



Silke Hayn

## Piezoelektrische Materialien in Atomistischen Simulationen

Atomistische Computersimulationen begleiten die Erforschung piezoelektrischer Materialien seit ca. 20 Jahren mit dem Hauptaugenmerk auf Perowskitischen Strukturen. In den ersten atomistischen Rechnungen war der Vergleich mit experimentellen Daten sehr wichtig. Dann konzentrierte man sich auf die Vorhersage von Eigenschaften die experimentell derzeit nur unter großem Aufwand oder gar nicht untersucht werden können. In den Neunziger Jahren wurden z.B. die elektronische Struktur, ferroelektrische Phasenumwandlungen und elastische Stabilität von ABO<sub>3</sub> Perovskiten untersucht. Außerdem wurden Methoden entwickelt ferroelektrische Eigenschaften aus atomistischen Modellen zu errechnen. Ab Anfang des neuen Jahrtausends wurden Perowskitische Mischsysteme betrachtet. Dort betrachtet man die lokale Struktur, und piezoelektrische Eigenschaften, wobei ein Schwerpunkt auf der Identifizierung der morphotropen Phasengrenze liegt. Außerdem werden unter Zuhilfenahme von Monte-Carlo-Methoden Phasendiagramme errechnet.