

## Przejścia fazowe w tlenkach o strukturze perowskitu – obliczenia z pierwszych zasad

Miejsce realizacji: Instytut Fizyki Molekularnej PAN, Zakład Teorii Ciała Stałego

Opiekun: prof. dr hab. Andrzej Jeziński  
tel.: 61 86 95 242, e-mail: andrzej.jeziński@ifmpan.poznan.pl

Opiekun pomocniczy: dr inż. Jakub Kaczkowski  
e-mail: kaczkowski@ifmpan.poznan.pl

### Wprowadzenie:

Tlenki o strukturze perowskitu  $ABO_3$  są interesujące zarówno z naukowego jak i aplikacyjnego punktu widzenia. Znajdują zastosowanie jako ferroelektryki ( $BaTiO_3$ ,  $PbTiO_3$ ) i dielektryki ( $CaTiO_3$ ). Mogą mieć też potencjalne zastosowanie jako przewodniki protonowe ( $SrCeO_3$ ) lub multiferroiki ( $BiFeO_3$ ). W układach o tej strukturze zaobserwowano również kolosalny magnetoopór ( $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ ) i nadprzewodnictwo ( $SrTiO_3$ ). Ważne miejsce w tej grupie zajmują związki bizmutu  $BiMO_3$  ( $M = Al, Ga, In, Fe, Mn, Co, Ni$ ). Układy te posiadają podobne właściwości ferroelektryczne co powszechnie stosowane ferroelektryki na bazie  $PbTiO_3$ , jednak bez szkodliwego dla środowiska ołowiu. Drugą ważną właściwością tych związków jest współwystępowanie ferroelektryczności i magnetyzmu (multiferroiczność). Spośród wszystkich multiferroików  $BiFeO_3$  jest jedynym w którym te dwa zjawiska występują powyżej temperatury pokojowej. Główną przeszkodą w zastosowaniach na skalę przemysłową tych układów jest duże przewodnictwo związane z obecnością luk tlenowych. W celu ich wyeliminowania tworzy się roztwory stałe takie jak np.  $BiFeO_3-LaFeO_3$ . Jednak prowadzi to do przemian fazowych z fazy ferro- do paraelektrycznej.

### Cel naukowy pracy i proponowane metody badawcze:

Celem pracy będzie zbadanie przejść fazowych w układach  $BiMO_3$  ( $M = Al, Ga, In, Fe, Mn, Co, Ni$ ) i roztworów stałych  $BiFeO_3-ABO_3$  ( $A = RE, B = TM$ ) w oparciu o teorię funkcjonału gęstości. Zbadana zostanie struktura elektronowa, dynamika sieci oraz właściwości ferroelektryczne i magnetyczne wybranych faz wyżej wymienionych układów. Obliczenia będą wykonywane za pomocą oprogramowania komercyjnego (VASP) jak i open-source (Quantum-Espresso, Abinit).