

10-054

Estudo mecânico-quântico das perovisquitas do tipo (Pb,Ba,Ca)TiO₃ e (Pb,Ca,Sr)TiO₃

Pontes, D.S.L. (1); Pontes, F.M.(2); Longo, E. (1)

(1) UFSCar; (2) UNESP-Bauru

Perovisquita é a estrutura mais comum vista nos materiais ferroelétricos, o qual tem sido amplamente utilizado na indústria de dispositivos nas últimas décadas. Dentre essa classe de materiais o PbTiO₃ é um dos materiais extensamente estudado devido a sua ampla faixa de aplicações como, por exemplo, capacitores, sensores piroelétrico e piezelétrico, memórias ferroelétricas. A substituição do Pb²⁺ pelos íons Ba²⁺/Ca²⁺ e Ca²⁺/ Sr²⁺ no sistema PbTiO₃, o qual conduziu a formação de sistemas PBCT e PCST, produziu varias mudanças nas propriedades elétricas e estruturais desses materiais. Os cálculos foram desenvolvidos com o programa crystal06, aplicando-se a teoria do funcional de densidade, com o funcional híbrido B3LYP para estudar esta importante classe de materiais. A estrutura eletrônica, energia do band gap, e densidade de estados (DOS) nos cristais ferroelétricos PBCT e PCST foram estudadas para investigar e interpretar melhor a influencia dos pares de íons Ba/Ca e Ca/Sr na ferroeletricidade do sistema PT. Pela análise teórica o grau de polarização bem como de tetragonalidade diminuiu no sistema PCST comparado ao PBCT, devido à presença agora de um forte caráter de ligações iônicas dentro do cristal, favorecendo o sistema a ter uma maior simetria, ou seja, menor distorção tetragonal que conduz menor grau de polarização.