

BLEIFREIE FERROELEKTRIKA FÜR SENSOREN UND AKTOREN

Ferroelektrika sind Materialien mit einer spontanen, schaltbaren elektrischen Polarisation. Sie sind piezoelektrisch und können als elektromechanische Aktoren oder Sensoren eingesetzt werden. Beispielsweise finden sich Ferroelektrika in modernen Dieselmotor-Einspritzpumpen: Eine piezoelektrische Ventilansteuerung ist schneller als eine elektromagnetische, ermöglicht daher eine genauere Kontrolle des Einspritzvorgangs und bedingt dadurch eine effizientere Verbrennung.

Zurzeit ist Blei-Zirkonat-Titanat (PZT) eines der am besten geeigneten Materialien für viele elektromechanische Anwendungen. In Zukunft sollen jedoch aus Umweltschutzgründen bleifreie Ersatzmaterialien zum Einsatz kommen. Ein möglicher Kandidat hierfür ist Kalium-Natrium-Niobat (KNN). Beide Materialien kristallisieren in der Perovskit-Struktur. Die Eigenschaften der ferroelektrischen Ausgangsstoffe lassen sich mit Hilfe von Dotierungen, beispielsweise Eisenoxid, optimieren. Bei KNN wird mitunter zusätzlich ein Sinterhilfsstoff, zum Beispiel Kupferoxid, zugesetzt.

Vorgehensweise

In einem DFG-Projekt zusammen mit Experimentalgruppen an den Universitäten Freiburg (Spinresonanz- und elektrische Messungen) und Karlsruhe (Probenherstellung, Strukturbestimmung und elektrische Messungen) untersuchen wir mit Hilfe von Computersimulationen auf atomarer Skala die Auswirkungen von Kupfer- und Eisendotierungen auf die ferroelektrischen Eigenschaften von KNN.

Zum Einsatz kommen die ab-initio-Dichtefunktionaltheorie (DFT) sowie Atomistik-Simulationen mit empirischen inter-

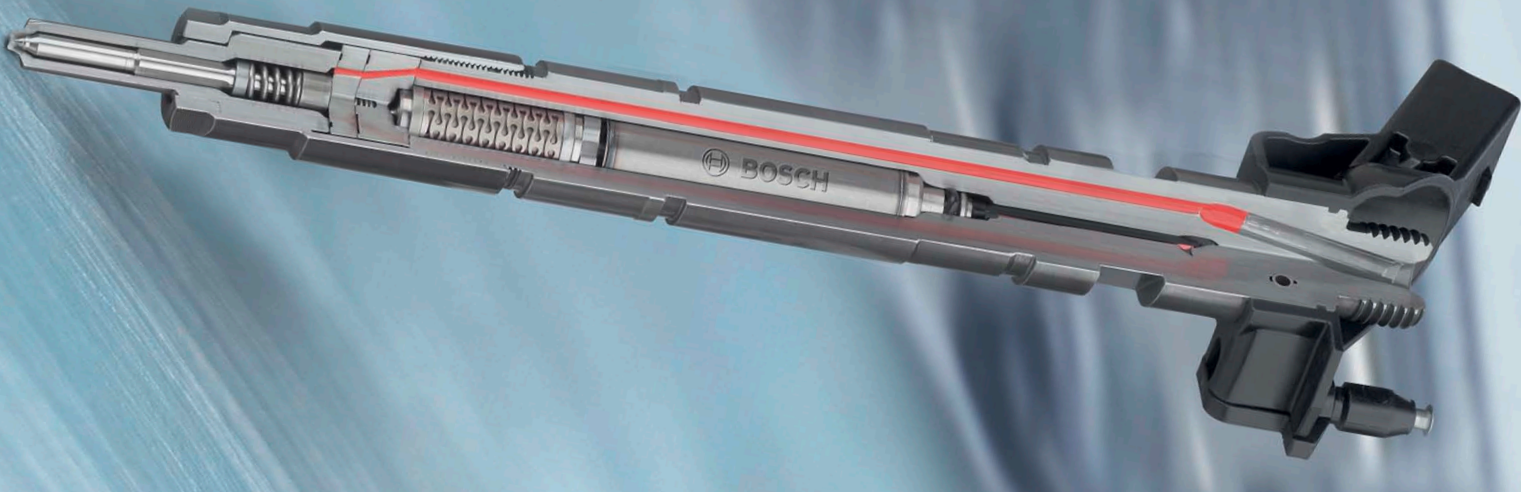
atomaren Potenzialen. Mit beiden Methoden lassen sich Gesamtenergien und Kräfte von kristallinen Materialien mit Strukturdefekten berechnen. Die quantenmechanischen ab-initio-Rechnungen sind wesentlich genauer, die empirischen interatomaren Potentiale ermöglichen eine schnellere Simulation größerer atomistischer Modellsysteme mit ausgedehnten Defektstrukturen.

Ergebnisse

Abbildung 1 zeigt ein Phasendiagramm des stabilsten Gitterplatzes für Kupfer-Fremdatome in KNN unter verschiedenen chemischen Bedingungen (μ : chemisches Potenzial). Bei Gasen, beispielsweise Sauerstoff, ist das chemische Potenzial ein Maß für den Partialdruck. Im thermodynamischen Gleichgewicht ist die Perovskitphase nur im farbig markierten Bereich der chemischen Potentiale stabil. Bei einer sauerstoffreichen Umgebung (grün) ersetzt Kupfer eher ein Niob-Atom, bei sauerstoffarmen Bedingungen (rosa) eher ein Alkali-Atom.

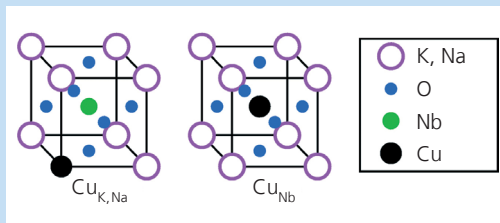
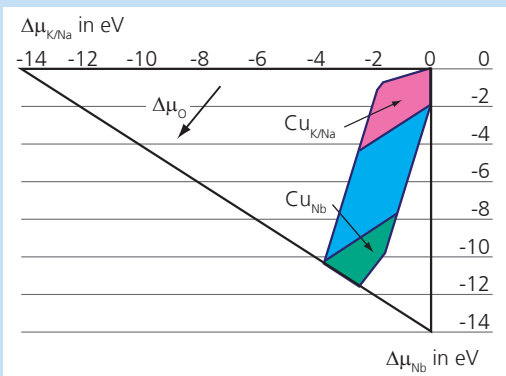
Abbildung 2 zeigt die Energieprofilkurven für Übergänge zwischen verschiedenen ferroelektrischen Polarisationsrichtungen ([001], [011] und [111]) und der paraelektrischen Struktur (PE). Bei einer Dotierung von Kupfer auf dem Niob-Platz wird das Schalten ersten Ergebnissen zufolge erleichtert, bei einer Dotierung auf einem Alkali-Platz mitunter erschwert. Mit entsprechenden Simulationen kann auch der Einfluss von Defektkomplexen aus Fremdatomen und Sauerstoffleerstellen auf das Schaltverhalten untersucht werden.

Dr. Sabine Körbel

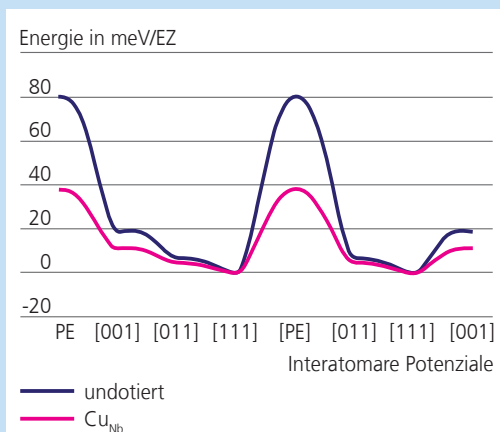
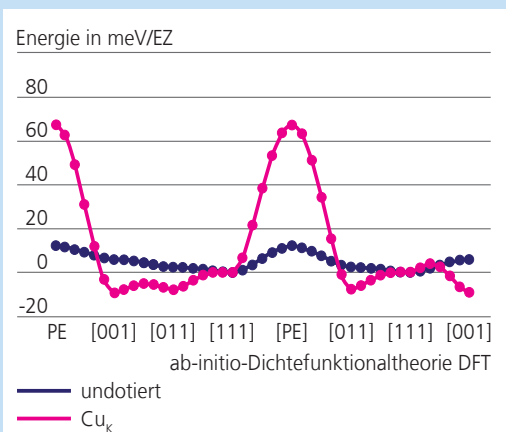


Ein Anwendungsbeispiel für Ferroelektrika:
Piezo-Injektor für Dieselmotor-Einspritzsysteme.

Foto: © Robert Bosch GmbH



1 Energetisch bevorzugter Gitterplatz für Kupfer in Kalium-Natrium-Niobat (KKN). Grün: Niob-Platz. Rosa: Alkali-Platz. Das chemische Potenzial für Sauerstoff (Partialdruck) nimmt von rechts oben nach links unten zu.



2 Energieprofilkurven für das Schalten der ferroelektrischen Polarisierung in reinem beziehungsweise Kupfer-dotiertem KKN. Der Energieunterschied zwischen paraelektrischer (PE) und in [111]-Richtung polarisierter Struktur ist bei einer Cu_K -Dotierung (links) stark erhöht, bei einer Cu_{Nb} -Dotierung (rechts) deutlich abgesenkt.