

RAPORTUL ȘTIINȚIFIC ȘI TEHNIC REZUMAT Etapa I/2016

Nanomateriale și arhitecturi inovatoare pentru aplicații integrate de captare a energiei piezoelectrice

Etapa I: Cercetare privind proprietățile piezoelectrice și electromecanice ale nanoparticulelor și filmelor subțiri

În cadrul acestei etape au fost finalizate cu succes obiectivele. În cadrul „*Studiu privind definirea cerințelor tehnice ale materialelor feroelectrice în sprijinul activităților din WP2*” s-a încercat calcularea preliminară cu software CRYSTAL a constantelor elastice și piezoelectrice pentru cristalele brute de două tipuri. A fost necesară "calibrarea" schemei de calcul asumate în ceea ce privește precizia și durata calculelor. S-au comparat rezultatele obținute cu datele experimentale disponibile în literatură.

În calcule, s-a folosit teoria funcționalei de densitate (DFT). S-au testat câteva seturi de baze ale combinației liniare ale orbitalilor atomici, LCAO (date comparative fiind pe site-ul web CRYSTAL [5]). După mai multe calcule de test s-au ales parametrii de calcul adecvați (SHRINK, TOLDEG, TOLDEX, TOLDEE, TOLINTEG) pentru calculele optime ale structurilor cu proprietăți feroelectrice.

În „*Studiul privind definirea cerințelor tehnologice ale materialelor feroelectrice în sprijinul activităților din WP3*” s-a exemplificat conceptul pentru sinteza pulberii PMN-35PT, unde au fost folosite următoarele materiale: PbO (99,9%, Aldrich), MgO (98%, Aldrich), TiO₂ (99,8%, Alfa Aesar) și Nb₂O₅ (99,9%, Aldrich). Un amestec de oxizi menționați în raportul molar corespunzător stoichiometric PMN-35PT cu un exces de 2 mol% de PbO a fost măcinat într-un Retsch, într-o moară Model PM 400 planetară timp de 72 ore la 300 rpm, și, suplimentar, într-o moară cu frecare timp de 4 ore la 800 rpm. După aceea, pulberea a fost încălzită la 700°C timp de o oră. Folosind un amestec de pulbere și un suport organic, se prepară pasta de PMN 35PT în strat gros. Pasta PMN 35PT a fost imprimată pe substratul ceramic cu uscare intermediară la 150°C, după fiecare etapă de imprimare. Probele au fost presate la 50 MPa, încălzite la 500°C timp de o oră pentru a descompune suportul organic, și sinterizate la 850°C timp de 2 ore acoperite cu un strat de pudră pe bază de Pb.

Suprafețele probelor au fost investigate cu FE-SEM JSM 7600F (INFM București). Dimensiunea medie a granulei (GS) a fost estimată din imaginile SEM ale suprafeței filmului.

Filmele PMN-35PT au fost imprimate prin serigrafie, uscate și după aceea încălzite la 500°C timp de o oră pentru a arde suportul ecologic. Microfotografia suprafețelor filmului PMN 35PT după ardere dezvăluie o microstructură poroasă cu media estimată a GS de $\sim 0,8 \mu\text{m}$. Domeniile cel mai frecvent observate pe filme au forme neregulate, de la domeniile de câteva sute de nanometri până la domenii de dimensiuni micrometrice. Exemple de astfel de domenii cu forme neregulate sunt marcate prin săgeți în imaginile PFM de amplitudine atât în afara planului, cât și în plan.

CONCLUZII

Studiile realizate: *“Studiul privind definirea cerințelor tehnice ale materialelor feroelectrice în sprijinul activităților din WP2”* și *“Studiul privind definirea cerințelor tehnologice ale materialelor feroelectrice în sprijinul activităților din WP3”*, au fost relevante pentru colaborarea cu partenerii din Latvia, Slovenia și București, conducând la desfășurarea cu succes a acestor pachete de activități atât în ceea ce privește modul de simulare la nivel de nano/microscala cât și la realizarea preliminară de structuri piezo în straturi groase pe bază de nanoparticule dezvoltate în paralel de institutul JSI din Slovenia și institutul INFM din București.

S-a reușit astfel o demonstrare preliminară a obținerii filmelor tip PMN-35PT cu o grosime de $\sim 60 \mu\text{m}$ pe substraturi ceramice. Aceste filme expun coeficient piezoelectric d_{33} la 120 pC/N. S-au observat domeniile relaxor feroelectric-lamelare în filmele PMN-35PT pe substrat. Domeniul de comutare a fost confirmat la nivel local, prin microscopie de forță piezorăspuns.