

Identificación de ferroeléctricos impropios usando métodos de primeros principios y modelos de Landau

Tomás Miranda^{1*}, Sebastián E. Reyes-Lillo

¹Universidad Andrés Bello, Departamento de ciencias físicas, Santiago

*t.mirandacastillo@uandresbello.cl, †sebastian.reyes@unab.cl

Introducción

Los materiales ferroeléctricos poseen una polarización espontánea, reorientable con la aplicación de un campo eléctrico externo, originada por una transición de segundo orden desde una estructura polar a una no polar. En el caso de un ferroeléctrico propio, la transición ferroelectrica puede ser estudiada usando el modelo de Landau $F = a(T-T_c)P^2 + bP^4$, donde la polarización corresponde al parámetro de orden. En los materiales ferroeléctricos impropios (e.g. YMnO₃) [1], la polarización no es el parámetro de orden principal, el modo vibracional en el centro de la zona de Brillouin es estable. Sin embargo, la ferroelectricidad se origina debido a un modo vibracional no polar inestable en el borde de la zona de Brillouin, y a su acoplamiento con el modo polar P. En este caso, la expresión de Landau es:

$$F = F_0 + aQ_{K3}^2 + bQ_P^2 + cQ_{K3}^3 Q_P$$

Metodología

Recientemente, se identificaron 255 posibles ferroeléctricos usando métodos de primeros principios y la teoría moderna de la polarización [2]. En este trabajo, analizamos los materiales ferroeléctricos de esta base de datos para encontrar posibles ferroeléctricos impropios. Para esto, calculamos la decomposition en modos de simetría usando la herramienta AMPLIMODES de la página web Bilbao crystallographic server [3,4]. Luego, se procederá a analizar el origen estructural de la ferroelectricidad impropia en estos materiales usando modelos de Landau.



Figura 1: Ejemplo

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

Referencias

- [1] C. J. Fennie, K. M. Rabe, *Phys. Rev. B* **72**, 100103(2005)
- [2] T. E. Smidt, S. A. Mack, S. E. Reyes-Lillo, A. Jain, J. B. Neaton, *Sci Data* **7**, 72 (2020)
- [3] D. Orobengoa, C. Capillas, M.I. Aroyo, J.M. Perez-Mato *J. Appl. Cryst.* **42**, 820-833 (2009).
- [4] J. M. Perez-Mato, D. Orobengoa, M.I. Aroyo, *Acta Cryst A* **66** 558-590 (2010).