

Popularnonaukowe streszczenie projektu

Materiały piezo- i ferroelektryczne odgrywają ważną rolę w codziennym życiu. Stosowane są m.in. w ultrasonografach, urządzeniach echolokacyjnych, pamięciach ferroelektrycznych (FeRAM) i w wielu innych. Najczęściej stosowanym tego typu materiałem jest cyrkonian-tytanian ołowiu ($\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$). Jednak ze względu na dużą toksyczność ołowiu istnieje potrzeba znalezienia materiałów o podobnych właściwościach ale bardziej przyjaznych dla środowiska. Najbardziej obiecującym kandydatem są związki bizmutu o strukturze perowskitu BiMO_3 ($M=\text{Al, Ga, In, Fe}$). Zarówno w perowskitach na bazie ołowiu jak i bizmutu za właściwości piezo- i ferroelektryczne odpowiedzialny jest ten sam mechanizm. Swobodna para elektronów $6s^2$ na jonach Pb^{2+} lub Bi^{3+} , która odpowiada za dużą dystorsję sieci a tym samym za dużą polaryzację ferroelektryczną. Jednak właściwości ferroelektryczne perowskitów bizmutowych ograniczane są przez różnego rodzaju defekty.

Defekty te powodują powstawanie szkodliwych z punktu widzenia zastosowań prądów upływu. Celem projektu w pierwszej kolejności, będzie zbadanie defektów rodzimych (np. luki bizmutowe lub tlenowe) w wybranych perowskitach BiMO_3 za pomocą metod teorii funkcjonału gęstości. Następnie zostaną przeanalizowane różnego rodzaju podstawienia obcych atomów w celu określenia, które z nich będą najlepszymi kandydatami do wyeliminowania niekorzystnego wpływu luk.

Drugim etapem badań będzie określenie warunków w których występować będą fazy perowskitów bizmutowych o pożądanym właściwościach. Badany będzie zarówno wpływ ciśnienia hydrostatycznego oraz chemicznego na perowskity BiMO_3 ($M=\text{Al, Ga, In}$). W przypadku ciśnienia chemicznego badane będą m.in. roztwory stałe typu $\text{Bi}_{1-x}\text{RE}_x\text{MO}_3$ ($\text{RE}=\text{Y, La, Ce}$; $M=\text{Al, Ga, In}$).