



## Study of the Strain - Stress Effect on Ferroelectric Behaviors of PbTiO<sub>3</sub>

### ARTICLE INFO

#### Article Type

Original Research

#### Authors

Araghi H.<sup>\*1</sup> PhD,  
Nemati Asl Y.<sup>1</sup> MSc

#### How to cite this article

Araghi H, Nemati Asl Y. Study of the Strain - Stress Effect on Ferroelectric Behaviors of PbTiO<sub>3</sub>. 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 PbTiO<sub>3</sub> is important in the industrial application (such as RAM) of PbTiO<sub>3</sub>. 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

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

## تأثیرات تنش و کرنش بر رفتار فروالکتريک سربتیتانات PbTiO<sub>3</sub>

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 فروالکتريک و در بالای این دما در فاز پارالکتريک است. بررسی تاثیر پارامترهای مکانیکی بر خواص فروالکتريک 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 فروالکتريک بررسی شده است. برای مدل‌سازی پتانسیل بین اتمی، برهم کنش بین یون‌ها در فاز پارالکتريک پتانسیل‌های باکینگهام کوتاه‌برد و کولنی بلندبرد و در فاز فروالکتريک 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 فروالکتريک 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 PbTiO<sub>3</sub> شد در حالی که با اعمال تنش تراکمی قطبش PbTiO<sub>3</sub> کاهش می‌یابد، تاجایی که با اعمال تنش-کرنش بحرانی قطبش PbTiO<sub>3</sub> به صفر می‌رسد.

**کلیدواژه‌ها:** سرب تیتانات، فروالکتريک، دینامیک مولکولی، تنش-کرنش، قطبش

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۴/۱۷

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۱۱/۱۵

\*نویسنده مسئول: araghi@aut.ac.ir

### ۱- مقدمه

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

در این مقاله سعی بر آن است که با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی رفتار قطبش سرب تیتانات در فاز فروالکتريک به دست آید. در ابتدا قطبش بلور کامل را به دست آورده و سپس تاثیرات 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 فروالکتريک، بلور سرب تیتانات (PT) دارای خاصیت فروالکتريسته 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 فروالکتريک 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 فروالکتريک 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 به صورت 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 به وسیله یک پتانسیل نوسانی خطی یا غیرخطی برهم‌کنش می‌کنند. در بلور PT در فاز فروالکتريک 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 به صورت 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:

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

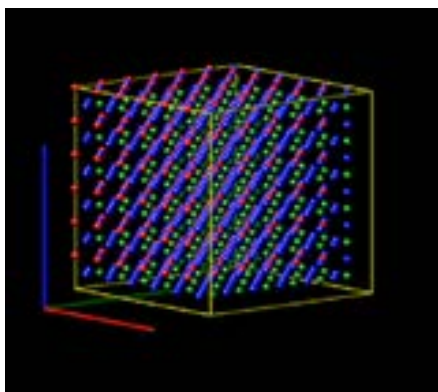
علاوه بر پتانسیل‌های فوق پتانسیل نوسانی غیرخطی و غیرهارمونیک نیز بین زوج‌های هسته/پوسته برای هر یون در این مدل به صورت زیر برقرار است:

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

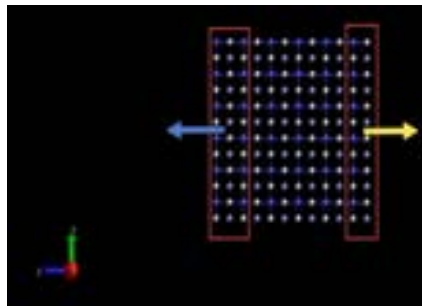
در روابط بالا،  $q_i$  و  $q_j$  بار یون‌های  $i$ ام و  $j$ ام بر حسب کولن،  $\epsilon_0$

تنش تنها در راستای یک محور بر نمونه وارد می‌شود. در مقاله حاضر با استفاده از نرم افزار 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، تاثیرات تنش- کرنش بر قطبش نمونه در این راستا چشمگیرتر بوده و قطبش نمونه را تحت تاثیر 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 مقید بودن 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،  $\Gamma_{ij}$  فاصله بین یون‌های A و  $\Gamma_{ij}$  و  $\rho$  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

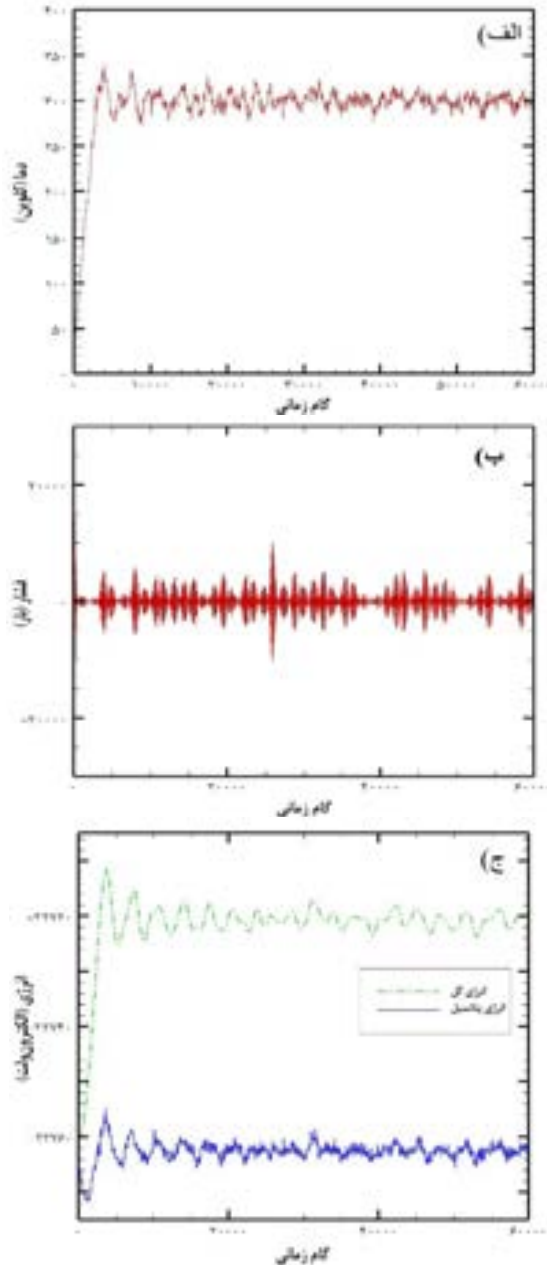
اتم	Core charge ( e )	Shell charge ( e )	$K_2$ (ev/A <sup>2</sup> )	$K_4$ (ev/A <sup>4</sup> )
سرب	۵/۴۹۵۶۸	۶/۶۳۳۲۲	۱۵۴/۸۷۱۳	۲۲۴۱۶/۶۷
تیتانیوم	۱۹/۳۶۹۰۱	-۱۶/۲۷۹۵۲	۸۸۲۹/۴۰۹۶	۱۹۲۸۵۸۱/۷۰
اکسیژن	۲/۵۴۸۴۳	-۴/۱۹۹۱۷	۱۸۰/۹۱۳۴	۶۹۴۵/۷۸
ب) ضرایب پتانسیل کوتاه‌برد باکینگهام <sup>[7]</sup>				
Short_range	A (ev)	$\rho$ (A <sup>0</sup> )	C (ev × A <sup>6</sup> )	
سرب-اکسیژن	۲۵۳۸/۴۱۱۰	۰/۳۰۰۶۹۸	۲/۶۱۶۷۶	
اکسیژن-	۱۶۹۸/۶۶۵۳	۰/۲۷۱۷۵۶	۶۱/۸۴۳۵۴	
تیتانیوم-	۲۵۵۵/۲۰۷۵	۰/۲۷۸۳۹۱	۲/۲۵۵۵۷	
اکسیژن-	۳۸۷/۷۳۱	۰/۳۹۴۹۵۷	۲۲۳/۲۴۴۰۹	
ثابت‌های شبکه در فاز چهارگوشی <sup>[7]</sup>				
a (A <sup>0</sup> )	b (A <sup>0</sup> )	c (A <sup>0</sup> )	c/a	
۳/۸۵۴	۳/۸۵۴	۴/۰۶۴	۱/۰۵۴	

### ۲-۲- تنظیمات شبیه‌سازی

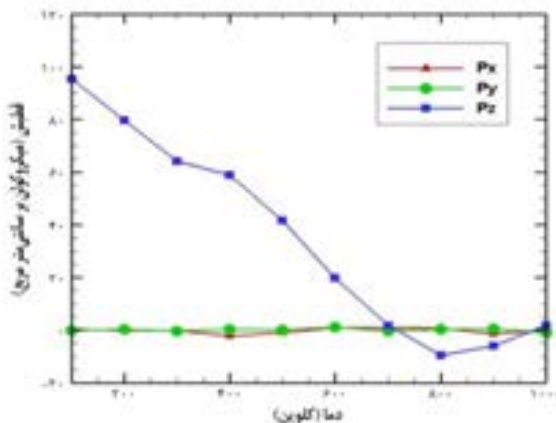
برای بررسی قطبش بلور سرب تیتانات، یک نمونه تشکیل شده از  $216$  یاخته بسیط (سلول واحد) تحت آنسامبل بزرگ کانونی در دمای  $300$  کلوین (زیر دمای کوری و در ساختار چهارگوشی) و فشار صفر اتمسفر با استفاده از کد دینامیک مولکولی هسته/پوسته لمپس را شبیه‌سازی می‌کنیم. شکل ۱، پروسکایت باریم تیتانات را در فاز توده 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<sup>[8]</sup>. 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 به هم فشردن 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) 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 ۶×۶×۶ 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<sup>[۹]</sup> و دارای مقداری نزدیک‌تری به دمای کوری محاسبه‌شده در بررسی دینامیک مولکولی با دمای گذار ۹۰۰ کلوین<sup>[۷]</sup> 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<sup>[۱۰، ۷]</sup>. 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 ۰/۰۷۵- و تحت اعمال تنش مثبت ۲۰۰۰۰۰ بار به دست آمده است که سعی بر رسیدن به کرنشی منفی‌تر از مقدار فوق به‌دلیل پایدارنبودن 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<sup>[۷]</sup> است. این کرنش بحرانی برای سرب‌تیتانات در بررسی شیمودا/ و همکاران<sup>[۷]</sup> با توجه به نمودار ۳ در حدود ۰/۰۸- 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 تترائگونالیته 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.

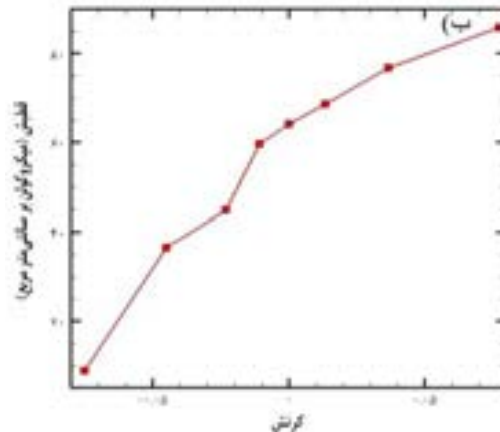
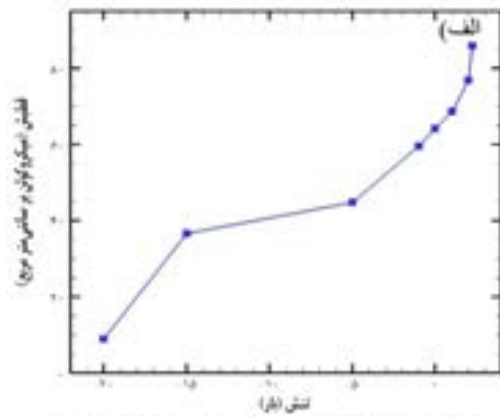
**تعارض منافع:** مقاله حاضر هیچ گونه تعارض منافی با سازمان‌ها و اشخاص دیگر ندارد.

**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 فروالکتريک و در بالای این دما در فاز پارالکتريک است. در این مطالعه با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر دما و تنش- کرنش بر قطبش سرب‌تیتانات در فاز فروالکتريک مورد بررسی قرار گرفت. برای مدل‌سازی پتانسیل بین اتمی، برهم‌کنش بین یون‌ها در فاز فروالکتريک 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 فروالکتريک سرب‌تیتانات می‌توان به‌صورت زیر دسته‌بندی کرد:

۱) قطبش سرب‌تیتانات با افزایش دما و گذار نمونه از فاز فروالکتريک (ساختار چهارگوشی) به فاز پارالکتريک (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 تترائگونالیته 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  $\text{PbTiO}_3$  single crystal. Transactions on Electrical and Electronic Materials. 2016;17(1):29-32.

10- Vielma JM, Schneider G. Shell model of  $\text{BaTiO}_3$  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  $\text{PbTiO}_3$  and PMN by fitting first principles results. Ferroelectrics. 2004;301(1):55-59.

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