

ESTUDOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS DE PROPRIEDADES ESTRUTURAIS DE MATERIAIS FERROELÉTRICOS

Nº: 20219117

Autor(es): Kauan da Rosa Paulino

Orientador(es): Luiz Gustavo Davanse Da Silveira

Evento: EVINCI

Área Temática: Ciências Exatas, da Terra e Engenharias

Programa Institucional: PIBIC VOLUNTÁRIOS

Palavras-chave: Estrutura Eletrônica, Materiais Ferroeletricos, Teoria Do Funcional Da Densidade

O presente trabalho estudou as propriedades das fases do material Titanato de Bário (BaTiO_3). Tal material pertence à classe dos materiais ferroelétricos. Nesta classe estão os materiais que mostram uma polarização elétrica espontânea e inversível através da aplicação de um campo elétrico externo. A ferroeletricidade observada se manifesta abaixo de uma temperatura de transição, chamada de temperatura de Curie. O BaTiO_3 faz também parte de uma classe de materiais ainda mais específica e que alcançou um grande interesse – científico e comercial – por suas vastas aplicações em dispositivos eletrônicos: Perovskita. Esta estrutura exibe uma complexa série de transições e estruturas distorcidas em baixas temperaturas. Pode-se observar no BaTiO_3 as seguintes fases: a estrutura cúbica, em altas temperaturas; tetragonal, abaixo da temperatura de Curie; ortorrômbica e, por fim, a fase romboédrica em baixas temperaturas. Utilizando-se da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foram estudadas e discutidas a estabilidade das diferentes fases de BaTiO_3 . A DFT consiste em um método quântico de primeiros princípios que permite a solução e o estudo de problemas de muitos corpos, como moléculas e sólidos cristalinos, permitindo a obtenção de diversas propriedades de interesse desses sistemas, tais como a estrutura molecular ou cristalina, energia de ionização, densidade de estados (DOS) e estruturas de bandas, modos de vibração, constantes elásticas e dielétricas, etc. Para o estudo, foram realizados cálculos computacionais onde inicialmente determinam-se as fases e busca-se realizar a otimização dos parâmetros estruturais (parâmetros de rede, ângulos e posições atômicas). Depois são realizados os cálculos das propriedades elásticas de cada fase e, por último são feitos os cálculos das propriedades eletrônicas. Na primeira parte, os cálculos de otimização foram realizados para a fase de simetria cúbica. Por seguinte houve a relaxação dessa fase para obter parâmetros de rede próximos à literatura pesquisada. Os parâmetros são utilizados para novos cálculos em sua fase tetragonal que é também relaxada. Depois busca-se obter as estruturas de bandas e as densidades de estados (DOS) das 2 fases. Os estudos avançam para as fases seguintes: ortorrômbica e romboédrica. Com os parâmetros de rede já otimizados, as fases foram relaxadas e em seguida, como as anteriores, são feitos uma série de cálculos de energia e se obtém os módulos de compressibilidade das fases. Por fim, são calculadas as estruturas de bandas e as DOS das últimas fases.