

## **SIMULACIÓN DE MATERIALES FERROELÉCTRICOS EN VOLUMEN Y NANOESTRUCTURADOS**

**Código:** ING265

**Período:** 2009-2010

**Director:** Migoni, Ricardo L

**E-mail:** migoni@ifir-conicet.gov.ar

**Integrantes:** Stachiotti, Marcelo G; Sepiarsky, Marcelo C; Lasave, Jorge A; Machado, Rodrigo; Koval, Sergio F

### **Objetivos**

El objetivo general de este proyecto es avanzar en la comprensión desde lo microscópico de propiedades de materiales ferroeléctricos utilizados para el desarrollo de dispositivos de memoria, transductores electromecánicos y dispositivos ópticos. En particular se realizarán investigaciones en los siguientes sistemas:

a)  $\text{SrBi}_2\text{Ta}_2\text{O}_9$  (SBT): material utilizado en el desarrollo de memorias ferroeléctricas de acceso aleatorio no volátiles (NV-FRAMs).

b)  $(\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3)_{1-x}(\text{PbTiO}_3)_x$  (PMN-PT): material utilizado en el desarrollo de dispositivos piezoeléctricos de alta performance debido al altísimo valor de sus constantes piezoeléctricas.

c) Ferroeléctricos con Puentes de Hidrógeno (FPH): en estos compuestos la polarización espontánea está relacionada con un ordenamiento de protones en puentes de hidrógeno. En particular,  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  (KDP) es un material tradicional que presenta marcados efectos piezo-ópticos y electro-ópticos.

d) Nanopartículas metálicas embebidas en matrices dieléctricas (NPM): Se explora la posibilidad de combinar diferentes composiciones de nanopartículas metálicas (Ag, Au, Pt, mixtas) y matrices dieléctricas para el reforzamiento dieléctrico de materiales ferroeléctricos.

Los objetivos particulares en cada uno de estos sistemas son:

a) SBT: desarrollar un modelo atómico que permita realizar simulaciones del comportamiento del material en función de la temperatura, las cuales no son realizables ab-initio. Esta modelización daría además acceso al estudio de efectos de dopaje y a la simulación de nanoestructuras.

b) PMN-PT: desarrollar un modelo atómico para contribuir a la comprensión microscópica del comportamiento conocido como "relaxor" de este material así como el origen del enorme efecto piezoeléctrico que presenta.

c) FPH: obtener dos tipos de modelaciones computacionales de la dinámica atómica en función de temperatura y presión, ambas basadas sobre resultados ab-initio obtenidos en el grupo. Uno es un modelo genérico aplicable tanto a ferroeléctricos, antiferroeléctricos o mixtos con comportamiento vítreo de la familia del KDP ( $\text{KH}_2\text{PO}_4$ ) como a las fases Ic e Ih del hielo. El otro es un modelo de capas a diseñar específicamente para KDP a fin de estudiar en detalle su dinámica atómica y efectos geométricos autoconsistentes de la sustitución isotópica.

d) NPM: esclarecer, mediante cálculos ab-initio, los efectos que producen en las propiedades electrónicas de nanopartículas de Ag los grupos adsorbidos, como Aminosilanos, que son utilizados como modificadores superficiales en la síntesis y manipulación de las nanopartículas.

## Resumen Técnico

Se complementan estudios teóricos por métodos de primeros principios con simulaciones mediante modelos atomísticos en ferroeléctricos de los tipos Aurivillius (SBT) y relaxores (PMN-PT) y compuestos cohesionados por puentes de hidrógeno (FPH).

Para el SBT se aspira a entender, mediante el desarrollo de un modelo atomístico basado en cálculos ab-initio, la dinámica microscópica involucrada en las transiciones y los mecanismos por los cuales operan distintos dopantes.

Con PMN-PT se pretende entender en base a la misma metodología el origen microscópico de los excepcionales valores de sus coeficientes piezoeléctricos.

En materiales donde la ferroelectricidad se origina por ordenamientos en puentes de hidrógeno (FPH), se propone obtener modelaciones computacionales de la dinámica atómica en función de temperatura y presión, basadas sobre resultados ab-initio obtenidos en el grupo. El objetivo es entender así mecanismos microscópicos de la ferroelectricidad y efectos isotópicos que aún están en discusión en estos materiales.

Se propone además realizar un estudio teórico tendiente a fundamentar microscópicamente el empleo de nanopartículas metálicas (NPM) para reforzar localmente el campo electromagnético en matrices dieléctricas. Mediante cálculos ab-initio se procurará entender el mecanismo microscópico de adsorción del modificador superficial y su efecto en las propiedades electrónicas de la nanopartícula.

**Disciplina:** Física

**Especialidad:** Materiales

**Palabras Clave:** ferroelectric - perovskite - hydrogen bonded - relaxor - nanostructure