

PLAN DE TRABAJO

Título: Acoplamiento magnetoeléctrico en heteroestructuras multifuncionales

Lugar de trabajo: GlyANN, Departamento de Física de la Materia Condensada.

Directoras: Dra. Solange Di Napoli (dinapoli@tandar.cnea.gov.ar, int.7106) - CONICET
Dra María Andrea Barral (barral@tandar.cnea.gov.ar, int.7106) - CONICET

Objetivos del trabajo:

La existencia de múltiples órdenes ferroicos en el mismo material y el acoplamiento entre ellos es conocido desde hace ya varias décadas¹⁻². Sin embargo, este fenómeno se ha mantenido básicamente en el dominio de la física teórica debido a que generalmente estos materiales monofásicos presentan baja temperatura de Curie, magnetización neta pequeña y acoplamiento magnetoeléctrico (MEC) débil, limitando sus potenciales aplicaciones tecnológicas³⁻⁶.

Esta situación ha sido revertida recientemente debido a los grandes avances en las técnicas de crecimiento de films delgados, que han hecho posible la fabricación de estructuras de baja dimensionalidad, tales como films o hilos, o estructuras complejas tales como laminados y heteroestructuras crecidas epitaxialmente. Estas técnicas experimentales abren la posibilidad de explorar nuevos materiales y heteroestructuras artificiales, que en principio, a través de una cuidadosa elección de las condiciones de síntesis, pueden ser diseñados para que tengan accesibles nuevos grados de libertad de tal manera que el acoplamiento entre distintos órdenes ferroicos se intensifique sustancialmente⁷⁻⁹.

Las heteroestructuras del tipo Ferroeléctrico/Ferromagnético (FE/FM) son especialmente interesantes porque permiten el acoplamiento interfacial entre dos parámetros de orden, con una intensidad que depende del mecanismo electrónico que interrelaciona ambos parámetros¹⁰⁻¹¹. En estas heteroestructuras, el MEC puede ser mediado por la tensión debida a la naturaleza piezoeléctrica de la fase FE y la naturaleza magnetostrictiva de la fase FM; puede ser obtenido electrónicamente a través del apantallamiento de la carga de polarización FE en la interfaz; a través de la modificación de los enlaces en la interfaz debido a los desplazamientos del material FE y/o por el efecto de "exchange bias" entre la fase FM y una posible fase AFM del FE¹²⁻¹³. El desafío es diseñar heteroestructuras FE/FM con un fuerte acoplamiento interfacial para lograr efectos magnetoeléctricos importantes.

La naturaleza del acoplamiento entre el magnetismo y la ferroelectricidad es altamente no trivial y no universal e involucra fenómenos complejos. Por lo tanto, su comprensión microscópica es un gran reto y también una necesidad para poder sintonizar las interacciones de los materiales multifuncionales y obtener propiedades eléctricas, magnéticas u ópticas que permitan su aplicación en dispositivos. El objetivo general de este plan de trabajo es contribuir al esclarecimiento de la interrelación entre la ferroelectricidad y el magnetismo en sistemas multiferroicos de baja dimensión a través de métodos de cálculos basados en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT). Desde el punto de vista teórico, está bien demostrado que los cálculos de primeros principios contribuyen a comprender los mecanismos por los cuales se presentan distintos tipos de propiedades en materiales y muchas veces pueden predecir nuevos materiales con comportamientos similares.

Focalizaremos en heteroestructuras del tipo FE/FM. La ventaja de este tipo de sistemas es que se dispone, para su diseño, de dos grupos numerosos de materiales ferroeléctricos y magnéticos con los cuales optimizar la intensidad del acoplamiento magnetoeléctrico, manteniendo grandes polarizaciones y operando a temperatura ambiente. Exploraremos los efectos de la transferencia de carga y la tensión en las interfaces con el fin de estudiar el rol de la dimensionalidad reducida en el multiferroismo. Como material FE consideraremos BiFeO₃ y

BaTiO₃ y dentro de los materiales FM que tendremos en cuenta se encuentran los metales *d* que presentan magnetismo en baja dimensión, tales como el Fe y el Co.

Bibliografía general

- 1- I. E. Dzyaloshinskii, Sov. Phys. – JETP **10**, 628 (1960).
- 2- J. van den Boomgaard, D.R. Terrell, R.A.J. Born, and H.F.J.I. Giller, J. Mater. Sci. **9**, 1705 (1974).
- 3- S.W. Cheong, and M. Mostovoy, Nat. Mater. **6**, 13-20 (2007).
- 4- D. Khomskii, Physics **2**, 20-27 (2009).
- 5- D. Khomskii, J. Magn. Magn. Mater. **306**, 1-8 (2006)
- 6- M. Fiebig, J. Phys. D Appl. Phys. **38**, R123-R152 (2005).
- 7- J. Schwarzkopf and R. Fornari, Prog. Cryst. Growth Charact. Mater. **52**, 159 (2006).
- 8- L.W. Martin, Y.H. Chu, and R. Ramesh, Mater. Sci. Eng., R **68**, 89 (2010).
- 9- D.G. Schlom, J.H. Haeni, J. Lettieri, C.D. Theis, W. Tian, J.C. Jiang, and X.Q. Pan, Mater. Sci. Eng. B **87**, 282 (2001).
- 10- R. Ramesh and N. A. Spaldin, Nat. Mater. **6**, 21 (2007).
- 11- C. Binek, Physics **6**, 13 (2013).
- 12- C. A. F. Vaz, J. Hoffman, C. H. Ahn and R. Ramesh, Adv. Mater. **22**, 2900 (2010).
- 13- C. A. F. Vaz, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 333201 (2012).