

The Magnetism of $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ and the Effect of Oxygen Vacancy on Its Magnetism by First-Principles Study

Zhiping Lin*, He Duan, Xin Zhang

School of Physics and Optoelectronic Engineering, Guangdong University of Technology, Guangzhou Guangdong
Email: *zhipinglphy@gdut.edu.cn

Received: Aug. 4th, 2016; accepted: Aug. 22nd, 2016; published: Aug. 25th, 2016

Copyright © 2016 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

Abstract

Based on first-principles calculation, it is discussed for the chemical potential regions of oxygen of PbTiO_3 system under the thermodynamics equilibrium conditions, the magnetism of $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ and the effect of oxygen vacancy on the magnetism of $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$. Results displays that increasing Sr, $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ appears the weak ferromagnetism (and when $x = 0.5$, the maximum magnetic moment is less than $0.04\mu_B/\text{unitcell}$). If there is a oxygen vacancy in $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ system, it takes on the ferromagnetism and magnetic moment is $0.486\mu_B/\text{vacancy}$, which is agreement with the magnetic moment $0.488\mu_B/\text{vacancy}$ of pure PbTiO_3 system with oxygen vacancy.

Keywords

First-Principles, Ferroelectric Materials, Oxygen Vacancy, Ferromagnetism

第一性原理研究 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 磁性以及氧空位对其磁性的影响

林志萍*, 段 鹤, 张 欣

广东工业大学, 物理与光电工程学院, 广东 广州

*通讯作者。

摘要

本文采用基于密度泛函理论的广义梯度近似方法和赝势平面波法的第一性原理计算讨论了 PbTiO_3 体系的氧的化学势范围、 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系的磁性以及氧空位对该体系磁性的影响。结果表明,有Sr掺杂的情况下, $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系呈现了一定的弱铁磁性($x = 0.5$ 时的最大磁矩小于 $0.04\mu_B/\text{unitcell}$); 当存在氧空位时, $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系具有铁磁性, 磁矩为 $0.486\mu_B/\text{vacancy}$ 和未掺杂的 PbTiO_3 中由于氧空位的存在而产生的磁矩 $0.488\mu_B/\text{vacancy}$ 一致。

关键词

第一性原理, 铁电材料, 氧空位, 铁磁性

1. 引言

多铁材料由于同时具有铁电性、铁磁性、铁弹性和铁涡性等性质中的两个或者两个以上而受到广泛关注[1]-[3]。同时展示铁电性和铁磁性的多铁材料被称为磁电耦合(magnetoelectricity coupling)。因为磁电耦合能使铁磁性由电场控制、铁电性由磁场控制, 所以多铁材料能够用于先进的设备(比如新的功能传感器和多态记忆元件) [4]-[6]。尽管 Bi 基钙钛矿氧化物(比如 BiFeO_3 等)展示了多铁性[7], 但是这类材料具有大的漏电流和高压场, 从而阻碍了他们的实际应用[5]。为了获得实用的多铁材料, 很多研究小组都在努力的寻找着。类似于稀磁半导体的研究, 在宿主材料中掺杂少量带有铁磁性的过渡金属, 比如 Fe, Co, Ni 等, 可以使非铁磁性的铁电材料具有一定的铁磁性[8]。Palkar and Malik 发现, 用 Fe 替代 PbTiO_3 中 Ti, 可以使材料具有磁电耦合[9]。然而本征激发的多铁材料是非常少的。比如传统的钙钛矿铁电材料(比如 PbTiO_3)由于缺乏铁磁材料所要求的部分填满的 d 电子结构而具有非铁磁性[10]。最近, 实验中发现室温下的 PbTiO_3 纳米颗粒展示了弱的铁磁性[11], 并且研究表明材料的空位缺陷可能对 PbTiO_3 纳米颗粒铁磁性的出现起了重要的作用。对不同颗粒大小的 PbTiO_3 实验研究也说明, 除了空位缺陷的作用, 颗粒表面也会对材料铁磁性有明显的影响[12] [13]。氧空位是钙钛矿材料中基本和本征的缺陷, 对材料的性质有重要的影响。实验发现, 真空烧结会增加纳米 PbTiO_3 晶体的铁磁性, 而空气中烧结则会减低它的铁磁性[11]-[13], 所以 PbTiO_3 纳米颗粒的铁磁性是和材料中的氧空位有关。

钙钛矿材料 SrTiO_3 由于其具有介电、铁电和不普通的磁性一直受到关注, 但这种材料通常被用来作为薄膜衬底[14] [15]。当 SrTiO_3 表面的 TiO_2 层中出现氧空位而导致局域 e_g 和 d_{xy} 轨道劈裂, 从而产生二维磁结构[16]。实验和计算结果显示, SrTiO_3 体材料是抗磁性的, 当材料中存在 Ti 空位或者氧空位时材料会呈现一定的铁磁性[17]。 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的研究主要是作为氧化物玻璃最早被研究[18]-[21]。结果显示, 当 $x \geq 0.5$ 时晶体结构具有类似于 SrTiO_3 的立方相[21]。试验对这种材料的介电性、铁电性、热释电性以及调谐性能的研究显示, $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 具有优异的电学性能和良好的发光性能, 是一类性能优良的多功能材料, 在微器件方面有巨大的应用前景[22]-[24]。在本文中我们主要运用第一性原理计算的手段调查了 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ (PST)的磁性以及氧空位对这种材料的磁性和电子导电性的影响。

2. 计算细节

我们利用基于密度泛函理论赝势平面波的 VASP 程序代码,并采用了 PW91 广义梯度近似[25]-[27]。平面波基的截断能取 550 eV, 网格点为 $4 \times 4 \times 4$, 使得总能量计算在允许误差内。

3. PbTiO_3 体系的氧的化学势范围

表 1 所计算出的关于 PbO_2 , TiO , 和 PbTiO_3 形成能结果与实验值[28]和其他的理论计算[29] [30]基本一致。影响空位形成能的主要因素是控制氧空位凝聚的原子的化学势。实际上, 化合物稳定存在需要达到一定的条件[30]: 首先, 在热力学平衡条件下, 为了得到稳定的 PbTiO_3 晶体, 所有原子总的化学势必须等于该化合物的形成能, 即

$$\Delta\mu_{\text{Pb}} + \Delta\mu_{\text{Ti}} + 3\Delta\mu_{\text{O}} = \Delta H(\text{PbTiO}_3) \quad (1)$$

这里 $\Delta H(\text{PbTiO}_3)$ 代表 PbTiO_3 的形成能, 可以通过总能减去相应单质晶体/气体的总能得到, $\Delta\mu_{\alpha}$ 则代表相应单质晶体/气体的内聚能的化学势。其次, 为了避免单质/气体析出(当 $\Delta\mu_{\alpha} = 0$ 时, α 组分的化学势正好与单质晶体/气体相平衡, 再大就会从晶体中析出单质 α 相), 要求原子的化学势不能比它们对应的单质/气体的内聚能大。因此, 化学势要求满足:

$$\Delta\mu_{\text{Pb}} \leq 0, \Delta\mu_{\text{Ti}} \leq 0, \text{ and } \Delta\mu_{\text{O}} \leq 0 \quad (2)$$

即当 α 组分的原子化学势和其单质/气体的内聚能相等时, 满足上述条件。最后, 为了避免二元竞争相从体系中析出, 也要求相关的化学势满足:

$$\begin{aligned} \mu_{\text{Pb}} + \mu_{\text{O}} &\leq \Delta H(\text{PbO}) \\ \mu_{\text{Ti}} + 2\mu_{\text{O}} &\leq \Delta H(\text{TiO}_2) \end{aligned} \quad (3)$$

其中, $\Delta H(\text{PbO})$ 和 $\Delta H(\text{TiO}_2)$ 代表可能存在的二元竞争相形成能。依据以上关系作出 PbTiO_3 稳定存在的相图——图 1。其中, ABCD 所围四边形区域为 PbTiO_3 的化学势稳定区。化学势通常能够反映出化合物形成的环境, 比如点 B 对应于贫氧条件—— $\Delta\mu_{\text{O}} = 2.04$ eV, A 和 D 对应于富氧条件—— $\Delta\mu_{\text{O}} = 0$ eV。和其他计算结果[24]相比偏小, 但基本一致。

4. $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系的磁性以及氧空位对体系磁性的影响

首先, $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系的磁性被讨论, 结构展示在图 2 中。图 2(a)展示了晶格参数随掺杂量的变化。从结果可以看出, c/a 的比值随着掺杂量先增大再减小; 当 $x < 0.3$ 时, c/a 的比值要比未掺杂的大。也就是说, 此时材料的四方相结构更好; 随着 x 增大到 0.5, c/a 逐渐接近 1, 结构逐渐演变为立方相结构, 这与实验结果相符[21] [31]; 当 $x \geq 0.5$ 时, $(\text{Pb,Sr})\text{TiO}_3$ 的结构变成立方结构, 和 SrTiO_3 的结构相同。由 Sr 掺杂而产生的磁矩也展示在图 2(b)中。结果显示, 由于 Sr 掺杂而产生的磁矩很小——最大值出现在 $x = 0.5$, 磁矩接近于 $0.03 \sim 0.04 \mu_B/\text{unitcell}$, 因此 $(\text{Pb,Sr})\text{TiO}_3$ 材料由于 Sr 杂质的存在具有一定弱铁磁性。

一直以来, 研究认为材料的空位缺陷是这类材料铁磁性出现的主要原因。因此在本文中我们也讨论了氧空位对 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系磁性的影响。在 PbTiO_3 中有两种氧原子: O(1)沿着 c 轴, 位于 Ti-O-Ti 直链上; O(2)位于 ab 面, 沿着 Z 型 Ti-O-Ti 链上, 如图 3(a)所示。因此, 在体材料中有两种氧空位。对于 Sr 掺杂 PbTiO_3 中氧空位的研究, 我们仅考虑只有一个 Sr 杂质的情况。同样也有两种氧空位, Sr-O-Pb 中间的氧形成的空位 $V_{\text{O}(1)}$ 和 Sr-O-Ti 中间的氧形成的空位 $V_{\text{O}(2)}$, 如图 3(b)所示。表 2 中列出了在富氧和贫氧条件下氧空位的形成能以及由于氧空位的存在而产生的磁矩。从结果可以看出, 两种氧空位的空位形成能相差很小——大约 $0.04 \sim 0.05$ eV。而且 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的两种氧空位的形成能差距比未掺杂 PbTiO_3 的

Table 1. Calculated formation energy of PbTiO_3 , TiO_2 and PbO , as well as experimental value and other calculated results. Unit of all results is eV

表 1. 第一性原理计算获得的 PbTiO_3 体系和相应二元竞争相形成能。可用的实验结果和其他第一性原理计算值作为比较也分别列出。所有结果的单位为 eV

化合物	本文计算值	实验值[28]	其他	
			Ref. [28]	Ref. [29]
TiO_2	-2.95	-2.27	-2.59	-2.25
PbO	-9.28	-9.79	-10.36	-9.13
PbTiO_3	-13.48		-13.34	-11.64

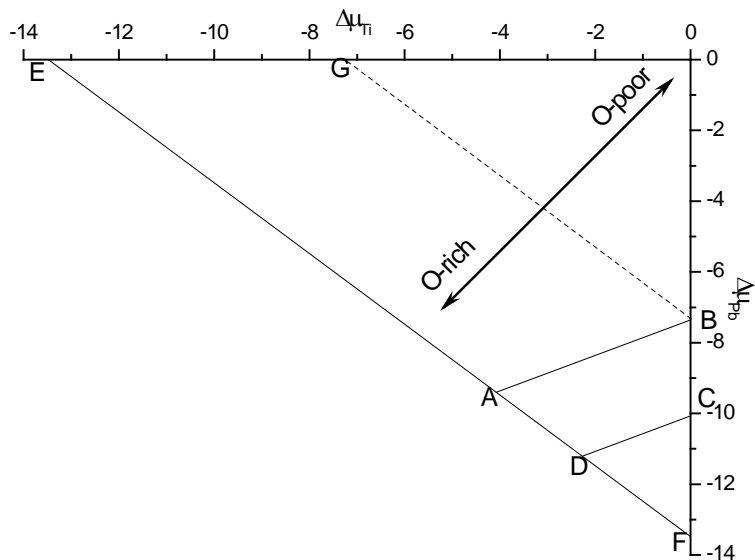


Figure 1. Phase diagram of PbTiO_3 . Quadrilateral ABCD is stable chemical potential area of PbTiO_3 , which point B is poor oxygen and points A and D are rich oxygen

图 1. PbTiO_3 体系相图。其中，ABCD 所围四边形区域为 PbTiO_3 的化学势稳定区，点 B 对应于贫氧条件，A 和 D 对应于富氧条件

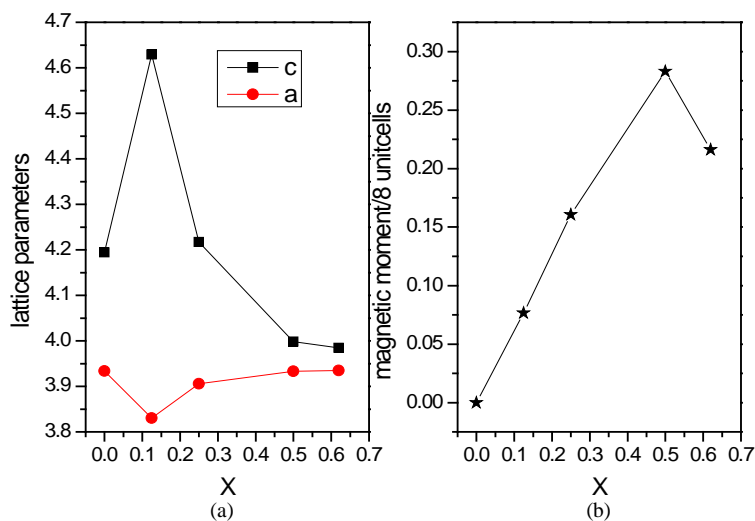


Figure 2. Lattice parameters and magnetic moments of $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$

图 2. 晶格参数和磁矩随 Sr 掺杂量的变化关系

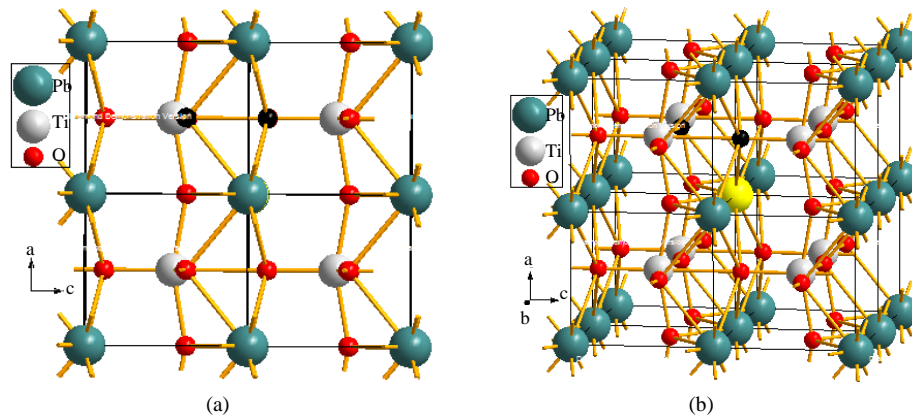


Figure 3. The structure of $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ ($x = 0.125$), in which yellow atom is doped Sr atom and two black is potential oxygen vacancy
图 3. $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的结构($x = 0.125$), 其中黄色原子为掺杂的 Sr 原子, 两个黑色的为形成的两种氧空位

Table 2. The formation energy of oxygen vacancies and magnetic moments for PbTiO_3 and $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$
表 2. 在 PbTiO_3 和 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体材料中, 两种氧空位形成能 E 以及每个氧空位所产生的磁矩($M/\text{vacancy}$)

	PbTiO_3		$(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$	
	$V_{\text{O}(1)}$	$V_{\text{O}(2)}$	$V_{\text{O}(1)}$	$V_{\text{O}(2)}$
E (O-poor)	2.463 eV	2.415 eV	5.581 eV	5.62 eV
E (O-rich)	4.503 eV	4.455 eV	7.621 eV	7.66 eV
M	$0.488\mu_B$ [29]	0 [29]	$0.486\mu_B$	0

更小。从氧空位的形成能也显示, 氧空位在贫氧条件下更容易形成, 并且形成 $V_{\text{O}(1)}$ 比 $V_{\text{O}(2)}$ 更易。和未掺杂体材料中氧空位形成的磁矩相比, 存在而产生的磁矩是 $0.486\mu_B/\text{vacancy}$ ($(\text{Pb,Sr})\text{TiO}_3$) 和 $0.488\mu_B/\text{vacancy}$ [29] (PbTiO_3) 是相近的, 而 O(2)空位产生的磁矩是零。因此, 在 $(\text{Pb,Sr})\text{TiO}_3$ 体材料中引起材料产生磁性的主要是 O(1)形成的氧空位。

电子态密度能够反映材料的导电性能。图 4 是 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的电子态密度以及氧空位存在时的态密度。其中, (a)、(b)、(c)分别为 $x = 0, 0.25, 0.5$ 时 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的电子态密度; (d)、(e)分别为存在 O(1)和 O(2)空位时 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的电子态密度。从图中能够看出, Sr 掺杂对 PbTiO_3 结构的电子带隙有较小的影响。随着掺杂量的增大带隙变宽, 带隙从 2.5 eV ($x = 0.0$)增加到 2.84 eV ($x = 0.5$)。当氧空位存在时, 带隙宽度改变不大, 但费米能级向导带底移动。从电子态密度也可以看到, 随着掺杂量增加自旋向上和自旋向下的态密度不再重合, 产生了一定的净自旋电子, 从而产生了一定的磁矩。

5. 结论

采用第一性原理计算的方法讨论了 PbTiO_3 体系的氧的化学势范围、 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系的磁性以及氧空位对该体系磁性的影响。结果显示, $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系随着 Sr 掺杂量的增加呈现了一定的弱铁磁性, 磁矩小于 $0.04\mu_B/\text{unitcell}$; 当存在氧空位时, $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系是铁磁性材料, 磁矩为 $0.486\mu_B/\text{vacancy}$ 和未掺杂的 PbTiO_3 中由于氧空位的存在而产生的磁矩 $0.488\mu_B/\text{vacancy}$ 一致。因此, $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系的铁磁性主要由材料烧结过程中所形成氧空位贡献, Sr 的掺杂不会对钛酸铅铁电材料铁磁性起重要作用。所以要想使 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 体系材料同时具有铁电和铁磁性, 可以采用控制烧结条件使得材料在烧结过程中形成氧空位来实现。

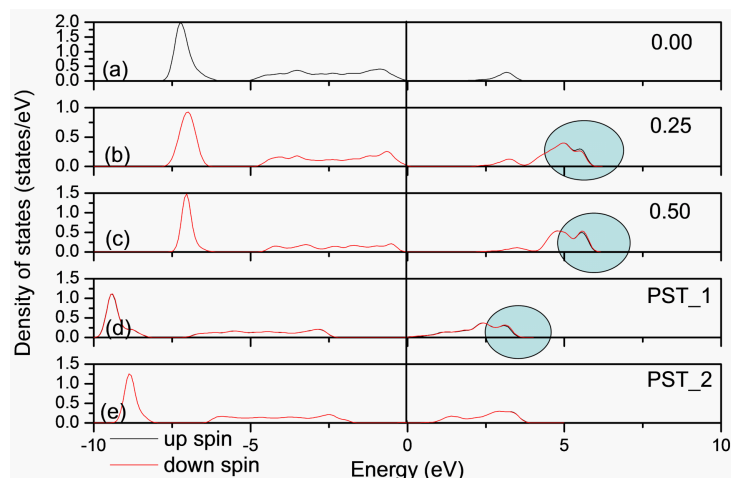


Figure 4. Density of electronic state of $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ and that with oxygen vacancy. (a), (b) and (c) are the density of electronic state of $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ when $x = 0, 0.25, 0.5$, respectively; (d) and (e) are that with O(1) and O(2) vacancy, respectively. The circle area is the non-overlap area for un-spin and down-spin density of states

图 4. $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的电子态密度以及氧空位存在时的电子态密度。其中, (a)、(b)、(c) 分别为 $x = 0, 0.25, 0.5$ 时 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的电子态密度; (d)、(e) 分别为存在 O(1) 和 O(2) 空位时 $(\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ 的电子态密度。圈起的区域为自旋向上和自旋向下不重合的区域

基金项目

本文获得国家自然科学基金(批准号: No. 11204042)资助。

参考文献 (References)

- [1] Scott, J.F. and Araujo, C.A.P. (1998) Ferroelectric Memories. *Science*, **246**, 1400-1405. <http://dx.doi.org/10.1126/science.246.4936.1400>
- [2] Eerenstein, W., Mathur, N.D. and Scott, J.F. (2006) Multiferroic and Magnetoelectric Materials. *Nature (London)*, **442**, 759-765. <http://dx.doi.org/10.1038/nature05023>
- [3] Hur, N., Park, S., Sharma, P.A., Ahn, J.S., Guha, S. and Cheong, S.W. (2004) Electric Polarization Reversal and Memory in Multiferroic Material Induced by Magnetic Fields. *Nature (London)*, **429**, 392-395. <http://dx.doi.org/10.1038/nature02572>
- [4] Feibig, M., Lottermoser, Th., Frohlich, D. and Goltsev, A.V. (2002) Observation of Coupled Magnetic and Electric Domains. *Nature*, **419**, 818-820. <http://dx.doi.org/10.1038/nature01077>
- [5] Spaldin, N.A. and Feibig, M. (2005) The Renaissance of Magnetoelectric Multiferroics. *Science*, **309**, 391-392. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1113357>
- [6] Cai, M.Q., Yang, G.W., Tang, X., Cao, Y.L., Wang, L.L., Hu, Y.Y., *et al.* (2007) First-Principles Study of Pressure-Induced Metal-Insulator Transition in BiNiO_3 . *Applied Physics Letters*, **91**, 101901. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2779925>
- [7] Wang, J., Neaton, J.B., Zheng, H., Nagarajan, V., Ogale, S.B., Liu, B., *et al.* (2003) Epitaxial BiFeO_3 Multiferroic Thin Film Heterostructures. *Science*, **299**, 1719-1722. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1080615>
- [8] Coey, J.M.D., Venkatesan, M. and Fitzgerald, C.B. (2005) Donor Impurity band Exchange in Dilute Ferromagnetic Oxides. *Nature Materials*, **4**, 173-179. <http://dx.doi.org/10.1038/nmat1310>
- [9] Zhu, Z.Y., Wang, B., Wang, H., Zheng, Y. and Li, Q.K. (2007) The First-Principles Study of Ferroelectric Behaviours of $\text{PbTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ and $\text{BaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ Superlattices. *Chinese Physics B*, **16**, 1780. <http://dx.doi.org/10.1088/1009-1963/16/6/051>
- [10] Hill, N.A. (2000) Why Are There so Few Magnetic Ferroelectrics? *The Journal of Physical Chemistry B*, **104**, 6694-

6709. <http://dx.doi.org/10.1021/jp000114x>
- [11] Wang, M., Tan, G.L. and Zhang, Q. (2010) Multiferroic Properties of Nanocrystalline PbTiO₃ Ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, **93**, 2151-2154. <http://dx.doi.org/10.1111/j.1551-2916.2010.03691.x>
- [12] Venkatesan, M., Fitzgerald, C.B. and Coey, J.M.D. (2004) Thin Films: Unexpected Magnetism in a Dielectric Oxide. *Nature*, **430**, 630-630. <http://dx.doi.org/10.1038/430630a>
- [13] Sundaresan, A. and Rao, C.N.R. (2009) Ferromagnetism as a Universal Feature of Inorganic Nanoparticles. *Nano Today*, **4**, 96. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nantod.2008.10.002>
- [14] Cheng, G.L., Veazey, J.P., *et al.* (2013) Anomalous Transport in Sketched Nanostructures at the LaAlO₃/SrTiO₃ Interface. *Physical Review X*, **3**, 011021. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevX.3.011021>
- [15] Wang, M., Ou, Y.-B., Li, F.S., *et al.* (2014) Molecular Beam Epitaxy of Single Unit-Cell FeSe Superconducting Films on SrTiO₃(001). *Acta Physica Sinica*, **63**, 027401.
- [16] Pavlenko, N., Kopp, T., Tsymbal, E.Y., Mannhart, J. and Sawatzky, G.A. (2012) Oxygen Vacancies at Titanate Interfaces: Two-Dimensional Magnetism and Orbital Reconstruction. *Physical Review B*, **86**, 064431. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.86.064431>
- [17] Zhang, Y.J., Hu, J.F., Cao, E.S., Sun, L. and Qin, H.W. (2012) Vacancy Induced Magnetism in SiTiO₃. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **324**, 1770-1775. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.12.036>
- [18] Sahu, A.K., Kumar, D. and Parkash, O. (2003) Crystallisation of Lead Strontium Titanate Perovskite Phase in [(Pb_{1-x}Sr_x)O.TiO₂]-[2SiO₂.B₂O₃]-[K₂O] Glass Ceramics. *British Ceramic Transactions*, **102**, 139-147. <http://dx.doi.org/10.1179/096797803225004981>
- [19] Gautam, C.R., Kumar, D. and Parkash, O. (2010) IR Study of Pb-Sr Titanate Borosilicate Glasses. *Bulletin of Materials Science*, **33**, 145-148.
- [20] Gautam, C.R., Kumar, D. and Parkash, O. (2011) Dielectric and Impedance Spectroscopic Studies of (Sr_{1-x}Pb_x)TiO₂ Glass Ceramics with Addition of Nb₂O₅. *Bulletin of Materials Science*, **34**, 1393-1399. <http://dx.doi.org/10.1007/s12034-011-0334-7>
- [21] Gautam, C.R., Kumar, D., Parkash, O. and Singh, P. (2013) Synthesis, IR, Crystallization and Dielectric Study of (Pb, Sr)TiO₃ Borosilicate Glass-Ceramics. *Bulletin of Materials Science*, **36**, 461-469. <http://dx.doi.org/10.1007/s12034-013-0489-5>
- [22] Liu, S.W., Lin, Y., Weaver, J., Donner, W., Chen, X., Chen, C.L., Jiang, J.C. and Meletis, E.I. (2004) High-Dielectric-Tunability of Ferroelectric (Pb, Sr)TiO₃ Thin Films on (001) LaAlO₃. *Applied Physics Letters*, **85**, 3202-3204. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1801176>
- [23] Chen, H.Y., Wu, J.M., Huang, H.E. and Bor, H.Y. (2007) Characteristics of (Pb, Sr)TiO₃/ZrO₂ Structures on Si and SiON/Si Substrates. *Applied Physics Letters*, **90**, 112907. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2712807>
- [24] Luo, L., Ren, H.Z., Tang, X.G., Ding, C.R., Wang, H.Z., *et al.* (2008) Room Temperature Tunable Blue-Green Luminescence in Nanocrystalline (Pb_{1-x}Sr_x)TiO₃ Thin Film Grown on Yttrium-Doped Zirconia Substrate. *Journal of Applied Physics*, **104**, 043514. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2969030>
- [25] Perdew, J.P., Chevary, J.A., Vosko, S.H., Jackson, K.A., Pederson, M.R., Singh, D.J. and Fiolhais, C. (1992) Atoms, Molecules, Solids, and Surfaces: Applications of the Generalized Gradient Approximation for Exchange and Correlation. *Physical Review B*, **46**, 6671-6687. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.46.6671>
- [26] Kresse, G. and Hafner, J. (1993) *Ab initio* Molecular Dynamics for Liquid Metals. *Physical Review B*, **47**, 558R. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.47.558>
- Kresse, G. and Hafner, J. (1994) *Ab initio* Molecular-Dynamics Simulation of the Liquid-Metal—Amorphous-Semiconductor Transition in Germanium. *Physical Review B*, **49**, 14251. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.49.14251>
- [27] Kresse, G. and Furthmuller, J. (1996) Efficiency of *Ab-Initio* Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set. *Computational Materials Science*, **6**, 15-50. [http://dx.doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](http://dx.doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
- Kresse, G. and Furthmuller, J. (1996) Efficient Iterative Schemes for *Ab Initio* Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set. *Physical Review B*, **54**, 11169. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
- [28] Haynes, W.M. (2007) CRC Handbook of Chemistry and Physics. 92nd Edition, CRC Press, Boca Raton.
- [29] Shimada, T., Uratani, Y. and Kitamura, T. (2012) Slip Band-Grain Boundary Interactions in Commercial-Purity Titanium. *Acta Materialia*, **60**, 6322-6330. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2012.08.007>
- [30] Zhao, Y.-J. and Zunger, A. (2004) Site Preference for Mn Substitution in Spintronic CuMnIXVI₂ Chalcopyrite Semiconductors. *Physical Review B*, **69**, 075208. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.69.075208>
- [31] 蒋艳平. 低维钛酸锶铅铁电材料的制备及电学与光学性能研究[D]: [博士学位论文]. 湘潭: 湘潭大学材料与光电物理学院, 2012.

期刊投稿者将享受如下服务：

1. 投稿前咨询服务 (QQ、微信、邮箱皆可)
2. 为您匹配最合适的期刊
3. 24 小时以内解答您的所有疑问
4. 友好的在线投稿界面
5. 专业的同行评审
6. 知网检索
7. 全网络覆盖式推广您的研究

投稿请点击：<http://www.hanspub.org/Submission.aspx>