

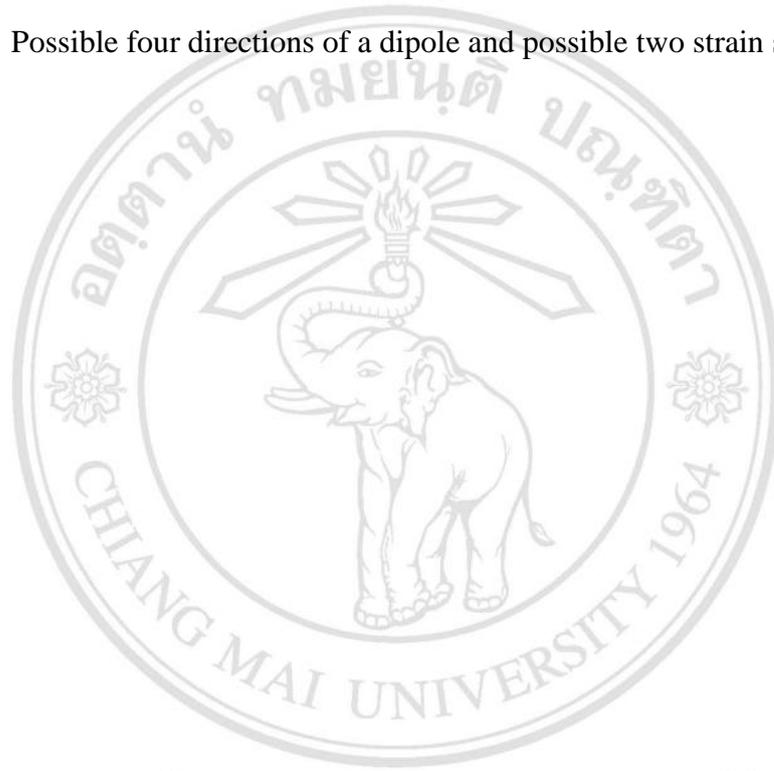
# CONTENTS

	Page
ACKNOWLEDGMENT	c
THAI ABSTRACT	d
ENGLISH ABSTRACT	e
LIST OF TABLES	h
LIST OF FIGURES	i
STATEMENT OF ORIGINALITY IN THAI	k
STATEMENT OF ORIGINALITY IN ENGLISH	l
CHAPTER 1 Introduction	1
1.1 Overview	1
1.2 Research objectives	2
1.3 Scope of study	3
1.4 Thesis outline	3
CHAPTER 2 Literature Review	
2.1 Ferroelectric materials in general	5
2.2 Ferroelectric hysteresis area	8
2.3 Spin models	9
2.4 Mean-field theory	11
2.5 Monte Carlo method	12
2.5.1 Probability theory	12
2.5.2 The estimator and important sampling	13
2.5.3 Observables and fluctuation	15
2.5.4 Markov process	16

2.5.5 Ergodicity and detailed balance	17
2.5.6 The Metropolis algorithm	17
2.5.7 Equilibrium and measurement	19
2.6 Data processing analysis	19
2.6.1 Artificial Neural Network	20
2.6.2 Fourier transformation	22
CHAPTER 3 Methodology	25
3.1 Research procedure	25
3.2 The single histogram method	32
3.3 Estimation of power-law exponents	34
CHAPTER 4 Results and Discussions	37
4.1 The hysteresis behaviors of ferroelectric thin films with partial non-polarizable structure	37
4.2 Ferroelectric-phase transition of partial non-polarizable ultra-thin films	44
4.3 Ferroelectric ultra-thin films with partial non-polarizable structure under External electric and stress fields	47
CHAPTER 5 Conclusions and Future Works	56
5.1 Conclusions	56
5.2 Future works	58
REFERENCES	59
APPENDIX	67
CURRICULUM VITAE	104

## LIST OF TABLES

	Page
Table 2.1 Comparison of ferroelectric hysteresis properties obtained from the Fourier prediction and real measurement [31, 46].	24
Table 3.1 Possible four directions of a dipole and possible two strain states.	31



ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่  
Copyright© by Chiang Mai University  
All rights reserved

## LIST OF FIGURES

		Page
Figure 2.1	A succession of phase transition of a ferroelectric material [6].	6
Figure 2.2	A hysteresis ferroelectric loop.	6
Figure 2.3	Ferroelectric thin films and applications.	7
Figure 2.4	Input signals, an input-weighted-sum and an output signal of a neuron. [46]	20
Figure 2.5	An example of schematic diagram for ANN modeling of ferroelectric hysteresis area.	21
Figure 3.1	Non-polarizable sites on possible 4 sides of a 2D-tetragonal cell.	31
Figure 4.1	The $P$ - $E$ hysteresis loops without defect concentration under varying frequency $f$ simulated at $l = 2$ , $T = 0.5 U/k_B$ [66].	37
Figure 4.2	The $P$ - $E$ The hysteresis loops with $c = 20\%$ under varying frequency $f$ simulated at $l = 2$ , $T = 0.5 U/k_B$ [66].	38
Figure 4.3	The thickness dependence of $P$ - $E$ hysteresis loops without defect concentration under varying the film's thickness $l$ simulated at a fixed field frequency $f = 0.0250 \text{ mcs}^{-1}$ [66].	39
Figure 4.4	The thickness dependence of $P$ - $E$ hysteresis loops with defect concentration $c = 20\%$ under varying the film's thickness simulated at a fixed field frequency $f = 0.0250 \text{ mcs}^{-1}$ [66].	40
Figure 4.5	The thickness dependence of hysteresis area $A$ without defect concentration under varying film's thickness $l$ and field frequency $f$ [66].	41
Figure 4.6	The thickness dependence of hysteresis area with partial non-polarizable structure under varying film's thickness $l$ and field frequency $f$ [66].	42

Figure 4.7	The regression line fitted by the scaled exponents $\alpha = -0.979$ , $\beta = -0.082$ and $\gamma = -0.114$ , simulated at higher field frequency ( $f > 0.1000 \text{ mcs}^{-1}$ ) [66].	43
Figure 4.8	The $P$ - $E$ hysteresis loops of ferroelectric ultra-thin films with varying $c$ under $E_0 = 0.50 U$ , $f = 0.001 \text{ mcs}^{-1}$ , and $T = 0.5 U/k_B$ [67].	44
Figure 4.9	The $P$ - $E$ hysteresis loops of ferroelectric ultra-thin films with varying $c$ under $E_0 = 1.00 U$ , $f = 0.001 \text{ mcs}^{-1}$ , and $T = 0.5 U/k_B$ [67].	45
Figure 4.10	The frequency dependence of hysteresis area $A$ with varying defect concentration $c$ [67].	46
Figure 4.11	The temperature dependence of dynamic order parameter simulated at frequency $f = 0.01 \text{ mcs}^{-1}$ and $E_0 = 1.0 U$ [67].	47
Figure 4.12	The $P_z$ - $E_z$ hysteresis loops with varying defect concentration $c$ under a free stress field [68].	48
Figure 4.13	The $P_z$ - $E_z$ hysteresis loops with varying defect concentration $c$ under a longitudinal tensile stress field [68].	49
Figure 4.14	The $P_z$ - $E_z$ hysteresis loops with varying defect concentration $c$ under a longitudinal compressive stress field [69].	50
Figure 4.15	The $P_z$ - $E_z$ hysteresis loops with varying defect concentration $c$ under a periodic stress field [68].	51
Figure 4.16	The hysteresis area $A$ versus defect concentration $c$ simulated at $\sigma_z = 0.0, 0.5, -0.5$ and $\sigma_0 \sin(2\pi ft)$ [68].	51
Figure 4.17	The $\varepsilon_z$ - $E_z$ hysteresis loops with varying defect concentration $c$ under a free stress field [68].	52
Figure 4.18	The $\varepsilon_z$ - $E_z$ hysteresis loops with varying defect concentration $c$ under a longitudinal tensile stress field [68].	53
Figure 4.19	The $\varepsilon_z$ - $E_z$ hysteresis loops with varying defect concentration $c$ under a longitudinal compressive stress field [68].	54
Figure 4.20	The $\varepsilon_z$ - $E_z$ hysteresis loops with varying defect concentration $c$ under a periodic stress field [68].	55

## ข้อความแห่งการริเริ่ม

- 1) วิทยานิพนธ์นี้ได้นำเสนอสมมติฐานที่ปรับปรุงสำหรับวัสดุเฟอร์โรอิเล็กทริกที่มีโครงสร้างแบบไม่สามารถมีขั้วได้บางส่วนเพื่อนำไปศึกษาพฤติกรรมของวัสดุเฟอร์โรอิเล็กทริกโดยใช้วงฮิสเทอรีซิส  $P-E$  และวงฮิสเทอรีซิส  $\varepsilon-E$  การสร้างวงฮิสเทอรีซิสเหล่านี้จะใช้แบบจำลองที่มีความสมจริงบนพื้นฐานแบบจำลองดิฟฟิโรว์ แบบจำลองไฮเซนเบิร์กที่มีอันตรกิริยาแบบดิฟฟิโรว์ และแบบจำลองพอทส์ 2 มิติแบบมี 4 สถานะ นอกจากนี้วิทยานิพนธ์นี้ยังได้กำหนดวิธีการระบุตำแหน่งที่ไม่สามารถมีขั้วได้บางส่วน (ในวิทยานิพนธ์นี้ ความเข้มข้นพกร่องจะแสดงถึงจำนวนตำแหน่งที่ไม่สามารถมีขั้วได้) ภายในแบบจำลองเหล่านี้
- 2) เพื่อให้เข้าใจพฤติกรรมฮิสเทอรีซิสของวัสดุเฟอร์โรอิเล็กทริกที่มีโครงสร้างแบบไม่สามารถมีขั้วได้บางส่วน ได้มีการนำเสนอภายนอกลักษณะต่าง ๆ (เช่น สนามไฟฟ้าแบบมีคาบ สนามความเค้นแบบคงที่ สนามความเค้นแบบคาบ หรือการผสมกันระหว่างสนามไฟฟ้าและสนามความเค้น) มากระทำต่อวัสดุเฟอร์โรอิเล็กทริกที่พิจารณา

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่  
Copyright© by Chiang Mai University  
All rights reserved

## STATEMENT OF ORIGINALITY

- 1) This thesis have presented the modified Hamiltonian for ferroelectric materials with partial non-polarizable structure to investigate their behaviors through the polarization-electric field and the strain-electric field hysteresis loops. To generate these hysteresis loops, we use more realistic models based on the DIFFOUR model, the modified Heisenberg model with DIFFOUR interaction, and 2D four-state Potts model. We have also proposed how to assign the non-polarizable positions (the defect concentration represents the number of non-polarizable positions in this thesis) within these models.
- 2) In order to further understand the hysteresis behaviors of ferroelectric materials with partial non-polarizable structure, we apply various external fields (for example, a periodic electric field, a static stress field, a periodic stress field, or a combination of periodic electric and stress field) on our materials to investigate how they effect on ferroelectric materials considered.

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่  
Copyright© by Chiang Mai University  
All rights reserved