

Nueva ruta para la obtención de multiferroicos magnetoeléctricos monofásicos

A new route to obtain single-phase magnetoelectric multiferrics

MARÍA ELENA FUENTES-MONTERO^{1,*}, EDGAR A. MACÍAS-RÍOS², CÉSAR OCTAVIO CONTRERAS-VEGA¹, RAMÓN OLIVAS-VARGAS¹, LUZ MARÍA RODRÍGUEZ-VALDEZ¹, AMELIA VALDEZ-AGUIRRE¹, CARLOS ARMANDO DE LA VEGA-COBOS¹, HÉCTOR CAMACHO-MONTES³

Recibido: Febrero 12, 2007

Aceptado: Septiembre 17, 2007

Resumen

Se describe una nueva estrategia para la síntesis de multiferroicos monofásicos mediante el diseño asistido por computadora. Hoy en día existe un gran interés científico en el logro de tales compuestos, debido a sus potenciales aplicaciones dentro de la nanotecnología. Se aborda el tema de la dificultad de obtención de materiales magnetoeléctricos monofásicos a temperatura ambiente. Se enumeran los requisitos para que un material cumpla con esta propiedad desde el punto de vista químico, estructural y eléctrico. Se presentan algunos ejemplos de cerámicos multiferroicos y sus rasgos principales. Se propone la búsqueda de magnetoeléctricos multiferroicos dentro de la familia de las cerámicas de Aurivillius. Se plantea una estrategia novedosa, basada en la modelación teórica, para el logro de compuestos con características superiores dentro de dicha familia.

Palabras clave: *DFT, Aurivillius, ferroeléctricos, materiales funcionales.*

Abstract

The difficulties to obtain magnetoelectric multiferrics at room temperature are reviewed in this work. There is great interest in this particular property because of its potential application in nanotechnology. In this article the main chemical, structural and electrical characteristics these materials have to obey are enumerated. Examples of multiferric ceramics and principal qualities are discussed. The potential of the Aurivillius ceramics family as new magnetoelectric multiferrics are explained. A new strategy based on theoretical modelling for obtaining compounds within this family with superior performance is proposed.

Keywords: *DFT, Aurivillius, ferroelectrics, functional materials.*

¹ Profesores de la Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Chihuahua. Ave. Universidad S/N. C.P. 00000. Chihuahua, Chih, México. Tel (614) 413-1187.

² Estudiante de posgrado del Centro de Investigación en Materiales Avanzados S. C. Miguel de Cervantes # 120, Complejo Industrial Chihuahua. C.P. 31109. Chihuahua, Chih, México. Tel. (614) 439-1100 ext. 1159.

³ Profesor del Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez. Av. Del Charro num. 450 norte. C.P. 32310. Cd. Juárez, Chih., México. Tel (656) 688-4887.

* Dirección electrónica del autor de correspondencia: *mfuentes@uach.mx*.

Introducción

La naciente ciencia de la nanotecnología tiene sus pilares en la investigación básica multidisciplinaria. Para lograr compuestos con propiedades novedosas, es necesario conjugar propiedades que no existen de forma natural. Éste es el caso de los materiales multiferroicos magnetoeléctricos. Recientemente ha habido un gran interés por desarrollar materiales multifuncionales, en los cuales una o más propiedades se combinan en un mismo compuesto. Los compuestos multiferroicos tienen simultáneamente ordenamiento ferromagnético, ferroeléctrico y/o ferroelástico. El acoplamiento entre las características ferroeléctrica y magnética en un mismo material puede dar lugar al efecto magnetoeléctrico, en el cual la dirección de la magnetización puede ser cambiada por un campo eléctrico aplicado y viceversa.

El efecto magnetoeléctrico se ha logrado con bastante éxito a partir de compósitos piezoeléctrico-magnetostrictivos (Zheng *et al.*, 2004), pero encontrar magnetoeléctricos monofásicos está resultando un reto difícil (Hill, 2000; Fuentes *et al.*, 2001). La boracita de níquel-yodo ($\text{Ni}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{I}$), unas pocas estructuras perovskitas (especialmente el BiFeO_3) y otras fases derivadas de éstas últimas (perovskitas dobles, fases de Aurivillius) representan los escasos multiferroicos conocidos (Fuentes *et al.* 2006a).

Una tendencia actual importante en la búsqueda de multiferroicos monofásicos se basa en la investigación teórica-computacional como precedente al trabajo experimental. El principal grupo promotor de esta estrategia a escala internacional es el de la Universidad de California en Santa Barbara (UCSB), liderado por la Dra. Nicola Spaldin (anteriormente Dra. Nicola Hill). Los aproximadamente 30 artículos que el grupo de Spaldin ha publicado sobre el tema durante los últimos 5 años ya acumulan cerca de 300 citas.

El objetivo de este ensayo es plantear un procedimiento para sintetizar nuevas cerámicas magnetoeléctricas. En el ámbito de la nanotecnología éste es un tema particu-

larmente fascinante y con aplicaciones muy prometedoras. Por ejemplo, se ha previsto la grabación-lectura de información mediante un sistema dual magnetoeléctrico, la creación de una nueva generación de detectores de campo magnético y mecanismos electrónicos de dirección de automóvil sin asistencia de la batería (Spaldin y Fiebig, 2005).

El orden que se sigue en el escrito es el siguiente: primero se enumeran las dificultades y contradicciones a nivel microscópico para conseguir un material multiferroico; luego se sugiere una estrategia de trabajo para descubrir materiales que satisfagan los requerimientos para el acoplamiento entre campos eléctrico y magnético, y por último se plantea una metodología científica novedosa basada en la combinación de diferentes aproximaciones dentro de la Teoría de Funcionales de Densidad (DFT, por sus siglas en inglés) para su descripción (Hohenberg y Kohn, 1964).

Desarrollo

¿A qué se deben las dificultades para encontrar magnetoeléctricas? ¿Cuáles son los requisitos que debe cumplir este tipo de material? En primer lugar, están los re-

quisitos de simetría. El material debe tener uno de los siguientes grupos puntuales: 1, 2, m, 222, 2mm, 4, -4, 422, 4mm, -42m, 3, 32, 3m, 6, 622, 6mm, 23, 432 (Fuentes, 1998). Por simetría, es imposible que un campo eléctrico invierta el momento magnético M en 180° (Schmid, 1999), sin embargo, la inversión de la polarización P por un campo eléctrico E sí puede provocar la rotación del eje de magnetización (Ascher, 1966). De igual manera, un campo magnético puede cambiar la dirección de P . (Kimura *et al.*, 2003). Desde el punto de vista de las propiedades eléctricas, el material debe poseer alta resistividad. En la práctica, es frecuente que esta condición se presente como un requerimiento difícil de satisfacer. Finalmente, algo importante: de alguna manera se debe esquivar cierta incompatibilidad existente entre los requisitos estándar de la ferroelectricidad y los del ferromagnetismo. Por ejemplo, la llamada d^0 -ness (orbitales d vacíos) del ión Ti^{4+} en el $BaTiO_3$ es clave para la transformación Jahn-Teller que genera la ferroelectricidad de este compuesto. Si en el centro de la perovskita (en el lugar del titanio) se coloca un catión con dipolo magnético, digamos Mn^{3+} , encontramos que su configuración d^4 —esencial para el magnetismo— entra en conflicto con el mecanismo que desplazaba al catión titanio. La condición multiferroica requiere soluciones no estándar. A continuación se mencionan algunos compuestos multiferroicos y, en los casos en que se conoce, su mecanismo microscópico de polarización-magnetización y sus temperaturas de transición ferro-paramagnético.

- *Boracita de níquel-yodo, $Ni_3B_7O_{13}I$* . Es un ferromagnético débil, con temperatura de transición al estado paramagnético $T_N = 60$ K, que manifiesta

ta ferroelectricidad hasta $T_C = 400$ K debido a la asimetría de sus octaedros O/I.

- *Perovskitas simples*
 - $YMnO_3$: Ferroelectricidad por factores estereoquímicos hasta $T_C = 900$ K; antiferromagnetismo hasta $T_N = 80$ K (Van Aken *et al.*, 2004).
 - $TbMnO_3$: Frustración de spin, $T_N = 40$ K, $T_C = 30$ K (Kimura *et al.*, 2003).
 - $BiMnO_3$ y $BiFeO_3$: Actividad estereoquímica del par electrónico $Bi6s^2$ (Seshadri y Hill, 2001; Santos *et al.*, 2002).
- *Perovskitas mezcladas, por ejemplo $Pb_2(CoW)O_6$* . Ferroeléctrico por desplazamiento de su catión W^{6+} , ferromagnético por los electrones d^6 del Co^{2+} .
- *Fases Aurivillius, por ejemplo $Bi_5Ti_3FeO_{15}$* . Ferroelectricidad en las capas de óxido de bismuto; octaedros perovskita antiferromagnéticos (Fuentes *et al.*, 2006a).

Todos estos compuestos tienen carácter ferroeléctrico debido a mecanismos no estándar. Uno de estos mecanismos se enfoca en cationes con pares electrónicos libres, los cuales tienen una configuración electrónica ns^2 . Los iones con esta configuración no tienen simetría de inversión, lo cual contribuye con las distorsiones estructurales. Esta actividad estereoquímica de los cationes con pares electrónicos libres, como el Bi^{3+} o el Pb^{2+} , es la responsable de las distorsiones estructurales de perovskitas tales como $BiMnO_3$ ó $BiFeO_3$. Con excepción del $BiFeO_3$, estas fases no exhiben propiedades magnéticas a temperatura ambiente. Una segunda limitación es que sus parámetros magnéticos y/o ferroeléctri-

cos son pobres. Desde el punto de vista químico, los metales de transición magnéticos son fáciles de oxidar/reducir, y esto añade dificultades prácticas al pretender combinar ferromagnetismo y ferro-electricidad en un mismo material (Baettig y Spaldin, 2005). El material más prometededor hasta ahora en la lista de las estructuras tipo perovskita es el BiFeO_3 ($T_c = 1103\text{K}$).

La Figura 1 caracteriza la estructura cristalográfica de esta fase (grupo espacial $R3c$). Se puede observar la rotación que sufren los octaedros de la celda tradicional. Si esta rotación se pudiera gobernar cambiando el campo eléctrico aplicado, existe la posibilidad de que se pueda rotar el spin del ión que se encuentra en el centro de los octaedros.

En este caso se lograría acoplar la magnetización y la polarización (Neaton *et al.*, 2005). Una familia de materiales que ofrece interesantes posibilidades de variantes estructurales es la de las *fases de Aurivillius* (Figura 2). Ellas cumplen con uno de los

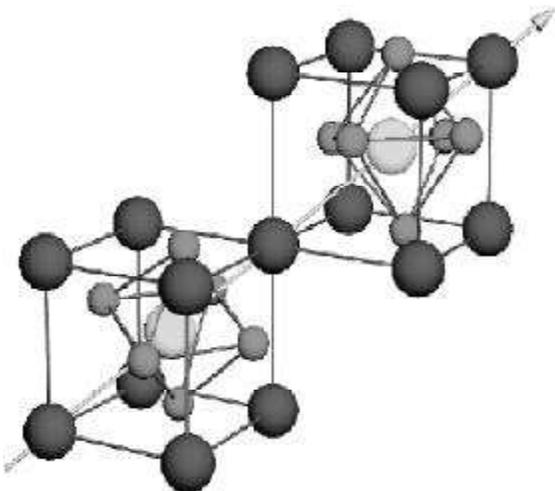


Figura 1. Estructura cristalina del BiFeO_3 . Los círculos pequeños representan átomos de oxígeno, los grandes oscuros se refieren a los de bismuto y los grandes claros al hierro.

mecanismos señalados como requerimientos para dar lugar a la magnetoelectricidad: la actividad estereoquímica de los cationes con pares electrónicos libres, como el Bi^{3+} . Este tipo de materiales, denominados así en honor a su descubridor (Aurivillius, 1949), presentan una estructura laminar cuya fórmula es $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}(\text{A}_{n-1}\text{B}_n\text{O}_{3n-1})^{2-}$. A y B representan los cationes que se encuentran en las posiciones cubo-octaédrica y octaédrica respectivamente de las estructuras pseudo-perovskita $(\text{A}_{n-1}\text{B}_n\text{O}_{3n-1})^{2-}$, y n representa el número de éstas que se encuentran entre las capas de óxido de bismuto $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$. Se ha logrado sintetizar y caracterizar fases de Aurivillius con diferentes composiciones y características (Castro *et al.*, 2000; Fuentes *et al.*, 2002, 2004, 2006; García-Guaderrama, 2004, 2005), entre ellas las $\text{Bi}_{n+1}\text{Ti}_3\text{Fe}_{n-3}\text{O}_{3n+3}$ ($n = 3, 4, 5, 6$ y 7). Los resultados experimentales en este material han mostrado valores del coeficiente magnetoeléctrico cercanos a $10 \text{ mV cm}^{-1} \text{ Oe}^{-1}$.

La necesidad de multiferroicos monofásicos es un requerimiento de la nanotecnología. Hasta la fecha sólo se conoce un material monofásico, el BiFeO_3 , que exhibe carácter multiferroico débilmente magnetoeléctrico a temperatura ambiente. En este documento se propone un método para sintetizar cerámicas de Aurivillius con estas características, con base en el diseño teórico-computacional.

De esta manera se realizaría por primera vez la investigación de este tipo de compuestos mediante métodos basados en DFT. También son originales el análisis estructural y de propiedades a escala nanométrica, así como la vinculación que se establecería entre las fases de obtención, modelación y caracterización de propieda-

des. Un plan tentativo es el que se propone a continuación:

1. Modelar con base en cálculos de DFT fases perovskitas y Aurivillius como sustancias que probablemente exhiban carácter multiferroico.
2. Sintetizar perovskitas y Aurivillius multiferroicos en forma de muestras masivas y como láminas delgadas.
3. Caracterizar química y estructuralmente los materiales obtenidos, utilizando técnicas convencionales de microscopía y de difracción, así como métodos de radiación sincrotrónica (Fuentes y Reyes, 2002).
4. Caracterizar las propiedades magnetoeléctricas de los materiales de interés.
5. Generar conocimientos nuevos sobre el origen, a nivel nanométrico, de las propiedades magnetoeléctricas de los materiales.

Recientemente se ha logrado caracterizar a los materiales multiferroicos monofásicos a nivel atómico. En el último año, se ha pasado de explicar los mecanismos para la existencia de magnetoelectricidad a diseñar y proponer nuevas fases, con base en cálculos teóricos. En esta dirección se tienen prácticamente agotadas las estruc-

turas tipo perovskita y se están considerando nuevas familias de materiales. Entre ellas se considera, con amplias posibilidades, a las fases de Aurivillius, donde las capas de BiO_2 pueden ser ferroeléctricas y las capas perovskita ferromagnéticas. La Figura 2 representa la estructura cristalina de un material con estas características esperadas. Así, se pueden tener ambos roles en un material monofásico e incluso en un material nanocristalino.

En ese contexto se inserta el procedimiento anterior, en el que se diseñan, sintetizan y prueban nuevos materiales multiferroicos. Este estudio se divide en 3 aspectos fundamentales: la síntesis de la cerámica, la caracterización estructural y la modelación de sus propiedades por DFT.

Como paso inicial se prevé la caracterización mediante espectroscopía de estructura fina de la absorción de rayos X extendida (EXAFS) (Newville, 2004) y mediante difracción de rayos X (XRD) de alta resolución (Young, 1993) de las cerámicas $\text{Bi}_{n+1}\text{Ti}_3\text{Fe}_{n-3}\text{O}_{3n+3}$ ($n=3, 4, 5, 6$ y 7), obtenidas en el Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV). Esto permite comprender la posición exacta de los iones de Bi, Fe y Ti y sus enlaces. Así se tendrá, usando diversos programas que se basan

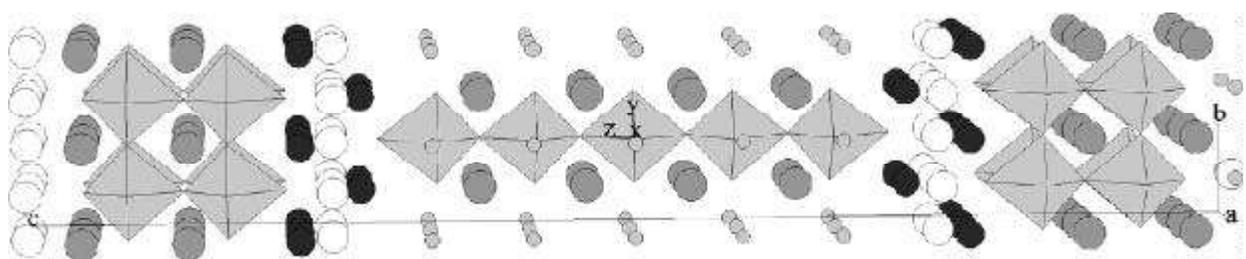


Figura 2. Estructura cristalina de una cerámica de Aurivillius de 5 capas. Esferas: blancas $\rightarrow \text{O}_2$, grises grandes $\rightarrow \text{Bi}$, grises pequeñas y centros de los octaedros $\rightarrow \text{Ti/Fe}$. Los átomos de O, que se encuentran en los extremos de los octaedros, se omiten.

en DFT, la información estructural necesaria para dilucidar el por qué de su pobre comportamiento magnetoeléctrico. Se pueden modelar las siguientes propiedades: densidad de carga, energías, estructura cristalina, estructura de bandas, ordenamiento magnético, frecuencias fonónicas, polarización ferroeléctrica, respuesta dieléctrica, coeficiente piezoeléctrico, etc. (Baroni *et al.*, 2001).

Dentro de este tipo de investigación teórica se debe comenzar por la optimización de la geometría y el cálculo de la energía total, la densidad de carga y la estructura de bandas (Spaldin y Pickett, 2003). Usando pseudopotenciales dentro de la aproximación LSDA y una base de ondas planas, se hace un estudio comparativo de las estructuras relajadas y no relajadas. La polarización ferroeléctrica debe calcularse por el método de la "fase de Berry" (Berry, 1984)(Hamann, 2005). Los estados excitados, la estructura fonónica y otras propiedades de interés se calculan dentro del marco de la Teoría de los Funcionales de la Densidad Dependiente del Tiempo y la Teoría Perturbativa del Funcional de Densidad. Este formalismo está recogido en varios capítulos del libro de Richard Martin (Martin, 2004). Es conocido que la aproximación LDA no permite modelar correctamente el gap existente en las bandas de energía de los materiales ferroeléctricos (Spaldin, 2003); por eso, el siguiente paso es realizar los cálculos dentro de algunas de las siguientes aproximaciones: LMTO (Olivera, 2005), LDA+U, GW (Gonze *et al.*, 2005), pseudo-SIC y FP-LAPW, (Payne *et al.*, 1992; Fuchs *et al.*, 1999). Las propiedades magnéticas merecen un tratamiento especial según el tipo de material: ferromagnético, ferrimagnético o antiferromag-

nético. No es sencillo el tratamiento en ninguno de los casos, pero hay algunas sugerencias en el artículo de Filippetti y Spaldin (2003). Entre los programas de computo que se pudieran encontrar se encuentran: Abinit, Wien2k, Castep y VASP.

Mediante los experimentos de EXAFS y XRD de alta resolución, que se pueden realizar en sincrotrones, también se puede obtener la respuesta para resolver un debate que existe en la literatura: ¿Pueden ser sustituidos los iones de bismuto de la capa $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ por otros cationes (Fuentes *et al.*, 2002)? Este punto tiene relevancia a la hora de lograr que, dentro de la celda unitaria, las capas perovskita tengan orden magnético y las de óxido de bismuto polarización eléctrica (Fuentes *et al.* 2006b).

Las mediciones experimentales del efecto magnetoeléctrico se realizan utilizando un sistema dinámico desarrollado en CIMAV, en donde mediante un campo magnético alterno se produce la respuesta eléctrica (García-Guaderrama, 2005). Este experimento, junto con la medición de los lazos de histéresis, debe confirmar o no el logro de las propiedades que se pretende determinar. Además, la observación de los dominios ferroeléctricos y magnéticos es uno de los aspectos más atractivos que se puede conseguir. Ellos se analizan por medio del Microscopio de Fuerza Atómica.

Conclusiones

En este ensayo se propone una nueva estrategia para obtener un material con una propiedad novedosa a escala nanométrica: la magnetoeléctricidad. Este es un tema novedoso y de gran interés para el desarrollo de la nanotecnología, ya que a la fecha no se han descubierto materiales magnetoeléctricos monofásicos.

Dentro de esta proposición se tiene el objetivo de investigar, desde el punto de vista de la magnetoelectricidad, teórica y experimentalmente, perovskitas y cerámicas de Aurivillius, basados en la modelación computacional, paralela a la obtención en el laboratorio. Las fases Aurivillius presentan una estructura laminar, descrita anteriormente, que cumple las características señaladas como requisitos para dar lugar a la magnetoelectricidad: cationes con pares electrónicos libres y una configuración favorable para que las capas de óxido de bismuto sean ferropiezoelectricas y las capas perovskitas exhiban algún tipo de orden magnético.

Después de sintetizar estos compuestos se realiza la investigación estructural, principalmente mediante técnicas de radiación sincrotrónica de alta resolución, y la medición de las propiedades eléctricas y magnéticas. El diseño de los nuevos materiales y la descripción a escala nanométrica de los diferentes compuestos constituyen uno de los retos más ambiciosos, lo cual se pretende realizar con el uso de programas de cómputo basados en DFT. 

Literatura citada

ABINIT: Revisado 2007. Es un proyecto en común de Université Catholique de Louvain, Corning Incorporated, y otros autores contribuyentes (URL: <http://www.abinit.org>).

ASCHER, E., H. Rieder, H. Schmid, & H. Stössel, 1966. Some properties of ferromagnetolectric nickel-iodine borate, $\text{Ni}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{I}$. *Journal of Applied Physics* 37: 1404-1405.

AURIVILLIUS, B. 1949. Mixed Bismuth Oxides with Layer Lattices III. *Arkiv for Kemi* 2(37): 519-527.

BAETTIG, P. y N.A. Spaldin. 2005. Ab initio prediction of a multiferroic with large polarization and magnetization. *Applied Physics Letter* 86, 012505: 1-3.

BARONI, S., G. Stefano y A. Dal Corso. 2001. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Reviews of modern Physics*, 73: 515-562.

BERRY M.V. y R. Proc. 1984. In: Fundamental aspects of quantum theory. Royal Society of London A 392, p.45-57.

CASTEP: Revisado 2007. Es comercializado por Accelrys Software Inc. como parte del paquete de Materials Studio®. (URL: <http://www.accelrys.com/products/mstudio/>).

CASTRO, J., T. de los Ríos y L. Fuentes, 2000. Synthesis and Characterization of Nb-doped PZT Piezo-Ferroelectric Ceramics. *Materials and Manufacturing Processes* 15, (2): 301-310.

FILIPPETTI, A. y N.A. Spaldin, 2003. Self-interaction corrected pseudopotential scheme for magnetic and strongly correlated systems. *Physical Review B* 67, 125109: 1-15.

FUCHS, M. y M. Scheffler. 1999. Ab initio pseudo-potentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density-functional theory. *Computational Physics Communications*. 119: 67-98.

FUENTES, L. 1998. Magnetic-coupling properties in polycrystals. *Textures and Microstructures* 30: 167-189.

FUENTES, M. E., H. Camacho y L. Fuentes. 2001. Propiedades de acoplamiento eléctrico y magnético: cristales y policristales. *Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio*, 40 (4): 267-274.

FUENTES, L. y M. Reyes 2002. Mineralogía Analítica. *Colección Textos Universitarios*, Universidad Autónoma de Chihuahua.

FUENTES, M.E., A. Mehta, L. Lascano, H. Camacho, R. Chianelli, J.F. Fernández y L. Fuentes. 2002. The Crystal Structure of $\text{BaBi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$. *Ferroelectrics* 269: 159-164.

FUENTES, L., M. García, J. Matutes-Aquino y D. Ríos-Jara, 2004. Magnetoelectricity Via Crystallography. *Journal of Alloys and Compounds* 369: 10-13.

FUENTES, L., M. García, D. Bueno, M.E. Fuentes y A. Muñoz. 2006a. Magnetoelectric effect in $\text{Bi}_5\text{Ti}_3\text{FeO}_{15}$ ceramics obtained by molten salts synthesis. *Ferroelectrics* 336: 81-89.

FUENTES, L., J.F. Fernández, M.E. Fuentes, L. Lascano, M.E. Montero y R. Olivera. 2006b. Synchrotron Radiation Study Of Structural Tendencies In Aurivillius Ceramics. *Ferroelectrics* 339: 209-218.

GARCÍA-GUADERRAMA, M., M.E. Botello-Zubiate, A. Marquez-Lucero, J.A. Matutes-Aquino y L. Fuentes-Cobas. 2004. Síntesis por rutas químicas y estructura cristalina de la fase Aurivillius $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$. *Revista Mexicana de Física* 50 (1): 42-45.

GARCÍA-GUADERRAMA, M. 2005. Síntesis por fusión de sales y caracterización de fases Aurivillius de la familia $\text{Bi}_{n+1}\text{Ti}_3\text{Fe}_{n-3}\text{O}_{3n+3}$. CIMAV. *Tesis de doctorado*.

GARCÍA-GUADERRAMA, M., L. Fuentes, M.E. Montero-Cabrera, A. Márquez-Lucero y M.E. Villafuerte-Castrejón, 2005. Molten salt synthesis and crystal structure of $\text{Bi}_5\text{Ti}_3\text{FeO}_{15}$. *Integrated Ferroelectrics* 71: 233-239.

GONZE, X., G.-M. Rignanese, M. Verstraete, J.-M. Beuken, Y. Pouillon, R. Caracas, F. Jollet, M. Torrent, Zerah G., M. Mikami, Ph. Ghosez, M. Veithen, J.Y. Raty, V. Olevano, F. Bruneval, L. Reining, R. Godoy, G. Onida, D.R. Hamann, y D.C. Allan. 2005. A brief introduction to the ABINIT software package. *Zeit Kristallographen* 220: 558-562.

HAMANN, D.R., X. Wu, K.M. Rabe y D. Vanderbilt. 2005. Metric tensor formulation of strain in density-functional perturbation theory. *Physical Review B* 71, 035117:1-13.

HILL, N. A. 2000. Why Are There So Few Magnetic Ferroelectrics? *Journal of Physical Chemistry B* 104: 6694-6709.

HOHENBERG, P. y W. Kohn. 1964. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review* 136: 864-871.

KIMURA, T., H. Goto, K. Shintani, T. Ishizaka, Y. Arima, y Y. Tokura. 2003. Magnetic control of ferroelectric polarization. *Nature* 426: 55-58.

MARTIN, M.R. 2004. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge Press.

- NEATON, J.B., U.V. Waghmare, C. Ederer, N.A. Spaldin y K.M. Rabe. 2005. First-principles study of spontaneous polarization in multiferroic BiFeO_3 . *Physical Review B*. 71,014113:1-8.
- NEWVILLE, M. 2004. Fundamentals of EXAFS. University of Chicago.
- OLIVERA, R. 2005. Análisis de la Ferroelectricidad en BaTiO_3 y PbTiO_3 por medio de su estructura electrónica, *Tesis de Maestría*, CIMAV.
- SANTOS, M. A., S. Parashar, A.R. Raju, Y.S. Zhao, A.K. Cheetham y C.N.R. Rao. 2002. Evidence for the likely occurrence of magnetoferroelectricity in BiMnO_3 . *Solid State Communications* 122: 49-52.
- SESHADRI, R. y N.A. Hill. 2001. Visualizing the role of Bi 6s "lone pairs" in the off-center distortion in ferromagnetic BiMnO_3 . *Chemical Mater* 13: 2892-2899.
- SCHMID, H. 1999. On the possibility of ferromagnetic, antiferromagnetic, ferroelectric and ferroelastic domain reorientations in magnetic and electric fields. *Ferroelectrics* 221: 9-17.
- SHINDE, S., B. Ogale, F. Bai, D. Viehland, Y. Jia, D. G. Schlom, M. Wuttig, A. Roytburd y R. Ramesh. 2004. Multiferroic $\text{BaTiO}_3\text{-CoFe}_2\text{O}_4$ Nanostructures. *Science* 303 (5658): 661-663.
- SPALDIN, N. A. y M. Fiebig. 2005. The renaissance of magnetoelectric multiferroics. *Science*, 309 (5733): 391-392.
- SPALDIN, N. A. y W.E. Pickett. 2003. Computational Design of Multifunctional Materials. *Solid State Chemistry*. 176 (2): 615-632.
- VAN AKEN, B. B., T.T.M. Palstra, A. Filippetti y N.A. Spaldin. 2004. The origin of ferroelectricity in magnetolectric YMnO_3 . *Nature Materials* 3: 164-170.
- VASP: Revisado 2007. Es un proyecto de los profesores Dr. Jürgen Hafner y Dr. Georg Kresse de Institut für Materialphysik, Technische Universität Wien. Viena, Austria (URL:<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>).
- WIEN2K: Revisado 2007. Es un proyecto del Grupo de Química Cuántica Computacional del Institut für Materialchemie, Technische Universität Wien. Viena, Austria (URL:<http://www.wien2k.at>).
- YOUNG, R. A. 1993. The Rietveld Method. IUCr Monographs on Crystallography 5, Oxford University Press.
- ZHENG, H., J. Wang, S. E. Lofland, Z. Ma, L. Mohaddes-Ardabili, T. Zhao, L. Salamanca-Riba, S. R. Shinde, S. B. Ogale, F. Bai, D. Viehland, Y. Jia, D. G. Schlom, M. Wuttig, A. Roytburd y R. Ramesh. 2004. Multiferroic $\text{BaTiO}_3\text{-CoFe}_2\text{O}_4$ Nanostructures. *Science* 303 (5658): 661-663.

Este artículo es citado así:

FUENTES-MONTERO, M. E. E. A. Macías-Ríos, C. O. Contreras-Vega, R. Olivas-Vargas, L. M. Rodríguez Valdéz, A. Valdéz Aguirre, C. A. De La Vega-Cobos y H. Camacho Montes. 2007. Nuevas rutas para la obtención de multiferroicos magnetoeléctricos monofásicos. *TECNOCIENCIA Chihuahua* 1(2): 27-35.

Resúmenes curriculares de autor y coautores

MARÍA ELENA FUENTES MONTERO. Cursó la Licenciatura en Física en la Facultad de Física de la Universidad de La Habana (1990-1995), así como la Maestría en Ciencias (1995-1997). Realizó los estudios de Doctorado en Ciencia, con especialidad en Materiales, en el Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV) de la Ciudad de Chihuahua (1999-2002). El tema de su disertación fue sobre la Difracción de Rayos X y materiales ferroeléctricos. Actualmente trabaja en las áreas de modelación de moléculas y cristales.

EDGAR MACÍAS RÍOS. Realizó la carrera de Ingeniería Industrial en el Instituto Tecnológico de Chihuahua II (1996-2001). Actualmente está cursando la Maestría en Ciencia de Materiales en el Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV).

CÉSAR OCTAVIO CONTRERAS VEGA. Durante el periodo 1974-1978 realizó su licenciatura y obtuvo el título de Ingeniero Químico Bromatólogo por la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de Chihuahua. En el año 2002 obtuvo el grado de Maestro en Ecuación por el Centro de Investigación y Docencia de la Secretaría de Educación y Cultura del Estado de Chihuahua. Sus áreas de especialidad son la teoría educativa y los modelos pedagógicos.

RAMÓN OLIVAS VARGAS. Realizó la carrera de Ingeniero Industrial, opción Química, en el Instituto Tecnológico de Chihuahua. Le fue otorgado el grado de Maestro en Ciencias en Bioingeniería, en el área de Alimentos, por el Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional (CINVESTAV-IPN). Llevó a cabo sus estudios de Doctorado en Ciencia de Materiales en el Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV). Actualmente se dedica al estudio de interacciones moleculares en alimentos y procesos de interés en Ingeniería en Alimentos.

LUZ MARÍA RODRÍGUEZ VALDEZ. Cursó la carrera de Ingeniería Industrial Química en el Instituto Tecnológico de Parral (ITP), con sede en la ciudad de Hidalgo del Parral, Chihuahua, concluyendo sus estudios en 1993. En enero de 2002 le fue otorgado el grado de Maestra en Ciencias por el Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), con sede en la ciudad de Chihuahua, Chihuahua. Posee el Doctorado en Ciencias, cuyo grado le fue otorgado en octubre de 2005 también por el Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV). Su área de especialización es la química computacional y el diseño y análisis teórico de materiales.

AMELIA VALDEZ AGUIRRE. Durante el periodo 1976-1980 cursó la carrera de Químico Bacteriólogo Parasitólogo en la Facultad de Ciencias Químicas (Universidad Autónoma de Chihuahua), de donde recibió su título profesional; además, en 1990 le fue otorgado el grado de Maestría en Inmunología por esta misma Facultad. Posee el grado de Doctor en Ciencias en Microbiología que le otorgó en 1999 la Facultad de Ciencia Biológicas de la Universidad Autónoma de Nuevo León. Su especialidad es la modelación de reacciones biológicas en el área de salud.

CARLOS ARMANDO DE LA VEGA COBOS. En febrero de 1991 obtuvo el título de Ingeniero Químico opción Alimentos, por la Facultad de Ciencias Químicas de la UACH. Posee el grado de Maestro en Ciencias de la Educación Ambiental, por la Universidad de Guadalajara, que se le otorgó en mayo del 2006. Actualmente cursa la Maestría en Ciencias de los Materiales en el Centro de Investigación en Materiales Avanzados S. C. (CIMAV).

HÉCTOR CAMACHO MONTES. Ostenta el título de Licenciado en Física, que le fue otorgado en 1994 por la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. Realizó estudios de posgrado en esta misma universidad, otorgándosele en 1998 el grado de Maestro en Ciencias Físicas. En el año 2003 obtuvo el Doctorado en Ciencia de Materiales, grado que le fue otorgado por el Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV). Sus áreas de especialización son las propiedades efectivas de materiales compuestos (relación estructura-propiedades), sinterizado de cerámicos, modelación y simulación.