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。

Phase-field Method

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





Interface energy density variation of the field variable →form different crystal walls of variants 極化量方向轉變之梯度 不論正或負皆使能量密度上升

Stored energy density sum of stored elastic energy and stored polarization energy $W^{sto}(\mu) = \frac{1}{2} [\varepsilon - \varepsilon^*(\mu)] \cdot C^P [\varepsilon \epsilon^*(\mu)] \, \neg [p - p^*(\mu)] \cdot j [\epsilon - \epsilon^*(\mu)]$ $+\frac{1}{2}[\mathbf{p}-\mathbf{p}^{*}(\mu)]\cdot\chi^{-1}[\mathbf{p}-\mathbf{p}^{*}(\mu)]$



Anisotropy energy density limits the field variable µ as the model evolves to 0 or 1 材料皆要選到同一極化量方向 否則 以不等於0或1→能量增加 $W^{\text{trri}}(\mathbf{\mu}) = K \cdot \mathbf{\mu}^2 (1-\mathbf{\mu})^2$



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。

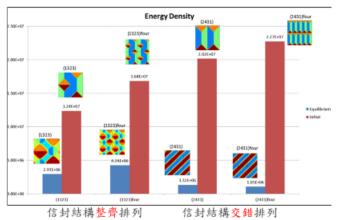
研究結果

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 左侧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。