

Khảo sát ảnh hưởng của biến dạng và khuyết tật hình học đến xoáy phân cực đơn trong sợi nano PbTiO₃

Investigating Effect of Strain and Geometric Defects on Single Polarization Vortex in PbTiO₃ Nanowires

Trần Thế Quang^{1,2*}, Nguyễn Hoàng Linh¹, Nguyễn Văn Hội¹,
Vương Văn Thanh¹, Đỗ Văn Trường^{1*}

¹ Trường Đại học Bách khoa Hà Nội, Hà Nội, Việt Nam

² Trường Đại học Thái Bình, Thái Bình, Việt Nam

*Email: tranthequang12@gmail.com; truong.dovan@hust.edu.vn

Tóm tắt

Cấu trúc xoáy phân cực đơn trong sợi nano có thể được sử dụng để lưu trữ dữ liệu cho bộ nhớ truy cập ngẫu nhiên không mất dữ liệu khi ngắt nguồn (NVFRAM hoặc FRAM). Tuy nhiên, ở kích thước nano, biến dạng cơ học hoặc khuyết tật hình học (vết nứt) có thể làm ảnh hưởng đến xoáy phân cực và nó cũng là một trong những nguyên nhân làm giảm tuổi thọ cũng như độ tin cậy của thiết bị. Trong nghiên cứu này, phương pháp mô phỏng nguyên tử sử dụng hàm thế năng tương tác trên cơ sở mô hình vỏ-lõi được lựa chọn để khảo sát ảnh hưởng của biến dạng, vết nứt và sai lệch vách miền phân cực (domain wall - DW) đến xoáy phân cực đơn trong sợi nano PbTiO₃ (PTO). Kết quả thu được chỉ ra rằng xoáy phân cực có thể bị triệt tiêu hoặc xuất hiện thêm tùy thuộc vào vị trí và kích thước của vết nứt. Sai lệch vị trí DW làm thay đổi kích thước và hình dạng của xoáy. Bên cạnh đó, dưới biến dạng cơ học độ lớn phân cực của xoáy tăng khi chịu kéo và giảm khi chịu nén. Đặc biệt, ở biến dạng nén lớn (10%), xoáy bị phá vỡ.

Từ khóa: PbTiO₃, mô hình vỏ-lõi, xoáy phân cực, sợi nano sắt điện

Abstract

The single polarization vortex structure in nanowire can be used to store binary data in Non-Volatile Ferroelectric Random Access Memories (NVFRAM or FRAM). However, at the nanoscale, mechanical strains or geometry defects (cracks) can affect the polarization vortex and they are one of the reasons for reducing the service life as well as the reliability of the device. In this study, the atomic simulation method using the interactive potential function based on the core-shell model is selected to investigate the effects of strain, cracks and domain wall deviations (DW) on the single polarization vortex in PbTiO₃ (PTO) nanowires. The results obtained showed that the polarization vortex can appear or disappear depending on the position and size of the crack. Deviations in the DW position make the polarization vortex change the size and shape. Besides, the magnitude of the vortex investigated increases under tension strain and decreases under compression strain. Especially, in large compression strain (10%), the vortex can be disappeared.

Keywords: PbTiO₃, core-shell model, polarization vortex, ferroelectric nanowires

1. Giới thiệu

Vật liệu gốm sắt điện ABO₃ (A = Sr, Ba, Pb và B = Ti, Zr) như PbTiO₃, BaTiO₃, SrTiO₃ đang được sử dụng rộng rãi trong các linh kiện điện tử như bộ nhớ truy cập ngẫu nhiên không mất dữ liệu khi ngắt nguồn (NVFRAM hoặc FRAM) [1], cảm biến (sensor) [2], bộ chuyển đổi điện (transducer) [3]. Trong nhóm vật liệu sắt điện này, PbTiO₃ (PTO) là một ứng viên tiềm năng cho các ứng dụng nổi trội, đã được nghiên cứu ở các quy mô kích thước khác nhau [1], [4-10] và hiện nay đang được quan tâm nhiều ở kích thước nano mét. Ở kích thước nano mét, số nguyên tử trên bề mặt chiếm tỉ lệ đáng kể so với tổng số nguyên tử, vì vậy tính chất cơ lý khác biệt với dạng khối [11].

Đã có một số nghiên cứu khảo sát ảnh hưởng về kích thước hình học của vật liệu đến phân bố phân cực sắt điện [4-10]. Theo chứng minh của Y. Su và các cộng sự [4,5], khi kích thước vật liệu thu nhỏ đến cỡ nano mét (khoảng dưới vài chục nano) thì dòng phân cực hình thành các xoáy. Bên cạnh đó, ảnh hưởng của bề mặt tự do của vật liệu đến độ lớn và dòng xoáy phân cực cũng được phân tích [5,6]. Mặc dù có không ít các tác giả tập trung vào nghiên cứu ở kích thước cỡ nano mét, tuy nhiên, đến thời điểm này, những khảo sát liên quan đến ảnh hưởng của khuyết tật hình học (cụ thể là các vết nứt) đến xoáy phân cực của sợi PTO vẫn chưa được xem xét.

Như chúng ta đã biết, phương pháp tính toán nguyên lý đầu (ab initio) dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) [12] được sử dụng phổ biến để khảo sát tính chất của vật liệu. Đây là một công cụ mô phỏng mạnh và cho kết quả tin cậy. Phương pháp này thường áp dụng cho mô hình khối sử dụng điều kiện biên tuần hoàn dựa trên một ô mạng đơn vị. Tuy nhiên, khi mô

phông các cấu trúc tiệm cận kích thước thực như tấm mỏng nano, sợi nano, khối lượng tính toán và thời gian tính toán tăng đáng kể. Để khắc phục những hạn chế trên, phương pháp tối ưu hóa cấu trúc nguyên tử dựa trên mô hình vỏ - lõi [13,14] được lựa chọn. Ưu điểm của phương pháp là cho phép mô hình tính toán lên tới hàng nghìn nguyên tử, tiệm cận kích thước thực, trong khi đó phân cực của vật liệu được tính toán dựa trên thay đổi của vị trí nguyên tử vẫn được đảm bảo.

Trong nghiên cứu này, ảnh hưởng của biến dạng đơn trục (theo phương Oz), khuyết tật hình học (vết nứt) và sai lệch vị trí của vách miền phân cực (DW) đến xoay phân cực đơn trong sợi nano PTO được khảo sát. Các kết quả thu được chỉ cho thấy vết nứt có thể làm biến đổi hình dạng xoay. Hơn thế nữa, trong một số trường hợp, nó có thể làm mất xoay. DW cũng xảy ra tương tự, sự di chuyển của DW có thể làm thay đổi hình dạng xoay. Trong trường hợp đặc biệt, hai xoay có thể hình thành khi DW di chuyển quá lệch về một bên. Các kết quả này là những khuyến cáo hữu ích, nó cũng là một trong những chìa khóa quan trọng trong việc nâng cao tuổi thọ và chất lượng phục vụ của thiết bị.

2. Phương pháp tính toán

2.1. Phân cực sắt điện

Phân cực điện là hiện tượng xảy ra ở một số vật liệu có cấu trúc tinh thể không đối xứng như PTO, BaTiO₃ (BTO). Phân cực tự phát có thể xuất hiện khi không có điện trường ngoài [15,16].

Khái niệm sắt điện là chỉ nhóm vật liệu có tính chất phân cực điện tự phát. Nhóm vật liệu này không chứa sắt nhưng nó mượn khái niệm sắt trong nhóm các vật liệu có tính chất từ tự phát.

Vật liệu sắt điện PTO có dạng tinh thể tứ diện (tetragonal) với các thông số mạng $a = 3,878 \text{ \AA}$; $c = 4,069 \text{ \AA}$ như minh họa trên hình 1a, được lựa chọn là đối tượng của nghiên cứu.

Hình 1(b) minh họa mô hình vỏ - lõi. Trong mô hình này, giả thiết mỗi nguyên tử được cấu tạo gồm hai phần: phần vỏ và phần lõi [13]. Phần vỏ được mô tả tương ứng với đám mây điện tử có điện tích là q_e , phần lõi tương ứng

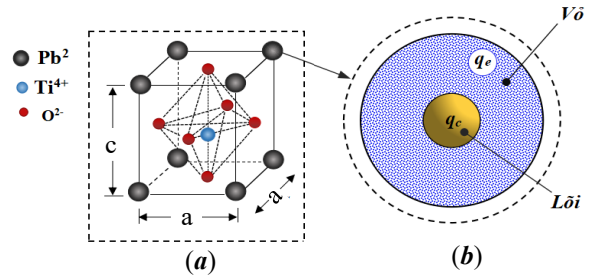
là hạt nhân nguyên tử có điện tích là q_c . Tổng điện tích của nguyên tử là:

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

Phân cực điện được hình thành khi tâm đám mây điện tử không trùng với tâm hạt nhân. Độ phân cực trong ô đơn vị PTO có thể xác định theo công thức [17]:

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

trong đó, V là thể tích ô đơn vị. q_m , r_m là điện tích và vị trí của nguyên tử thứ m . r_B là vị trí tham chiếu đối với lõi nguyên tử B (Ti) và 29 hạt còn lại. w_m là hệ số mô tả sự chia sẻ nguyên tử: Pb là 8, Ti là 1 và 2 cho O.

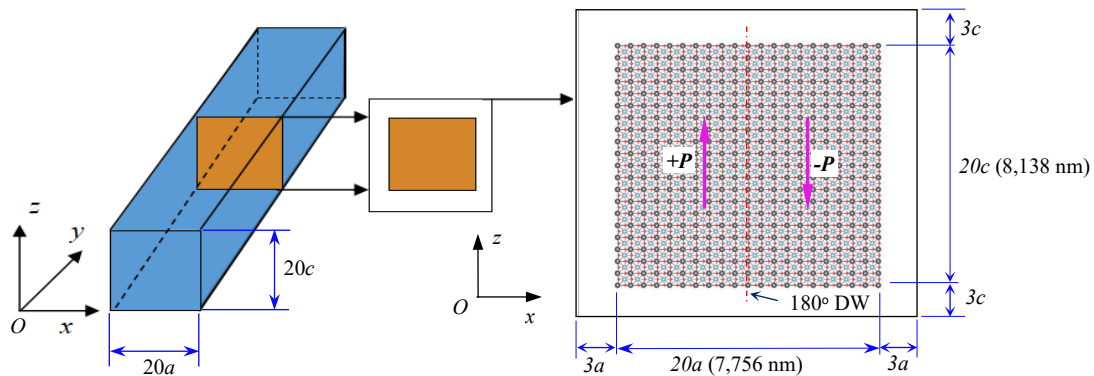


Hình 1. Mô hình cấu trúc mạng tinh thể PTO: (a) Cấu trúc ô mạng đơn vị của PTO; (b) Mô hình vỏ - lõi.

2.2. Mô hình sợi nano PTO

Hình 2 minh họa mô hình của sợi nano PTO mô phỏng với tiết diện 20×20 ô đơn vị tương ứng với kích thước là $7,756 \text{ nm} \times 8,138 \text{ nm}$ theo các phương x và z . Điều kiện biên tuần hoàn được áp dụng trên cả ba phương x , y , z của mô hình. Để tránh ảnh hưởng của điều kiện biên tuần hoàn theo phương x và z , vùng chân không được thiết lập với chiều dày bằng 6 lần thông số mạng theo các phương tương ứng.

Mô hình được xây dựng gồm hai miền phân cực 180° (miền 180°) ngược chiều nhau theo phương z , kích thước mỗi miền là 10×20 ô đơn vị. Tương ứng, với $(-P)$ ở bên phải và $(+P)$ bên trái, một vách miền 180° (180° DW) được hình thành.



Hình 2. Mô hình sợi nano PTO theo mặt cắt xz với miền 180° được thiết lập ban đầu

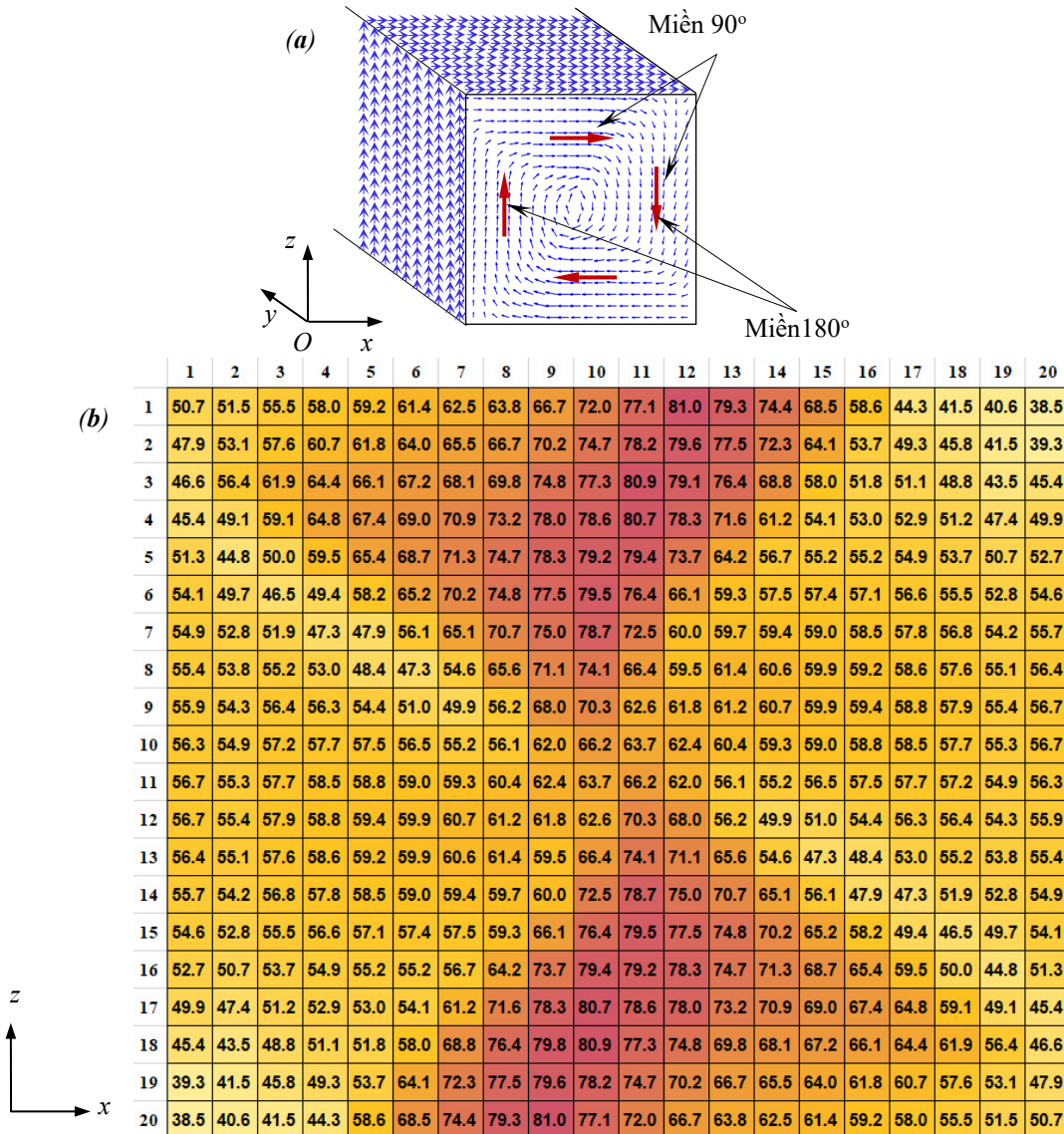
Các thiết lập tính toán được thực hiện qua phương pháp mô phỏng nguyên tử sử dụng hàm thế năng tương tác giữa vò - lồi [14] thông qua phần mềm GULP [18]. Trên hình 3(a), kết quả tính toán, mô phỏng thu được chỉ cho thấy các vector phân cực tạo thành xoáy đơn từ các miền 180° và miền 90° . Chiều phân cực được sắp xếp tạo thành một dòng khép kín (cấu trúc miền khép kín). Kết quả này cũng phù hợp với kết quả các nghiên cứu trước đây [19–22]. Sự hình thành cấu trúc miền khép kín có thể làm giảm đáng kể trường khử cực với cấu trúc 180° DW [19].

Hình 3(b) mô tả độ lớn phân cực của từng ô đơn vị. Độ lớn lớn nhất và nhỏ nhất của các phân cực lần lượt là $81,0$ và $38,5 \mu\text{C}/\text{cm}^2$, cả hai giá trị đều nhỏ hơn cường độ phân cực trong tinh thể khối, $86,8 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ [23]. Tại bốn góc của xoáy, cường độ phân cực nhỏ hơn ở trung tâm và các khu vực khác. Kết quả này cũng tương đồng với các

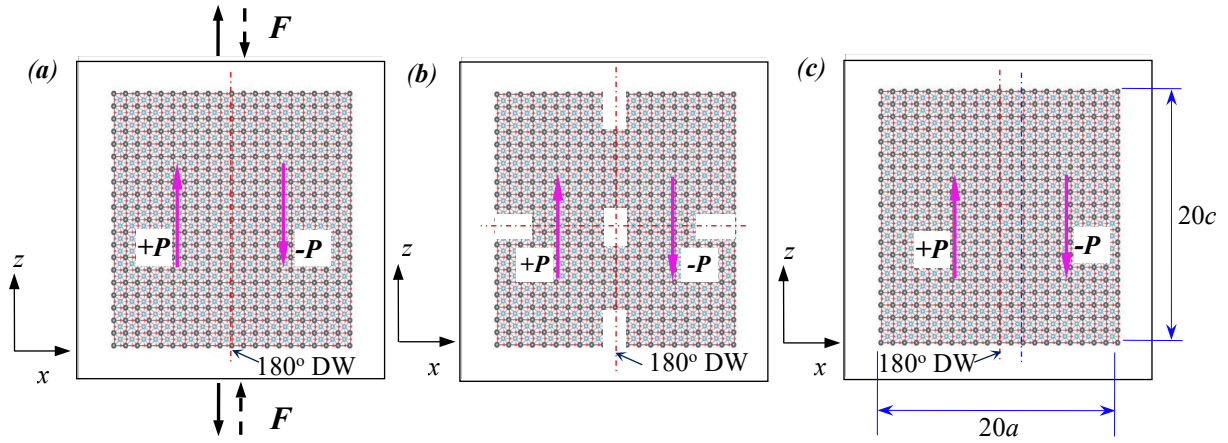
nghiên cứu trước đây [21]. Từ các chứng minh trên, chúng ta có thể khẳng định, mô hình sợi nano PTO với tiết diện 20×20 ô đơn vị có đủ độ tin cậy để sử dụng cho các khảo sát khác nhau.

Như chúng ta đã biết, trong điều kiện làm việc, nhiệt độ và tải trọng ngoài có thể gây ra các biến dạng không mong muốn. Bên cạnh đó, trong quá trình chế tạo, các khuyết tật dạng vết nứt, các DW đặt không đúng vị trí có thể xuất hiện. Những yếu tố này làm ảnh hưởng đến kích thước và hình dạng xoáy phân cực. Để làm sáng tỏ những ảnh hưởng trên, các khảo sát dưới đây được thực hiện trên sợi PTO với tiết diện 20×20 ô đơn vị.

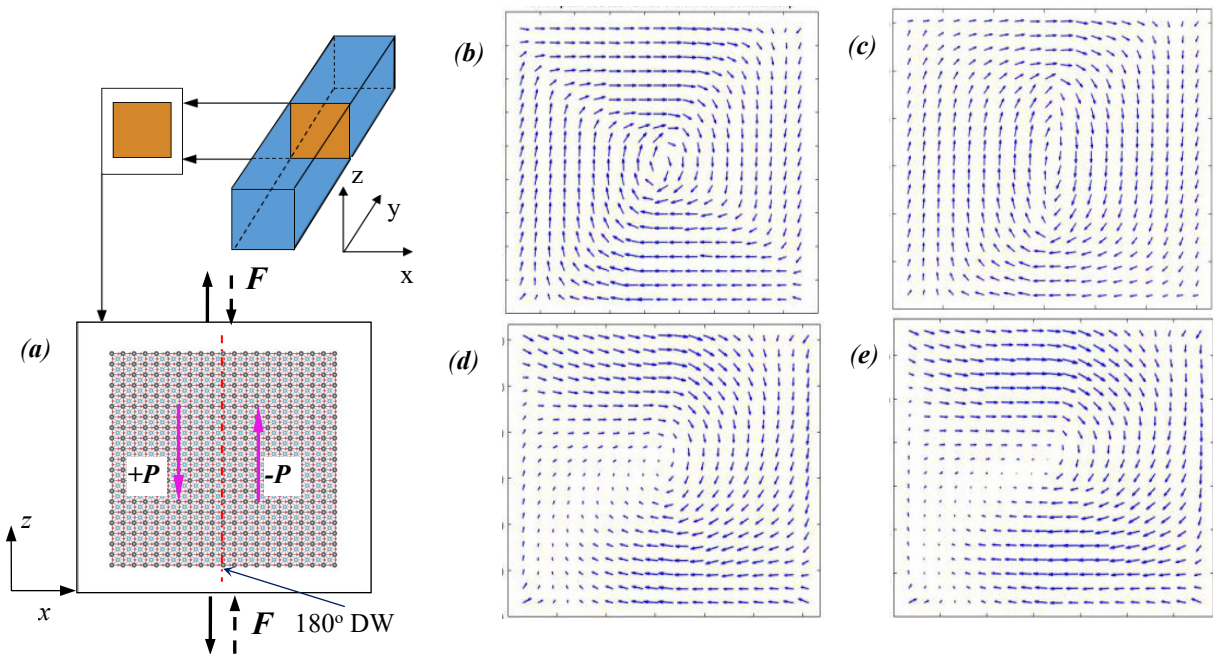
Hình 4 minh họa các mô hình khảo sát, trong đó hình 4(a) là mô hình chịu biến dạng, hình 4(b) là mô hình với các vết nứt và hình 4(c) là mô hình với khuyết tật lệch vị trí 180° DW.



Hình 3. (a) Phân bố phân cực của sợi nano PTO có cấu trúc xoáy đơn với các miền 90° và 180° , kích thước $20 \times 10 \times 20$ ô đơn vị; (b) Giá trị phân cực mặt xz ($\mu\text{C}/\text{cm}^2$).



Hình 4. Mô hình mặt cắt của sợi PTO chịu biến dạng và các dạng khuyết tật
 (a) Mô hình chịu biến dạng kéo và nén; (b) Vị trí các khuyết tật (vết nứt); (c) Khuyết tật lệch vị trí 180° DW.



Hình 5. Mô hình và kết quả phân cực của PTO dưới biến dạng kéo, nén theo phương Oz: (a) Mô hình khi biến dạng kéo, nén theo Oz; (b) Phân bố phân cực ban đầu; (c) Phân bố phân cực với biến dạng kéo 10%; (d) Phân bố phân cực với biến dạng nén 8% và (e) Phân bố phân cực với biến dạng nén 10%.

2. Khảo sát ảnh hưởng của biến dạng và khuyết tật hình học (vết nứt) đến xoáy phân cực đơn

2.1. Ảnh hưởng của biến dạng

Hình 5 minh họa mô hình và sự phân bố phân cực của sợi PTO với kích thước 20x20 ô đơn vị trong mặt xz dưới biến dạng kéo, nén theo phương Oz. Các khảo sát biến dạng kéo, nén được thực hiện từ 2% đến 10%. Một cách tổng quát, xoáy phân cực đơn bị ảnh hưởng không lớn ở biến dạng nhỏ (< 6%). Độ lớn của phân cực có xu hướng tăng dưới biến dạng kéo và giảm dưới biến dạng nén. Cụ thể, với biến dạng kéo 10%, xoáy phân cực bị kéo dài ra trong khi đó độ lớn các phân cực thành phần tăng, hình 5(c). Ngược lại, ở biến dạng nén 8%, độ lớn phân cực giảm, hình 5(d). Sự tăng

giảm này, bản chất là do sự dịch chuyển của các nguyên tử kéo theo dịch chuyển của đám mây điện tử và tâm nguyên tử. Khi nén đến 10%, các miền 180° chuyển thành miền 90°, phá vỡ xoáy phân cực, hình 5(e).

Như vậy, biến dạng kéo không làm ảnh hưởng đến phương, chiều của xoáy phân cực, mà nó chỉ làm thay đổi độ lớn của phân cực. Tuy nhiên, dưới biến dạng nén lớn ($\geq 10\%$), xoáy phân cực bị phá vỡ.

2.2. Ảnh hưởng của khuyết tật hình học (vết nứt)

Hình 6 mô tả vị trí vết nứt và phân bố phân cực thu được khi vết nứt ở tâm. Kết quả chỉ cho thấy các vết nứt ở vị trí và kích thước khác nhau có thể làm xuất hiện thêm xoáy và cũng có thể làm mất xoáy.

Khi kích thước vết nứt ở tâm theo phương x bằng 50% chiều dài của mẫu ($10a/20a$), sự hình thành thêm các xoáy là rõ rệt. Các xoáy này đối xứng nhau và cùng chiều với xoáy chính, hình 6(c). Sự hình thành thêm xoáy này có thể là do các nguyên tử gần vết nứt mất liên kết, tạo nên hai miền 180° phía trên và dưới vết nứt. Sự xuất hiện thêm xoáy này gây khó khăn cho việc đọc và ghi dữ liệu trong FRAM [20].

Ở trường hợp vết nứt theo phương Oz , xoáy phân cực bị ảnh hưởng không nhiều do vết nứt chỉ làm tăng khoảng cách giữa hai miền 180° ban đầu. Khi vết nứt đạt đến 50% chiều dài 180° DW, xoáy phân cực vẫn hầu như không đổi, hình 6(d).

Hình 7 minh họa ảnh hưởng của vết nứt xuất hiện ở cạnh biên đến xoáy. Nhìn chung, ở tất cả các vị trí, kích thước của vết nứt tăng ảnh hưởng rõ rệt đến xoáy phân cực. Cụ thể, khi vết nứt ở cạnh biên theo phương x (không đối xứng) bằng 30% chiều dài của mẫu ($6a/20a$), hình 7(a), nó làm xuất hiện thêm hai xoáy phân cực ở hai phía (trên và dưới) của vết nứt và ngược chiều với xoáy phân cực chính. Hiện tượng này có thể được hiểu là do vết nứt làm liên kết miền 180° ban đầu không còn liên tục, tạo ra các miền 180° riêng và xoáy phân cực được hình thành trên những miền mới [24].

Với trường hợp vết nứt ở cạnh bên đối xứng theo phương x , kết quả chỉ ra rằng xoáy phân cực đơn bị phá vỡ khi kích thước vết nứt bằng 20% ($4a/20a$) chiều dài mẫu, hình 7(b). Hiện tượng này là do vết nứt có kích thước đủ lớn phá vỡ tính liên tục ở hai miền 180° ban đầu, làm tăng trường khử cực tại các

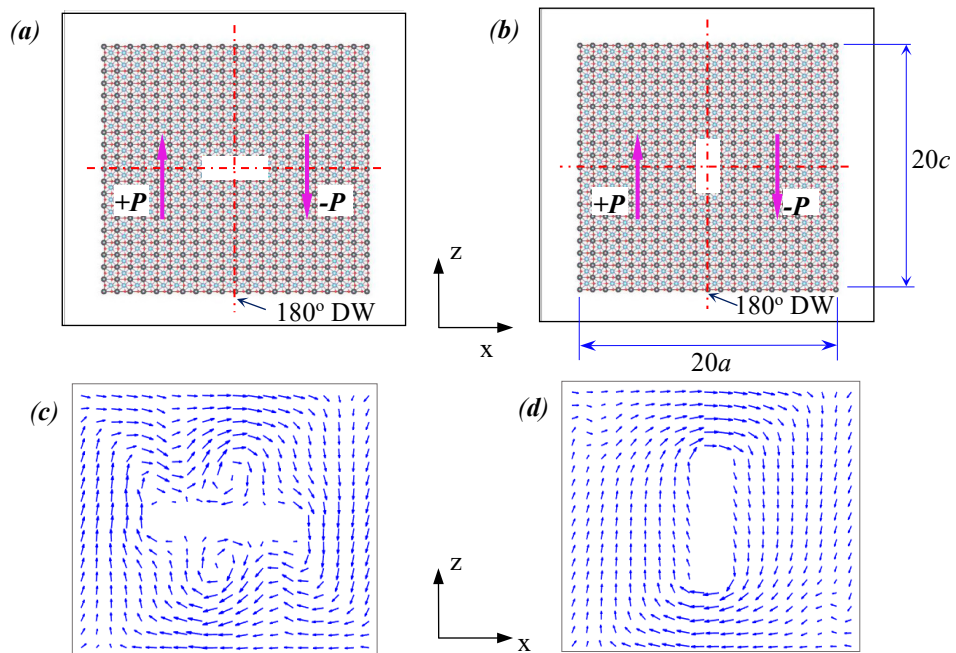
mặt biên, tạo thành các vùng có miền phân cực khác nhau như: miền 180° , 45° xen kẽ và miền 90° , làm mất xoáy phân cực, hình 7(c). Khi kích thước vết nứt tăng lên 40% tổng chiều dài mẫu, số miền 45° giảm, miền 90° gần như không còn và thay vào đó là miền 180° . Kết quả cho thấy có thể thu được một miền 180° từ hai miền 180° ngược chiều ban đầu.

Ở trường hợp vết nứt trên cạnh biên tại vị trí 180° DW và không đối xứng theo phương z , xoáy phân cực bị thu hẹp khi kích thước vết nứt tăng. Kết quả khảo sát cho thấy, khi chiều dài vết nứt chiếm tỉ lệ đến 40% chiều dài mẫu ($8c/20c$), xoáy phân cực bị thu hẹp về phần có DW còn lại, hình 7(d).

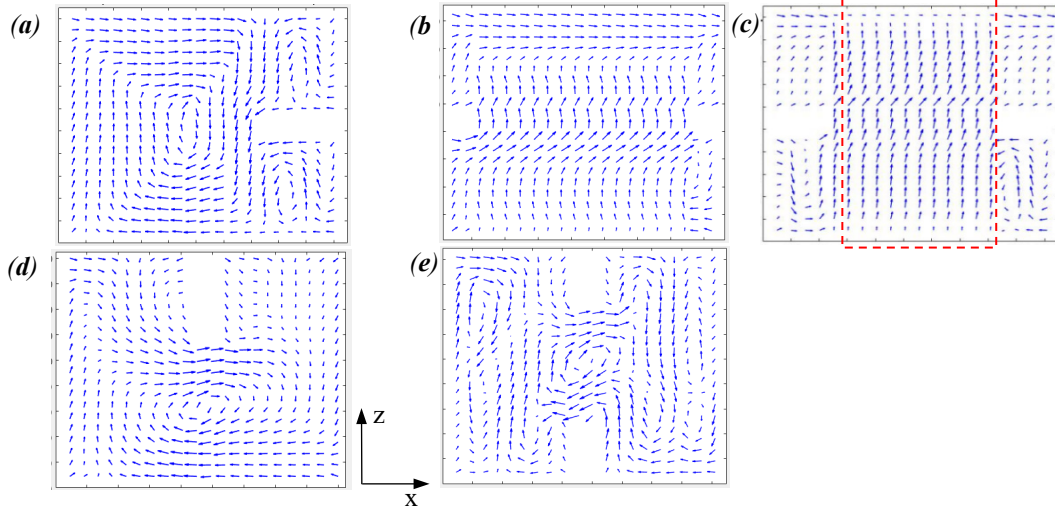
Với trường hợp các vết nứt trên cạnh biên tại vị trí 180° DW và đối xứng theo phương z , ảnh hưởng của nó đến xoáy là đáng kể. Xoáy phân cực bị co lại và khi vết nứt có tổng chiều dài bằng 50% chiều dài mẫu ($10c/20c$) xuất hiện thêm các xoáy phân cực mới cùng chiều với xoáy phân cực chính, hình 7(e). Kết quả chỉ ra rằng xoáy phân cực bị thu hẹp về tâm (phần DW còn lại) và khi các vết nứt có kích thước đủ lớn các phần miền 180° không còn DW tạo thêm các xoáy phân cực.

2.3. Ảnh hưởng của 180° DW

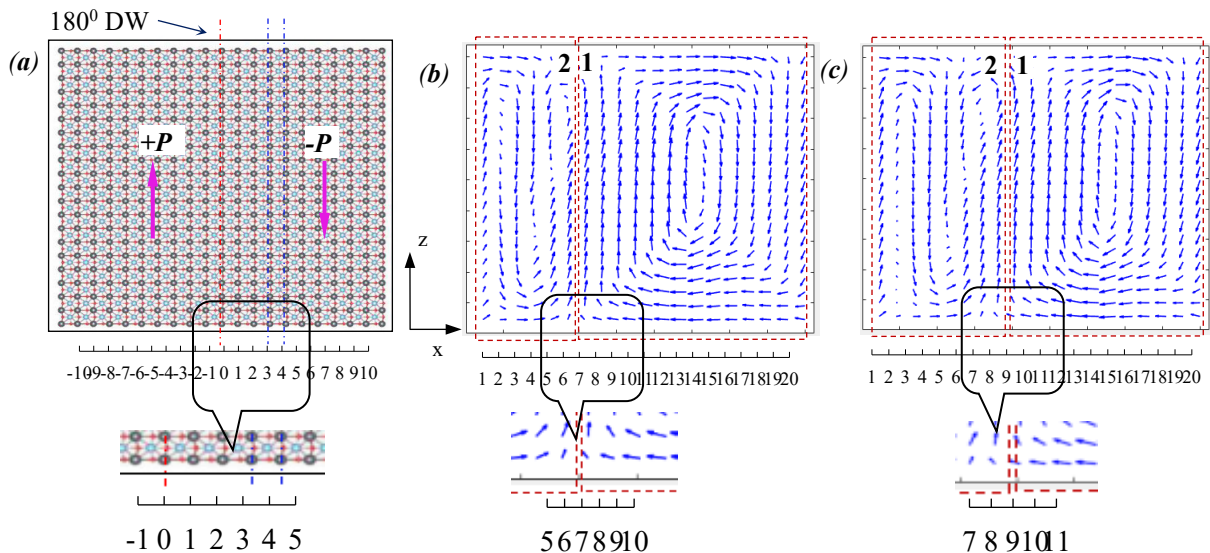
Hình 8 minh họa mô hình và kết quả của khuyết tật do lệch vị trí 180° DW của sợi PTO. Tổng quát, xoáy phân cực đơn có thể bị co lại và hình thành thêm các xoáy mới tùy thuộc vào vị trí sai lệch của 180° DW.



Hình 6. Mô hình và kết quả phân cực của sợi PTO khi vết nứt ở tâm theo phương x và z : (a) Mô hình vị trí vết nứt ở tâm theo phương x ; (b) Mô hình vị trí vết nứt ở tâm theo phương z ; (c) Phân cực khi vết nứt có kích thước $10a \times 2c$ (xz); (d) Phân cực khi vết nứt có kích thước $2a \times 10c$ (xz).



Hình 7. Phân bố phân cực của mặt cắt sợi PTO với các vết nứt ở biên theo phương x và z : (a) Vết nứt (không đối xứng) có chiều dài bằng 30% tổng chiều dài theo phương x ; (b) Vết nứt (đối xứng) có tổng chiều dài bằng 20% tổng chiều dài theo phương x ; (c) Vết nứt (đối xứng) có tổng chiều dài bằng 40% tổng chiều dài theo phương x ; (d) Vết nứt (không đối xứng) có chiều dài bằng 40% tổng chiều dài theo phương z ; (e) Vết nứt (đối xứng) có tổng chiều dài bằng 50% tổng chiều dài theo phương z .



Hình 8. Ảnh hưởng của sai lệch 180° DW đến xoáy phân cực đơn: (a) Mô hình 180° DW; (b) Phân bố phân cực khi lệch DW ở vị trí 3; (c) Phân bố phân cực khi lệch DW ở vị trí 4.

Hình 8(b) mô tả kết quả thu được trường hợp 180° DW sai lệch ở vị trí số 3 (nghĩa là tăng 30% miền $180^\circ+P$). Phân bố phân cực được chia làm hai vùng: vùng 1 là một xoáy đơn với các dòng xoáy 7×7 ô đơn vị; Vùng 2 là các dòng xoáy xen kẽ theo chu kỳ 2×2 ô đơn vị. Tương tự, khi 180° DW sai lệch ở vị trí số 4 (tăng 40% miền $180^\circ+P$) gồm: vùng 1 là một xoáy đơn 6×6 ô đơn vị và vùng 2 là các dòng xoáy, hình 8(c). Hiện tượng này bản chất là do mất cân bằng về số lượng miền 180° cùng chiều, tuy nhiên xoáy phân cực đơn vẫn được hình thành từ cặp miền 180° có phân cực ngược chiều. Phần dư của miền 180° có thể hình thành các dòng xoáy phân cực xen kẽ.

Tương tự, khi 180° DW ở các vị trí -3, -4 kết quả cho tương ứng với các vị trí 3, 4, do tính chất đối xứng. Vì vậy, để xoáy phân cực ổn định thì cần phải đảm bảo tính đối xứng của các miền 180° có chiều (-P) và (+P) ban đầu.

3. Kết luận

Trong nghiên cứu này, ảnh hưởng của biến dạng đơn trục (theo phương Oz), khuyết tật hình học (vết nứt) và sai lệch vị trí của 180° DW đến xoáy phân cực đơn trong sợi nano PTO được khảo sát. Các kết quả chính của nghiên cứu thu được có thể tóm tắt dưới đây:

- Dưới biến dạng theo phương Oz , độ lớn phân cực của xoáy tăng khi chịu kéo và giảm khi chịu nén.

Đặc biệt, dưới biến dạng nén $\geq 10\%$, xoáy phân cực đơn bị triệt tiêu;

- Xoáy phân cực bị ảnh hưởng không lớn khi vết nứt ở tâm theo phương z . Khi kích thước vết nứt lên đến 50% chiều dài 180° DW, xoáy gần như không thay đổi;

- Trường hợp vết nứt trên cạnh biên tại vị trí 180° DW theo phương z (không đối xứng), xoáy phân cực bị thu hẹp về phần có DW liên tục còn lại;

- Trường hợp vết nứt ở tâm theo phương x với kích thước bằng 50% chiều dài mẫu ($10a/20a$), vết nứt trên cạnh biên tại vị trí 180° DW theo phương z đối xứng với kích thước bằng 50% tổng chiều dài mẫu ($10c/20c$) và vết nứt ở cạnh biên theo phương x không đối xứng với kích thước bằng 25% chiều dài mẫu ($5a/20a$), đều xuất hiện thêm các xoáy phân cực;

- Trường hợp vết nứt ở cạnh bên đối xứng theo phương x , khi kích thước vết nứt bằng 20% chiều dài mẫu ($4a/20a$), xoáy phân cực đơn bị triệt tiêu;

- Sai lệch vị trí của 180° DW làm xoáy phân cực đơn co ở phần này nhưng lại có thể hình thành thêm các xoáy ở phần kia. Phần dư của miền 180° càng nhiều thì các dòng xoáy phân cực xen kẽ càng lớn.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển Khoa học và Công nghệ Quốc gia (NAFOSTED), mã số: 107.02- 2016.18.

Tài liệu tham khảo

- [1]. J.F. Scott and C.A. Paz De Araujo, Ferroelectric memories, *Science*, vol. 246, no. 4936, (1989), 1400–1405.
- [2]. L.E. Cross, Ferroelectric Materials for Electromechanical Transducer Applications, *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 34, no. Part 1, No. 5B, (1995), 2525–2532.
- [3]. S. Zhang, F. Li, X. Jiang, J. Kim, J. Luo, and X. Geng, Advantages and challenges of relaxor-PbTiO₃ ferroelectric crystals for electroacoustic transducers - A review, *Prog. Mater. Sci.*, vol. 68, (2015), 1–66.
- [4]. Y. Su and J.N. Du, Existence conditions for single-vertex structure of polarization in ferroelectric nanoparticles, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 95, no. 1, (2009), 20–23.
- [5]. Y. Su and J. N. Du, Effect of intrinsic surface stress on single-vertex structure of polarization in ferroelectric nanoparticles, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, no. 16, (2010), 192605-3.
- [6]. Y. Su, H. Chen, J.J. Li, A.K. Soh, and G.J. Weng, Effects of surface tension on the size-dependent ferroelectric characteristics of free-standing BaTiO₃ nano-thin films, *J. Appl. Phys.* 110(8), (2011), 084108-6.
- [7]. Y.C. Song, Y. Ni, and J.Q. Zhang, Phase field model of polarization evolution in a finite ferroelectric body with free surfaces, in *Acta Mechanica*, 224 (6) (2013), 1309-1313.
- [8]. J.F. Scott, [3D] nano-scale ferroelectric devices for memory applications, *Ferroelectrics*, vol. 314, no. January 2015, (2005), 207–222.
- [9]. H. Fu and L. Bellaiche, Ferroelectricity in Barium Titanate Quantum Dots and Wires, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, no. 25, (2003), 257601.
- [10]. Z. Wu, N. Huang, Z. Liu, J. Wu, W. Duan, and B.-L. Gu, Unusual vortex structure in ultrathin Pb(Zr_{0.5}Ti_{0.5})O₃ films, *J. Appl. Phys.*, vol. 101, no. 1, (2007), 014112,.
- [11]. L. M. Liz-Marzán, *Nanometals, Handb. Less-Common Nanostructures*, no. February, (2004), 699–720.
- [12]. M. Morales, R. Clay, C. Pierleoni, and D. Ceperley, First Principles Methods: A Perspective from Quantum Monte Carlo, *Entropy*, vol. 16, no. 1, (2013), 287–321.
- [13]. H. J. Mang and H.A. Weidenmuller, Shell-Model Theory of the Nucleus, *Annu. Rev. Nucl. Sci.*, vol. 18, no. 1, (1968), 1–26.
- [14]. B. G. Dick and A.W. Overhauser, Theory of the Dielectric Constants of Alkali Halide Crystals, *Phys. Rev.*, vol. 112, no. 1, (1958), 90–103.
- [15]. W. Känzig, *Ferroelectrics and antiferroelectrics*. New York: Academic Press, (1957).
- [16]. M.E. Lines and A. M. (Alastair M. Glass, *Principles and applications of ferroelectrics and related materials*. Clarendon Press, (1977).
- [17]. M. Sepiarsky and R. E. Cohen, First-principles based atomistic modeling of phase stability in PMN_xPT, *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 23, no. 43, (2011), 435902-11.
- [18]. J. D. Gale and A.L. Rohl, The General Utility Lattice Program (GULP), *Mol. Simul.*, vol. 29, no. 5, (2003), 291–341.
- [19]. T. Shimada, S. Tomoda and T. Kitamura, Ab initio study of ferroelectric closure domains in ultrathin PbTiO₃ films, *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 81, no. 14, (2010), 144116-6.
- [20]. T.T. Quang, T.N. Giang, V.V. Thanh, and Đ.V. Trường, Khảo sát sự hình thành xoáy phân cực của vật liệu sắt điện ở kích thước nano mét, sử dụng mô hình core-shell, *Hội nghị Cơ học Kỹ thuật toàn quốc, Viện Cơ học, Hà Nội, tập 1, (2019), 313–319.*
- [21]. J. Wang and M. Kamlah, Domain control in ferroelectric nanodots through surface charges, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, no. 26, (2008), 1–4.
- [22]. J. Wang, Switching mechanism of polarization vortex in single-crystal ferroelectric nanodots, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 97, no. 19, (2010), 95–98.
- [23]. D.Van Truong, T.T. Quang, N.H. Linh, N.Van Hoi, and V.Van Thanh, Strain Effect on Hysteresis Loop of PbTiO₃ Bulk, *Proceedings of the International Conference on Engineering Research and Applications, ICERA 2019, Trường ĐH Kỹ thuật Công nghiệp Thái Nguyên*, vol. 104,(2020), 679–685.
- [24]. S. Prosandeev, I. Ponomareva, I. Kornev, I. Naumov, and L. Bellaiche, Controlling toroidal moment by means of an inhomogeneous static field: An Ab initio study, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, no. 23, (2006), 1–4.