

# Structural Instabilities in Perovskites: Ab-initio Calculation of the Dynamical Properties of Ferroelectric $\text{PbTiO}_3$

García, Alberto  
Universidad del País Vasco  
Dpto. de Física Aplicada II  
Apdo. 644. 48080 Bilbao

Vanderbilt, David  
Rutgers University  
Department of Physics and Astronomy  
Piscataway, NJ 08855-0849, USA

BIBLID [1137-4411 (1997), 4; 73-90]

$\text{PbTiO}_3$ -aren fase tetragonal ferroelektrikoaren bibrazio moduen *ab initio* azterketa bat egin da, Brillouin eskualdeko (BZ) simetria puntu nagusienetan. Dentsitate lokalaren hurbilketa eta pseudopotential ultramalguak uhin laueko oinarrian erabiltzen ditu kalkuluak eta  $\Gamma$  puntuko moduei buruz dauden emaitza esperimentalak, LO-TO bikoizketa besteak beste, ondo deskribatzen ditu. Lan hau aurretik egindako beste bat eragin zuen, alegia, tenperatura baxuetan fase ortorronbikora gertatzen den trantsizioaren aurkikuntzak [ J. Kobayashi, Y. Uesu, and Y. Sakemi, Phys. Rev. B **28**, 3866 (1983).]. Guk frogatu ahal izan dugu tentsio ortorronbikoaren akoplamendu linealak,  $\Gamma$  modu batekin, eragina duela fase trantsizio honetan. Baina, ezegonkortasun mekanikorik (modu malguak) ezin izan dugu aurkitu, ez  $\Gamma$ -n ezta beste BZ-ko simetria haundiko puntutan ere.

Un estudio de los principios básicos de los modos vibracionales del  $\text{PbTiO}_3$  en la fase ferroeléctrica tetragonal ha sido llevada a cabo para todos los puntos de simetría principal de la zona de Brillouin (BZ). Los cálculos utilizan la aproximación de la densidad local y pseudopotenciales ultrasuaves con una base de ondas planas, y reproducen bien la información experimental en los modos en los puntos  $\Gamma$ , incluyendo los desdoblamientos LO-TO. Este trabajo fue motivado en parte por una transición a una fase ortorrómbica a bajas temperaturas reportada anteriormente [ J. Kobayashi, Y. Uesu, and Y. Sakemi, Phys. Rev. B **28**, 3866 (1983).]. Nosotros demostramos que un acoplamiento lineal de tensión ortorrómbica de los modos en  $\Gamma$  juega un papel en la discusión de la posibilidad de esta fase de transición. Sin embargo, no se han encontrado inestabilidades mecánicas (modos suaves), ni en  $\Gamma$  ni en ningún otro punto de alta simetría en el BZ.

Un étude des principes fondamentaux des modes vibrationnels du  $\text{PbTiO}_3$  à la phase ferroélectrique tétragonale a été réalisé pour tous les points de symétrie principale à la zone de Brillouin (BZ). Les calculs utilisent l'approximation de la densité locale et pseudopotenciales ultradoux avec une base d'ondes planes, et ils reproduisent correctement l'information expérimentales sur les modes aux points  $\Gamma$ , comprenant les dédoublements LO-TO. Ce travail fut, en partie, à l'occasion d'une transition à une phase orthorhombique à basses températures paraître auparavant [ J. Kobayashi, Y. Uesu, and Y. Sakemi, Phys. Rev. B **28**, 3866 (1983).]. Nous démontrons qu'un couplage linéaire de tension orthorhombique des modes aux points  $\Gamma$  joue un rôle dans la discussion sur la possibilité de cette phase de transition. Cependant, on a pas trouvé des instabilités mécaniques (des modes doux), ni aux points  $\Gamma$  ni à un autre point de haute symétrie à la BZ.

Giltz-Hitzak: Peroskitak. Fase aldaketak.

Palabras Clave: Peroskitas. Cambios de fase.

Mots Clés: Peroskites. Changes de phase.