نمونه در این راستا چشمگیرتر بوده و قطبش نمونه را تحت تأثیر قرار می‌دهد.

ناحیه‌ای به اندازه ثابت شبکه محوری C یعنی به اندازه یک سلول واحد در راستای محور Z برای اختصاص دادن سرعت در دو طرف نمونه در نظر گرفته می‌شود. با این انتخاب ناحیه جدیدی با پیکربندی یک نمونه $1 \times 6 \times 6$ سلولی در دو طرف نمونه ایجاد می‌شود تا با اختصاص سرعت به این دو ناحیه و اعمال تنش بر سیستم به تغییر ابعادی و در راستای محور Z و در نتیجه به تنش-کرنش مورد نظر دست یافت (شکل‌های ۱ و ۲).



شکل (۱) پروسکایت سرب تیتانات در حالت توده با 216 یاخته بسیط



شکل (۲) نحوه ساخت ناحیه برای اختصاص سرعت به منظور اعمال تنش در شبیه‌سازی

۳- یافته‌ها

نمودار ۱ رفتار دما، فشار و انرژی مکانیکی بلور سرب تیتانات بر حسب گام زمانی را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود پس از گذشت 5000 گام زمانی معادل 2 پیکوثانیه دما، فشار و انرژی مکانیکی در پیرامون مقدار ثابتی نوسان می‌کنند بنابراین پس از 2 پیکوثانیه بلور در حالت تعادل ترمودینامیکی قرار می‌گیرد.

همان‌طور که در نمودار ۱-ج مشاهده می‌شود سهم عمده در انرژی کل سیستم سهم انرژی پتانسیل است که از این مقدار سهم پتانسیل ناشی از نیروهای بلند برد ربایشی بیشتر از پتانسیل‌های کوتاه‌برد و کولنی رانشی است که طبیعتاً موجب مقیدبودن و پایداری سیستم می‌شود.

بنابراین با توجه به اینکه بعد از 5000 گام بلور سرب تیتانات در حالت تعادل ترمودینامیکی قرار می‌گیرد، روی قطبش‌های

ضریب الکتریکی گذردهی خلا، Γ_{ij} فاصله بین یون‌های A و M و Z ام بر حسب متر، A ، ρ و C ضرایب پتانسیل باکینگهام k_2 و k_4 ضرایب پتانسیل نوسانی هستند. جدول ۱ ضرایب ذکر شده و ثابت‌های شبکه در فاز چهارگوشی را برای بلور PT نشان می‌دهد.

جدول (۱) پارامترهای پتانسیل هسته/پوسته سرب تیتانات

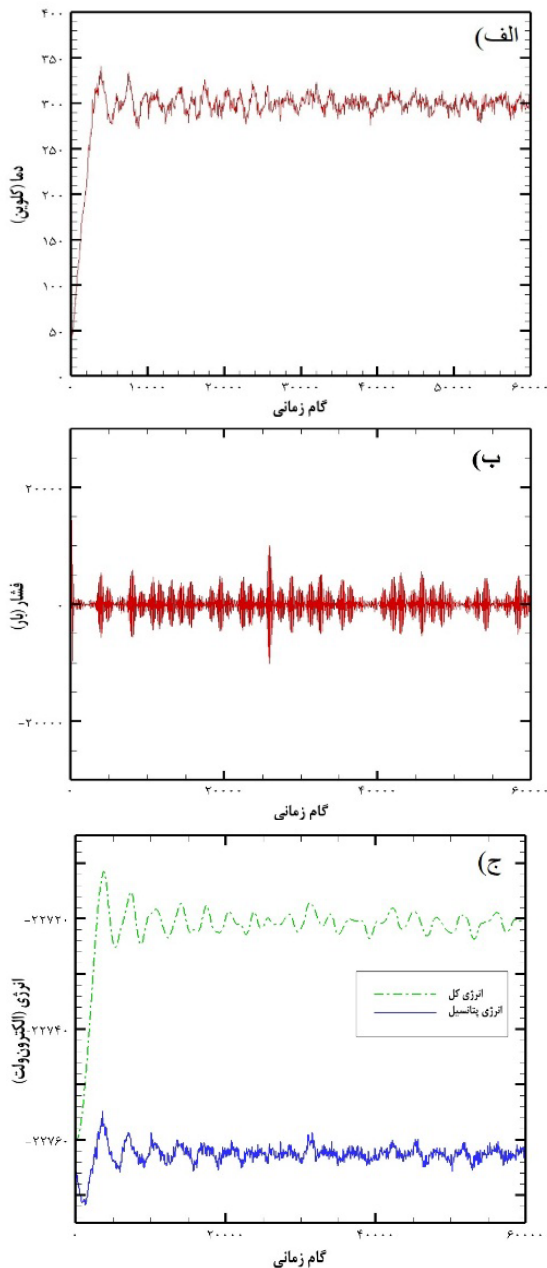
اتم	Core charge (e)	Shell charge (e)	K_2 (ev/A ²)	K_4 (ev/A ⁴)
سرب	۵/۴۹۵۶۸	۶/۶۳۳۲۲	۱۵۴/۸۷۱۳	۲۲۴۱۶/۶۷
تیتانیوم	۱۹/۳۶۹۰۱	-۱۶/۲۷۹۵۲	۸۸۲۹/۴۰۹۶	۱۹۲۸۵۸۱/۷۰
اکسیژن	۲/۵۴۸۴۳	-۴/۱۹۹۱۷	۱۸۰/۹۱۳۴	۶۹۴۵/۷۸
(ب) ضرایب پتانسیل کوتاه‌برد باکینگهام ^[۷]				
Short_range	A (ev)	ρ (A ⁰)	C (ev \times A ⁶)	
سرب-اکسیژن	۲۵۳۸/۴۱۱۰	۰/۳۰۰۶۹۸	۲/۶۱۶۷۶	
اکسیژن-اکسیژن	۱۶۹۸/۶۶۵۳	۰/۲۷۱۷۵۶	۶۱/۸۴۳۵۴	
تیتانیوم-اکسیژن	۲۵۵۵/۲۰۷۵	۰/۲۷۸۳۹۱	۲/۲۵۵۵۷	
سرب-تیتانیوم	۳۸۷/۷۳۱	۰/۳۹۴۹۵۷	۲۲۳/۲۴۴۰۹	
ثابت‌های شبکه در فاز چهارگوشی ^[۷]				
a (A ⁰)	b (A ⁰)	c (A ⁰)	c/a	
۳/۸۵۴	۳/۸۵۴	۴/۰۶۴	۱/۰۵۴	

۲-۲- تنظیمات شبیه‌سازی

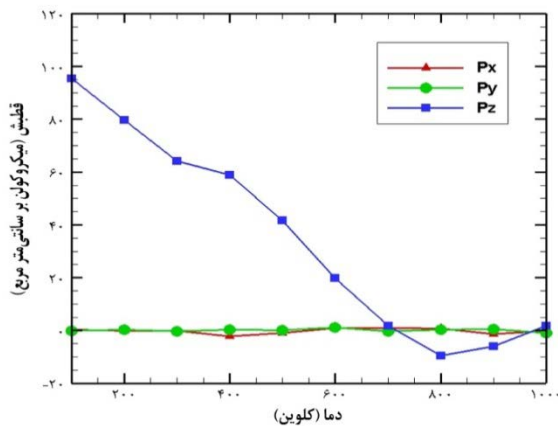
برای بررسی قطبش بلور سرب تیتانات، یک نمونه تشکیل شده از 216 یاخته بسیط (سلول واحد) تحت آنسامبل بزرگ کانونی در دمای 300 کلوین (زیر دمای کوری و در ساختار چهارگوشی) و فشار صفر اتمسفر با استفاده از کد دینامیک مولکولی هسته/پوسته لمپس را شبیه‌سازی می‌کنیم. شکل ۱، پروسکایت باریم تیتانات را در فاز توده برای $6 \times 6 \times 6$ یاخته بسیط نشان می‌دهد. شرایط مرزی برای در نظر گرفتن حالت توده (کپه‌ای) در سه راستا تناوبی در نظر گرفته می‌شود. گام زمانی 0.4 فمتوثانیه، زمان واهلش برای تنظیم دما و فشار در آنسامبل بزرگ کانونی 0.1 پیکوثانیه است^[۸]. پس از اجرای 40000 گام زمانی معادل 16 پیکوثانیه، قطبش را محاسبه می‌کنیم.

۲-۳- اعمال اثر تنش-کرنش و محاسبه قطبش

به‌منظور بررسی تغییرات قطبش بلور سرب تیتانات در حالت توده تحت اثر تنش-کرنش، باید در ابتدا اجازه داد سیستم به تعادل برسد، سپس قطبش ذاتی محاسبه شود. بعد از به تعادل رسیدن سیستم و رسیدن به مقدار قطبش تعادلی میدان تنش-کرنش را اعمال می‌شود و قطبش محاسبه می‌گردد. این عمل می‌تواند با کشیدن دو طرف نمونه یا به‌هم‌فشاردن دو طرف نمونه در راستای مورد نظری که تنش اعمال می‌شود آغاز می‌گردد و تا جایی که سیستم به تعادل دست یابد یا اینکه سیستم از هم پاشیده شود، شبیه‌سازی را اجرا می‌شود. آنجا که نمونه از هم پاشد در نهایت تنش اعمالی در آن حالت تعیین می‌شود که منجر به کرنش بزرگ می‌شود. این کرنش بزرگ می‌تواند هم مثبت (در حالت تنش تراکمی) یا منفی (تنش تراکمی) باشد که نشان‌دهنده بیشینه تنش اعمال شده در آن حالت و تغییر ابعادی مطلوب است. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود کشیدن یا فشردن نمونه در این مقاله با اختصاص دادن سرعت‌های به دو طرف نمونه صورت می‌گیرد. این روند تا رسیدن نمونه به همان تنش-کرنش نهایی در هر شبیه‌سازی ادامه می‌یابد. میدان تنش کرنشی که در این مقاله بر نمونه اعمال می‌شود، تنش تک‌محوری است بدین معنی که این



نمودار ۱ (الف) دمای سرب‌تیتانات تابعی از زمان (ب) فشار سرب‌تیتانات تابعی از زمان (ج) انرژی مکانیکی سرب‌تیتانات تابعی از زمان



نمودار ۲ (ب) قطبش پروسکایت سرب‌تیتانات برحسب دما تحت آنسامبل NPT در گسترده‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۷۰۰ کلوین و فشار صفر اتمسفر

به‌دست‌آمده از گام زمانی ۵۰۰۰ تا ۴۰۰۰۰ میانگین می‌گیریم و میانگین به‌دست‌آمده را به‌عنوان قطبش تعادلی بلور گزارش می‌کنیم. برای بررسی گذار فاز، برای یاخته بسیط (سلول واحد) تحت آنسامبل NPT در گستره دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین و فشار صفر اتمسفر با استفاده از کد دینامیک مولکولی شبیه‌سازی مدل بی‌دررو هسته/پوسته شبیه‌سازی می‌کنیم. نمودار ۲ قطبش پروسکایت سرب‌تیتانات را برحسب دما برای $6 \times 6 \times 6$ یاخته بسیط تحت آنسامبل NPT در گسترده دمایی ۱۰۰ تا ۸۰۰ کلوین و فشار صفر اتمسفر نشان می‌دهد. با توجه به این شکل از گستره دمایی پایین‌تر از دمای ۷۰۰ کلوین که سیستم در فاز چهارگوشی است تنها مقدار قطبش در راستای Z وجود دارد و در دو راستای دیگر (X و Y) قطبش نزدیک صفر است. همچنین در گسترده دمایی ۸۰۰-۷۰۰ کلوین قطبش در راستای Z مانند دو راستای دیگر صفر می‌شود که نشان‌دهنده گذار فاز از حالت فروالکترونیک (دارای قطبش ذاتی) به فاز پارالکترونیک (بدون قطبش ذاتی) است. طبق تعریف، دمای کوری دمایی است که در آن بلور فروالکترونیک خاصیت قطبش ذاتی خود را از دست بدهد و به فاز بدون قطبش یعنی پارالکترونیک گذار کند. بنابراین دمای کوری در گسترده ۸۰۰-۷۰۰ کلوین به دست می‌آید که در تطابق خوبی با مقدار تجربی ۷۶۶ کلوین^[۹] و دارای مقداری نزدیک‌تری به دمای کوری محاسبه‌شده در بررسی دینامیک مولکولی با دمای گذار ۹۰۰ کلوین^[۷] است.

تفاوت‌هایی در مقدار دمای گذار در بررسی‌های فوق با یکدیگر و با این بررسی وجود دارد که دلیل این تفاوت در ضرایب پتانسیل استفاده‌شده برای شبیه‌سازی است. یعنی علاوه بر نوسانات اتمی، بسته به آن که ضرایب پتانسیل به‌دست‌آمده تا چه حد میزان قطبش ماده را در نظر می‌گیرند، قطبش محاسبه‌شده می‌تواند متفاوت باشد. کمیت پتانسیل ویژگی‌های عمده در اکسیدهای فروالکترونیک را توصیف و تعیین می‌کند. در واقع برهم‌کنش نوسانی هسته اکسیژن نسبت به دو عامل قطبش و انرژی کل بسیار حساس است^[۱۰، ۷]. بنابراین، زمانی که این ضرایب پتانسیل هسته/پوسته برای فاز فروالکترونیک سرب‌تیتانات بهینه‌سازی می‌شوند باید به این دو عامل در بهینه‌سازی دقت کافی شود تا منجر به قطبش صحیحی برای بلور سرب‌تیتانات شوند.

با توجه به اینکه کرنش یک سیستم به‌صورت نسبت تغییر طول سیستم به طول اولیه آن محاسبه می‌شود بنابراین با توجه به نمودار ۳ با افزایش تنش اعمالی مثبت بر سیستم و کاهش اندازه سیستم در راستای محور Z به مقداری از طول یا به عبارت بهتر مقداری از کرنش می‌رسیم که قطبش در آن ابعاد به کمترین مقدار خود در این بررسی می‌رسد. با توجه به نمودار در این ناحیه به تنش می‌رسیم که تحت آن قطبش بلور به صفر نزدیک می‌شود که از این تنش و به تبع آن از این کرنش به‌عنوان تنش-کرنش بحرانی یاد می‌شود، شبیه به حالتی که قطبش در دمایی خاص یا در ضخامتی خاص به مقدار بحرانی رسیده و به آن دما یا ضخامت بحرانی اطلاق می‌شود. در این بررسی کمترین مقدار قطبش در کرنش $0.75/0-$ و تحت اعمال تنش مثبت 200000 بار به دست آمده است که سعی بر رسیدن به کرنشی منفی‌تر از مقدار فوق به دلیل پایدار نبودن سیستم در تنش‌های بزرگ و ازهم‌پاشیدگی سیستم بدون نتیجه ماند. با این حال این مقدار در توافق خوبی با مقدار به‌دست‌آمده در بررسی بررسی شیمودا/ و همکاران^[۷] است. این کرنش بحرانی برای سرب‌تیتانات در بررسی شیمودا/ و همکاران^[۷] با توجه به نمودار ۳ در حدود $0.8/0-$ تخمین زده شده است.

سیستم نیز در این راستا جهت‌گیری می‌کند قطبش سیستم دستخوش تغییر شد. با اعمال تنش کششی نسبت c/a برای نمونه افزایش پیدا کرد و جابه‌جایی هسته- پوسته‌ها از جایگاه شبکه‌شان و جدایی نسبی این دو موجود فرضی از هم بزرگ‌تر شد که منجر به تولید گشتاور- دوقطبی‌های بزرگ‌تری شده و در نتیجه موجب افزایش قطبش بلور گشته است.

۴) افزایش تنش تراکمی موجب مقید کردن بیشتر هسته- پوسته به جایگاه‌های شبکه شده و باعث کاهش فاصله جدایی آنها از یکدیگر و در نتیجه کوچک‌تر شدن گشتاور دوقطبی‌ها ایجاد شده در بلور می‌شود که با کاهش قطبش حاصل از جابه‌جایی یونی قطبش کل سیستم تضعیف می‌شود. با افزایش تنش- کرنش تراکمی نسبت c/a که تعیین‌کننده خاصیت تتراگونالیته سربتیتانات است به‌طور چشمگیری کاهش پیدا می‌کند.

۵) افزایش تنش- کرنش تراکمی قطبش را نسبت به حالت تنش صفر کاهش می‌دهد. این افزایش قید مکانیکی تراکمی و در نتیجه کاهش قطبش تا جایی ادامه دارد که قطبش نهایتاً به صفر می‌رسد و نمونه به یک حالت بحرانی نزدیک می‌شود.

تشکر و قدردانی: این مورد توسط نویسندگان بیان نشد.

تاییدیه اخلاقی: این مقاله تاکنون در نشریه دیگری به چاپ نرسیده است. همچنین برای بررسی یا چاپ به نشریه دیگری ارسال نشده است. ضمناً نتایج علمی مقاله حاصل فعالیت علمی نویسندگان بوده و صحت و اعتبار نتایج بر عهده نویسندگان است.

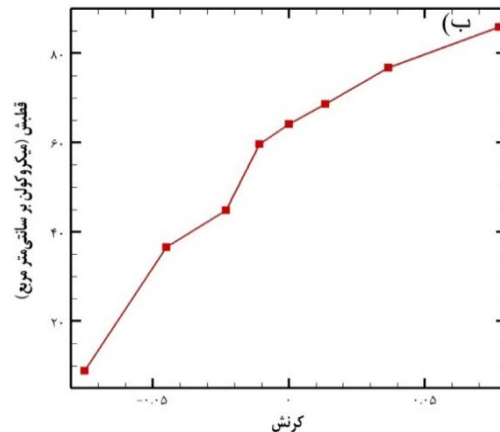
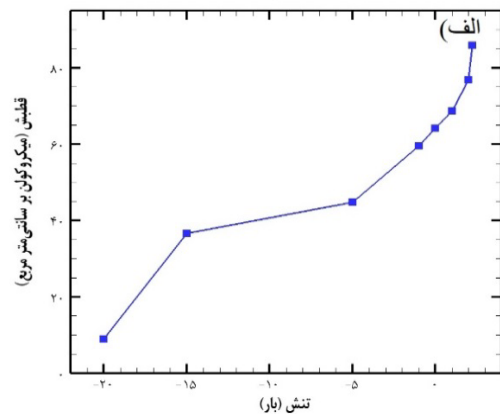
تعارض منافع: مقاله حاضر هیچ گونه تعارض منافی با سازمان‌ها و اشخاص دیگر ندارد.

سهم نویسندگان: هوشنگ عراقی (نویسنده اول)، روش‌شناس/پژوهشگر اصلی/نگارنده بحث (۶۰٪)؛ یاسر نعمتی‌اصل (نویسنده دوم)، نگارنده مقدمه/پژوهشگر کمکی/نگارنده بحث (۴۰٪)

منابع مالی: این تحقیق هیچ گونه منابع مالی دریافت نکرده است.

منابع

- 1- Grünebohm A, Nishimatsu T. Influence of defects on ferroelectric and electrocaloric properties of $BaTiO_3$. *Physical Review B*. 2016;93:134101.
- 2- Bedoya-Hincapié CM, Ortiz-Álvarez HH, Restrepo-Parra E, Olaya-Flórez JJ, Alfonso JE. Hysteresis loop behaviors of ferroelectric thin films: A Monte Carlo simulation study. *Chinese Physics B*. 2015;24(11):117701.
- 3- Qi Y, Liu S, Grinberg I, Rappe AM. Atomistic description for temperature-driven phase transitions in $BaTiO_3$. *Physical Review B*. 2016;94:134308.
- 4- Asthagiri A, Wu Z, Choudhury N, Cohen RE. Advances in first-principles studies of transducer materials. *Ferroelectrics*. 2006;333(1):69-78.
- 5- Behera RK, Hinojosa BB, Sinnott SB, Asthagiri A, Phillpot SR. Coupling of surface relaxation and polarization in $PbTiO_3$ from atomistic simulation. *Journal of Physics Condensed Matter*. 2008;20(39):395004.
- 6- Sepiarsky M, Asthagiri A, Phillpot SR, Stachiotti MG, Migoni RL. Atomic-level simulation of ferroelectricity in oxide materials. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*. 2005;9(3):107-113.
- 7- Shimada T, Wakahara K, Umeno Y, Kitamura T. Shell model potential for $PbTiO_3$ and its applicability to



نمودار ۳ (الف) تاثیرات تنش بر قطبش سربتیتانات تحت آنسامبل NPT در دمای ۳۰۰ کلوین و فشار هیدروستاتیک صفر اتمسفر (ب) تاثیرات کرنش بر قطبش سربتیتانات

۴- نتیجه‌گیری

سربتیتانات به‌عنوان یک پروسکایت یونی در دمایی پایین‌تر از دمای ۷۶۶ کلوین در فاز فروالکتریک و در بالای این دما در فاز پارالکتریک است. در این مطالعه با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر دما و تنش- کرنش بر قطبش سربتیتانات در فاز فروالکتریک مورد بررسی قرار گرفت. برای مدل‌سازی پتانسیل بین اتمی، برهم‌کنش بین یون‌ها در فاز فروالکتریک با استفاده از پتانسیل‌های باکینگهام و کولنی و با استفاده از مدل پوسته‌ای مدل شده است. دلیل توجه به این پروسکایت در این مطالعه کاربردهای گسترده ساختارهای بلوری این پروسکایت در صنعت الکترونیک به‌خصوص قطعات ذخیره اطلاعات است.

نتایج به‌دست‌آمده از این مطالعه را برای فاز فروالکتریک سربتیتانات می‌توان به‌صورت زیر دسته‌بندی کرد:

۱) قطبش سربتیتانات با افزایش دما و گذار نمونه از فاز فروالکتریک (ساختار چهارگوشی) به فاز پارالکتریک (مکعبی) به سمت صفر میل می‌کند. تا جایی که در این بررسی در حدود دمای بحرانی ۷۰۰ کلوین مقدار قطبش به کمترین مقدار خود در حدود ۱.۶۸۶ میکروکولن بر متر مربع رسید.

۲) سربتیتانات برخلاف باریم‌تیتانات در پایین‌تر از دمای گذار تنها در ساختار چهارگوشی پدیدار می‌شود که با کاهش دما همان ساختار چهارگوشی را با قطبشی پایدارتر و بزرگ‌تر نتیجه می‌دهد.

۳) خاصیت چهارگوشی بودن یا تتراگونالیته مشخصه ساختاری پایداری قطبش است. با اعمال تنش بر نمونه و کشیدن نمونه از دو طرف و افزایش طول نمونه در راستای محور Z که عمده قطبش

predictions of structures and piezoelectric properties of PbTiO_3 single crystal. Transactions on Electrical and Electronic Materials. 2016;17(1):29-32.

10- Vielma JM, Schneider G. Shell model of BaTiO_3 derived from ab-initio total energy calculations. Journal of Applied Physics. 2013;114(17):174108.

surfaces and domain walls. Journal of Physics Condensed Matter. 2008;20(32):325225.

8- Sepiarsky M, Wu Z, Asthagiri A, Cohen RE. Atomistic model potential for PbTiO_3 and PMN by fitting first principles results. Ferroelectrics. 2004;301(1):55-59.

9- Kim MC, Lee SG, Joh C, Seo HS. First-principles