

RAPORTUL ȘTIINȚIFIC ȘI TEHNIC REZUMAT Etapa II/2017

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

Etapa I: Integrarea particulelor feroelectrice în filmele subțiri și caracterizarea acestora.

În cadrul acestei etape au fost finalizate cu succes toate obiectivele propuse în cadrul activităților aferente etapei și prevăzute în planul de realizare, cum ar fi: studiu preliminar de exploatare și implementare în vederea demarării activităților din WP5 și WP6, studiul proprietăților dielectrice ale filmelor ceramice obținute

În cadrul acestei etape s-a realizat conversia topochimică plăcilor $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ în plăci de tip perovskit MTiO_3 ($M = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$) în sare topită NaCl / KCl în condiții hidrotermale. Obiectivul principal a fost conservarea formei șablonului ($\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$), mai ales, având în vedere că, aparent, o astfel de conversie în condiții hidrotermale nu a mai fost raportată în literatura de specialitate.

Tot în cadrul acestei etape s-a efectuat un studiu teoretic al proprietăților electromecanice/piezoelectrice ale soluției solide tetragonale de $\text{Ba}_{(1-x)}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$ (la temperatura camerei) prin intermediul unor calcule primare bazate pe funcționalități hibride avansate ale teoriei densității funcționale. Modelul supercelei a fost utilizat pentru calcularea proprietăților electromecanice ale soluțiilor solide de tip perovskit. Au fost considerate trei compoziții ($x = 0$, $x = 0.125$ și $x = 0.25$) în intervalul în care soluția solidă este cunoscută experimental ca prezentând un comportament feroelectric.

CONCLUZII

În cadrul etapei au fost investigate proprietățile electromecanice/ piezoelectrice ale soluției solide tetragonale BSTO. S-au calculat constantele elastice și piezoelectrice, care au arătat că dacă este dopat cu Sr, BTO își îmbunătățește proprietățile electromecanice. Avantajul soluției solide $\text{Ba}_{(1-x)}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$, spre deosebire de BTO, este că tranziția de fază structurală, care

are loc în BTO la 5°C, se schimbă la temperaturi mai scăzute dacă x crește. Ca rezultat, s-a constatat că nu există o fază de tranziție în BSTO într-un interval mare de temperatură în jurul temperaturii camerei, ceea ce duce la o proprietate piezoelectrică de temperatură stabilă, importantă pentru aplicații practice.

În ultima parte a etapei au fost efectuate calcule pentru soluțiile solide de $(\text{Ba,Sr})\text{TiO}_3$ și $(\text{Ba,Ca})\text{TiO}_3$. Creșterea semnificativă a proprietăților piezoelectrice a fost prevăzută odată cu creșterea concentrației de Sr (sau Ca) de la 0 la 25%.

A fost studiată tulburarea de configurație a soluției solide BSTO. Rezultatele demonstrează că un astfel de efect are un efect minim asupra proprietăților medii ale sistemului ($<4\%$).

Au fost efectuate calculele pentru soluțiile solide de $\text{Ba}(\text{Ti,Zr})\text{O}_3$ și filmele subțiri de BTO.

Calcularele prezic în mod clar că perovskitul de BaTiO_3 devine mecanic mai greu când atomii de Ba sunt substituiți progresiv cu atomi de Sr. Interesant este faptul că o îmbunătățire semnificativă și aproape liniară a proprietăților piezoelectrice ale BaTiO_3 este prezisă la substituția lui Ba cu atomi de Sr. Într-adevăr, se constată că constanta piezoelectrică directă e_{33} crește cu $\sim 30\%$ pentru $x = 0.25$. Calcularele au arătat că relaxarea nucleară contribuie în principal la piezoelectricitatea BTO și BSTO. Pe de altă parte, tulburarea de configurare afectează marginal proprietățile mecanice și piezoelectrice calculate ale soluției solide de BSTO.

Publicații și participări la manifestări științifice

1. *Innovative Nano-materials and Architectures for Integrated Piezoelectric Energy Harvesting Applications*, Schreiner C., Ciobanu R.C., Vlaicu I., **Plopa O.**, th International Conference on Environmental Science and Technology, Grecia, 31 august-2 septembrie 2017
2. *Polyoxidic Thick Films for Piezoelectric Energy Harvesters*, Hana Ursic, Romeo Ciobanu, **Olga Plopa**, 22nd IMEKO TC4 International Symposium & 20th International Workshop on ADC Modelling and Testing SUPPORTING WORLD DEVELOPMENT THROUGH ELECTRICAL&ELECTRONIC MEASUREMENTS, Iasi, Romania, 14-15 septembrie 2017