

MODELAGEM DA PEROVSKITA LaTiO_3 : INVESTIGAÇÃO DO EFEITO PIEZOELÉTRICO

Marcos Antonio Barros dos Santos¹(PG)*, Ricardo M. Miranda¹(PG), Antonio F. de Figueiredo¹ (PG), Maycon S. Lobato¹ (PG), Márcio de S. Farias¹(PG), José Ciríaco Pinheiro¹(PQ), O. Treu-Filho²(PQ), R. T. Kondo³(PQ). E-mail: mbsantos@ufpa.br

¹Laboratório de Química Teórica e Computacional, UFPA, CEP 66075-900, Belém, PA, Amazônia, Brasil

²Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, CP 335, 14800-900, Araraquara, SP, Brasil

³Seção Técnica de Suporte, Centro de Informática de São Carlos, USP-São Carlos, SP, Brasil.

Palavras Chave: Piezoelectricidade, Perovskita LaTiO_3 , Método Coordenada Geradora HF.

Introdução

Na atualidade, perovskitas do tipo ABO_3 são os materiais cerâmicos mais utilizados em aplicações tecnológicas pela habilidade destes desenvolverem uma carga elétrica proporcional a um “stress” mecânico. Pinheiro e colaboradores^{1,2} aplicaram cálculos *ab initio* no estudo da piezoelectricidade em Titanato de Bário (BaTiO_3) e Ferrita de Lantânio (LaFeO_3) e os resultados ofereceram evidências de que o efeito piezoelectrico nesse material pode ser causado por interações eletrostáticas.

O objetivo deste trabalho é aplicar a teoria HFR na investigação do efeito piezoelectrico em Titanato de Lantânio (LaTiO_3). Inicialmente, o Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock é utilizado na geração de conjuntos de bases gaussianas 23s15p, 29s19p13d e 32s22p17d para os átomos de O (³P), Ti (⁵S) e La (²D) respectivamente. Posteriormente, os conjuntos de bases foram contraídos para 6s5p, 11s7p6d e 17s10p6d e enriquecidos com funções de polarização e difusa para finalmente serem usados na investigação do efeito piezoelectrico em LaTiO_3 .

Resultados e Discussão

Utilizou-se a seguinte estratégia no estudo:

(i) dimizou-se a geometria do fragmento (Figura 1);
(ii) com a geometria otimizada, os cálculos para Ti^{3+} nas posições **a**, **b** e **c** (correspondente ao encurtamento das ligações $\text{Ti}_1\text{-O}_3$, $\text{Ti}_1\text{-O}_4$ e $\text{Ti}_2\text{-O}_4$ de 0,005Å) foram desenvolvidos no nível HFR. Os resultados da otimização estão muito próximos dos valores da literatura e os desvios são $2,3 \times 10^{-1}$ e $3,0 \times 10^{-2}$ Å respectivamente.

Na figura 1, quando Ti^{3+} é considerado na posição **a**; o fragmento é $3,14 \times 10^{-3}$ e $4,6 \times 10^{-2}$ Hartree mais estável do que com o átomo nas posições **b** e **c**. Observa-se também que a oscilação de Ti^{3+} entre as posições **b** e **c** provoca uma diminuição e um aumento do momento de dipolo respectivamente do fragmento; indicando que Ti^{3+} é centrossimétrico.

Ainda analisando a figura 1; quando Ti^{3+} sofre deslocamento da posição **a** para **b**, verifica-se

a diminuição de cargas nos átomos Ti_2 , La_1 e La_2 e um aumento nas cargas dos átomos O_1 , O_4 e O_6 .

Por outro lado, quando Ti^{3+} desloca-se de **a** para **c**, apenas o La_2 diminui sua carga e os átomos O_1 , O_4 e O_6 aumentam suas cargas.

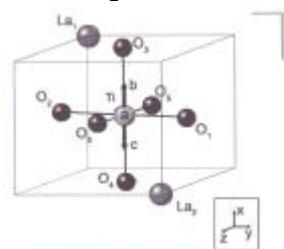


Figura 1: Fragmento octaédrico $[\text{La}_2\text{TiO}_6]^{3-}$ estudado.

Ao analisar estes valores de cargas atômicas para o fragmento $[\text{LaTiO}_3]_2$; após o deslocamento da posição **a** para as posições **b** e **c**, verifica-se que não há uma correta migração de carga entre os átomos metálicos e os átomos de oxigênio. O encurtamento das ligações $\text{Ti}_1\text{-O}_3$, $\text{Ti}_1\text{-O}_4$ e $\text{Ti}_2\text{-O}_4$ (Figura 1) provocam ora a diminuição, ora o aumento das cargas totais nos átomos Ti_2 , La_1 e La_2 , o que permite afirmar que o fragmento não sofreu uma polarização quando submetido a um “stress” mecânico e, conseqüentemente, ausência de migração de cargas entre os átomos.

Pela análise da oscilação do Ti^{3+} entre as posições **a**, **b**, **c** e o encurtamento das ligações Ti-O ; é razoável supor que LaTiO_3 não apresenta propriedades piezoelectricas.

Conclusões

- (1) Na perovskita $[\text{LaTiO}_3]_2$, o Ti^{3+} apresenta a condição de centrossimetria.
- (2) Quando submetido a um “stress” mecânico, o fragmento $[\text{LaTiO}_3]_2$ não sofre polarização.
- (3) A perovskita estudada não apresenta o efeito piezoelectrico.

Agradecimentos

CAPES/CNPq.

¹ Pinheiro, José Ciríaco; Treu Filho, O; Kondo, Rogério T. Designing Gaussian basis sets to the theoretical study of

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)
the piezoelectric effect of perovskite (BaTiO₃) *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **671** (2004) 71.
² dos Santos C.C.; Barbosa, J.P.; dos Santos, M.A.B.; Lira, F.A.M.; Cardoso, F.J.B.; Pinheiro, J.C.; Treu Filho, O.; R.T. Kondo.
Investigation of piezoelectricity in perovskite (LaFeO₃): A theoretical study *Computational Materials Science*, in Press.