

# Ảnh hưởng của điện trường ngoài và khuyết tật dạng vết nứt đến phân cực sắt điện của $\text{PbTiO}_3$

Trần Thế Quang<sup>1\*</sup>, Nguyễn Hoàng Linh<sup>2,3</sup>, Đỗ Văn Trường<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Khoa Công nghệ và Kỹ thuật, Trường Đại học Thái Bình, phường Thái Bình, tỉnh Hưng Yên, Việt Nam

<sup>2</sup>Trường Đại học Quốc gia Changwon, TP. Changwon, tỉnh Gyeongsangnam, Hàn Quốc

<sup>3</sup>Viện Kỹ thuật và Công nghệ Gốm Hàn Quốc, quận Yuseong, TP. Daejeon, Hàn Quốc

<sup>4</sup>Trường Cơ khí, Đại học Bách khoa Hà Nội, 1 Đại Cồ Việt, phường Bạch Mai, Hà Nội, Việt Nam

Ngày nhận bài 17/7/2025; ngày chuyển phản biện 19/7/2025; ngày nhận phản biện 30/7/2025; ngày chấp nhận đăng 5/8/2025

## Tóm tắt:

Nghiên cứu này sử dụng phương pháp tối ưu hóa cấu trúc nguyên tử dựa trên mô hình vỏ - lõi để khảo sát sự phụ thuộc của phân cực điện trong  $\text{PbTiO}_3$  (PTO) vào điện trường ngoài và sự xuất hiện của khuyết tật. Kết quả cho thấy, mối quan hệ giữa độ phân cực điện  $P$  và điện trường ngoài  $E$ , được minh họa qua đường cong điện trễ, với các thông số đặc trưng: trường điện kháng  $E_c = \pm 0,115 \text{ eV/\text{Å}}$ , độ phân cực dư  $P_r = \pm 86,8 \text{ }\mu\text{C/cm}^2$  và độ phân cực bão hòa  $P_s = \pm 101,21 \text{ }\mu\text{C/cm}^2$ . Sự xuất hiện của vết nứt làm  $P_r$  giảm lần lượt từ 34,9, 40,2 và 31,2% đối với các kích thước vết nứt  $a \times c$ ,  $a \times 2c$  và  $2a \times c$ , trong khi  $E_c$  giảm 21,7% ( $a \times c$ ), 18,3% ( $a \times 2c$ ), nhưng tăng 16,5% ở trường hợp  $2a \times c$ . Đồng thời, ứng suất tại  $E_c$  giảm 40,6% (từ 7,2 xuống 4,28 GPa), phản ánh sự gián đoạn cấu trúc. Kết quả không chỉ làm rõ cơ chế phân cực của PTO mà còn cung cấp cơ sở lý thuyết quan trọng để tối ưu hóa thiết kế thiết bị sắt điện, đặc biệt là bộ nhớ truy cập ngẫu nhiên không mất dữ liệu khi ngắt nguồn (FeRAM), cảm biến và các hệ thống điện tử điều khiển chính xác. Nghiên cứu đồng thời gợi mở hướng phát triển trong việc phân tích tương tác giữa khuyết tật cấu trúc và điện trường ngoài trong vật liệu sắt điện.

**Từ khóa:** điện trường ngoài, khuyết tật dạng vết nứt, mô hình vỏ - lõi,  $\text{PbTiO}_3$ , phân cực sắt điện.

**Chỉ số phân loại:** 1.3, 1.8, 2.5

## Effects of an external electric field and crack-like defects on the ferroelectric polarisation of $\text{PbTiO}_3$

The Quang Tran<sup>1\*</sup>, Hoang Linh Nguyen<sup>2,3</sup>, Van Truong Do<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Technology and Engineering, Thai Binh University, Thai Binh Ward, Hung Yen Province, Vietnam

<sup>2</sup>Changwon National University, Changwon City, Gyeongsangnam Province, Republic of Korea

<sup>3</sup>Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology (KICET), Yuseong-gu District, Daejeon City, Republic of Korea

<sup>4</sup>School of Mechanical Engineering, Hanoi University of Science and Technology, 1 Dai Co Viet Road, Bach Mai Ward, Hanoi, Vietnam

Received 17 July 2025; revised 30 July 2025; accepted 5 August 2025

## Abstract:

This study employs atomic structure optimisation based on the core-shell model to investigate the dependence of electric polarisation in  $\text{PbTiO}_3$  (PTO) on external electric fields and the presence of defects. The results reveal the relationship between polarisation ( $P$ ) and electric field ( $E$ ), as illustrated by the hysteresis loop, with characteristic parameters including the coercive field  $E_c = \pm 0.115 \text{ eV/\text{Å}}$ , the remanent polarisation  $P_r = \pm 86.8 \text{ }\mu\text{C/cm}^2$ , and the saturation polarisation  $P_s = \pm 101.21 \text{ }\mu\text{C/cm}^2$ . The presence of cracks leads to a reduction in  $P_r$  by 34.9, 40.2, and 31.2% for crack sizes of  $a \times c$ ,  $a \times 2c$ , and  $2a \times c$ , respectively, while  $E_c$  decreases by 21.7% ( $a \times c$ ) and 18.3% ( $a \times 2c$ ), but increases by 16.5% in the case of  $2a \times c$ . Additionally, the stress at  $E_c$  drops by 40.6% (from 7.2 to 4.28 GPa), indicating structural disruption. These findings not only elucidate the polarisation mechanism of PTO but also provide an important theoretical basis for optimising ferroelectric device design, particularly ferroelectric random access memories (FeRAM), sensors, and high-precision electronic control systems. The study also suggests future research directions for investigating the interaction between structural defects and external electric fields in ferroelectric materials.

**Keywords:** core-shell model, crack-like defect, external electric field, ferroelectric polarisation,  $\text{PbTiO}_3$ .

**Classification numbers:** 1.3, 1.8, 2.5

\*Tác giả liên hệ: Email: tranthequang12@gmail.com

## 1. Đặt vấn đề

Vật liệu sắt điện  $\text{PbTiO}_3$  (PTO) đang thu hút nhiều sự quan tâm từ cộng đồng khoa học và ngành công nghiệp nhờ vào các đặc tính vượt trội như khả năng phân cực điện và ứng dụng tiềm năng trong các thiết bị công nghệ cao. Những ứng dụng nổi bật bao gồm FeRAM [1], bộ chuyển đổi điện (transducers) [2] và cảm biến [3]. Trong những năm gần đây, các nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm đã đạt được nhiều thành công trong việc làm sáng tỏ cơ chế hình thành phân cực điện trong vật liệu sắt điện [4, 5]. Điển hình như mô hình lý thuyết của Cohen và Krakauer đã chứng minh rằng liên kết hóa học giữa các nguyên tử đóng vai trò quan trọng trong việc xác định tính chất sắt điện của  $\text{BaTiO}_3$  (BTO) và PTO bằng phương pháp nguyên lý đầu (ab initio), nhấn mạnh ảnh hưởng của cấu trúc nguyên tử [4]. Ngoài ra, nghiên cứu của Y. Chen và cs (2019) [5] đã chỉ ra rằng, độ phân cực điện phụ thuộc mạnh vào cường độ tức thời của điện trường tác dụng, đồng thời cơ chế đảo chiều phân cực dưới tác động của các xung điện cũng đã được làm sáng tỏ. Tuy nhiên, các nghiên cứu trước đây ít chú trọng đến ứng xử của phân cực điện dưới tác dụng của điện trường và khuyết tật dạng vết nứt trong quá trình hoạt động của các linh kiện điện tử dựa trên PTO, mặc dù đây là yếu tố quan trọng ảnh hưởng đến độ tin cậy và hiệu suất.

Phương pháp tính toán dựa trên nguyên lý đầu - nền tảng cơ học lượng tử - là một công cụ đáng tin cậy, thường được sử dụng để mô phỏng và xác định các tính chất của vật liệu sắt điện [6]. Ưu điểm của phương pháp này là khả năng dự đoán tính chất mà không cần dữ liệu thực nghiệm ban đầu, nhưng nó có hạn chế như chỉ áp dụng hiệu quả cho mô hình có số lượng nguyên tử nhỏ (vài chục nguyên tử), thời gian tính toán kéo dài và thường giới hạn ở điều kiện nhiệt độ 0 K. Trong những năm gần đây, mô hình vỏ - lõi [7] đã cải thiện các nhược điểm trên bằng cách cho phép mô phỏng hệ thống có số lượng nguyên tử lớn (hàng nghìn nguyên tử), tiệm cận với cấu trúc thực tế, giảm thời gian tính toán và đặc biệt hỗ trợ mô phỏng ở các điều kiện nhiệt độ khác nhau ( $>0$  K) [8]. Nhờ những ưu điểm vượt trội này, mô hình vỏ - lõi đã trở thành một trong những phương pháp tính toán hiệu quả, được sử dụng rộng rãi để nghiên cứu các tính chất phân cực điện của vật liệu, đặc biệt trong các hệ thống phức tạp và dưới các điều kiện môi trường khác nhau.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi áp dụng phương pháp tối ưu hóa cấu trúc nguyên tử dựa trên mô hình vỏ - lõi để khảo sát chi tiết tính chất phân cực điện của vật liệu PTO dưới tác dụng của điện trường ngoài. Bên cạnh

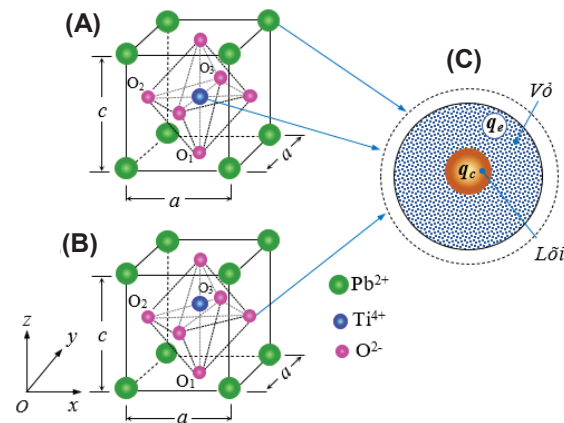
đó, nghiên cứu cũng tập trung phân tích ảnh hưởng của khuyết tật dạng vết nứt đến đặc tính này. Mục tiêu chính là làm sáng tỏ mối quan hệ giữa cấu trúc vi mô, điện trường và khuyết tật với tính chất phân cực của PTO, từ đó cung cấp cơ sở khoa học để cải tiến thiết kế và nâng cao hiệu suất của các thiết bị dựa trên vật liệu sắt điện.

## 2. Phương pháp nghiên cứu

### 2.1. Mô hình mô phỏng

Vật liệu sắt điện PTO là đối tượng nghiên cứu trong công trình này, với cấu trúc pha thuận điện (pha cubic), được minh họa trong hình 1A và pha sắt điện (pha lăng trụ tứ giác - tetragonal) như mô tả trên hình 1B. Hình 1C trình bày mô hình vỏ - lõi, trong đó mỗi nguyên tử được mô tả như một hệ thống gồm hai phần: vỏ và lõi [7]. Phần vỏ được mô tả tương ứng với đám mây điện tử có điện tích là  $q_e$ , phần lõi tương ứng là hạt nhân nguyên tử có điện tích là  $q_c$  [9]. Tổng điện tích của nguyên tử được xác định bởi tổng  $q_e$  và  $q_c$ , phản ánh sự cân bằng điện tích trong cấu trúc nguyên tử.

$$q = q_e + q_c \quad (1)$$



**Hình 1. Mô hình cấu trúc ô đơn vị của PTO. (A)** Pha thuận điện - Cubic; **(B)** Pha sắt điện - Tetragonal; **(C)** Mô hình vỏ - lõi.

Trong nghiên cứu này, các tính toán được thực hiện trên mô hình vật liệu PTO ở pha sắt điện, với cấu trúc đã được tối ưu hóa và tọa độ chi tiết của các nguyên tử được liệt kê trong bảng 1. Điều kiện biên chu kỳ được áp dụng trên cả ba phương x, y và z, để mô phỏng một hệ thống vô hạn, từ đó loại bỏ các hiệu ứng bề mặt và đảm bảo tính đại diện của cấu trúc. Quá trình mô phỏng được thực hiện bằng phương pháp tính toán tối ưu hóa cấu trúc nguyên tử dựa trên mô hình vỏ - lõi [7], cho phép mô tả chính xác các tương tác giữa các nguyên tử và các hiệu ứng phân cực đặc trưng của vật liệu sắt điện. Để đạt được độ chính xác cao và hiệu quả tính toán, nghiên cứu

sử dụng sự kết hợp hai thuật toán tối ưu hóa: thuật toán tối ưu Newton-Raphson, giúp tăng tốc độ hội tụ trong quá trình tối ưu và giải thuật cực tiểu Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS), một phương pháp hiệu quả trong tối ưu hóa các bài toán phi tuyến tính. Toàn bộ quá trình mô phỏng và tính toán được thực hiện thông qua phần mềm General Utility Lattice Program (GULP) [10], một công cụ linh hoạt và hiệu quả cho mô phỏng vật liệu ở kích thước nguyên tử. Phần mềm này cho phép thực hiện các tính toán phức tạp về cấu trúc và tính chất của PTO một cách hiệu quả, hỗ trợ phân tích chi tiết các đặc tính vật liệu trong điều kiện mô phỏng.

**Bảng 1.** Tọa độ nguyên tử của PTO ở cấu trúc lăng trụ tứ giác.

| Tọa độ (Å)     | <i>x</i> | <i>y</i> | <i>z</i> |
|----------------|----------|----------|----------|
| Nguyên tử      |          |          |          |
| Pb             | 0,0000   | 0,0000   | 0,0000   |
| Ti             | 0,5000   | 0,5000   | 0,5337   |
| O <sub>1</sub> | 0,5000   | 0,5000   | 0,0902   |
| O <sub>2</sub> | 0,0000   | 0,5000   | 0,6050   |
| O <sub>3</sub> | 0,5000   | 0,0000   | 0,6050   |

## 2.2. Phân cực sắt điện

Hiện tượng phân cực trong vật liệu PTO xảy ra do sự chuyển dịch tương đối giữa phần vỏ (đại diện cho đám mây điện tử) và lõi (đại diện cho hạt nhân) của các nguyên tử trong cấu trúc tinh thể. Khi có tác động từ bên ngoài, chẳng hạn như điện trường, tâm của đám mây điện tử không còn trùng với tâm hạt nhân, dẫn đến sự hình thành các phân cực điện vi mô tại từng vị trí nguyên tử. Sự tổng hợp của các phân cực vi mô này tạo nên tổng phân cực điện (*P*) của vật liệu. Để định lượng hiện tượng này, độ phân cực điện trong một ô đơn vị của PTO được tính toán dựa trên công thức sau [11]:

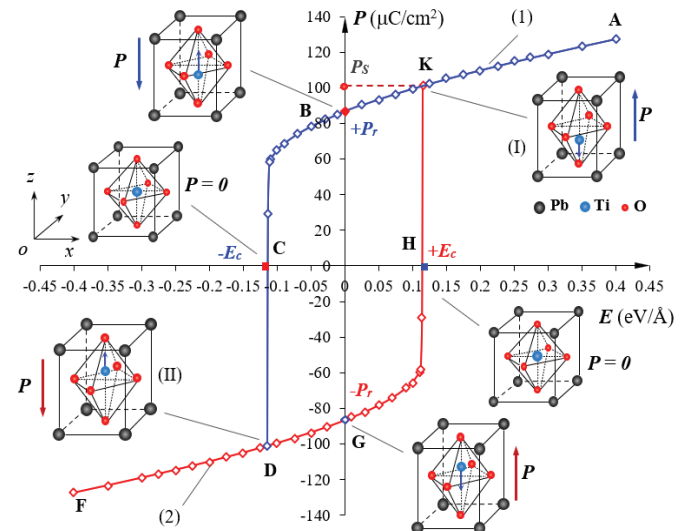
$$P = \frac{1}{V} \sum_m \frac{1}{w_m} q_m (r_m - r_A) \quad (2)$$

trong đó: *V* là thể tích ô đơn vị. *q<sub>m</sub>*, *r<sub>m</sub>* lần lượt là điện tích và vector vị trí của nguyên tử thứ *m*. *r<sub>A</sub>* là vector vị trí tham chiếu đối với lõi nguyên tử A (nguyên tử trung tâm, trong trường hợp này là nguyên tử Ti) và tổng cộng 29 hạt còn lại trong ô đơn vị được xem xét, tương ứng với thành phần cấu trúc của PTO bao gồm 8 nguyên tử Pb ở các đỉnh, 1 nguyên tử Ti ở trung tâm và 6 nguyên tử O phân bố trên các mặt của ô đơn vị. *w<sub>m</sub>* là hệ số chia sẻ nguyên tử được gán như sau: 8 cho Pb, 1 cho Ti và 2 cho O, mô tả mức độ đóng góp của từng loại nguyên tử vào *P* của vật liệu, dựa trên vai trò và phân bố điện tích của chúng trong mạng tinh thể.

## 3. Kết quả và bàn luận

### 3.1. Ảnh hưởng của điện trường đến sự phân cực điện

Mô hình khảo sát được thiết lập với điện trường ngoài (*E*) trong khoảng từ -0,4 đến +0,4 eV/Å, ở nhiệt độ 0 K và phân cực điện ban đầu (*P*) định hướng theo trục *z* dương (+*z*). Hình 2 minh họa mối quan hệ giữa phân cực điện (*P*) và điện trường ngoài (*E*) của vật liệu PbTiO<sub>3</sub>. Trong đó, giá trị của *P* tại điểm mà điện trường *E* bằng 0 (điểm B và G) được định nghĩa là độ phân cực dư (*P<sub>r</sub>*, ±*P<sub>r</sub>*), đại diện cho mức độ phân cực điện tự phát của vật liệu ở trạng thái tự nhiên, khi không có điện trường ngoài tác dụng. Cường độ điện trường cần thiết để đưa phân cực *P* về 0 (điểm C và H) được gọi là trường điện kháng (*E<sub>c</sub>*, ±*E<sub>c</sub>*). Ngoài ra, giá trị của *P* tại *E<sub>c</sub>*=±0,115 eV/Å (điểm K và D) được xác định là độ phân cực bão hòa (*P<sub>s</sub>*, ±101,21 μC/cm<sup>2</sup>), phản ánh mức phân cực tối đa của vật liệu. Mối quan hệ giữa *P* và *E* được thể hiện qua một chu trình điện trễ hay còn gọi là đường cong điện trễ (ABCDFGHKA), được mô tả chi tiết trong hình 2.



**Hình 2.** Đường cong điện trễ của vật liệu PTO.

Phân tích kết quả thu được cho thấy độ phân cực *P* phụ thuộc trực tiếp vào điện trường ngoài *E*, được thể hiện qua đường cong điện trễ. Đường cong này có thể chia thành hai nhánh: ABCDF (nhánh 1) và FGHKA (nhánh 2), phản ánh các trạng thái khác nhau của cấu trúc tinh thể. Ở nhánh 1, trong trạng thái ban đầu (trạng thái I), nguyên tử Ti nằm ở phía dưới và cách xa vị trí lý tưởng (chính tâm ô đơn vị) khi điện trường ngoài đạt *E*=+0,4 eV/Å. Khi điện trường ngoài giảm từ +0,4 xuống -0,115 eV/Å, độ phân cực *P* giảm theo xu hướng gần



như tuyến tính. Sự giảm này xảy ra do nguyên tử Ti dần chuyển dịch về gần vị trí chính tâm của ô đơn vị. Tại  $E=0$  (điểm B), vật liệu có độ phân cực dư  $P_r=+86,8 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ , biểu thị mức phân cực tự phát trong trạng thái không có điện trường. Đặc biệt, khi  $E$  giảm đến  $-0,115 \text{ eV}/\text{\AA}$  (điểm C), độ phân cực điện bị triệt tiêu hoàn toàn ( $P=0$ ), do nguyên tử Ti di chuyển chính xác về vị trí chính tâm của cấu trúc tinh thể. Nếu tiếp tục giảm điện trường, cấu trúc tinh thể chuyển sang trạng thái II, khi đó nguyên tử Ti dịch chuyển lên phía trên của vị trí lý tưởng. Quá trình này diễn ra nhanh chóng (đoạn CD), dẫn đến đảo chiều phân cực, đạt giá trị  $P=-101,21 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  tại điểm D, phản ánh mức phân cực bão hòa âm. Ngược lại với nhánh 1, khi điện trường tăng dần từ  $-0,4$  đến  $0,115 \text{ eV}/\text{\AA}$ , độ phân cực  $P$  tăng theo xu hướng gần như tuyến tính. Tại  $E=0$  (điểm G), độ phân cực dư ở trạng thái II đạt  $P_r=-86,8 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ , tương ứng với trạng thái phân cực tự phát ngược chiều. Khi  $E$  tăng đến  $0,115 \text{ eV}/\text{\AA}$  (điểm H), độ phân cực lại bị triệt tiêu ( $P=0$ ), do nguyên tử Ti trở về vị trí chính tâm của cấu trúc. Khi tiếp tục tăng điện trường, cấu trúc tinh thể chuyển về trạng thái I (đoạn HK), với phân cực đảo chiều một lần nữa, đạt  $P=+101,21 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  tại điểm K, hoàn thành chu trình điện trễ. Quá trình này lặp lại theo chiều ngược lại với nhánh 1, tạo thành một vòng tuần hoàn ổn định.

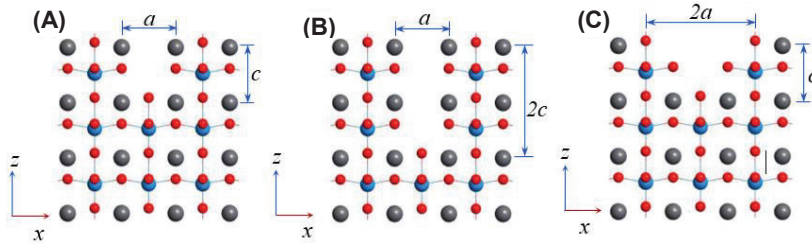
Kết quả nghiên cứu cho thấy, có mối quan hệ chặt chẽ giữa độ phân cực  $P$  và điện trường ngoài  $E$  trong vật liệu  $\text{PbTiO}_3$ . Cụ thể, khi  $E$  tăng,  $P$  cũng tăng theo, tuy nhiên khi  $E$  đạt đến giá trị tới hạn (trường điện kháng  $E_c$ ),  $P$  đảo chiều. Khi  $E$  giảm,  $P$  giảm tương ứng. Đáng chú ý, chiều của  $P$  luôn đồng thuận với chiều của  $E$ , nhưng ngược với chiều dịch chuyển của nguyên tử Ti trong mạng tinh thể. Điều này cho thấy sự lệch khỏi vị trí lý tưởng của nguyên tử Ti tạo ra điện trường nội tại tác động đến  $P$  và dịch chuyển ngược chiều phản ánh cơ chế đảo chiều phân cực đặc trưng của vật liệu sắt điện. Mối quan hệ  $P$ - $E$  được biểu diễn qua đường cong điện trễ, thể hiện một chu trình tuần hoàn lặp lại liên tục khi điện trường ngoài thay đổi chiều. Đường cong này gồm hai nhánh đối xứng, phù hợp với các nghiên cứu trước đây [12-14], qua đó khẳng định tính ổn định và khả năng tái lập chu kỳ của hiện tượng. Từ đường cong điện trễ, các thông số quan trọng của vật liệu sắt điện  $\text{PbTiO}_3$  đã xác định được, bao gồm: độ phân cực dư  $P_r=\pm 86,8 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  (mức phân cực tự phát tại  $E=0$ ), độ phân cực bão hòa  $P_s=\pm 101,21 \mu\text{C}/\text{cm}^2$

(mức phân cực tối đa tại  $E_c$ ) và trường điện kháng  $E_c=\pm 0,115 \text{ eV}/\text{\AA}$ , (điện trường cần thiết để triệt tiêu  $P$ ). Những giá trị này cung cấp thông tin quan trọng về đặc tính sắt điện của  $\text{PbTiO}_3$ , bao gồm khả năng đảo chiều phân cực và phản ứng với điện trường, có thể được sử dụng để so sánh với kết quả thực nghiệm hoặc dự đoán hành vi của vật liệu trong các ứng dụng thực tế như bộ nhớ sắt điện hoặc cảm biến.

### 3.2. Ảnh hưởng của khuyết tật (vết nứt) đến đường cong điện trễ

Mô hình cấu trúc của vật liệu PTO được khảo sát với các vết nứt có kích thước khác nhau, cụ thể là  $a \times c$ ,  $a \times 2c$  và  $2a \times c$ , phân bố trên mặt phẳng ( $Oxz$ ), được minh họa tương ứng trên hình 3. Quá trình hình thành sự phân cực điện  $P$  và đường cong điện trễ của các mô hình được thực hiện theo phương pháp tương tự như nghiên cứu mục 3.1. Cụ thể, quá trình này dựa trên việc tăng dần giá trị điện trường ngoài  $E$  trong khoảng từ  $-0,4 \text{ eV}/\text{\AA}$  đến  $+0,4 \text{ eV}/\text{\AA}$ , từ đó đánh giá ảnh hưởng của  $E$  đến  $P$  và đặc tính sắt điện của vật liệu, ngay cả khi có sự hiện diện của các vết nứt.

Anh hưởng của kích thước vết nứt đến mối quan hệ  $P$ - $E$  được mô tả trên hình 4. Kết quả nghiên cứu chỉ ra rằng cả độ phân cực dư  $P_r$  và trường điện kháng  $E_c$  đều bị suy giảm khi xuất hiện vết nứt trong cấu trúc vật liệu PTO. Cụ thể,  $P_r$  giảm dần khi kích thước vết nứt tăng theo phương  $z$ , trong khi  $E_c$  lại có xu hướng tăng khi kích thước vết nứt phát triển theo phương  $x$ . Hiện tượng này có thể được lý giải dựa trên sự thay đổi trong cấu trúc tinh thể: sự xuất hiện vết nứt dẫn đến mất mát một số nguyên tử, đặc biệt là nguyên tử Ti, làm giảm số lượng lưỡng cực điện (dipoles) đóng góp vào độ phân cực, từ đó làm giảm  $P_r$ . Đồng thời, sự mất mát nguyên tử Ti cũng ảnh hưởng đáng kể đến  $E_c$ , do sự gián đoạn cấu trúc tinh thể làm thay đổi ngưỡng điện trường cần thiết để đảo chiều phân cực. Tại vết nứt có kích thước  $a \times c$ ,  $P_r$  đạt  $56,53 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  và tại vết nứt  $a \times 2c$ ,  $P_r$  giảm xuống còn  $51,88 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ , tương ứng với mức giảm lần lượt 34,9 và 40,2% so với trạng thái tự nhiên (chưa có vết nứt,  $P_r=86,8 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ ). Trong khi đó,  $E_c$  cũng giảm tương ứng, lần lượt là  $\pm 0,090$  (21,7%) và  $\pm 0,094 \text{ eV}/\text{\AA}$  (18,3%) so với giá trị ban đầu ( $E_c=\pm 0,115 \text{ eV}/\text{\AA}$ ). Tuy nhiên, trong trường hợp vết nứt có kích thước là  $2a \times c$ ,  $P_r$  chỉ giảm 31,2% (tương đương  $\sim 59,7 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ ) nhưng  $E_c$  lại tăng

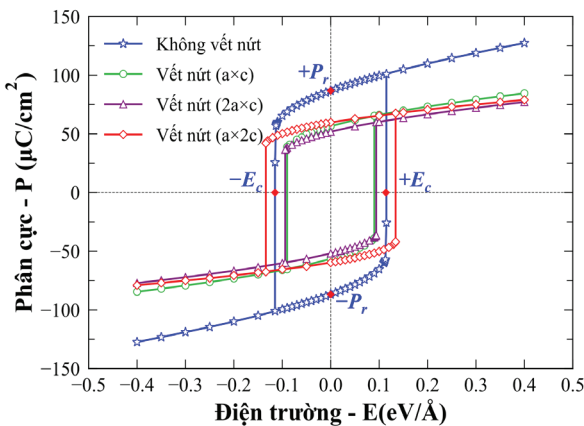


Hình 3. Mô hình vết nứt với các kích thước. (A)  $a \times c$ ; (B)  $a \times 2c$ ; (C)  $2a \times c$ .

lên  $\pm 0,134$  eV/Å (16,5%), cho thấy sự thay đổi phức tạp trong hành vi điện khi kích thước vết nứt thay đổi theo hướng khác.

Như vậy, có thể thấy kích thước và phương của vết nứt trên mặt phẳng ( $Oxz$ ) có tác động đáng kể đến  $P_r$  và  $E_c$  của PTO. Sự suy giảm  $P_r$  và biến động của  $E_c$  phản ánh tác động của mất mát nguyên tử Ti và sự gián đoạn cấu trúc, cung cấp cơ sở quan trọng để đánh giá độ bền cơ điện của vật liệu trong các ứng dụng thực tế khi xuất hiện khuyết tật, chẳng hạn như trong thiết bị lưu trữ hoặc cảm biến (hình 4).

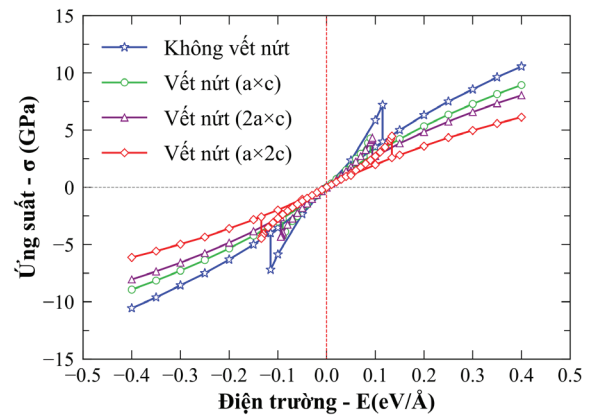
Hình 5 mô tả mối quan hệ giữa ứng suất ( $\sigma$ ) và điện trường ngoài ( $E$ ) trong vật liệu PTO khi tồn tại các vết nứt với kích thước khác nhau. Kết quả nghiên cứu cho thấy, ứng suất tại trường điện kháng  $E_c$  giảm khi xuất hiện vết nứt, với mức suy giảm đáng kể lên đến 40,6% (từ 7,2 xuống 4,28 GPa tại vết nứt  $a \times c$ ). Về bản chất, hiện tượng này xuất phát từ sự mất liên kết giữa các nguyên tử tại khu vực khuyết tật dạng vết nứt, gây ra sự gián đoạn mạng tinh thể và làm suy giảm khả năng truyền tải ứng suất. Khác với cơ học phá hủy cổ điển - nơi ứng suất tập trung tại đầu vết nứt, ở quy mô nguyên tử, sự gián



Hình 4. Đường cong điện trễ với các vết nứt có kích thước khác nhau.

đoạn cấu trúc này đồng thời làm suy yếu cả tính chất cơ học (độ cứng và khả năng chịu tải) và tính chất điện môi (khả năng phân cực) của vật liệu. Cụ thể, sự hiện diện của vết nứt không chỉ làm giảm ứng suất tại trường điện kháng ( $E_c$ ) mà còn gây suy giảm đáng kể độ phân cực dư ( $P_r$ ) và chính  $E_c$ , do việc giảm số lượng lưỡng cực điện tham gia vào quá trình định hướng phân cực. Điều này

phản ánh mối quan hệ tương hỗ giữa tính toàn vẹn cấu trúc và các tính chất vật lý của vật liệu sắt điện. Những kết quả này cung cấp cơ sở quan trọng để hiểu rõ ảnh hưởng của khuyết tật dạng vết nứt đến tính chất cơ-điện của  $\text{PbTiO}_3$ , đồng thời gợi mở hướng nghiên cứu và phát triển nhằm tối ưu hóa vật liệu cho các ứng dụng đòi hỏi độ bền và độ ổn định cao.



Hình 5. Quan hệ giữa ứng suất  $\sigma$  và điện trường  $E$  với các vết nứt khác nhau.

#### 4. Kết luận

Nghiên cứu này tập trung khảo sát ảnh hưởng của điện trường ngoài  $E$  và khuyết tật dạng vết nứt đến sự phân cực điện của vật liệu PTO, thông qua phương pháp tối ưu hóa cấu trúc tinh thể trên cơ sở mô hình vỏ - lõi. Các kết quả chính có thể tóm tắt như sau:

- Mối quan hệ giữa phân cực  $P$  và điện trường ngoài  $E$  được mô tả bằng đường cong điện trễ, với các thông số đặc trưng bao gồm trường điện kháng  $E_c = \pm 0,115$  eV/Å, độ phân cực dư  $P_r = \pm 86,8$   $\mu\text{C}/\text{cm}^2$  và độ phân cực bão hòa  $P_s = \pm 101,21$   $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ ;

- Sự xuất hiện của khuyết tật (vết nứt) dẫn đến sự suy giảm của  $P_r$  và  $E_c$ , với mức độ giảm dần khi kích thước vết nứt phát triển theo phương  $z$ . Tuy nhiên,  $E_c$  tăng khi

kích thước mở rộng theo phương  $x$ , phản ánh tính bất đẳng hướng của ảnh hưởng khuyết tật;

- Ứng suất tại  $E_c$  giảm khi xuất hiện vết nứt, cho thấy mối liên hệ chặt chẽ giữa tính chất cơ học và điện của vật liệu.

Những kết quả này cung cấp thông tin quan trọng về đặc tính phân cực điện của PTO và tác động của các yếu tố ngoại vi như khuyết tật, điện trường ngoài giúp làm sáng tỏ mối quan hệ giữa cấu trúc tinh thể và tính chất điện. Kết quả có ý nghĩa thiết yếu trong việc tối ưu hóa thiết kế các thiết bị dựa trên PTO, chẳng hạn như bộ nhớ sắt điện hoặc cảm biến và mở ra hướng phát triển mới thông qua việc kiểm soát khuyết tật và điện trường ngoài để nâng cao hiệu suất vật liệu. Tuy nhiên, cần tiến hành thêm các nghiên cứu sâu hơn để làm rõ cơ chế tương tác giữa các yếu tố này, từ đó thúc đẩy sự phát triển của các ứng dụng tiên tiến trong lĩnh vực điện tử và năng lượng.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] C.S. Hwang, T. Mikolajick (2019), "Ferroelectric memories", *Advances in Non-Volatile Memory and Storage Technology (Second Edition)*, Woodhead Publishing, pp.393-441, DOI: 10.1016/B978-0-08-102584-0.00012-7.
- [2] S. Zhang, F. Li, X. Jiang, et al. (2015), "Advantages and challenges of relaxor-PbTiO<sub>3</sub> ferroelectric crystals for electroacoustic transducers-A review", *Prog. Mater. Sci.*, **68**, pp.1-66, DOI: 10.1016/j.pmatsci.2014.10.002.
- [3] K. Yao, S. Chen, S.C. Lai, et al. (2022), "Enabling distributed intelligence with ferroelectric multifunctionalities", *Advanced Science*, **9**(1), DOI: 10.1002/advs.202103842.
- [4] R.I. Eglitis (2014), "Ab initio calculations of SrTiO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub>, PbTiO<sub>3</sub>, CaTiO<sub>3</sub>, SrZrO<sub>3</sub>, PbZrO<sub>3</sub> and BaZrO<sub>3</sub> (001), (011) and (111) surfaces as well as F centers, polarons, KTN solid solutions and Nb impurities therein", *International Journal of Modern Physics B*, **28**(17), DOI: 10.1142/S0217979214300096.
- [5] Y. Chen, Y. Chen, Y. Du, et al. (2019), "Influence of polarisation, reorientation, and coupling of dipole on electrocaloric effect in ferroelectrics", *International Journal of Applied Ceramic Technology*, **17**, pp.1382-1391, DOI: 10.1111/ijac.13411.
- [6] M.A. Morales, R. Clay, C. Pierleoni, et al. (2014), "First principles methods: A perspective from quantum Monte Carlo", *Entropy*, **16**(1), pp.287-321, DOI: 10.3390/e16010287.
- [7] H. Zou, Z. Luo, X. Yang, et al. (2022), "Toward emerging applications using core-shell nanostructured materials: A review", *Journal of Materials Science*, **57**(18), pp.10912-10942, DOI: 10.1007/s10853-022-07328-z.
- [8] T.Q. Tran, V.H. Nguyen, L.H. Nguyen, et al. (2021a), "Evaluation of potential function of core-shell model for PbTiO<sub>3</sub> ferroelectric material and its application for polarisation calculation", *JST: Engineering and Technology for Sustainable Development*, **31**(2), pp.72-78, DOI: 10.51316/jst.149.etsd.2021.31.2.12.
- [9] T.Q. Tran (2022), *Mechanical and Physical Properties of Ferroelectric Materials at the Nanoscale*, Doctoral Thesis in Mechanics, Hanoi University of Science and Technology, 225pp (in Vietnamese).
- [10] J.D. Gale (2005), "GULP: Capabilities and prospects", *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, **220**(5-6), pp.552-554, DOI: 10.1524/zkri.220.5.552.65070.
- [11] T.Q. Tran, V.H. Nguyen, L.H. Nguyen, et al. (2021b), "Investigating effect of strain and geometric defects on single polarisation vortex in PbTiO<sub>3</sub> nanowires", *JST: Engineering and Technology for Sustainable Development*, **31**, pp.108-114, DOI: 10.51316/jst.149.etsd.2021.31.2.18.
- [12] R. Nishino, T.C. Fujita, F. Kagawa, et al. (2020), "Evolution of ferroelectricity in ultrathin PbTiO<sub>3</sub> films as revealed by electric double layer gating", *Scientific Reports*, **10**(1), DOI: 10.1038/s41598-020-67580-8.
- [13] R.W. Whatmore (2017), *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, Springer International Publishing, 614pp.
- [14] I. Chilibon, J.N.M. Mendes (2012), "Ferroelectric ceramics by sol-gel methods and applications: A review", *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, **64**(3), pp.571-611, DOI:10.1007/s10971-012-2891-7.