

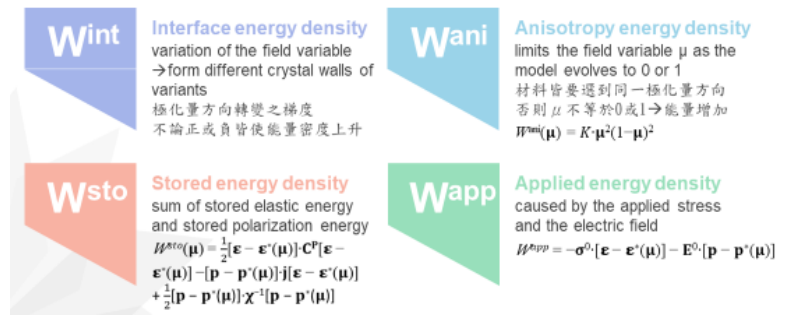
## 應用相場法及陡變介面法於鐵電材料微層狀結構之研究

鐵電材料之微結構為影響材料性質之重要因素，然而其模擬方法仍有些待改善之處。例如相場法計算量大，但計算微結構之變化過程精確；而陡變介面法計算量較小，卻無法計算晶壁能量，精確度較低。因此本研究將結合不同理論模型之優點，使用有限元素軟體 COMSOL 進行模擬，將陡變介面法模型求得之平衡微結構作為初始條件導入相場法模型中進行模擬，分析其微結構演化過程與數據，再與文獻進行比對，並針對不同兄弟晶間之介面進行探討。成果預期可快速找到能量最低、最穩定的鐵電材料微結構，提供鐵電材料元件設計參考。

陡變界面法為研究鐵電材料的數值方法之一，其可產生多個微結構。其由諧和條件判斷，所產生之結果可找出接近能量最小化之結構。但是若以相場法研究，有時這些結構能量並非在最低點。這是由於相場法若使用不同之場變數與更複雜的能量表示式，則會造成研究結果不完全相同。因此，本研究欲使用相場法探討陡變界面法所產生出來的微結構，並觀察其能量變化以及能量最低點之微結構。

### Phase-field Method

$$E(\mu, \mathbf{p}) = \int_{\Omega} (W^{int} + W^{ani} + W^{sto} + W^{app}) d\mathbf{x} + W^{depo}$$

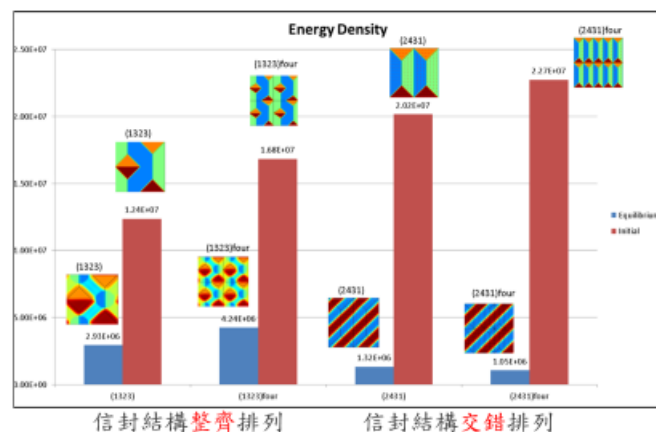


## 研究結果

Energy density diagram of (1323) and (2431)

### Envelope Structure

- 信封結構整齊排列為常見結構
- Energy：整齊排列 > 交錯排列
- 介面數量影響 Energy 大小
- 發現新結構：交錯排列信封



本研究很重要的發現即信封結構，圖中紅色為初始態，藍色為平衡態之能量密度。右側整齊排列的信封結構為理論中可推測之結構，在研究過程中發現左側信封交錯排列的新結構，能量較整齊排列低，相較之下更穩定。再者，交差信封在達到平衡態時維持在原本的結構狀態，而整齊信封卻有改變，由此可知，本研究發現新的交錯排列信封結構比整齊排列更穩定。