



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky, informatiky
a mezioborových studií ■

Nástroj pro vizualizaci fázových diagramů ve feroelektrikách

Bakalářská práce

Studijní program: B2646 – Informační technologie

Studijní obor: 1802R007 – Informační technologie

Autor práce: **Vladimír Škopek**

Vedoucí práce: Ing. Pavel Márton, Ph.D.



ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Vladimír Škopek**
Osobní číslo: **M14000076**
Studijní program: **B2646 Informační technologie**
Studijní obor: **Informační technologie**
Název tématu: **Nástroj pro vizualizaci fázových diagramů ve feroelektrikách**
Zadávající katedra: **Ústav mechatroniky a technické informatiky**

Z á s a d y p r o v y p r a c o v á n í :

1. Cílem práce je vyvinout nástroj pro vizualizaci fázového diagramu feroelektrického materiálu za účelem ověřování vlastností fenomenologického popisu.
2. Osvojte si základní principy popisu materiálu pomocí fenomenologického potenciálu [1].
3. Navrhněte robustní skript v jazyce Python, který umožní pro zadaný tvar potenciálu, jeho parametrizaci a zvolené rozsahy vnějších/okrajových podmínek, na kterých potenciál závisí, vykreslit dvourozměrný obrázek vlastností globálního minima potenciálu.
4. Požadované vlastnosti k vizualizaci, jakož i proměnné veličiny, které budou vystupovat na osách grafů, pravidelně konzultujte.
5. Ověřte funkčnost skriptu na jednoduchém případě BaTiO₃, a porovnejte výsledky s publikovanými daty [2]. Rozšiřte skript tak, aby umožňoval práci s tvarem potenciálu pro BiFeO₃ [3].
6. Skript v průběhu práce udržujte aktualizovaný v některém z cloudových repozitářů. Skript podrobně dokumentujte ve zdrojovém kódu a vytvořte dokumentaci pomocí sphinx [4]. O výsledcích sepište zprávu.

Rozsah grafických prací: **dle potřeby dokumentace**

Rozsah pracovní zprávy: **30–40 stran**

Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná/elektronická**

Seznam odborné literatury:

- [1] P. Ondrejko: Studium doménových struktur ve feroelektrickém BaTiO₃, diplomová práce, FJFI-ČVUT (2008).
- [2] A. Bell: Phenomenologically derived electric field-temperature phase diagrams and piezoelectric coefficients for single crystal barium titanate under fields along different axes, J. Appl. Phys. 89, 3907 (2001).
- [3] P. Márton, A. Klíč, M. Pasciak, a J. Hlinka: Development of Landau potential for BiFeO₃, nepublikovaná práce (2016).
- [4] SPHINX, Python documentation generator, <http://www.sphinx-doc.org/en/stable/>, navštíveno 14.10.2016.

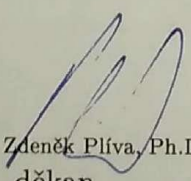
Vedoucí bakalářské práce:

Ing. Pavel Márton, Ph.D.

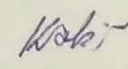
Ústav mechatroniky a technické informatiky

Datum zadání bakalářské práce: **10. října 2016**

Termín odevzdání bakalářské práce: **15. května 2017**


prof. Ing. Zdeněk Plíva, Ph.D.
děkan




doc. Ing. Milan Kolář, CSc.
vedoucí ústavu

V Liberci dne 10. října 2016

Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé bakalářské práce pro vnitřní potřebu TUL.

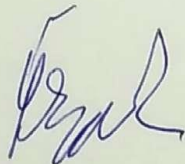
Užiji-li bakalářskou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Bakalářskou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce a konzultantem.

Současně čestně prohlašuji, že tištěná verze práce se shoduje s elektronickou verzí, vloženou do IS STAG.

Datum: 15. 5. 2017

Podpis:



Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval vedoucímu práce panu Ing. Pavlu Mártonovi, Ph.D. za odborné vedení, vstřícnost při konzultacích a čas, který mi věnoval v průběhu vypracování bakalářské práce.



Abstrakt

Bakalářská práce se zabývá návrhem a tvorbou nástroje pro vizualizaci fázových diagramů feroelektrických materiálů BaTiO_3 a BiFeO_3 , pomocí kterého je možné ověřovat vlastnosti fenomenologického popisu. Aplikace je realizována v jazyce Python s využitím knihoven třetích stran. Pro vykreslování grafů, numerické operace a optimalizaci byly použity knihovny matplotlib, NumPy a SciPy. Nástroj umožňuje vizualizaci diagramů pro zadaný tvar potenciálu v závislosti na jedné nebo dvou zvolených veličinách v požadovaném rozsahu. V současnosti je možné vykreslovat grafy v závislosti na teplotě a aplikovaném elektrickém poli ve zvoleném směru, data jsou prezentována ve formě dvourozměrného nebo trojrozměrného grafu, dle volby uživatele. Správnost zobrazovaných dat je ověřena srovnáním výsledných fázových diagramů BaTiO_3 s vizualizacemi z článku A. J. Bella [2].

Klíčová slova

Python, vizualizace, fázové diagramy, feroelektrické materiály, vývoj aplikací

Abstract

The bachelor thesis deals with the design and creation of a Tool for visualization of phase diagrams of ferroelectric materials BaTiO₃ and BiFeO₃, by which it is possible to verify the properties of phenomenological description. The application is implemented in Python using third-party libraries. The matplotlib, NumPy, and SciPy libraries were used to plot charts, numeric operations, and optimization. The Tool allows visualization of diagrams for the specified shape of the potential, depending on one or two selected variables in the desired range. It is currently possible to plot charts depending on the temperature and the applied electric field in the chosen direction, the data being presented in the form of a two-dimensional or three-dimensional graph, according to the user's choice. The correctness of the displayed data is verified by comparing the resulting BaTiO₃ phase diagrams with visualizations from A. J. Bell's article [2].

Keywords

Python, visualization, phase diagrams, ferroelectric materials, application development

Obsah

| | | |
|-------|--|----|
| 1 | Úvod..... | 12 |
| 2 | Feroelektrické materiály, jejich vlastnosti a popis..... | 14 |
| 2.1 | Feroelektřina | 14 |
| 2.2 | Fenomenologický popis | 14 |
| 2.3 | Gibbsova volná energie..... | 14 |
| 2.4 | Krystalová struktura a fáze..... | 16 |
| 2.5 | Elementární buňka | 16 |
| 2.5.1 | Millerova notace | 17 |
| 2.5.2 | Krystalová mřížka..... | 17 |
| 2.6 | Titaničitan barnatý | 18 |
| 2.6.1 | Struktura..... | 18 |
| 2.6.2 | Vlastnosti | 19 |
| 2.6.3 | Strukturální fázové přechody..... | 19 |
| 2.6.4 | Využití | 20 |
| 2.7 | Bismuth ferrite | 21 |
| 2.7.1 | struktura | 21 |
| 2.7.2 | Využití | 22 |
| 3 | Návrh řešení..... | 24 |
| 3.1 | Prostředky | 24 |
| 3.2 | Členění kódu | 25 |
| 3.2.1 | Hlavní skript | 25 |
| 3.2.2 | Knihovna potenciálů | 27 |
| 3.2.3 | Parametry potenciálu BiFeO_3 | 27 |
| 3.3 | Rozhraní příkazové řádky | 27 |
| 3.4 | Optimalizační algoritmus | 28 |

| | | |
|-------|---|----|
| 3.5 | Počáteční bod optimalizace..... | 29 |
| 4 | Realizace řešení | 30 |
| 4.1 | Hlavní program | 30 |
| 4.2 | Funkce | 30 |
| 4.2.1 | Načtení vstupu | 30 |
| 4.2.2 | Výpočet energie | 31 |
| 4.2.3 | Jednorozměrné grafy..... | 31 |
| 4.2.4 | Dvourozměrné grafy | 33 |
| 4.2.5 | Určení fáze..... | 34 |
| 4.3 | Popis rozšiřitelnosti..... | 35 |
| 5 | Vyhodnocení řešení | 36 |
| 6 | Závěr | 38 |
| | Seznam literatury | 39 |
| A | Obsah CD..... | 41 |
| B | Vývojové schéma pro fázový diagram BaTiO ₃ | 42 |
| C | Fázový diagram BiFeO ₃ , vizualizace A3..... | 43 |

Seznam obrázků

| | |
|--|----|
| Obrázek 1 – Typy elementárních buněk pro kubický systém [15] | 16 |
| Obrázek 2 – Roviny s různým Millerovým indexem v kubické struktuře [17]..... | 17 |
| Obrázek 3 – Sedm druhů mřížky [18] | 17 |
| Obrázek 4 – Kubická perovskitová struktura ABO_3 [12]..... | 18 |
| Obrázek 5 – Pozice iontů v tetragonálním $BaTiO_3$ [12] | 20 |
| Obrázek 6 - Schéma krystalové struktury $BiFeO_3$, dva krystaly ve směru [111] [19]. .. | 21 |
| Obrázek 7 – zjednodušený návrh posloupnosti parametrizace vizualizace | 26 |
| Obrázek 8 – Screenshot aplikace | 28 |
| Obrázek 9 – Vizualizace komponent polarizace P1, P2 | 29 |
| Obrázek 10 – Komponenty polarizace P1, P2, P3 | 32 |
| Obrázek 11 – ukázka fázového diagramu ve směru [100]..... | 33 |
| Obrázek 12 – prostorový graf vlastnosti P1 | 34 |
| Obrázek 13 – vygenerovaný fázový diagram | 36 |
| Obrázek 14 –fázový diagram [2] | 36 |
| Obrázek 15 – vygenerovaný obrázek, polarizace ve směru [101]..... | 37 |
| Obrázek 16 – polarizace ve směru [101] [2]..... | 37 |

Seznam zkratek a termínů

| | |
|--------------------|---|
| BaTiO ₃ | Titaničitan barnatý |
| BiFeO ₃ | Bismuth ferrite |
| PZT | Piezoelectric Translator |
| IDE | Integrated Development Environment |
| BFGS | Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (metoda) |
| CG | Conjugate gradient (metoda) |

1 Úvod

Fenomenologické potenciály jsou užitečné pro popis aplikačně zajímavých vlastností feroelektrických materiálů. Vycházejí z mikroskopických znalostí o materiálu, ale zároveň jsou dostatečně jednoduché, aby umožnily analytické výpočty, které vedou k pochopení materiálových vlastností, zároveň jsou vhodné pro numerické simulace velkých oblastí materiálu. Taková simulace umožňuje pochopení vlivu různých rozhraní (např. tzv. doménových stěn).

Cílem této bakalářské práce je realizace skriptu, který umožní vykreslovat několik různých druhů diagramů pro sledované vlastnosti feroelektrických materiálů, které jsou popsány pomocí tzv. Landau-Devonshire fenomenologického potenciálu. Skript je určený k vizualizaci pro materiály BaTiO_3 a BiFeO_3 , přičemž by měl být připraven na možnost rozšíření o další materiály, za předpokladu, že uživatel disponuje potřebným tvarem potenciálu. Požadovanými typy diagramů jsou:

- graf zobrazující vlastnosti materiálu v závislosti na jedné zvolené veličině
- fázový diagram
- trojrozměrný obrázek zvolené vlastnosti v závislosti na dvou veličinách

Parametry diagramů jsou dány uživatelským vstupem v rozhraní příkazové řádky, pro kterou je nástroj navržen. Uživatel nejprve zvolí materiál, poté typ grafu a nakonec přiřadí osám veličiny, na jejichž základě bude proveden výpočet. Kód programu by měl být popsán pro případné budoucí úpravy, k tomuto účelu poslouží nástroj ke zhotovení dokumentace Sphinx [4].

Pro tuto práci jsem se rozhodl především proto, že jsem se chtěl naučit používat programovací jazyk Python, který je dle mého názoru pro svou víceúčelovost a systematickosti důležitým nástrojem vývojáře a jeho znalost je prakticky uplatnitelná v budoucím profesním životě. V průběhu práce jsem měl navíc možnost nahlédnout do pro mě nového oboru a rozšířit si tak všeobecný rozhled.

Bakalářská práce je rozčleněna na šest kapitol. Druhá kapitola se zaměřuje na teoretické informace o materiálech BaTiO_3 a BiFeO_3 a jejich využití v praxi, dále jsou zde vysvětleny některé základní pojmy, které jsou potřebné pro realizaci nástroje. V kapitole

tři je popsán návrh aplikace, zvolené metody a prostředky. Čtvrtá kapitola je věnována konkrétní implementaci navrženého řešení. Pátá kapitola obsahuje zhodnocení funkčnosti nástroje vzhledem k vizualizacím z publikace [2]. V závěru jsou shrnuty výsledky práce a dosažení dílčích cílů.

2 Feroelektrické materiály, jejich vlastnosti a popis

Tato část práce je věnována seznámení s fakty, které jsou důležité pro další porozumění textu. Popisuje materiály, pro které je konečný program napsán, jejich vlastnosti a využití v praxi, čímž i dále přibližuje motivaci pro realizaci aplikace. Kromě samotných materiálů je zde ve stručnosti vysvětlen způsob popisu krystalových struktur a fází materiálů, který je v práci používán a význam energie, jejíž výpočet je stěžejní v procesu vizualizace fázových diagramů.

2.1 Feroelektřina

Feroelektřina je vlastnost některých nevodivých krystalů nebo dielektrik, které vykazují spontánní elektrickou polarizaci (oddělení centra kladného a záporného elektrického náboje, čímž jedna strana krystalu získá náboj kladný a opačná záporný), směr polarizace může být změněn aplikací adekvátního elektrického pole [9].

2.2 Fenomenologický popis

Fenomenologie fyziky částic je součástí teoretické fyziky částic, která se zabývá aplikací teoretické fyziky na experimenty s vysokou energií. Fenomenologie tvoří most mezi matematickými modely teoretické fyziky a experimentální fyzikou částic tím, že vytváří kvantitativní předpovědi založené na teoretických modelech. Fenomenologie souvisí s filozofickým pojetím v tom, že tyto předpovědi popisují očekávané chování pro jevy ve skutečnosti [8].

2.3 Gibbsova volná energie

Gibbsova funkce je termodynamický potenciál, který lze použít k výpočtu maxima reverzibilní práce, která může být vykonána termodynamickým systémem při konstantní teplotě a tlaku. Stejně jako v mechanice, kde je snížení potenciální energie definováno jako maximální užitečná práce, kterou lze provést, mají i různé potenciály rozlišné významy. Pokles Gibbsovy energie je maximální množství práce, kterou lze extrahovat z termodynamicky uzavřeného systému bez roztažení.

Tohoto maxima je možné dosáhnout pouze v plně reverzibilním procesu. Pokud se systém reverzibilně změní z počátečního stavu na stav konečný, pokles volné energie se rovná práci, kterou systém odvádí vzhledem ke svému okolí, sníženou o práci tlakových sil [6].

Gibbsova energie (označovaná také jako G) je také termodynamický potenciál, který je minimalizován, když systém dosáhne chemické rovnováhy při konstantním tlaku a teplotě. Jeho derivace s ohledem na reakční souřadnici v systému zmizí v rovnovážném bodě. Jako taková je minimalizace G nezbytnou podmínkou pro spontánnost procesů při konstantním tlaku a teplotě [6].

Pro případ BaTiO₃ je k výpočtům použit následující vztah udávající Gibbsovu volnou energii. Velikost této energie závisí na termodynamické teplotě a aplikovaném elektrickém poli.

$$\begin{aligned} \Delta G = & \alpha_1 (P_1^2 + P_2^2 + P_3^2) + \alpha_{11} (P_1^4 + P_2^4 + P_3^4) \\ & + \alpha_{12} (P_1^2 P_2^2 + P_2^2 P_3^2 + P_3^2 P_1^2) \\ & + \alpha_{111} (P_1^6 + P_2^6 + P_3^6) \\ & + \alpha_{112} (P_1^4 P_2^2 + P_1^2 P_2^4 + P_2^4 P_3^2 + P_2^2 P_3^4 + P_3^4 P_1^2 \\ & + P_3^2 P_1^4) + \alpha_{123} P_1^2 P_2^2 P_3^2 - E_1 P_1 - E_2 P_2 - E_3 P_3 \end{aligned} \quad (1)$$

P_i vyjadřuje jednotlivé komponenty polarizace a E_i příslušné komponenty aplikovaného elektrického pole. Koeficienty α jsou teplotně závislé, jak je možné vidět v tabulce níže. Hodnoty koeficientů α pro titaničitan barnatý jsou známé, tudíž hodnoty komponent polarizace mohou být stanoveny pro danou teplotu a aplikované pole, provedením minimalizace ΔG.

| koeficienty | | jednotky |
|------------------|---|----------------------------------|
| α ₁ | 3.34 × 10 ⁵ (T – 381) | V m C ⁻¹ |
| α ₁₁ | 4.69 × 10 ⁶ (T – 393) – 2.02 × 10 ⁸ | V m ⁵ C ⁻³ |
| α ₁₁₁ | 5.52 × 10 ⁷ (T – 393) + 2.76 × 10 ⁹ | V m ⁹ C ⁻⁵ |
| α ₁₂ | 3.23 × 10 ⁸ | V m ⁵ C ⁻³ |
| α ₁₁₂ | 4.47 × 10 ⁹ | V m ⁹ C ⁻⁵ |
| α ₁₂₃ | 4.91 × 10 ⁹ | V m ⁵ C ⁻⁵ |

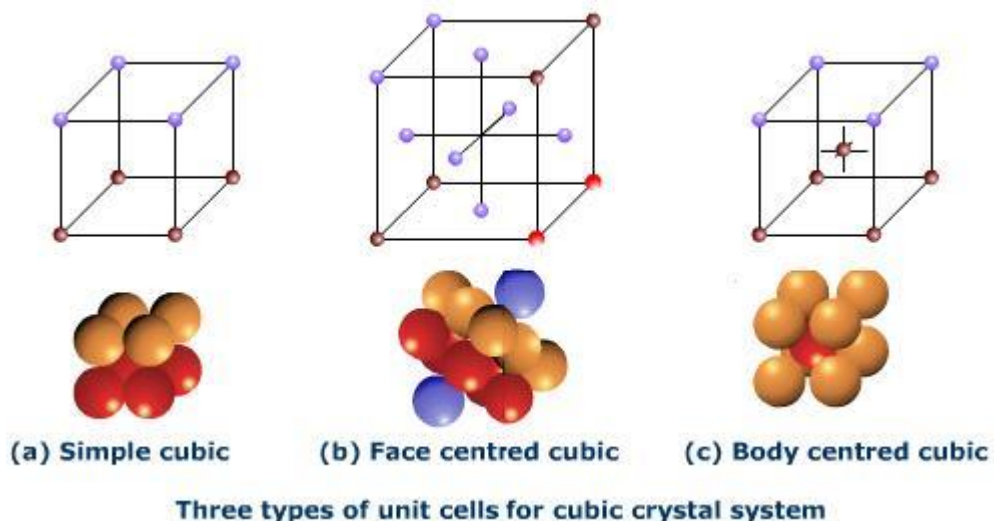
Tabulka 1 - Teplotně závislé koeficienty Gibbsovy energie [1]

2.4 Krystalová struktura a fáze

Existuje několik krystalových struktur, zejména perovskity, které vykazují feroelektrické chování, které je analogické k feromagnetismu (za nepřítomnosti elektrického pole během produkce nevykazuje polarizaci). Po aplikaci elektrického pole o dostatečné velikosti se krystal stane trvale polarizovaným. Tato polarizace může být převrácena dostatečně velkým opačným nábojem stejně jako u feromagnetu. Tento efekt nastává právě díky krystalové struktuře, nikoliv díky přítomnosti železných kovů, jak by se z názvu feroelektrika dalo předpokládat [39][13].

2.5 Elementární buňka

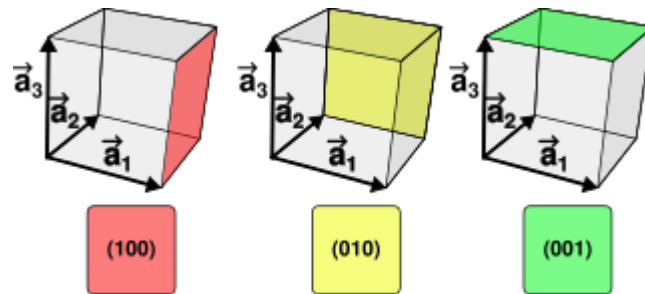
Krystalová struktura materiálu (uspořádání atomů u daného typu krystalu) je popisována pomocí elementárních buněk. Elementární buňka je box obsahující jeden nebo více atomů uspořádaných ve třech rozměrech, určují ji parametry mřížky, délky hran buňky (a , b , c) a úhly mezi nimi (α , β , γ), poloha atomů uvnitř buňky je popsána sadou (x_i, y_i, z_i) , měřenou od referenčního bodu mřížky. Běžně jsou pozice atomů vyjádřeny v souřadnicích, které jsou relativní vzhledem k délkám hran elementární buňky [14].



Obrázek 1 – Typy elementárních buněk pro kubický systém [15]

2.5.1 Millerova notace

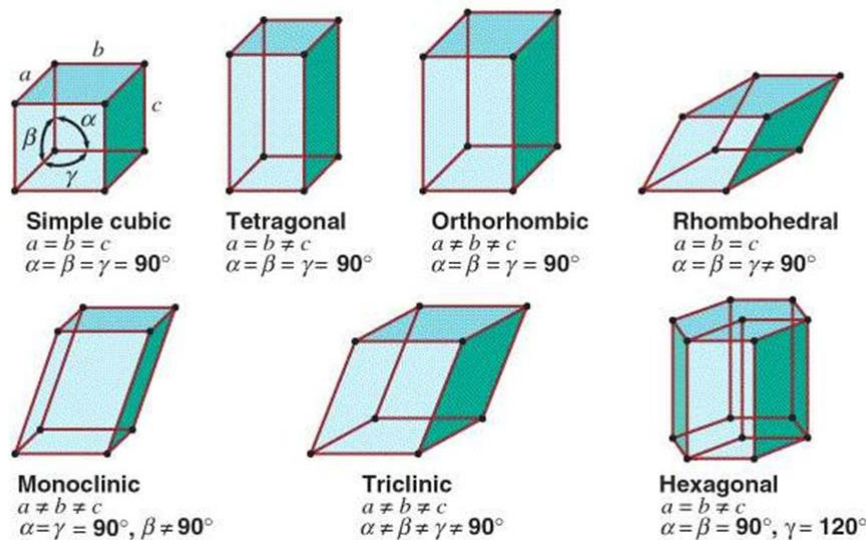
Vektory a roviny v krystalové mřížce jsou zapisovány třemi hodnotami Millerovy indexové notace. Tato notace používá indexy l , m , a n jako směrové parametry, které jsou navzájem kolmé. Pokud je jeden nebo více indexů nulových, znamená to, že rovina neprochází danými osami. Záporné indexy se značí pomocí horizontální čáry nad komponentou (např. $1\bar{2}3$) [16].



Obrázek 2 – Roviny s různým Millerovým indexem v kubické struktuře [17]

2.5.2 Krystalová mřížka

Struktury všech krystalů je dále možné klasifikovat dle symetrie elementární buňky mezi následujícími sedm druhů mřížky: triklinická, monoklinická, ortorombická, tetragonální, hexagonální, rombohedrální a kubická. Symetrie každého typu je popsána vztahem mezi stranami mřížky a , b a c a úhly alfa, beta a gama.



Obrázek 3 – Sedm druhů mřížky [18]

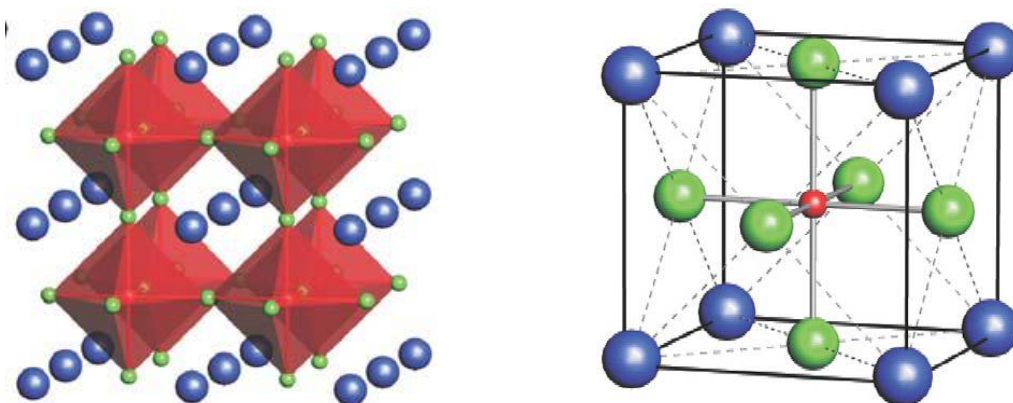
2.6 Titaničitan barnatý

Titaničitan barnatý, anorganická sloučenina s chemickým vzorcem BaTiO_3 , je feroelektrický materiál, který má podobu bílých krystalů. Nabízí mnohá využití díky svým nadprůměrným dielektrickým, piezoelektrickým a feroelektrickým vlastnostem. BaTiO_3 patří do rozsáhlé skupiny sloučenin nesoucí název perovskity. BaTiO_3 může být zhotoven užitím několika odlišných metod, zvolená metoda syntézy závisí na požadované charakteristice konečného použití materiálu a má významný vliv na strukturu a vlastnosti materiálu [12].

2.6.1 Struktura

BaTiO_3 se řadí svou strukturou mezi perovskity, které získali své jméno po minerálu perovskit (CaTiO_3), vyznačují se obecným vzorcem ABO_3 . Obecná krystalová struktura je jednoduchá krychle, kde A je větší kationt v rohu, B menší kationt ve středu krychle a aniont, obvykle kyslík, ve středu ploch ohraničujících krychli. A může být jedno vazebný, dvou vazebný nebo tří vazebný kov, zatímco B je pětivazný, čtyřvazný nebo tří vazebný prvek.

Geometrické uspořádání iontů v mřížce je velmi důležitým faktorem, který určuje typ struktury. Perovskitová struktura může být vnímána jako třírozměrná konstrukce složená z BO_6 oktaedrů nebo je možné na ní pohlížet jako na krychlové uspořádání tvořené z A a O iontů, přičemž ionty B se nacházejí v centru této soustavy [12].



Obrázek 4 – Kubická perovskitová struktura ABO_3 [12]

Do skupiny perovskitů neřadíme pouze sloučeniny s ideální kubickou mřížkou, ale také všechny sloučeniny se strukturou, která může být od ideální mřížky odvozena pomocí malého zkreslení mřížky nebo vynecháním některých atomů. Do skupiny perovskitů řadíme například i velký počet dvojitých fluoridů, jako KMgF_3 , KZnF_3 a další.

2.6.2 Vlastnosti

Mezi ostatními feroelektrickými materiály je BaTiO_3 velmi užitečný a technologicky důležitý materiál, díky jeho feroelektrickému chování, které vykazuje při a nad teplotou 393 K. Další důležitou vlastností je vysoká hodnota polarizace, která je o několik řádů vyšší než u feroelektrik typu dihydrogenfosforečnanu vápenatého. Kromě svých feroelektrických vlastností je také excelentním fotorefraktivním materiálem.

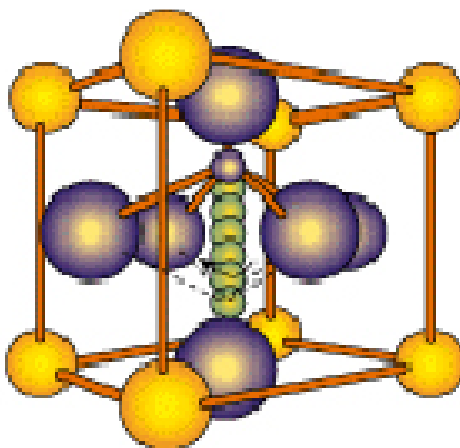
V čisté formě je BaTiO_3 elektrickým izolantem. Dopováním malým množstvím kovů, především skandiem, yttriem, neodymem atd. se stane polovodivým. Jako polovodič vykazuje vlastnost pozitivního teplotního koeficient odporu v polykrystalické formě, což znamená, že při určité teplotě, zvané Curie teplota, materiál vykazuje zvýšení odporu typicky o několik řádů. Teplota Curie může být do jisté míry ovlivněna pomocí příměsí [11].

2.6.3 Strukturální fázové přechody

Feroelektrické vlastnosti BaTiO_3 jsou spojeny s řadou tří fázových přechodů. Curie teplota BaTiO_3 je 393 K, nad touto teplotou je původní kubická struktura stabilní až do 1733 K, při vyšších teplotách se stává struktura hexagonální. Pokud je teplota nižší než Curie, probíhá přechod mezi kubickou, paraelektrickou a feroelektrickou fází tetragonální struktury. Do 278 K je struktura ortorombická a pod 183 K trigonální.

Při teplotě Curie jsou všechny ionty Ti v rovnovážné poloze ve středu svých oktaedrů, s poklesem teploty tyto ionty přeskakují mezi energeticky výhodnými pozicemi mimo střed oktaedru (Obrázek 4). Tento jev může být spojen se strukturálními změnami, prodlužováním, nebo zkracováním vazeb tak, že se krystalografická dimenze mřížky

mění s teplotou. Mechanismy odpovědné za tyto fázové přechody jsou obecně považovány za složité [11].



Obrázek 5 – Pozice iontů v tetragonálním BaTiO₃ [12]

2.6.4 Využití

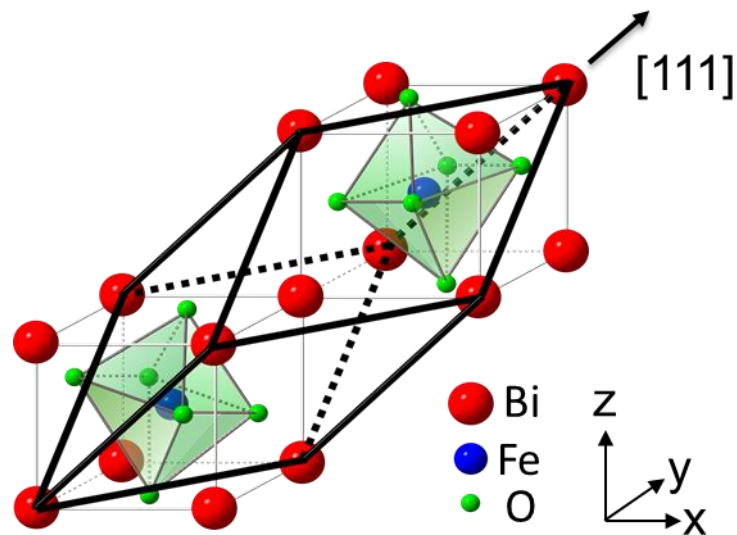
BaTiO₃ je dielektrická keramika používána k výrobě kondenzátorů. Hodnota dielektrické konstanty této keramiky dosahuje až 7000, přičemž jiné keramiky, jako například TiO₂, dosahují hodnot mezi 20 a 70. V úzkém teplotním rozsahu je dosažitelná hodnota až 15000. Nejběžnější keramiky a polymery mají tuto konstantu nižší než 10. Jako piezoelektrický materiál se používá do mikrofonů a převodníku, byl z velké části nahrazen zirkoničitan-titaničitanem olova, také známým jako PZT. BaTiO₃ v polykrystalické formě vykazuje kladný teplotní koeficient, díky čemuž je to materiál použitelný jako termistor a také do samoregulovatelných elektrických zahřívacích systémů. Pyroelektrické a feroelektrické vlastnosti BaTiO₃ se používají v některých typech nechlazených senzorů do termokamer. Prášek čistého BaTiO₃ je považován za klíčovou komponentu nového systému uchovávání energie pro použití v elektrických vozidlech.

2.7 Bismuth ferrite

Bismuth ferrite (BiFeO_3 , také často označovaný jako BFO) je anorganická chemická sloučenina s perovskitovou strukturou a jeden z nejslibnějších multiferoických materiálů. Neélova teplota a feroelektrická Curie teplota se pohybují vysoko nad pokojovou teplotou (přibližně 653 K a 1100K v odpovídajícím pořadí) [10].

2.7.1 struktura

Fáze BiFeO_3 při pokojové teplotě je rombohedrální spadající do prostorové grupy $R3c$, parametr mřížky perovskitové buňky je 3.965 Å, rombohedrální úhel nabývá hodnot 89.3–89.48°, feroelektrická polarizace nastává podél pseudokubického směru ($[111]_c$) o velikosti 90–95 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$. Jednotková buňka může být také popsána v hexagonální vztažné soustavě s hexagonální c-osou paralelní k diagonále perovskitové krychle tj. $[001]$ hexagonální $\parallel [111]$ pseudokubická. Parametry hexagonální mřížky jsou $a_{\text{hex}} = 5.58$ Å a $c_{\text{hex}} = 13.90$ Å. Koeficient teplotní roztažnosti není přímo lineární ani izotropní, udávané hodnoty se markantně liší, pohybujíc se mezi 6.5×10^{-6} a $13 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [7].



Obrázek 6 - Schéma krystalové struktury BiFeO_3 , dva krystaly ve směru $[111]$ [19].

Velmi důležitým strukturálním parametrem je úhel rotace kyslíkových oktaedrů. Tento úhel by byl 0° pro kubický perovskit s perfektně odpovídajícími velikostmi iontů.

Míra toho, jak dobře iont zapadne do perovskitové buňky je poměr $(r_{\text{Bi}} + r_{\text{O}})/l$, kde r je poloměr daného iontu a l délka hrany oktaedru. Když je tento poměr menší než jedna, musí se kyslíkový oktaedr zdeformovat tak aby se vměstnal do menší buňky. Pro BiFeO_3 je ω zhruba $11 - 14^\circ$ podél polární $[111]$ osy s přímo úměrným Fe-O-Fe úhlem (přibližně $154 - 156^\circ$). Úhel Fe-O-Fe je důležitý protože řídí magnetickou výměnu a orbitální překryv mezi Fe a O, a jako takový určuje Neélovu teplotu a vodivost [7].

2.7.2 Využití

BiFeO_3 , jakožto multiferoický materiál nabízí mnohá potenciální využití. Zbytková polarizace BiFeO_3 je velmi vysoká, $100 \mu\text{C}/\text{m}^2$ v polárním směru $[111]$, což je nejvyšší měnitelná polarizace ze všech perovskitů a je zhruba dvakrát vyšší než u nejvíce používaného materiálu ve feroelektrických pamětech, PZT. Navíc, na rozdíl od PZT, je to bezolovnatý materiál, což je ze zdravotního a bezpečnostního hlediska výhodou [7].

Výrobci feroelektrických pamětí jako například Fujitsu zvažují použití BiFeO_3 jako potenciální aktivní materiál pro další generaci paměťových zařízení. Aby se mohla taková aplikace uskutečnit, musí být odstraněny některé překážky: 1) vyšší vodivost (tím pádem také dielektrické ztráty), 2) jeho tendence k vyčerpání, 3) zdá se, že se teplotně rozkládá při určitém napětí [7].

Další možností je využití vyzářování THz, které je údajně pozorováno při střetu BiFeO_3 s femtosekundovým laserovým paprskem. Toto záření je momentálně předmětem zájmu pro mnohé aplikace od telekomunikace až po bezpečnost. THz záření by mohlo poskytnout velmi rychlou (čas odezvy v pikosekundách), nedestruktivní metodu pro feroelektrické čtení z paměti. Další výhodou je, že při takto vysokých frekvencích odezvy je nenáchylný k únikům, čímž se automaticky zbavuje jedné z hlavních překážek k implementaci, jakožto feroelektrického paměťového materiálu [7].

Hlavní směr aplikovaného výzkumu kolem BiFeO_3 jsou magnetoelektrické a spintronické aplikace. Nejzajímavější z těchto aplikací jsou paměti, do kterých může být zapisováno pomocí napětí, a čtení z nich probíhá použitím magnetického pole [7].

Použití napětí k zapisování má následující výhody: 1) může být implementováno v pevných obvodech bez mobilních částí, 2) nízké energetické nároky, 3) napěťové

nároky se automaticky snižují s větší tloušťkou materiálu. Čtení paměti magneticky má tu výhodu, že je nedestruktivní na rozdíl od přímého feroelektrického čtení, které vyžaduje změnu polarizace [7].

Aby takové paměti mohly fungovat, musí být magnetický stav: 1) elektricky měnitelný, 2) magneticky čitelný. První podmínku BiFeO_3 splňuje, jelikož jednoduchá plocha jeho antiferomagnetických domén je ve vzájemném vztahu s polárním směrem a otočení polarizace má za následek otočení podmřížky magnetizace, což znamená, že magnetický stav vzorku může být změněn napětím. Na druhou stranu, druhá podmínka není přímo splněna, protože antiferomagnetické (nebo přinejlepším, slabě nakloněné antiferomagnetické) domény nelze jednoduše číst [7].

3 Návrh řešení

Kapitola shrnuje jednotlivé dílčí kroky vedoucí k realizaci finální funkční aplikace. Je zde popsána a zdůvodněna volba softwarových prostředků, způsob členění kódu programu, výběr vhodných datových struktur, komunikace s uživatelem a především možnosti řešení problémů při optimalizaci fenomenologického potenciálu.

3.1 Prostředky

K vývoji aplikace byl určen programovací jazyk python, který je pro tuto práci vhodný z několika důvodů. Python lze zdarma nainstalovat na většině běžných platformách (Unix, Windows, Mac OS), přičemž ve většině distribucí systému Linux je součástí základní instalace, bývá řazen mezi tzv. skriptovací jazyky, ale umožňuje i tvorbu rozsáhlých aplikací s grafickým uživatelským rozhraním.

V Pythonu je možné používat objektově orientovaný přístup i procedurální, právě druhé zmíněné paradigma je vhodné pro řešení zadaného úkolu, jehož podstata je založena především na opakovaných výpočtech a následující prezentaci dat uživateli v požadované formě.

Další výhodou Pythonu je knihovna matplotlib, která poskytuje potřebné kvalitní prostředky pro vykreslování grafů, podobné placenému softwaru MATLAB. Celkově Python disponuje velkým množstvím knihoven, použitelných pro vědeckou, matematickou a výzkumnou činnost. Pro potřeby aplikace byla nainstalována platforma Anaconda, která zahrnuje veškeré populární balíčky pro Python a není tedy nutné je jednotlivě ručně instalovat, čímž je ušetřeno mnoho práce.

Jako vývojové prostředí byl zvolen PyCharm vyvinutý Českou společností JetBrains. Toto IDE má všechny potřebné atributy pro tvorbu aplikace v Pythonu. Poskytuje přehledný grafický debugger, nástroj pro testování a podporuje integraci s verzovacími systémy, díky čemuž je možné změny v projektu odeslat jedním kliknutím například do vzdáleného repositáře. Jako repositář slouží pro tuto práci GitLab Technické univerzity v Liberci.

3.2 Členění kódu

Kód Aplikace je rozdělen mezi dva soubory. Hlavním souborem je skript pojmenovaný *feroelectrics_engine.py*, který obsahuje veškerou logiku programu od zpracování vstupu až po vykreslení grafu a druhým souborem je modul *potentials_library.py*, obsahující tvary potenciálu pro BaTiO_3 a BiFeO_3 .

3.2.1 Hlavní skript

Řídící skript je rozdělen na části podle běžných konvencí. Kód uvozuje hlavička informující o požadovaném interpretu a kódování, dále pokračuje deklarací všech konstant, řadou funkcí a nakonec hlavním programem.

V návrhu je třeba zohlednit budoucí rozšíření programu, a proto musí být vhodně zvoleny datové struktury nesoucí informace o materiálech a dalších datech nezbytných pro vykreslování grafů. Splněním této podmínky se zajistí, že skript bude pracovat s novými daty stejně jako s těmi, pro které byl původně napsaný.

Pro tento účel byly zvoleny slovníky (umístěné v deklarační části), které jsou globálními proměnnými skriptu a obsahují důležité informace pro konečné vykreslování, jako například jednotky jednotlivých veličin, označení veličin, na kterých je daný potenciál závislý, vlastnosti, které mohou být sledovány, ale také způsob, jakým se mají které vlastnosti vykreslovat (šířka křivek u jednorozměrných grafů apod.).

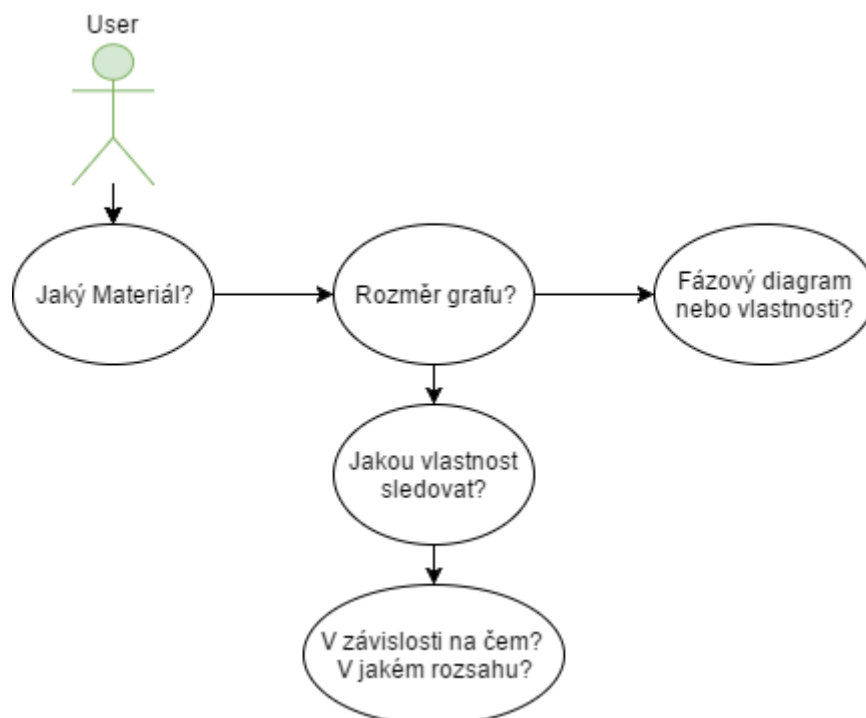
Prvním důležitým slovníkem je slovník materiálů, kde klíčem jsou hodnoty datového typu integer číslované od nuly a hodnotou další slovník, obsahující data o daném materiálu. Slovník jednoho materiálu má následující strukturu:

- Klíč „dependencies“ – hodnotou je list textových řetězců, které označují veličiny, na kterých může být potenciál materiálu závislý, momentálně je v potenciálech zahrnuta závislost na teplotě (T) a aplikovaném elektrickém poli (E).
- Klíč „properties“ – hodnotou je opět list textových řetězců, které označují zkoumané vlastnosti materiálu (Komponenty polarizace P1, P2, P3, rotace kyslíkových oktaedrů atd.)

- Klíč „init“ – hodnotou je list tuplů o třech hodnotách. Tyto tři hodnoty označují výchozí bod pro optimalizační funkci
- Klíč „name“ – hodnotou je textový řetězec nesoucí jméno materiálu. Tento string je především určený pro titulek ke grafu.

Slovník *u_input* je určen k uchování uživatelského vstupu, uživatel zadává následující parametry, které jsou přiřazeny odpovídajícím klíčům:

- „material“ – index zvoleného materiálu
- „dimension“ – počet závislostí v grafu (jedna nebo dvě)
- „type“ – v případě dvou závislostí volí uživatel mezi trojrozměrným grafem pro vybranou vlastnost a dvourozměrným grafem – standardním fázovým diagramem.
- „properties“ – sledované vlastnosti
- „dependency“ – závislost pro osu x (analogicky i klíč pro osu y)
- „x_range“ – rozsah hodnot na ose x
- „x_n_points“ – počet diskrétních bodů vynesných na dané ose
- „E_direction“ – směr aplikovaného elektrického pole



Obrázek 7 – zjednodušený návrh posloupnosti parametrizace vizualizace

Další slovník nese název *units* a obsahuje vždy dvojici veličina, jednotka (v pořadí klíč, hodnota). Uloženy jsou jednotky pro polarizaci, elektrické pole a teplotu.

3.2.2 Knihovna potenciálů

Modul *potentials_library* má v sobě několik funkcí zastupujících tvar potenciálu pro konkrétní materiály. Jednodušší potenciál BaTiO₃ pokrývá jediná funkce, spolu s funkcí na výpočet teplotně závislých parametrů viz tabulka x. V případě BiFeO₃ je potenciál rozčleněn mezi sedm funkcí, přičemž jedna z nich je propojovací a volá v sobě ostatních šest. Potenciály jsou netriviální polynomiální výrazy, jejichž sestavení není součástí této práce a byly poskytnuty vedoucím práce [3].

```
def f_l_E(px, py, pz, prm, E1=0, E2=0, E3=0):
    return prm[0] * (px ** 2 + py ** 2 + pz ** 2) + \
           prm[1] * (px ** 4 + py ** 4 + pz ** 4) + \
           prm[2] * (px ** 2 * py ** 2 + py ** 2 * pz ** 2 + \
                    px ** 2 * pz ** 2) + \
           prm[3] * (px ** 6 + py ** 6 + pz ** 6) + \
           prm[4] * (px ** 4 * (py ** 2 + pz ** 2) + \
                    py ** 4 * (px ** 2 + pz ** 2) + \
                    pz ** 4 * (px ** 2 + py ** 2)) + \
           prm[5] * (px ** 2 * py ** 2 * pz ** 2) - \
           (E1 * px) - (E2 * py) - (E3 * pz)
```

Zdrojový kód 1 – ukázka funkce pro potenciál BaTiO₃

3.2.3 Parametry potenciálu BiFeO₃

Parametry potenciálu BiFeO₃ jsou uloženy v souboru, není vhodné je deklarovat v samotném kódu vzhledem k jejich velkému počtu, textový soubor je pojmenován *bfo_params.txt*.

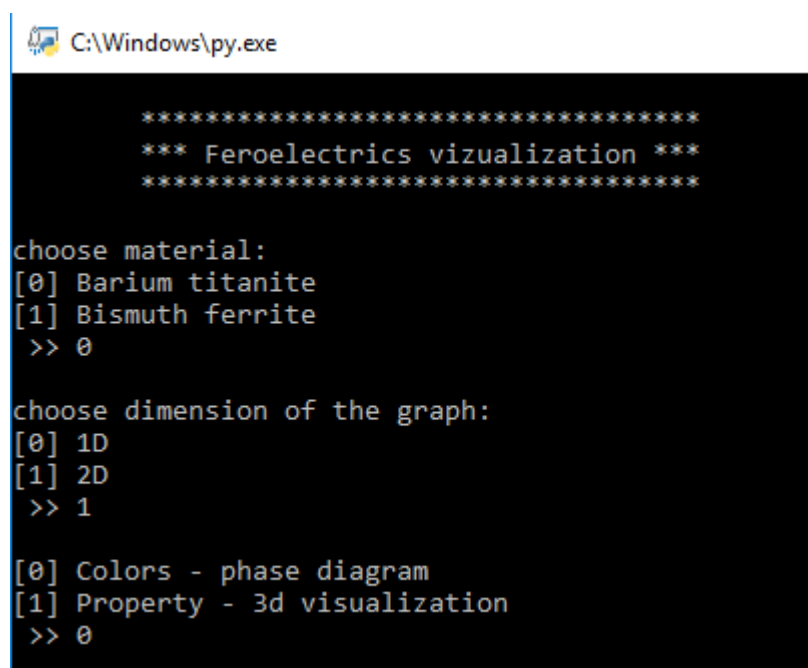
3.3 Rozhraní příkazové řádky

Nástroj je určen k používání v příkazové řádce a komunikuje s uživatelem textově prostřednictvím standardního výstupu a získává data pomocí vestavěné funkce *input*, která načítá zadaný řádek.

Po spuštění se objeví úvodní text s názvem programu – *feroelectrics visualisation* a program začne vybízet uživatele k vyplnění série dotazů (viz Obrázek 7). Uživateli je ve většině případů prezentováno menu možností, ze kterého může volit zadáním čísla

příslušné položky, v ostatních případech doplňuje vlastní hodnoty (například název pro uložení grafu do souboru, rozsahy hodnot na osách apod.).

Po vyplnění všech dotazů se do terminálu vypíše hláška o probíhajícím výpočtu. Doba výpočtu se odvíjí od zadaného počtu diskretních bodů os grafu, který udává, kolikrát se provede optimalizace potenciálu. Tento výpočet může trvat i několik minut při vyšším rozlišení u dvojrozměrných grafů. Jakmile skončí výpočet, otevře se uživateli samostatné okno se zadaným grafem. Po zavření okna s grafem informuje program o úspěšném uložení výsledku do souboru a zeptá se, zda se má ukončit.



```
C:\Windows\py.exe

*****
*** Ferroelectrics vizualization ***
*****

choose material:
[0] Barium titanite
[1] Bismuth ferrite
>> 0

choose dimension of the graph:
[0] 1D
[1] 2D
>> 1

[0] Colors - phase diagram
[1] Property - 3d visualization
>> 0
```

Obrázek 8 – Screenshot aplikace

3.4 Optimalizační algoritmus

Klíčový proces ve vizualizaci fázových diagramů je optimalizace potenciálu. Vykreslení každého bodu v grafu vyžaduje hodnotu minima potenciálu v aktuálních podmínkách, význam minima je vysvětlen v kapitole 2.3. K tomuto výpočtu je potřeba optimalizační funkce, knihovna *Sci-Py* nabízí ve svém modulu *optimize* několik implementací známých algoritmů.

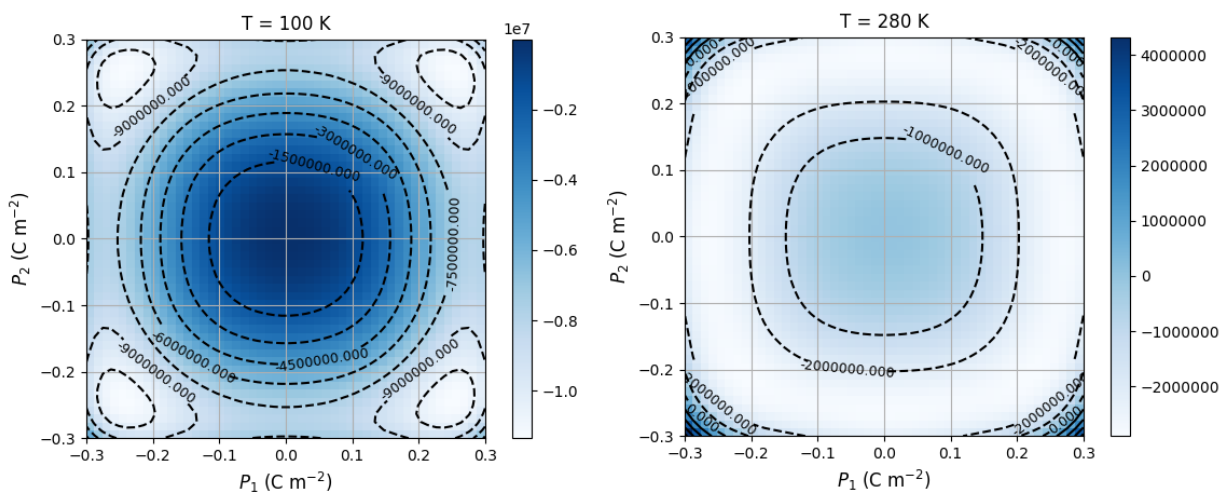
Základní funkce *fmin*, využívající Nelder-Mead algoritmus se ukázala jako nevhodná pro optimalizaci potenciálu především ze dvou důvodů, je pomalejší než algoritmy, které

používají k nalezení minima první a druhou derivace a v praxi nemusí vracet dobré výsledky u funkcí vyššího řádu.

První zvolenou funkcí byla *fmin_cg*, jejíž výsledek se ukázal příliš závislý na počátečním bodu optimalizace a k získání očekávaných výsledků bylo třeba generovat velké množství počátečních podmínek, což vedlo k výraznému zvýšení doby výpočtu. Nakonec byla vybrána funkce *fmin_bfgs* (implementace Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shannova algoritmu), která je vhodná pro řešení nelineárních optimalizačních problémů.

3.5 Počáteční bod optimalizace

K získání korektních výsledků optimalizace je nutné předat příslušné funkci počáteční bod, ze kterého bude minimum vyhledáváno. Takový bod by měl být ideálně v blízkosti hledaného minima. Jedním z přístupů je určit bod pro první výpočet a pro všechny další



Obrázek 9 – Vizualizace komponent polarizace P_1 , P_2 , konturové grafy ukazují hodnotu energie pro příslušné hodnoty polarizace (bílé místa jsou minima potenciálu, tmavě modrá místa reprezentují vysoké hodnoty energie)

kroky použít výstup předešlé optimalizace, tento způsob je nejméně časově náročný, ale negarantuje přesné výsledky. Jelikož se „poloha“ minima mění v závislosti na aktuálních podmínkách (směr aplikovaného elektrického pole, teplota), musí být optimalizační funkci předáno více počátečních podmínek a následně je třeba vyhodnotit, které nalezené minimum má nejnižší hodnotu. Tento proces popisuje diagram (B).

4 Realizace řešení

Kapitola je rozdělena na dvě části, první je věnována popisu některých důležitých funkcí hotového programu a ve druhé je vysvětleno, jak postupovat při rozšiřování skriptu o další potenciály nebo přidání nové závislosti ke stávajícím potenciálům.

4.1 Hlavní program

Hlavní program obsahuje logiku na nejobecnější úrovni. Celý jeho kód je ve smyčce, která se provádí, dokud uživatel nedá pokyn k ukončení, na které je dotazován na konci každého cyklu. Nejprve se zavolá funkce *get_input*, která získá od uživatele veškeré parametry pro vizualizaci, poté se volá adekvátní vykreslovací funkce.

4.2 Funkce

Funkčnost skriptu je možné rozdělit na dva základní úkoly, podle nichž se funkce dělí. Jedna skupina obstarává zpracování uživatelského vstupu a druhá je zaměřena na výpočet a vizualizaci.

4.2.1 Načtení vstupu

Načtení vstupu zajišťuje celkem dvanáct různých funkcí, jedna z nich, funkce s názvem *get_input*, volá všechny ostatní a určuje sekvenci, v jaké budou data do slovníku *u_input* načítány.

Vzhledem k velkému počtu funkcí představím jednu zástupnou, na které je možné demonstrovat realizaci načítání vstupu, přičemž ostatní funkce jsou implementovány analogicky s rozdílem datového typu a formátu načítaných hodnot.

Funkce *load_properties* slouží k určení vlastností potenciálu, které si uživatel přeje vykreslit do grafu, přijímá jeden parametr datového typu bool *one_property*. Tento parametr říká, zda se metoda volá pro vykreslování trojrozměrného grafu, v případě že je hodnota *True*, nedostane uživatel možnost zadat počet požadovaných vlastností, ale zvolí pouze jednu. Funkce nejprve zjistí ze slovníku *u_input*, jaký materiál uživatel zvolil a poté vypíše na obrazovku všechny možnosti vlastností daného materiálu. V dalším

kroku funkce načte počet vlastností, které chce uživatel momentálně sledovat (tolikrát se zobrazí výzva k načtení vlastnosti). Podle počtu vlastností se vytvoří list validních hodnot, které uživatel může zadat (zadáva pouze číslo položky), jestliže se načtené číslo nevyskytuje v tomto listu, vypíše se výzva k opakovanému zadání. V případě, že dojde k načtení neočekávaného formátu vstupu je zachycena výjimka *ValueError* a vypíše se hláška s instrukcemi k zadání validního vstupu. Funkce nevrací hodnotu a vkládá do slovníku list zvolených vlastností.

4.2.2 Výpočet energie

Funkce *count_energy* vypočítává hodnoty vlastností materiálu v místě nejnižší energie pomocí optimalizační funkce. Parametry jsou list inicializačních bodů, aktuální hodnota na ose x a aktuální hodnota na ose y (pokud se jedná o dvourozměrné grafy, jinak je hodnota y ve výchozím stavu 0).

Před vlastní optimalizací je třeba připravit parametry minimalizační funkce, k tomuto účelu slouží funkce *set_parameters_for_optimization*. Ta identifikuje dle slovníku *u_input*, které proměnné se má přiřadit jaká hodnota (jaké ose přiřadil uživatel, kterou veličinu). Dále se v případě BaTiO_3 zavolá funkce *temperature_parameters_batio3* z modulu *potentials_library*, která vypočítá teplotně závislé parametry. Pro BiFeO_3 se načítají další parametry ze souboru funkcí *BTO_file_args*.

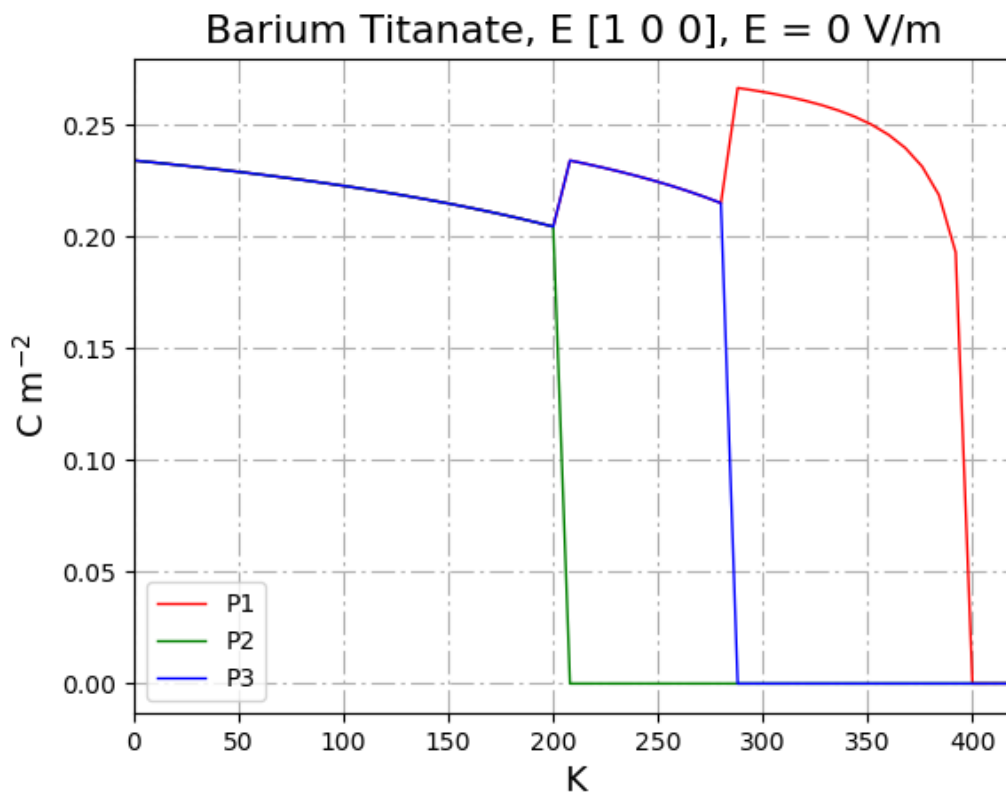
Po přípravě všech parametrů se zavolá funkce *fmin_bfgs* na příslušném potenciálu, optimalizace se provede tolikrát, kolik je inicializačních bodů v listu *init*. Optimalizační funkce vrací hodnotu energie a „souřadnice“ tohoto minima, pro BaTiO_3 dostaneme komponenty polarizace (P1, P2, P3) a v případě BiFeO_3 komponenty polarizace, rotace kyslíkových oktaedrů a mechanické deformace (P1, P2, P3, A1, A2, A3, exx, eyy, ezz, eyz, exz, exy). Po získání minima pro všechny inicializační body se vybere nejnižší hodnota energie a funkce vrátí list komponent, které byly výsledkem minimalizace.

4.2.3 Jednorozměrné grafy

Vykreslování jednorozměrných grafů zajišťuje funkce *print_Id*, která nepřijímá žádné vstupní parametry a nic nevrací, slouží k zaobalení logiky procesu.

Nejprve se podle zadaného rozsahu osy a počtu požadovaných diskretních bodů určí krok výpočtu, následně se v každém kroku zavolá funkce *count_energy*, momentální hodnota proměnné řídící cyklus se uloží do listu *x_values* a výsledek minimalizace do listu *y_values*. Jelikož je výsledek minimalizace list hodnot (počet je daný materiálem), přičemž každou z nich chceme vykreslit zvlášť, vytvoří se nový list listů *properties*, do kterého je oddělena každá komponenta minimalizace v podobě vlastního listu (př. [list P1, list P2, list P3])

Následuje samotné vykreslení hodnot do grafu. Pro každý list v listu *properties* se zavolá funkce z modulu *pyplot* (knihovna *matplotlib*) *plot*, jejíž parametry jsou list hodnot pro osu x (*x_values*), list hodnot pro osu y (*properties[i]*) a další parametry ovlivňující vizuální podobu grafu. Pomocí funkcí z modulu *pyplot* se vykreslí popisky os, titulek, mřížka a další prvky dle zadání. Nakonec se obrázek uloží do souboru a zobrazí uživateli.

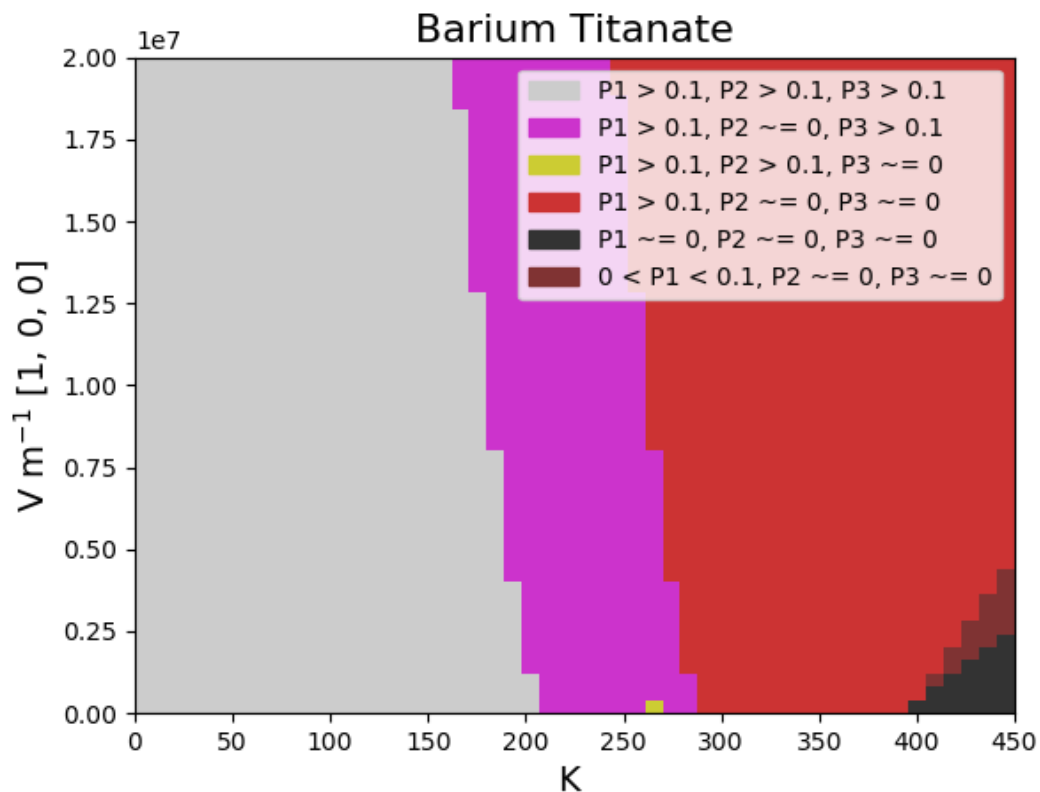


Obrázek 10 – Komponenty polarizace P1, P2, P3 pro minimum potenciálu v závislosti na teplotě

4.2.4 Dvourozměrné grafy

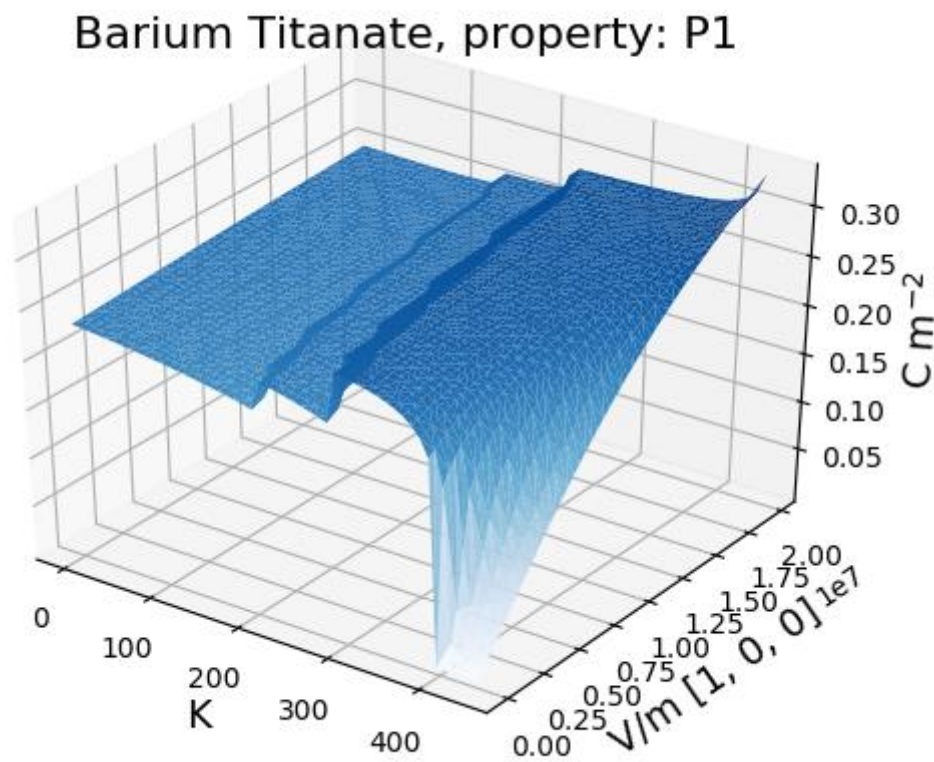
V této podkapitole je popsána funkce pro vykreslování grafů závislých na dvou proměnných *print_2d*. Tato funkce má dvě možnosti vykreslení, první je fázový diagram, kde jsou barevně odlišeny fáze materiálu vzhledem k teplotě nebo aplikovanému elektrickému poli (Obrázek 11) a druhou je graf, zobrazující jednu vybranou vlastnost v prostoru (Obrázek 12).

Funkce *print_2d* opět nepřijímá žádné parametry a nemá návratovou hodnotu. Nejprve se inicializuje matice *color_matrix* o velikosti $m \times n$, kde m je počet požadovaných diskrétních bodů na ose x a n je počet diskrétních bodů na ose y. Každý prvek matice je list o velikosti 3 (R, G, B). Dále se škálují osy podle zadaných hodnot (řeší funkce *make_axis*), poté se v cyklu provádí optimalizace pro všechny hodnoty na osách skrze funkci *count_energy* analogicky jako u jednorozměrných grafů, s tím rozdílem, že obdrží dva měnící se parametry (hodnota na ose x, hodnota na ose y).



Obrázek 11 – ukázka fázového diagramu ve směru [100]

V případě, že uživatel zvolil fázový diagram, předá se výsledek optimalizace funkci `get_color`, určující fázi. Barva se uloží do matice `color_matrix` na aktuální index. Pokud je zvoleným typem vizualizace vykreslení jedné vlastnosti v prostoru, uloží se pouze zvolená komponenta do listu `property`. K vykreslení fázového diagramu je použita funkce `imshow`, přejímající jako vstupní parametr matici `color_matrix`. Vykreslení prostorového grafu zajišťuje funkce `plot_trisurf`, která přebírá jako parametry tři jednorozměrná pole (hodnota x, hodnota y, `property`). Obrázek se uloží do souboru a následně zobrazí uživateli.



Obrázek 12 – prostorový graf vlastnosti P1

4.2.5 Určení fáze

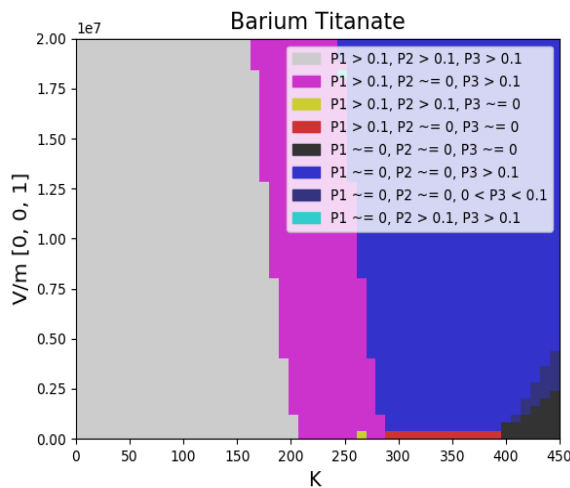
K určení fáze v daném bodě grafu slouží funkce `get_color`. Fáze je vyjádřena barvou, která se spočítá z jednotlivých komponent polarizace vrácených optimalizací. Hodnota každé komponenty polarizace je zařazena do intervalů ($0 - low_threshold$, $low_threshold - high_threshold$, $high_threshold - nekonečno$), přičemž každý interval má svou hodnotu mezi nulou a jedničkou vyjadřující barvu, následně jsou všechny komponenty polarizace sloučeny do tříprvkového listu `colors` ($P1 = R$, $P2 = G$, $P3 = B$, `colors = [R, G, B]`), tento systém lze pozorovat v legendě fázového diagramu (Obrázek 11).

4.3 Popis rozšiřitelnosti

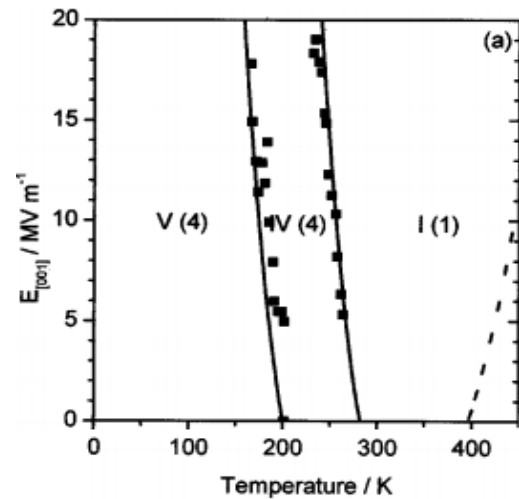
Vzhledem k tomu, že by skript měl být univerzálním nástrojem pro vizualizaci feroelektrik, je důležitá možnost jeho rozšíření o další materiály. Takové rozšíření vyžaduje fenomenologický potenciál, který musí být přepsán do podoby funkce a následně vložen do modulu *potentials_library.py*, pro materiál je poté potřeba napsat slovník (viz kapitola 3.2.1) a přidat ho do slovníku materiálů. Pokud se do skriptu přidává nová proměnná, na které potenciál závisí, je nutné přidat do slovníku *units* jednotku veličiny v podobě textového řetězce. Dále musí vzniknout ve slovníku *u_input* nový klíč, do kterého se bude veličina při zadávání ukládat. V závislosti na tvaru nového potenciálu a jeho vstupních parametrů je třeba přidat novou větev do funkce *set_parameters_for_optimization* a připravit vhodně parametry pro konkrétní potenciál.

5 Vyhodnocení řešení

K ověření správnosti řešení je použito srovnání výsledků se známými grafy z publikace [2]. Porovnávat budu korektnost dat u fázových diagramů BaTiO₃, výpočet byl proveden pro teplotu v rozmezí 0 až 450 K a elektrické pole do 20 MV m⁻¹ ve směru [100].



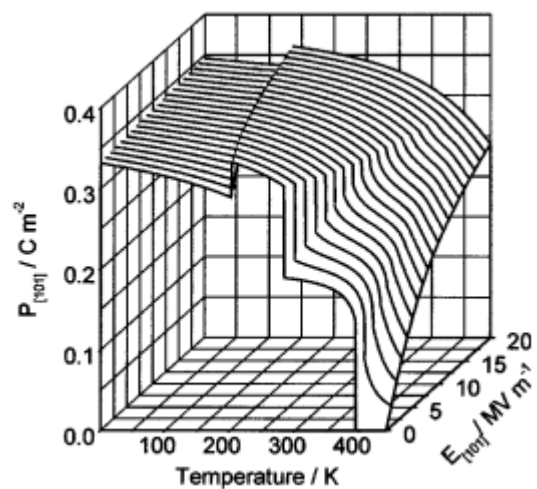
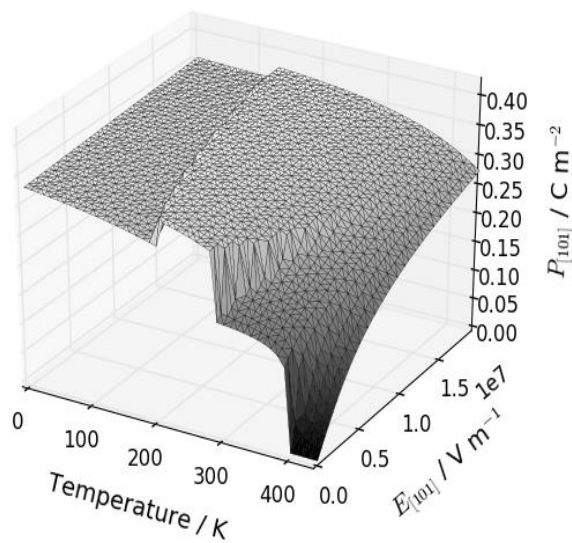
Obrázek 13 – Vygenerovaný fázový diagram



Obrázek 14 – Fázový diagram 39[2]

Na obrázku vlevo je možné vidět fázový diagram, který je výstupem z naprogramovaného nástroje, lze zde pozorovat několik nekonzistentních bodů pro nízké hodnoty elektrického pole a teplotu v rozmezí 250 K až 450 K, tyto body jsou důsledkem chyby v minimalizaci, kterou zapříčiňuje nedostatek vhodných počátečních bodů optimalizace blízko minima. Zvýšení počtu počátečních bodů by výrazně prodloužilo dobu výpočtu, z tohoto důvodu je výsledek dostatečným kompromisem mezi přesností a rychlostí, až na tuto chybu jsou výsledná data odpovídající.

Kromě dvourozměrných fázových diagramů byly vizualizovány i trojrozměrné grafy, kde je zobrazena polarizace jako funkce teploty a elektrického pole ve směru [101]. Přímé srovnání je vidět na obrázcích na následující straně, data odpovídají očekávaným hodnotám. Kontrola proběhla i pro vizualizace v ostatních směrech diskutovaných v článku [2] ([111], [001], [101]), na základě těchto srovnání je možné vytvořený nástroj a v něm použité metody, považovat za funkční, prezentující data s požadovanou kvalitou výstupní informace.



Obrázek 15 – Vygenerovaný obrázek, polarizace ve směru [101]

Obrázek 16 – Polarizace ve směru [101] [2]

6 Závěr

Úkolem této bakalářské práce bylo vyvinout nástroj, který umožní ověřovat vlastnosti fenomenologického potenciálu prostřednictvím fázových diagramů. Tohoto cíle bylo dosaženo vytvořením skriptu v jazyce Python s použitím existujících knihoven, především *matplotlib*, *SciPy* a *NumPy*.

Skript splňuje zadaná kritéria, komentovaná v úvodní kapitole. Program komunikuje s uživatelem skrze příkazovou řádku. Uživatel nejprve určí materiál, který chce zkoumat a dále zvolí mezi jednorozměrnou a dvourozměrnou formou vizualizace. Jednorozměrný graf ukazuje vlastnosti potenciálu v závislosti na jedné z vybraných veličin (teplota, elektrické pole). Dvourozměrná vizualizace umožňuje vykreslení vlastnosti v závislosti na dvou veličinách v prostoru a standardní fázový diagram. Běh programu je stabilní, jsou ošetřeny výjimky, které by mohl vyvolat nesprávný vstup od uživatele, finální verze kódu je zdokumentována pomocí nástroje Sphinx.

K minimalizaci potenciálu byla použita implementace metody BFGS, jak je popsáno v kapitole 3.4. Vhodnost metody a tedy i funkčnost nástroje byla ověřena srovnáním vypočtených dat s publikovanými daty [2].

Do budoucna se nabízí rozšíření aplikace o grafické rozhraní. Taková úprava je vzhledem ke specifickému účelu nástroje a jeho cílové skupině otázkou preferencí uživatele. Grafické rozhraní by pravděpodobně neurychlilo práci s nástrojem, ale mohlo by nabídnout lepší přehlednost a intuitivnější ovládání.

Seznam literatury

- [1] ONDREJKOVIČ, Petr. *Studium doménových struktur ve feroelektrickém BaTiO₃*. FJFI-ČVUT, 2008. Diplomová práce. Vedoucí práce Ing. Jiří Hlinka, Ph.D.
- [2] BELL, Andrew J. Phenomenologically derived electric field-temperature phase diagrams and piezoelectric coefficients for single crystal barium titanate under fields along different axes. *Journal of Applied Physics*. 2001, (89), 1-8.
- [3] MÁRTON, P., A. KLÍČ, M. PASCIAK a J. HLINKA. *Development of Landau potential for BiFeO₃*. 2016.
- [4] *SPHINX: Python documentation generator* [online]. [cit. 2016-10-14]. Dostupné z: <http://www.sphinx-doc.org/en/stable/>
- [5] ED.: FREDERICK SEITZ . *Solid state physics: advances in research and applications*. New York, NY [u.a.]: Academic Press, 1957. ISBN 01-260-7704-5.
- [6] PERROT, Pierre. *A to Z of thermodynamics*. New York: Oxford University Press, 1998. ISBN 01-985-6552-6.
- [7] CATALAN, Gustau a James F. SCOTT. Physics and Applications of Bismuth Ferrite. *Advanced Materials* [online]. 2009, (21) [cit. 2017-03-15]. Dostupné z: https://inside.mines.edu/~zhiwu/research/papers/E09_bfo.pdf
- [8] *KEK Theory Center: Phenomenology of Particle Physics* [online]. [cit. 2017-03-14]. Dostupné z: http://www2.kek.jp/theory-center/theory_e/groups/phenomenology/
- [9] *Encyklopedia Britannica: Ferroelectricity* [online]. [cit. 2017-03-14]. Dostupné z: <https://www.britannica.com/science/ferroelectricity>
- [10] CAI, Shengzhen. *Bismuth-containing multiferroics; Synthesis, structure and magnetic properties*. Chalmers, 2013.
- [11] *AZO Materials: Barium Titanate (BaTiO₃) - Properties and Applications* [online]. [cit. 2017-03-14]. Dostupné z: <http://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=2280>
- [12] VIJATOVIĆ, M. M., J. D. BOBIĆ a B. D. STOJANOVIĆ. *History and Challenges of Barium Titanate: Part I*. Institute for Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1, Belgrade, Serbia, 2008.
- [13] HOOK, J. R. a H. E. HALL. *Solid state physics*. 2nd ed. New York: Wiley, 1991. ISBN 978-047-1928-041.
- [14] *International Tables for Crystallography: Volume A, Space-group symmetry*. 2006.

- [15] *Simple cubic, face centered and body centered: Tutorials for Chemistry Learning* [online]. [cit. 2017-03-14]. Dostupné z: <http://chem-guide.blogspot.cz/2010/04/simple-cubic-face-centered-and-body.html>
- [16] ASHCROFT, Neil a David MERMIN. *Solid State Physics*. Harcourt: New York, 1976.
- [17] *Miller Index* [online]. [cit. 2017-03-14]. Dostupné z: https://en.wikipedia.org/wiki/Miller_index
- [18] *Earth: Minerals in Rocks* [online]. [cit. 2017-03-16]. Dostupné z: <http://www.earthgeologic.com/2016/06/minerals-in-rocks.html>
- [19] *Intech: Multifunctional Characteristics of B-site Substituted BiFeO3 Films* [online]. [cit. 2017-03-16]. Dostupné z: <https://www.intechopen.com/books/ferroelectrics-physical-effects/multifunctional-characteristics-of-b-site-substituted-bifeo3-films>

A Obsah CD

Příložené CD obsahuje adresář s aplikací, dokumentací a textem této práce ve formátu PDF.

App (adresář)

- ferroelectrics_engine.py
- potentials_library.py
- bfo_params.txt

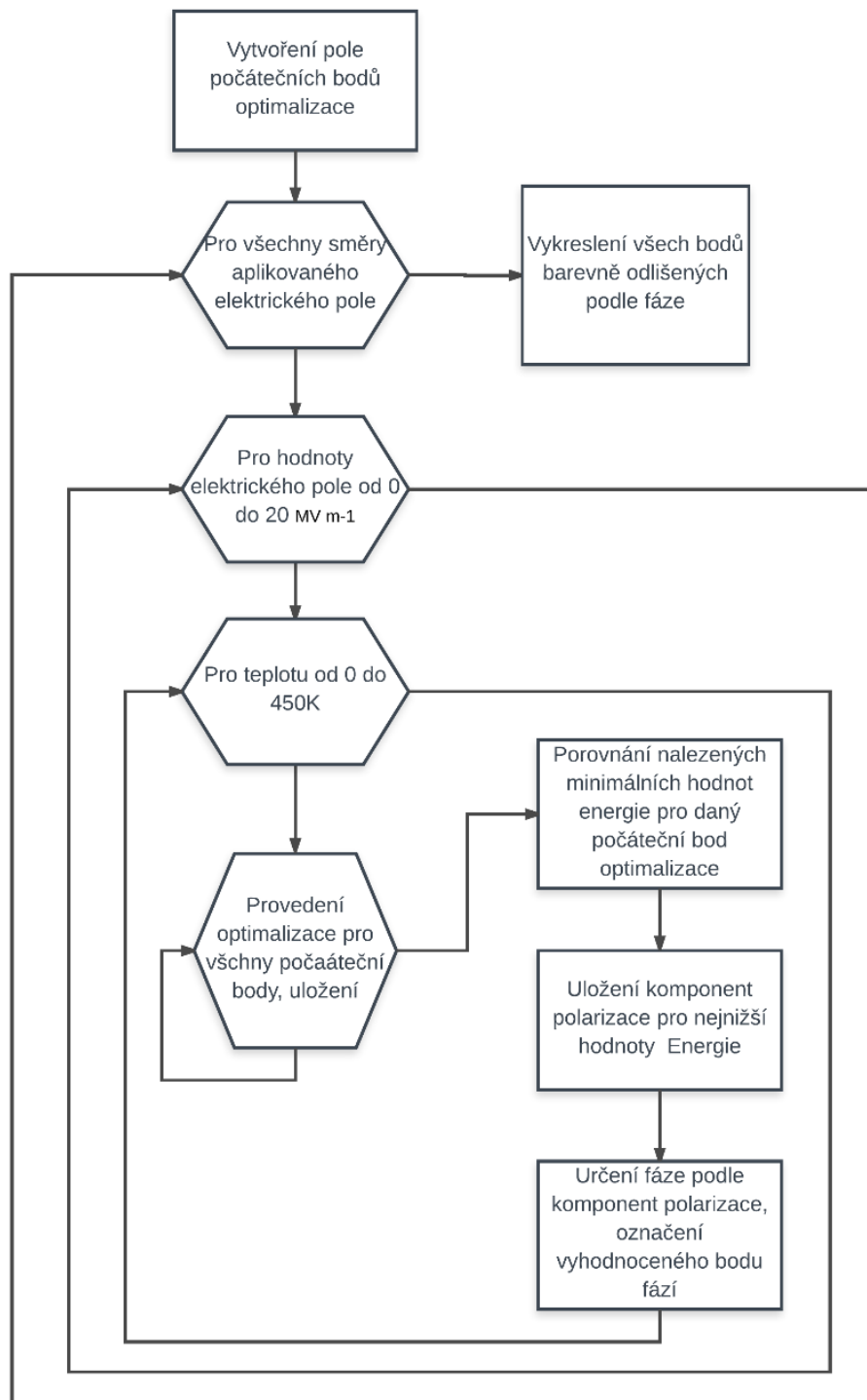
Doc (adresář)

- html (adresář) – obsahuje vygenerované html dokumenty

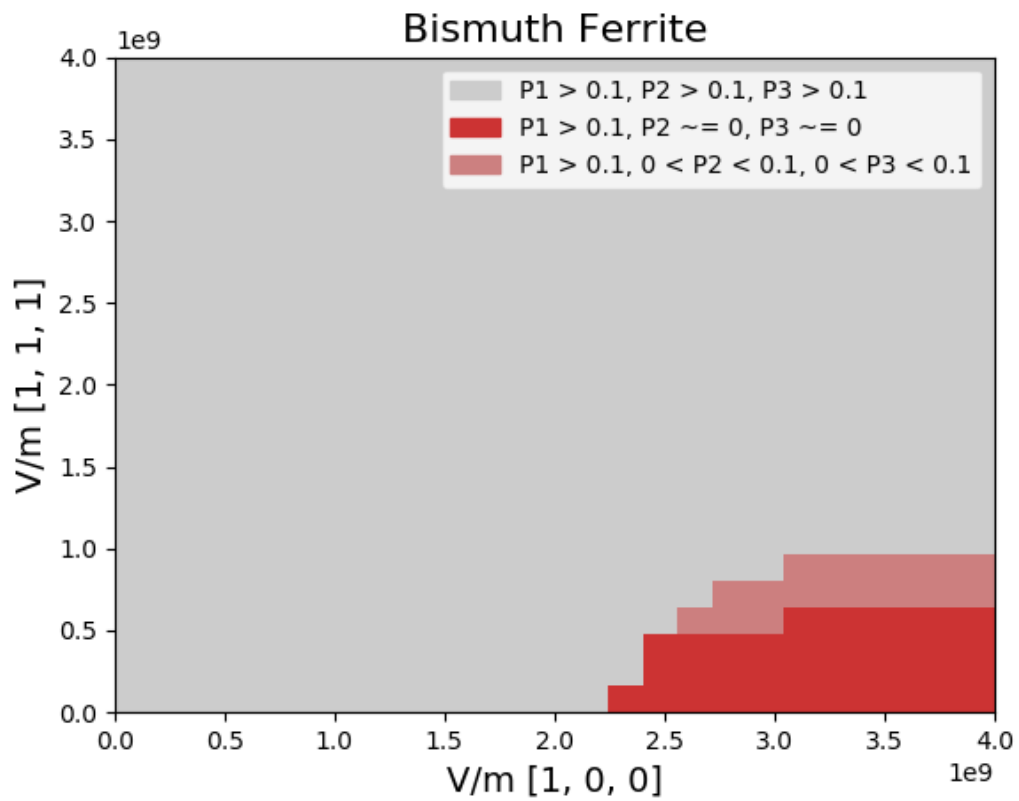
Text (adresář)

- BP_Skopek_Vladimir.pdf

B Vývojové schéma pro fázový diagram BaTiO_3



C Fázový diagram BiFeO₃, vizualizace A3



Bismuth Ferrite, property: A3

