

Atomistische Simulationen zu ferroelektrischen Materialien

Anna Grünebohm

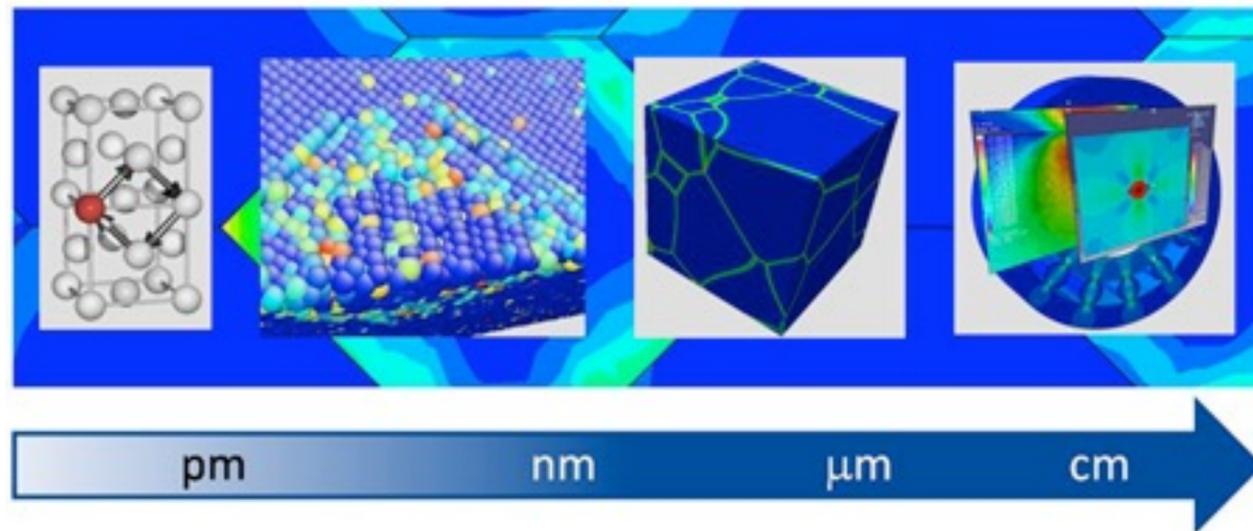
Interdisciplinary Centre for Advanced Materials Simulations (ICAMS)
Zentrum für Grenzflächendominierte Höchstleistungswerkstoffe (ZGH)
Ruhr-Universität Bochum
Deutschland



DFG



Modelling across the length scales



ICAMS Mission: Entwicklung und Anwendung von Simulationswerkzeugen für die Multiskalenmodellierung von Werkstoffen

Ziel: Entwicklungskosten und -zeiten für neue Werkstoffe senken



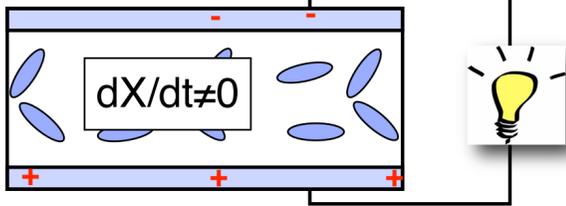
Ausbildung:

- Bachelor
Materialwissenschaft <http://www.mawi.rub.de/>
- Internationales Masterprogramm:
Materials Science and Simulation

Scale-bridging simulation of Functional Composites

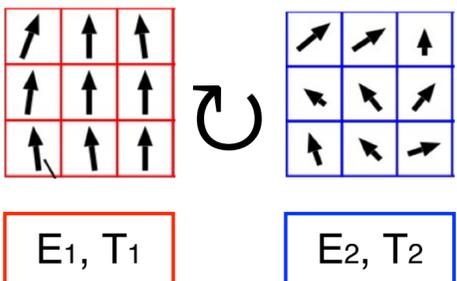
Funktionelle Eigenschaften

Energiekonversion



$X: T, \sigma$

ferroic cooling



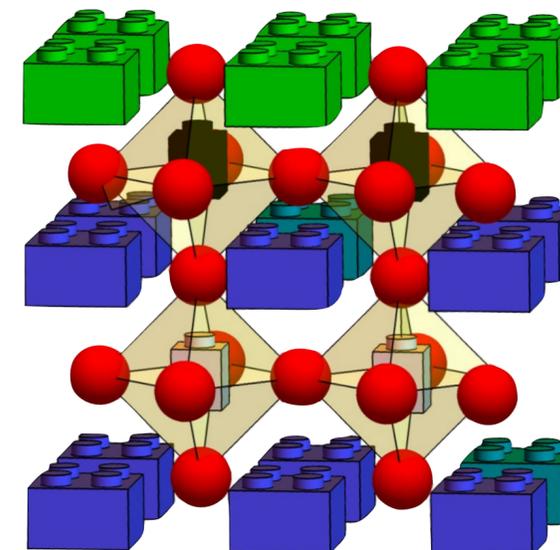
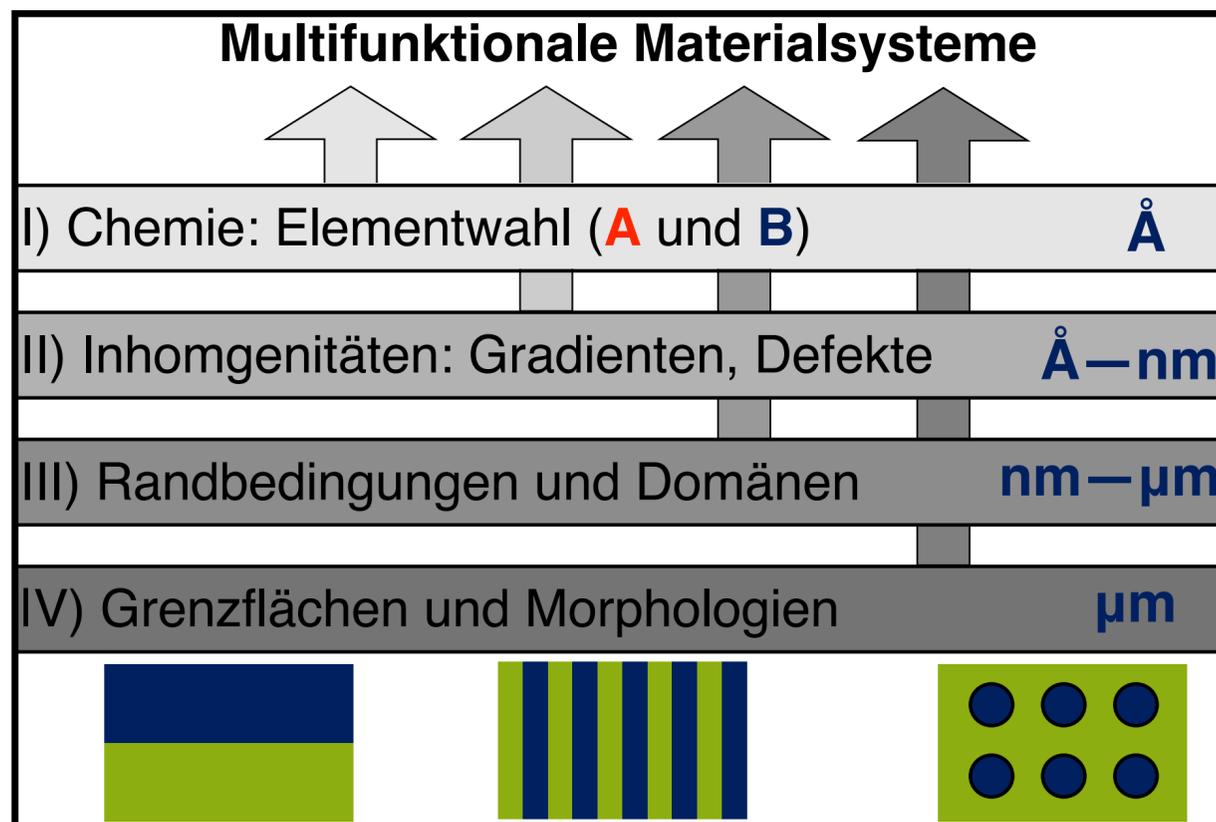
E_1, T_1 E_2, T_2

Anforderungen

- große, reversible Response
- geringe Verluste
- passender Operationsbereich
- Kontrolle: Ermüdung, Alterung
- Nachhaltige Werkstoffe



ZIEL: fundamentales Verständnis und Materialdesign



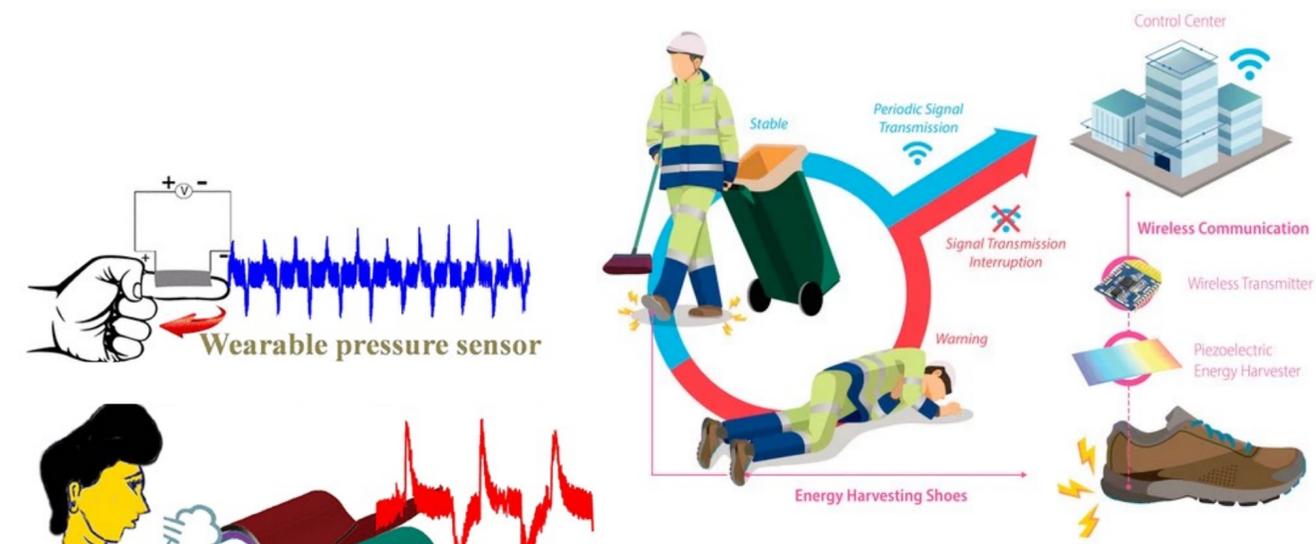
Ausgangspunkt: Perovksite

- stabil
- vielfältig
- bereits oxidiert

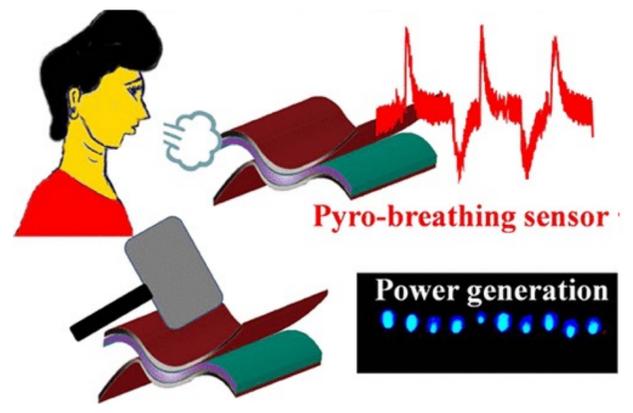


Anwendungen

- Sensoren
- Energiekonversion
- Piezoelektrische Anwendungen
- Datenspeicher
- Energiespeicher
- Energiesparende Computertechnologie und Elektronik
- Hochfrequenz-elektronik
- Kühltechnologien



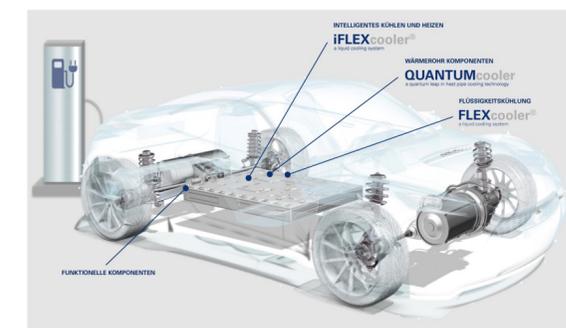
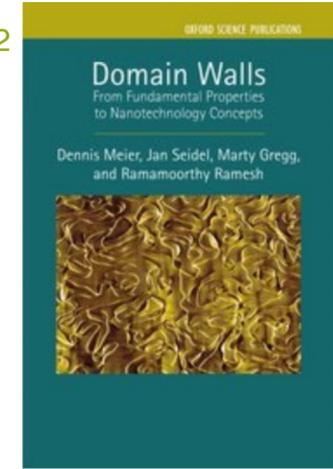
Jeong, *Energies* **15**, 237, 2022



Roy et al., *ACS Appl. Nano Mater.* **2**, 2013, 2019

Domain wall nanoelectronics

Rev. Mod. Phys., **84**, 119, 2012



<https://www.miba.com>



Ma et al., *Science* **357**, 1130, 2017



©wikipedia

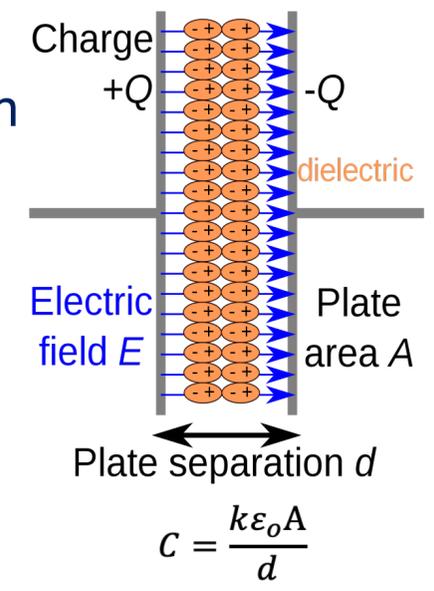


©wikipedia

Kondensatoren



©TDK, Europa



$$C = \frac{k\epsilon_0 A}{d}$$

©wikipedia

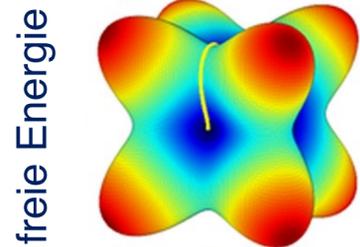
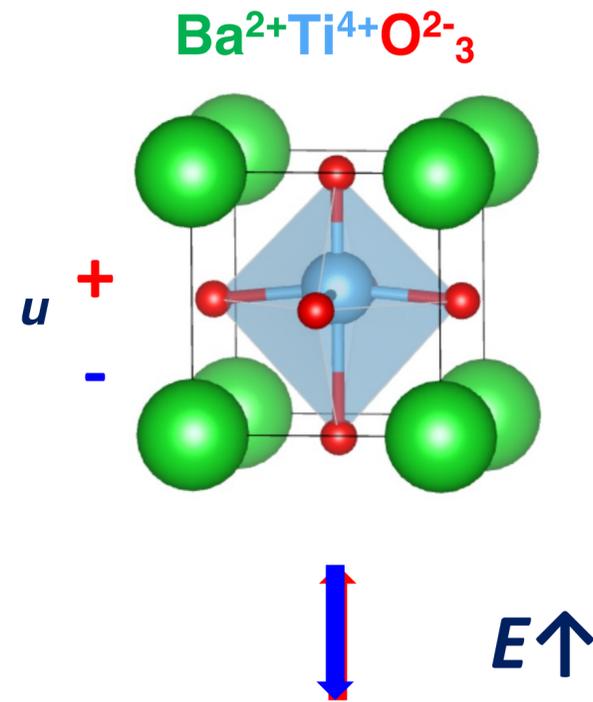
Roger W. Whatmore et al. *APL Materials* **9**, 070401 (2021)

“Der Weltmarkt für ferroelektrische Materialien und Bauelemente in diesem Jahrzehnt wird ca. 100 Milliarden US-Dollar erreichen“

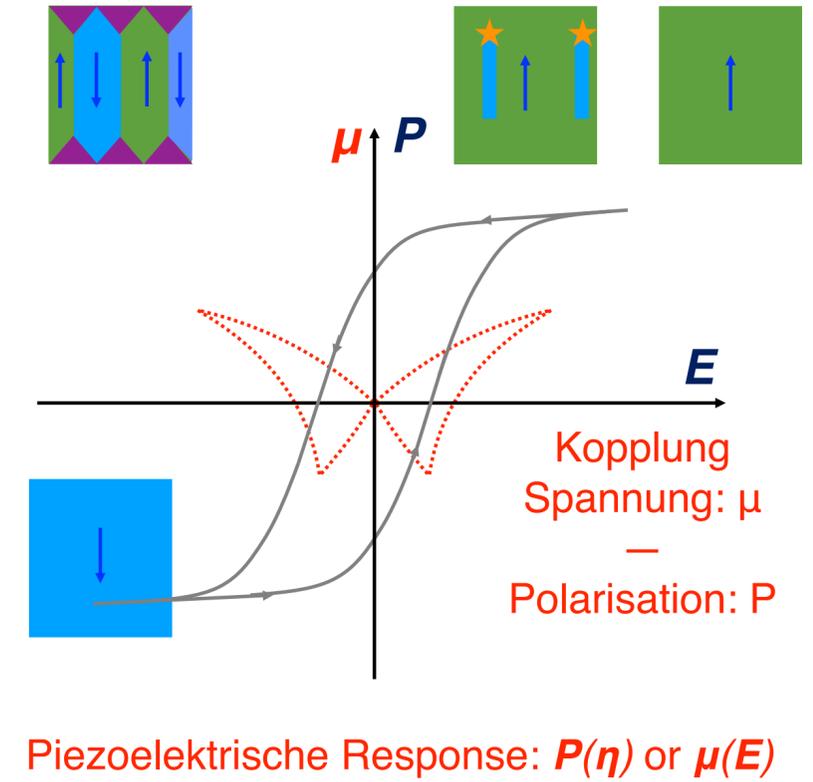
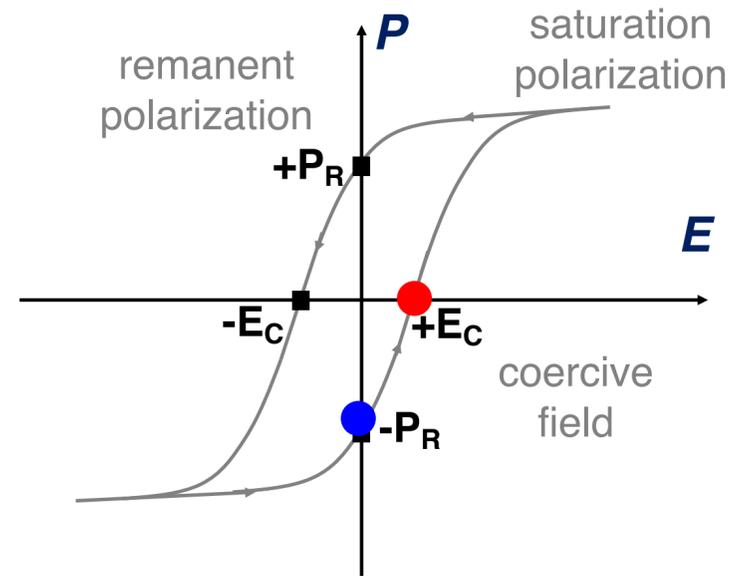


Einführung

(ferroelektrische Phase)



Yang *et al.*, *Sci. Rep.* **6**, 33392, 2016



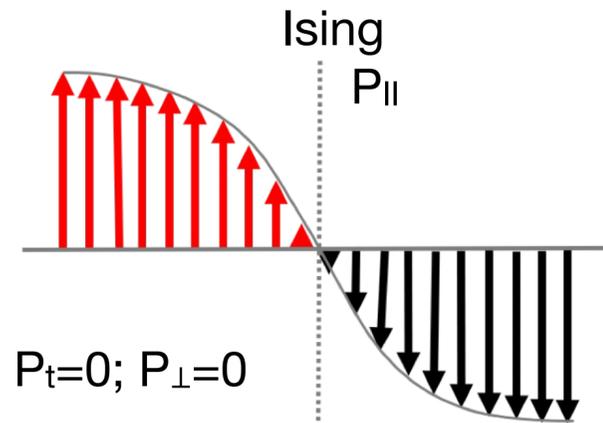
Die Domänenstruktur(dynamik) dominiert die funktionelle Response

AG *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **34**, 073002

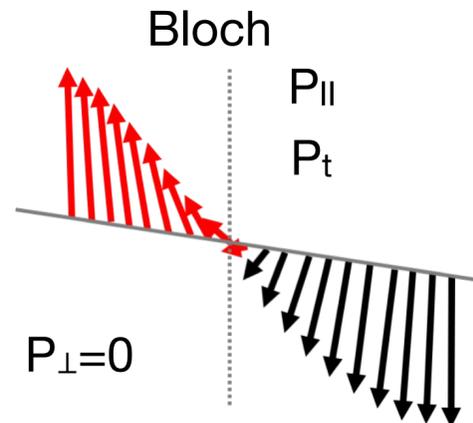


Einführung: Domänenwände

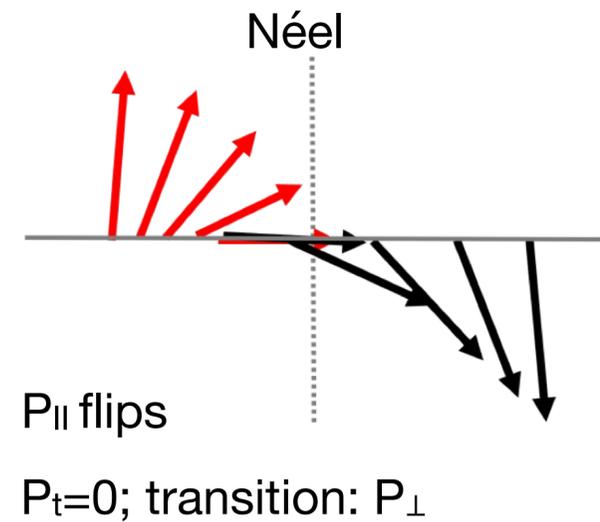
- Domänenwände: Grenzflächen im Material, der Ordnungsparameters wechselt die Richtung



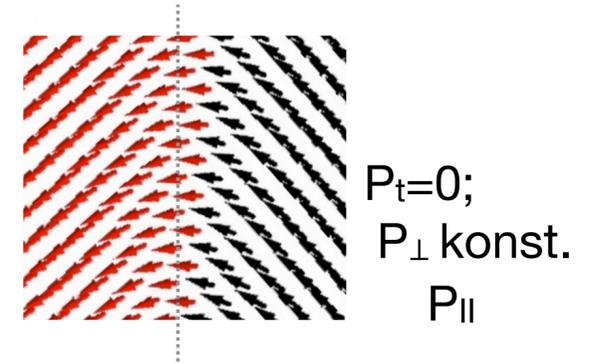
ferroelectric
T 180°: <0.5 nm



magnetisch:
Fe: >100 nm



magnetische dünne Filme



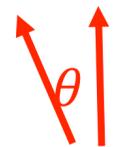
elastisch

- Relevante Energien

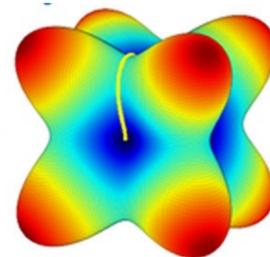
Fe: $\Delta E_{FM-NM} \approx 160$ meV/atom

BaTiO₃: $\Delta E_{FE-NFE} < 10$ meV/atom

Intrinsische Instabilität



Nachbarn



Anisotropie



elastische Energie

details: Spaldin: *Physics of Ferroelectrics*, (Springer, 2007) p.175

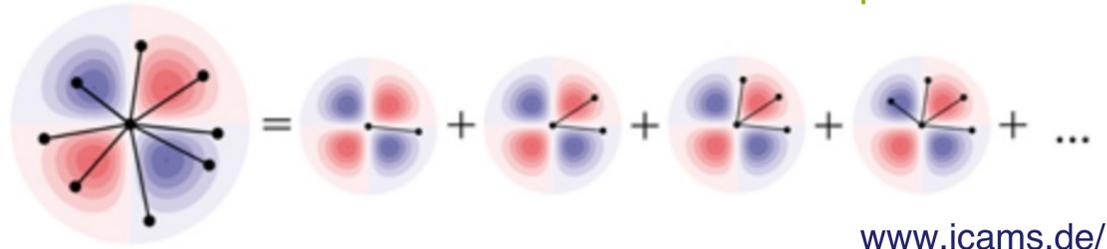


Methodik: Simulationsmodelle

Ziele

- Modelle mit Vorhersagekraft
- Mikrostruktur (\AA – μm)
- Endliche Temperaturen und zeitabhängige Felder

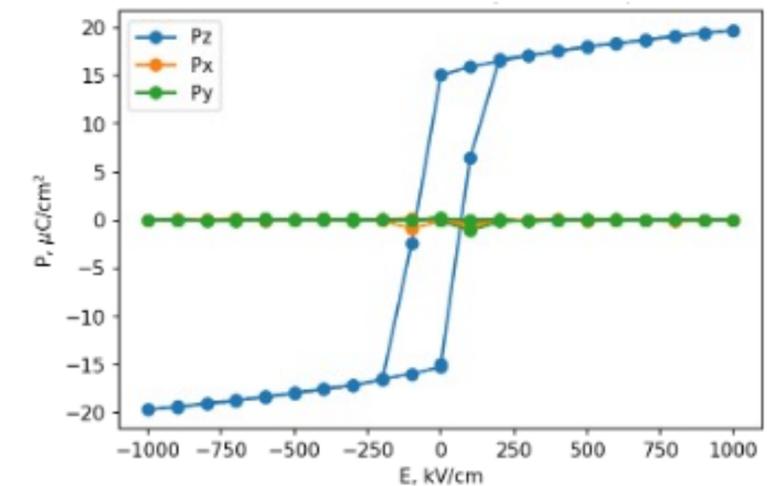
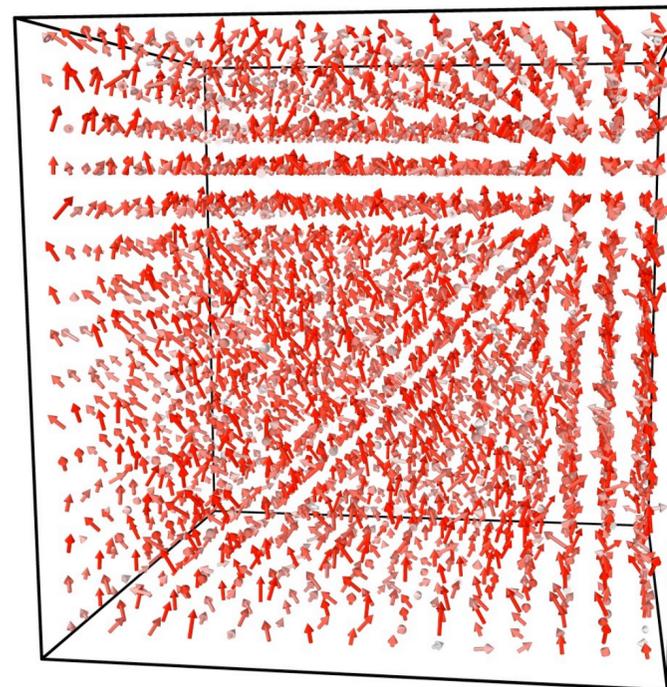
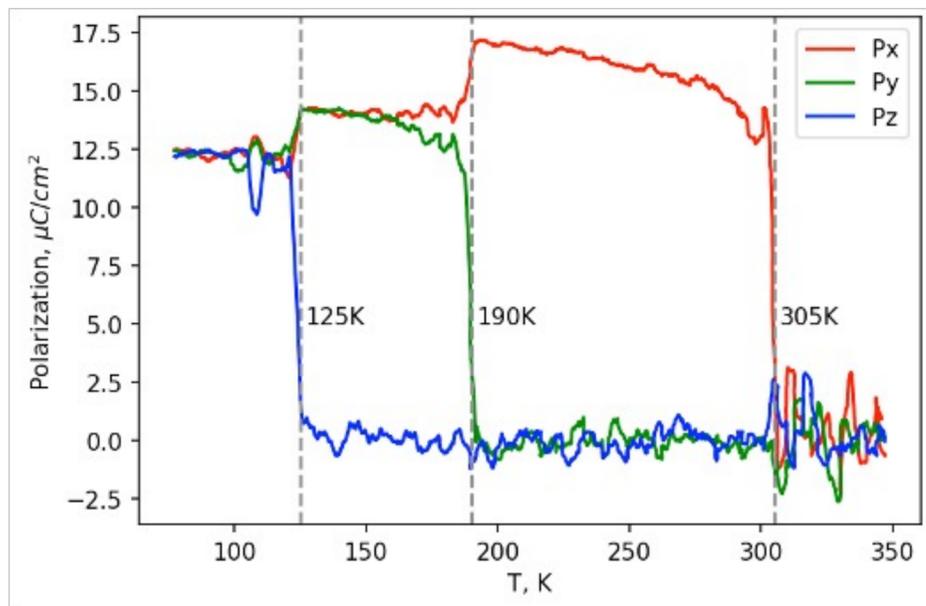
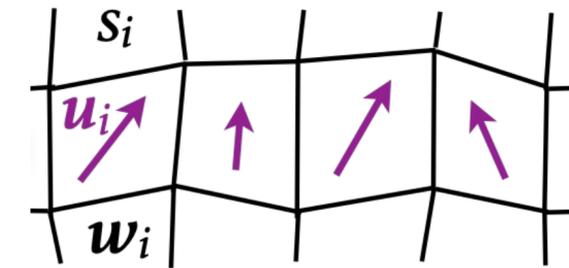
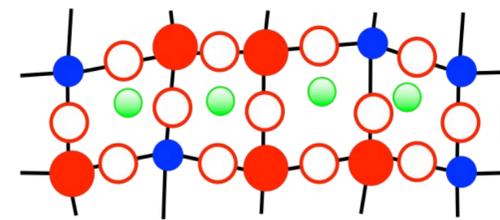
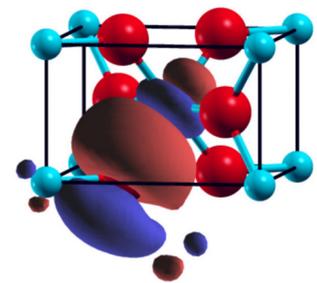
Maschinelles Lernen: Atomic Cluster Expansion



Dichtefunktionaltheorie

Atomistische Potentiale

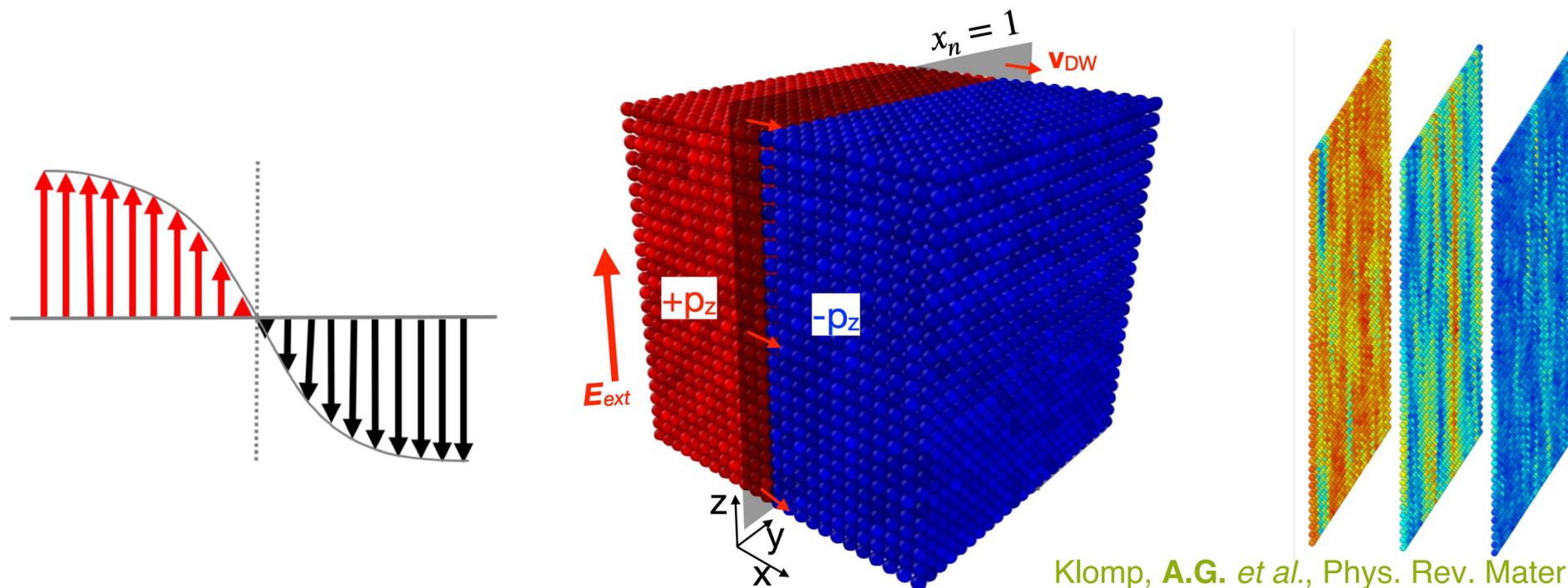
H_{eff} Zhong *et al.*, Phys. Rev. B **52**, 6301, 1995



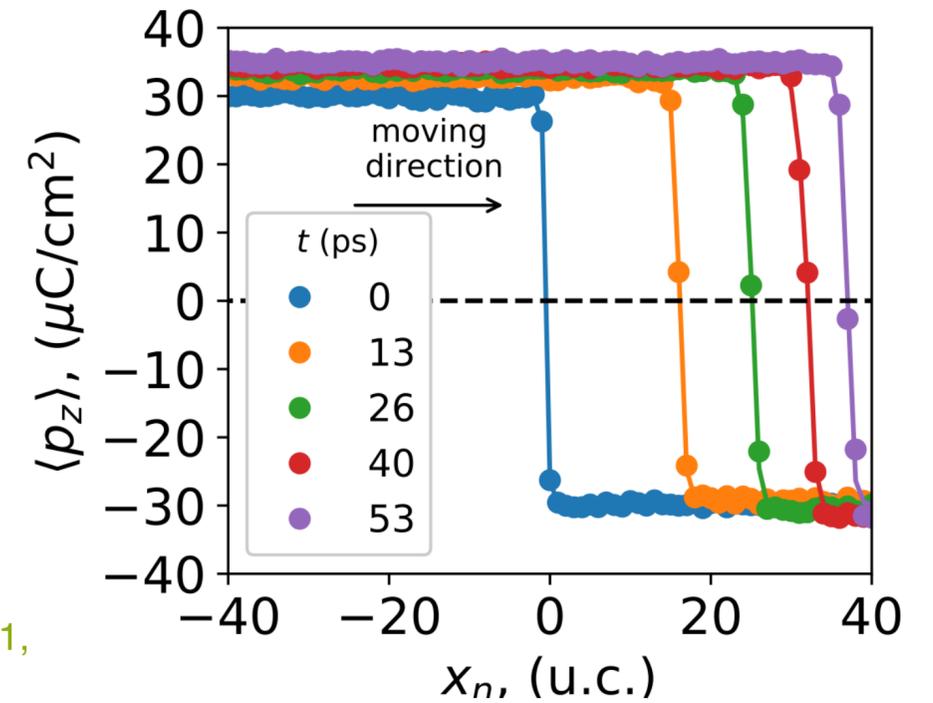
Lysogorskiy, Rinaldi, Bochkarev, Dimou, Mrovec, Popov, **AG**, Drautz
(in preparation)



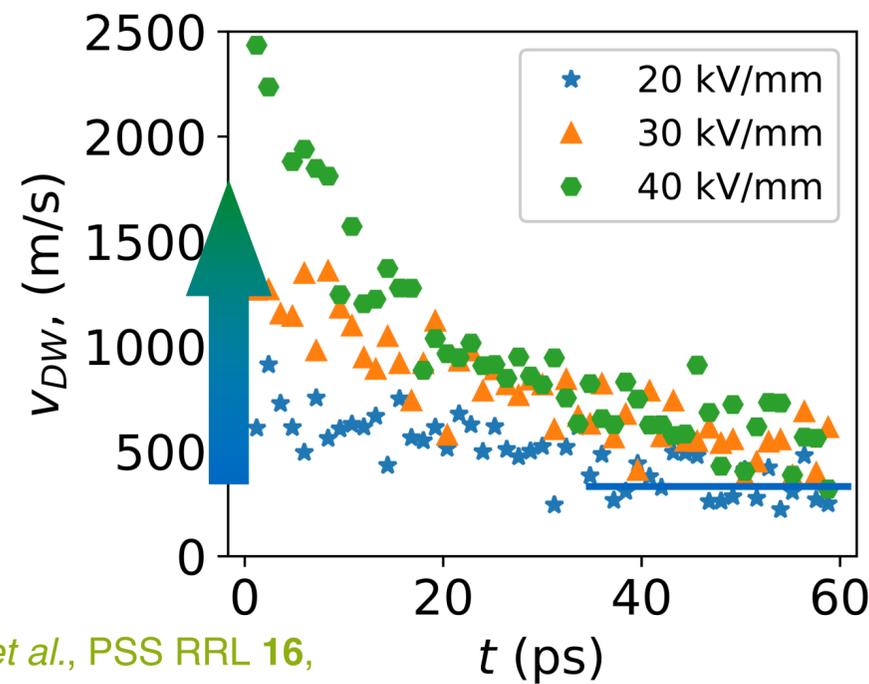
Domänenwände



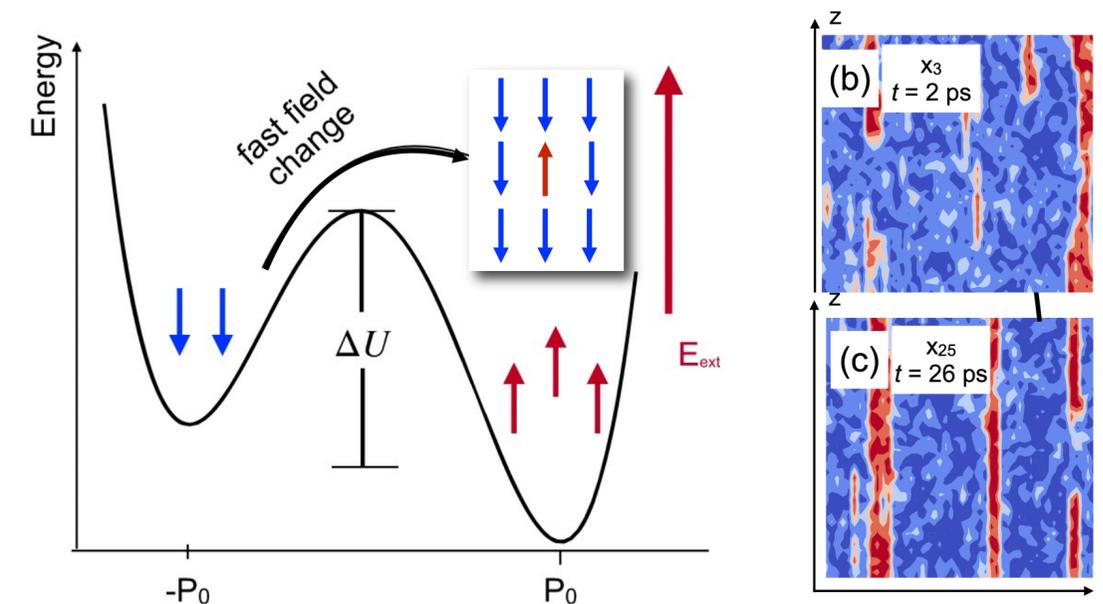
Klomp, A.G. et al., Phys. Rev. Mater., 6, 104411, 2022



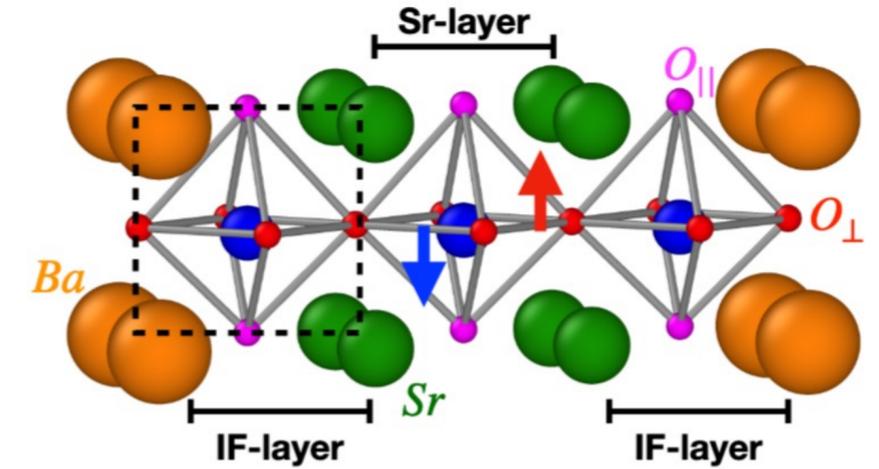
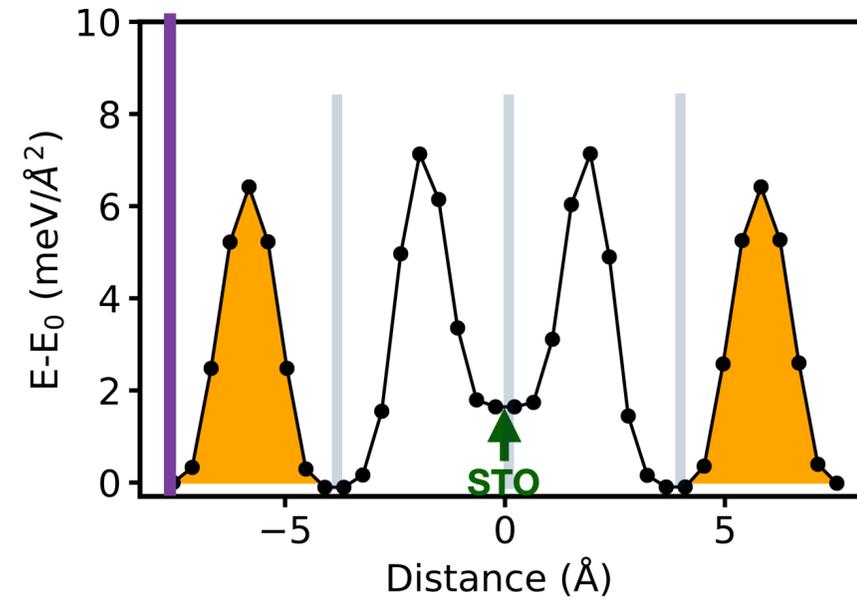
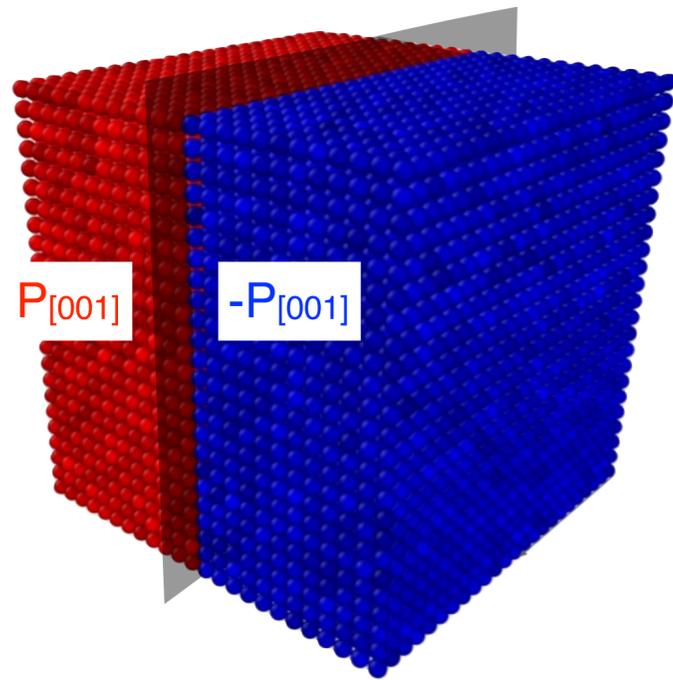
- Domänenwand
- Nukleation bestimmt die Stabilität
- E-Feld: Stabilisation einer Domäne ($E \sim -\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}$)
- Domänenwandbewegung
 - Stationär: v_{DW} konstant
 - Beschleunigung?
 - Feldpuls



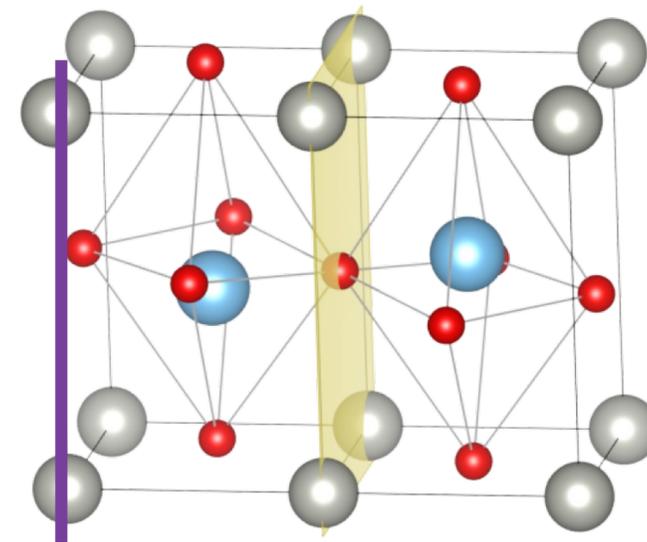
Khachatryan, A.G. et al., PSS RRL 16, 2200038



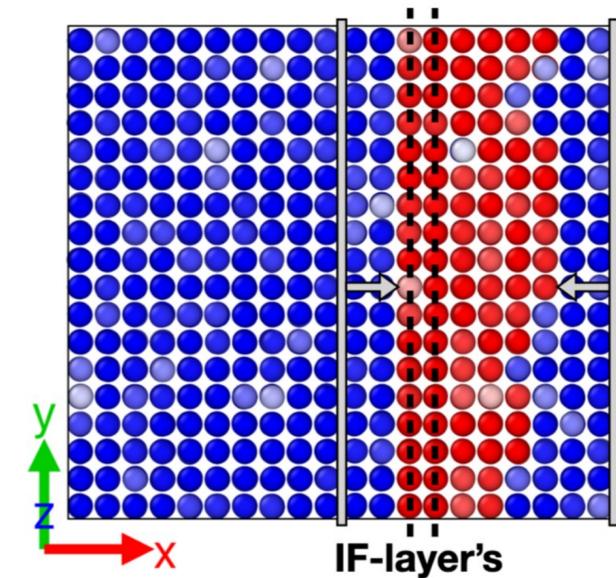
Scale-bridging simulation of Functional Composites



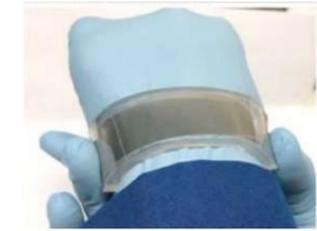
- Domänenwand
 - Nukleation bestimmt die Stabilität
 - E-Feld: Stabilisation einer Domäne
($E \sim -\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}$)
 - Domänenwandbewegung
 - Energiebarriere
 - Pinning durch Konzentrationsgradienten



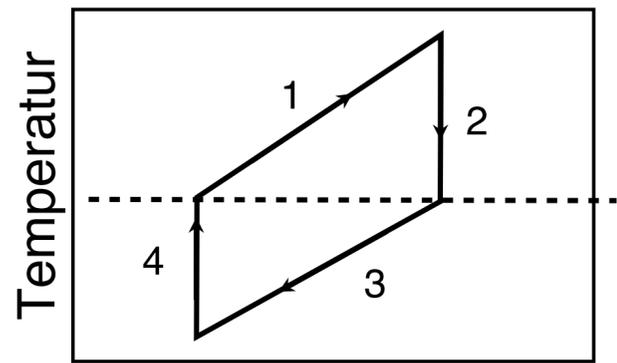
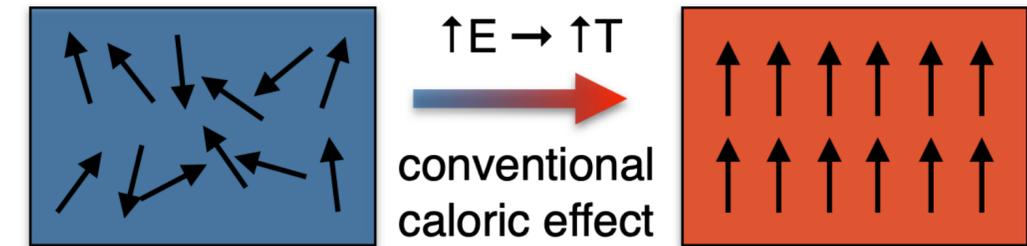
Dimou, A.G. et al., Phys. Rev. B, 106, 094104



Einführung: caloric cooling



- Probleme
 - Energiebedarf
 - Toxische und treibhausaktive Materialien
 - Miniaturisation



$$G = U - TS + pV$$

$$G = U - TS - E \cdot P$$

Kompressor → Elektrisches Feld

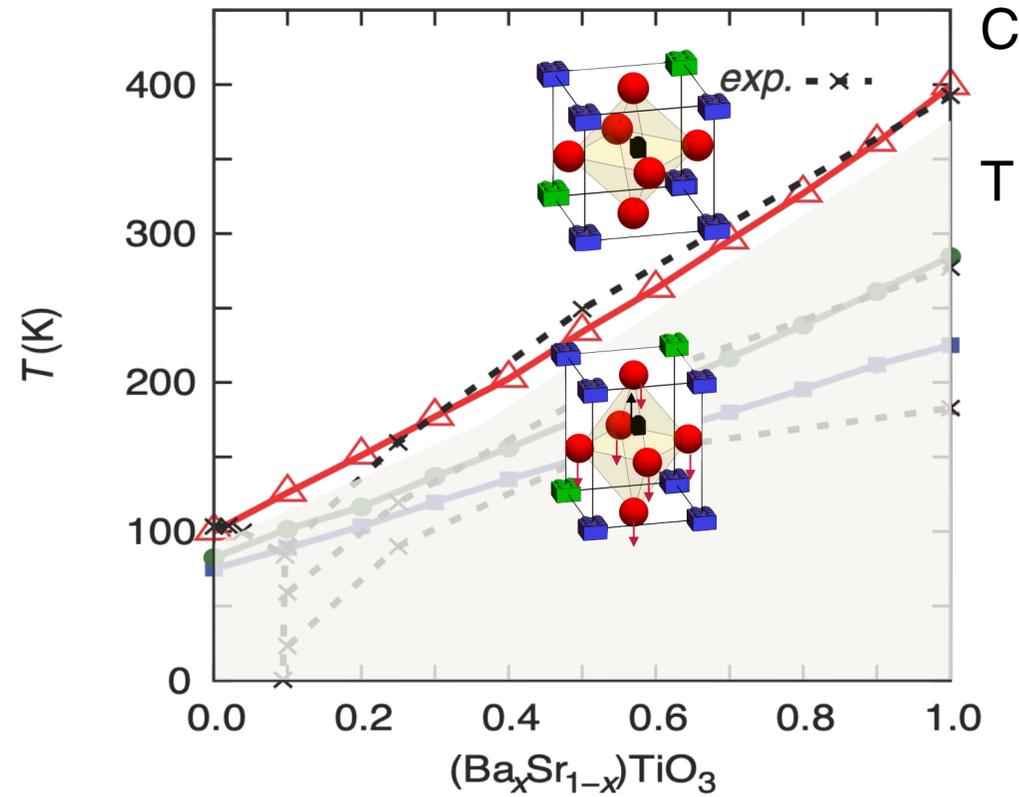
- **E** an: Reduktion der Konfigurationsentropie
 - adiabatisches Heizen
- **E** aus: Anstieg der Konfigurationsentropie
 - adiabatisches Kühlen



Design: caloric cooling

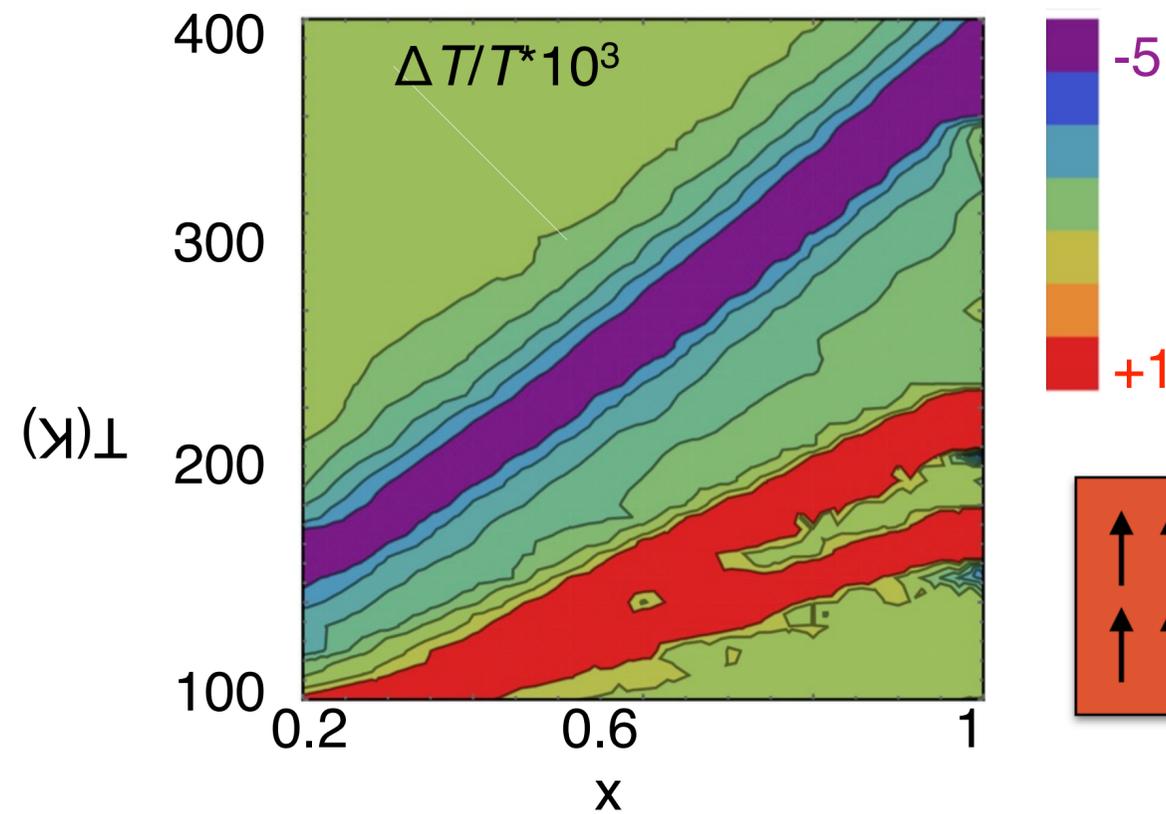
Sr:  113 pm

Ba:  135 pm



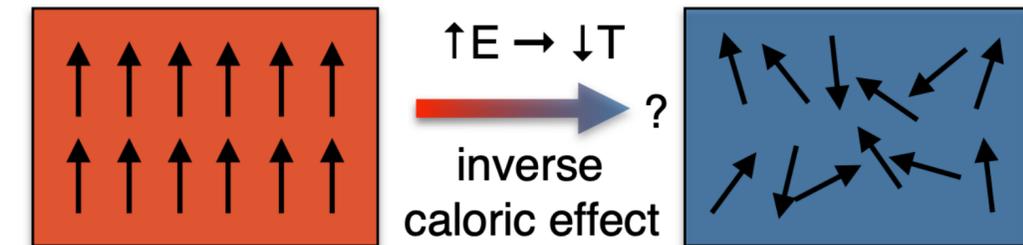
Nishimatsu, **A.G.** *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 114714, 2016

100 kV/cm → 0 kV/cm



A.G. and Nishimatsu, Thermag Proc., 2018

- Probleme
 - Operationsbereich
 - Maximale Response am Phasenübergang
 - Inverser Effekt?



A.G. *et al.*, Energy Technol. **6**, 1491, 2018

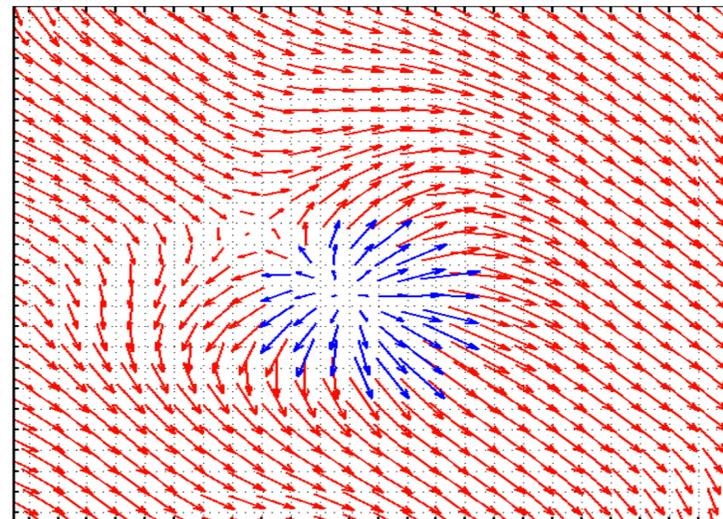
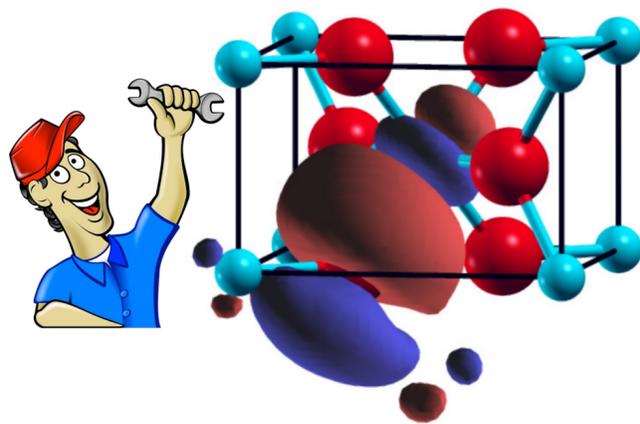
- Substitution Ba → Sr
 - Lineare Reduktion: T_c
 - Maximal ΔT : $T_c + \Delta T$
 - $\Delta T(T) \rightarrow \Delta T/T \approx \text{const.}$

$$\Delta T = - \int_{E_1}^{E_2} \frac{T}{C(E, T)} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_E dE$$



Atomistische Simulationen zu ferroelektrischen Materialien

- Ferroelektrische Materialien sind relevant für viele Anwendungen
- Domänenwände und Phasenübergänge bestimmen die funktionelle Response
- Atomistische Simulationen können wesentlich zum Verständnis beitragen



Vielen Dank!

