Hessisches Kompetenzzentrum
für Hochleistungsrechnen

Modellierung des elektrokalorischen Effekts in bleifreien Relaxor-Ferroelektrika

Researchers
Dr.-Ing. Melanie Dupé Gröting and Kai-Christian Meyer

Principal Investigator
Prof. Dr. rer. nat. Karsten Albe

Project Term
2013 - 2016

Project Areas
Materials Engineering

Institute
Mathematical Modeling and Analysis

University
Technische Universität Darmstadt

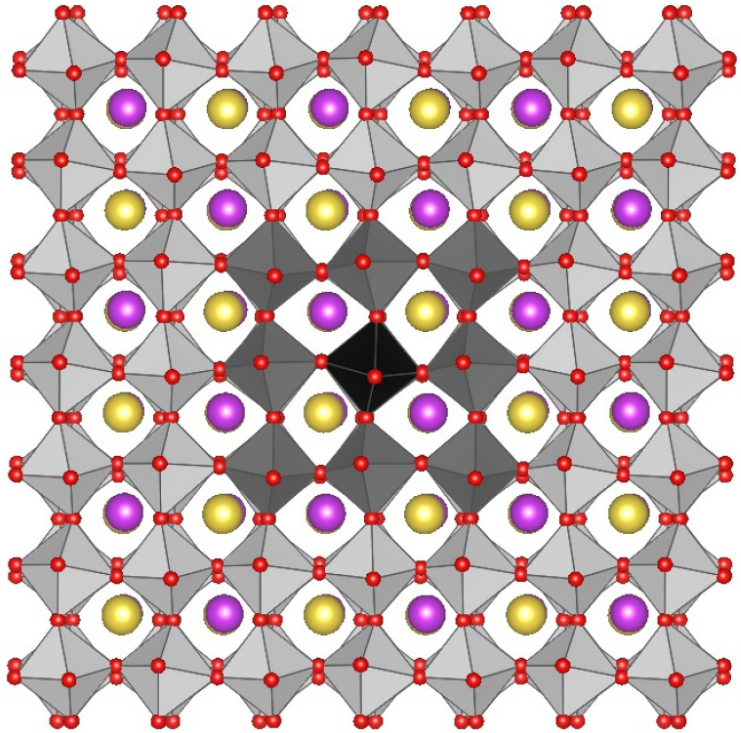


Abb. 1: NBT Superzelle (Bi: Lila, Na: Gelb, O: Rot) mit rhomboedrischer Oktaeder Verkippung (grau) und einem orthorhombischen Defekt (schwarz). Auch zum Defekt benachbarte Oktaeder (dunkelgrau) sind aus ihrer ursprünglichen Konfiguration verkippt.

Introduction

Natrium Bismut Titanat (NBT) gehört zu der Gruppe der dielektrische Materialien (auch Isolatoren genannt). Dielektrika spielen heute in allen Bereichen der Technik eine wichtige Rolle, wobei diese sehr unterschiedlicher Natur sein können, vor allem weil Dielektrika verschiedenste Eigenschaften besitzen können. Sie können beispielsweise piezoelektrisch (eine Verformung des Kristalls erzeugt eine elektrische Spannung, z.b. Drucksensoren) oder pyroelektrisch (eine Temperaturerhöhung erzeugt eine Spannung, z.b. Temperatursensoren) sein. Interessant und relevant für Anwendungen sind auch die Umkehrungen dieser Effekte. So kann eine Verformung durch Anlegen eines E-Feldes erzeugt werden (Aktuatoren) oder eine Abkühlung durch Anlegen eines E-Feldes erreicht werden (elektrokalorischer Effekt).

NBT gehört zu einer Untergruppe der Dielektrika, den Relaxor Ferroelektrika, kurz Relaxoren. Diese weisen Eigenschaften auf, die zu beiden Kategorien, den Paraelektrika und Ferroelektrika gehören und sind besonders interessant für Anwendungen zum Kühlen und Wärmen, da sie in einem großem Temperaturbereich eingesetzt werden können. Fokus des Projekts ist das Verstehen des elektrokalorischen Effekts auf atomistischer Ebene in Materialien wie NBT, die eine Perowskit-Struktur aufweisen (chemische Formel ABO3). Im Gegensatz zu herkömmlichen Materialien wie Metalle und anderen Festkörper, die eine regelmäßige Gitterstruktur (mit einem bestimmten Grad an Defekten) ist die Struktur von Relaxoren noch ungeklärt. Die beobachtbaren Eigenschaften werden oft auf Unordnungen auf der atomistischen Skala zurückgeführt, jedoch ist unklar, was diese Unordnungen hervorruft.

Discussion

Es ist bekannt, dass NBT bei Raumtemperatur eine rhomboedrische Struktur aufweist, das bei Temperaturerhöhung zu einer tetragonalen wird [1]. Auch ist bekannt, dass die jeweiligen Strukturen durch das Kippen der Sauerstoffoktaeder zustande kommt [1,2]. Jedoch müssen Unordnungen in den Strukturen vorhanden sein, welche für die beobachtbaren Eigenschaften verantwortlich sind. Experimentelle Methoden konnten kein einheitliches Bild für die atomistische Konfiguration liefern, weswegen wir in unserer Arbeit versuchen, das Problem mit atomistischen Simulationen zu verstehen. Mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) bauen wir verschiedene Defekte in die regelmäßigen Strukturen ein (siehe Abb. 1 mit orthorhombischen Defekten (schwarz) in einer rhomboedrischen Matrix (grau)) und berechnen die jeweiligen Energien. Daraus lässt sich folgern, welche Arten von Unordnungen und Defekten wahrscheinlich sind und welche mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht in der Natur vorkommen [3]. Mit diesem Wissen können wir Modelle aufstellen, die erklären, was strukturell bei einer Temperaturerhöhung passiert, wenn man von der rhomboedrischen zu der tetragonalen Struktur übergeht.

Zusätzlich ermöglichen uns diese atomistischen Simulationen

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT
UNIKASSEL VERSITÄT
Philipps Universität Marburg

weitere mesoskopische Simulationen auf größeren Längenskalen zu erstellen, mit deren Hilfe wir die Temperaturänderung des Materials berechnen können, wenn wir ein E-Feld in unsere Simulation einbringen. Ziel ist durch Variieren der Zusammensetzungen (z.b. NBT und einige Prozent eines weiteren Materials) die Temperaturänderungen weiter zu erhöhen und den Effekt zu maximieren.

Reference

[1] G.O. Jones and P.A. Thomas (2002), Investigation of the structure and phase transitions in the novel. A-site substituted distorted perovskite compound Na0.5Bi0.5TiO3, Acta Crystallographica Section B, 58(2): 168-178. https://doi.org/10.1107/s0108768101020845

[2] I. Levin und I.M. Reaney (2012), Nano- and Mesoscale Structure of Na1/2Bi1/2TiO3: A TEM Perspective, Advanced Functional Materials, 22(16): 1616-3028. https://doi.org/10.1002/adfm.201200282

[3] K.C. Meyer, M. Gröting und K. Albe (2015), Octahedral tilt transitions in the relaxor ferroelectric Na1/2Bi1/2TiO3. Journal of Solid State Chemistry 227: 117-122. https://doi.org/10.1016/j.jssc.2015.03.023

Last Update: 2022-07-14 23:44