

SIMULACIÓN ATOMÍSTICA DE COMPUESTOS FERROELÉCTRICOS Y MULTIFERROICOS

Código: ING376

Tipo de Investigación: Básica

Carrera que se vincula: Licenciatura em Física

Período: 2012 - 2013

Director: Sepliarsky, Marcelo Claudio

Integrantes: Stachiotti, Marcelo Gabriel; Machado, Rodrigo; Graf, Mónica Elisabet

Objetivos

- a) Desarrollar un esquema a nivel atómico que permita describir simultáneamente las propiedades ferroeléctricas y magnéticas que presentan los multiferroicos a temperatura finita. En particular se aplicara dicho esquema al estudio de las propiedades que presenta el BiFeO_3 en función de la temperatura y bajo la acción de campos eléctricos y magnéticos.
- b) Investigar los mecanismos microscópicos relevantes que originan las propiedades electromecánicas notables que presentan las soluciones sólidas $(\text{K,Na,Li})(\text{Nb,Ta})\text{O}_3$. Un entendimiento detallado de estos mecanismos constituye un paso importante para el desarrollo de nuevos materiales libres de Pb con propiedades piezoeléctricas aun superiores.

Resumen Técnico

Se investigarán propiedades novedosas de compuestos ferroeléctricos y multiferroicos de interés para el desarrollo de dispositivos funcionales. En particular se realizarán simulaciones computacionales basadas en métodos ab-initio y en modelos atomísticos para estudiar propiedades microscópicas relevantes en los siguientes compuestos:

- a) BiFeO_3 . Es un compuesto denominado multiferroico (MFE) por que coexisten propiedades ferroelectricas y ferromagnéticas.. El interés en estos materiales se origina en la posibilidad de controlar cargas aplicando campos magnéticos y espines aplicando voltajes, y basado en ello construir nuevas formas de dispositivos multifuncionales.
- b) $(\text{Na}_0.5\text{K}_0.5\text{NbO}_3)_{1-x}(\text{LiTaO}_3)_x$. Es un óxido mixto presenta interesantes propiedades piezoeléctrias. Su composición permitiría reemplazar a los piezoeléctricos tradicionales basados en plomo (PZT), ya que estos últimos generan inconvenientes ecológicos debido a los altos niveles de toxicidad del plomo.

Disciplina: Física

Especialidad: Física del estado sólido

Palabras Clave: Ferroéctricos - Multiferroicos - Simulaciones