

Nuevos ferroeléctricos por ordenamiento de carga desde primeros principios

Jose Cuevas*, Sebastián E. Reyes-Lillo†

Universidad Andrés Bello, Departamento de Ciencias Físicas, Santiago

*j.cuevasmedina@uandresbello.edu, †sebastian.reyes@unab.cl

Introducción

Los materiales ferroeléctricos poseen dos o más estados polares que se pueden intercambiar por medio de la aplicación de un campo eléctrico externo. En particular, en ferroeléctricos por ordenamiento de carga (FOC), la estructura polar se origina por la combinación de una distorsión estructural no polar y un ordenamiento de carga [1]. Sin embargo, hasta el momento, existen pocos ejemplos de FOC [2, 3], por lo que hay un entendimiento limitado de sus propiedades y funcionalidades. En este trabajo, esperamos predecir nuevos FOC a partir de la base de datos del Materials Project. Imponiendo las condiciones de polar, aislante, metales de transición con diferentes posiciones de Wyckoff y estados de valencia, encontramos aprox. 600 candidatos preliminares a FOC. La polarización eléctrica de estos materiales es estimada usando la teoría moderna de la polarización y métodos de primeros principios.

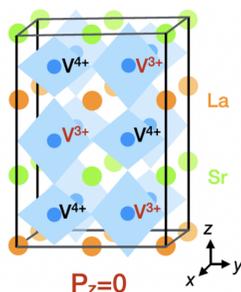


Figura 1: LaVO₃/SrTiO₃ es un ferroeléctrico por ordenamiento de carga, con polarización en la dirección vertical [2].



Agradecimientos: Este trabajo está apoyado por ANID Fondecyt Regular No 1220986.

Referencias

- [1] J. Van den Brink & D. Khomskii, Phys.: Condens. Matter 20, 434217 (2008).
- [2] S. Park, A. Kumar, K. M. Rabe, Phys. Rev. Lett. 118, 087602 (2017).
- [3] K. Yamauchi, T. Fukushima, S. Picozzi, Phys. Rev. B. 79, 212404 (2009).