

A. González Vazquez<sup>1</sup>, M.E. Fuentes Montero<sup>2</sup>, L.E. Fuentes Cobas<sup>1</sup>, J. M. Nápoles Duarte<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados S. C. Miguel de Cervantes No. 120, C.P. 31136, Chihuahua, Chihuahua, México.

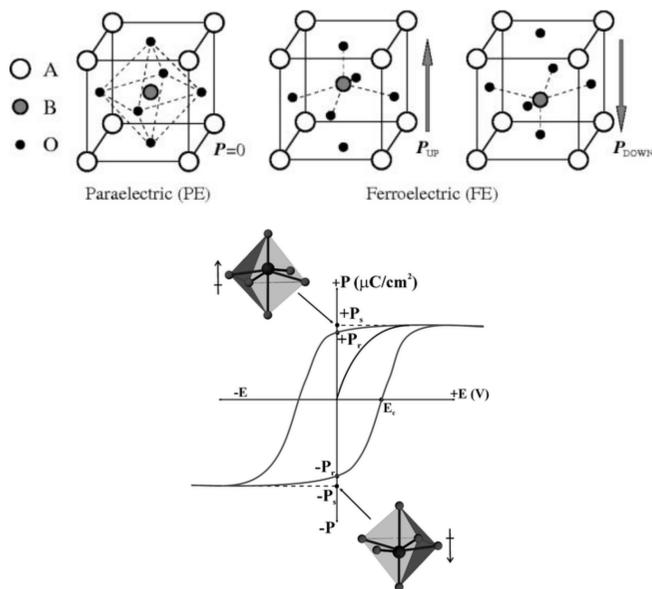
<sup>2</sup> Universidad Autónoma de Chihuahua. Circuito Universitario 2, Campus II Uach, C.P. 31125 Chihuahua, Chihuahua

## Resumen

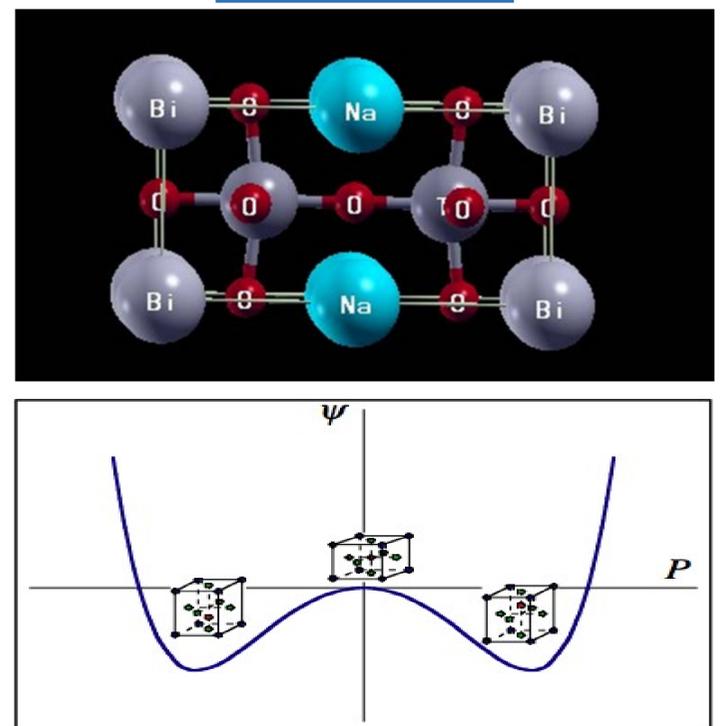
EL  $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$  (NBT) es una perovskita con desorden en el sitio A, es uno de los principales candidatos para sustituir a los materiales ferroeléctricos en base de plomo, que deben de ser remplazados debido a la gran contaminación que se emite en su procesamiento. La simulación de materiales permite elucidar y explicar, mediante principios, las razones por las que los materiales se comportan como lo hacen, permitiendo diseñar sus propiedades, en un futuro cercano, con una gran exactitud

## Justificación

Los materiales ferroeléctricos son muy usados en la industria electrónica, pero su principal ejemplo es la PZT ( $\text{PbZr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48}\text{O}_3$ ), por lo que su procesamiento conlleva una contaminación considerable. Por lo mismo existe un movimiento en la comunidad científica e industrial para encontrar alternativas a este. En esta ventana de oportunidad en donde nace el estudio del titanato de sodio-bismuto.



## Resultados



## Aplicaciones

Existe un nuevo campo de uso de los ferroeléctricos, los materiales magnetoeléctricos (monofásicos y compositos) : al usar los materiales piezoeléctricos en conjunto con materiales magnetostrictivos es posible conseguir propiedades muy versátiles. Una de las principales es en el tratamiento del cáncer.

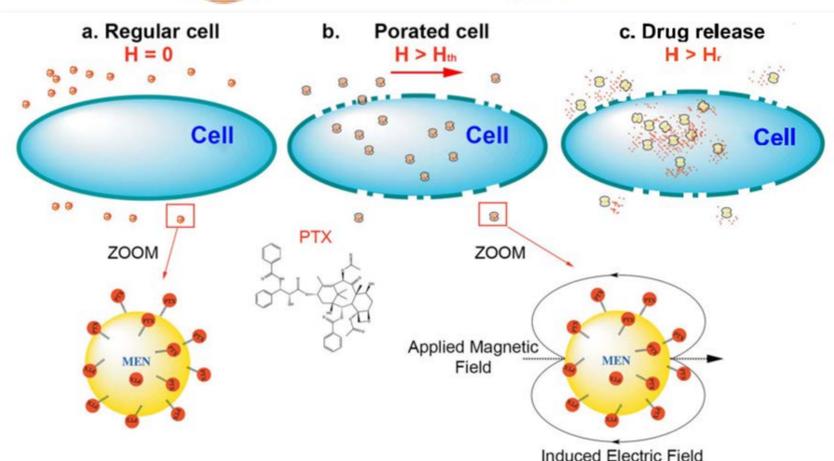
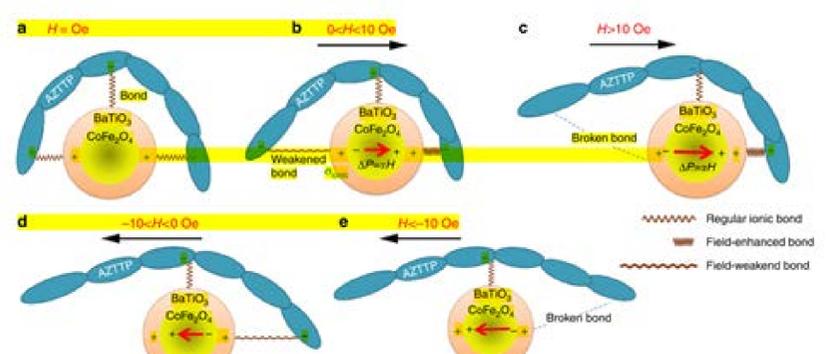
## Metodología

A partir de la teoría del funcional de la densidad (DFT), se estudia la característica principal de los ferroeléctricos, la polarización, desde el formalism de la fase de Berry.



$$p = \frac{1}{a} \left( \sum_i (q_i x_i)^{ions} + \sum_n^{occ} (q_n \bar{r}_n)^{WFs} \right)$$

$$\begin{aligned} \delta p &= p^f - p^0 \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_i [q_i^f \mathbf{r}_i^f - q_i^0 \mathbf{r}_i^0] \\ &\quad - \frac{2ie}{(2\pi)^3} \sum_n^{occ} \left[ \int_{BZ} d^3\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left\langle u_{n\mathbf{k}}^f \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}^f}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle - \left\langle u_{n\mathbf{k}}^0 \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}^0}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \right] \end{aligned}$$



## Referencias

- N. a. Spaldin, "A beginners guide to the modern theory of polarization," *J. Solid State Chem.*, vol. 195, pp. 2–10, 2012.
- M. Sepliarsky, A. Asthagiri, S. R. Phillpot, M. G. Stachiotti, and R. L. Migoni, "Atomic-level simulation of ferroelectricity in oxide materials," *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, vol. 9, no. 3, pp. 107–113, Jun. 2005.