

## مطالعه‌ی ویژگی‌های نوری ترکیب $\text{BiFeO}_3$ در حالت تراگونال

نوع مقاله: علمی پژوهشی

حمداله صالحی<sup>۱\*</sup>، الهام کردستانی<sup>۱</sup>، وحید مهربانی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران  
<sup>۲</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت اله بروجردی، بروجرد، ایران

\*salehi@scu.ac.ir

### چکیده:

در این مطالعه خواص نوری ترکیب  $\text{BiFeO}_3$  با استفاده از روش امواج بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه چگالی (DFT) با استفاده از کد محاسباتی  $\text{Wien2k}$  مورد بررسی قرار گرفت. ساختار نواری و انرژی گاف با تقریب‌های  $\text{GGA+U}$ ،  $\text{GGA-PBE}$  و  $\text{GGA+MBJ}$  محاسبه و نتایج حاصل از تابعی  $\text{MBJ}$  سازگاری بهتری با نتایج تجربی گزارش شده دارد. ویژگی‌های نوری مانند سهم حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب جذب، ضریب بازتاب، ضریب شکست، ضریب خاموشی، رسانندگی و طیف اتلاف انرژی محاسبه و مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که ترکیب فریت بیسموت در حالت تراگونال یک نیم رسانا با گاف اپتیکی  $2/7$  الکترون ولت می‌باشد. از آن جا که ترکیب دارای خاصیت مغناطیسی می‌باشد کلیه محاسبات به صورت کاملاً قطبش اسپینی انجام شده است.

### اطلاعات مقاله:

دریافت: ۲۶ تیر ۱۴۰۰

پذیرش: ۲۰ شهریور ۱۴۰۰

صفحه ۱۳ تا صفحه ۲۳

در دسترس در نشانی:

[www.ijcse.ir](http://www.ijcse.ir)

زبان نشریه: فارسی

شاپا چاپی: ۲۳۵۲-۲۳۲۲

شاپا الکترونیکی:

۳۰۰۳-۲۷۸۳

### کلیدواژه:

فریت بیسموت، نظریه تابعی

چگالی، ویژگی‌های نوری،

قطبش اسپینی

20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6

کد DOR:

این ترکیب متشکل از کاتیون‌های  $\text{Fe}^{3+}$  و  $\text{Bi}^{3+}$  بوده که در آن کاتیون‌های  $\text{Fe}^{3+}$  در فضاهای خالی هشت‌وجهی اکسیژن و فضاهای خالی بین این هشت‌وجهی‌ها توسط یون‌های  $\text{Bi}^{3+}$  پر می‌شود [۱]. منشأ اصلی خاصیت فروالکتریکی از یون  $\text{Bi}^{3+}$  نشأت می‌گیرد. در ساختار الکترونی این یون

### ۱- مقدمه

فریت بیسموت یک ترکیب چندفروئی می‌باشد که دو کاتیون آهن و بیسموت در شبکه این ماده سه ظرفیتی می‌باشند، به همین دلیل ساختار این ماده را پروووسکیت ۳-۳ نیز می‌نامند.



نرم‌افزار Wien2k به کمک روش خود سازگار به حل دسته معادلات کوهن-شم به روش FP-LAPW می‌پردازد. بعد از حل کامل معادلات، مجموعه‌ای از توابع موج تک-الکترونی به دست می‌آید که با استفاده از این توابع می‌توان چگالی الکترونی جدید را محاسبه کرد. یکی از روش‌های مناسب برای انتخاب توابع موج تک‌الکترونی، تقسیم‌بندی بلور به دو ناحیه کره‌های مافین-تین و ناحیه بین جایگاهی است. در روش FP-LAPW مجموعه پایه معرفی شده در داخل کره مافین-تین با شعاع RMT، تلفیقی خطی از توابع شعاعی است و مجموعه پایه معرفی شده در ناحیه بین جایگاهی، توابع موج مربوط به امواج تخت است. بسط بردار موج  $K$  در نواحی مافین-تین تا  $K_{\max}$  و در نواحی بین جایگاهی تا  $G_{\max}$  انجام می‌گیرد [۹]. در این پژوهش، مقادیر بهینه  $Rk_{\max}$  برابر با  $1/5$ ، انرژی جداسازی حالت‌های مغزه از ظرفیت برابر با  $Ry7$ - و  $G_{\max}$  برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی برابر با  $12 \text{ (a.u}^{-1}\text{)}$  انتخاب شد. تعداد ۵۰۰ نقطه را به عنوان مقدار بهینه برای تعداد نقاط  $k$  انتخاب نموده‌ایم که به ازای آن یک شبکه  $k$ -mesh به صورت توزیع ایجاد شده است. برای اتم بیسموت اربیتال‌های  $6p^3$ ،  $6s^2$ ، برای اتم آهن اربیتال‌های  $4s^2$ ،  $3d^6$  و برای اتم اکسیژن اربیتال‌های  $2p^4$ ،  $2s^2$  را به عنوان الکترون‌های لایه ظرفیت در نظر گرفته شده است و معیار همگرایی را بر مبنای انرژی  $10^{-6}$  قرار دادیم. مشخصات ساختاری ترکیب  $\text{BiFeO}_3$  در جدول (۱) آورده شده است.

### ۳- نتایج و بحث

#### ۳-۱- ساختار نواری

از آنجا که در محاسبات ویژگی‌های نوری پیش‌بینی ساختار

یک جفت الکترون  $s$  وجود دارد که در پیوند شیمیایی هیچ سهمی ندارد. این الکترون‌ها قطبش‌پذیری بالایی داشته و با منظم قرار گرفتن در یک جهت می‌توانند خاصیت قطبیدگی را در این ترکیب ایجاد کنند [۲]. از طرفی یون مغناطیسی  $\text{Fe}^{3+}$ ، یک نظم مغناطیسی را به وجود می‌آورد. در نتیجه به دلیل وجود این دو عنصر، به طور همزمان نظم فروالکتریکی و مغناطیسی در این ترکیب می‌تواند وجود داشته باشد [۳]. فریت بیسموت از جمله موادی است که در دمای محیط هر دو خاصیت فرومغناطیس و فروالکتریکی را دارد، لذا کاربردهای زیادی در ذخیره‌سازی داده‌ها، حافظه‌های چندگانه و اسپین ترونیک دارد [۴]. این ترکیب در امتداد  $R3c$  (۱۱۱) یک ساختار هشت‌وجهی با گروه فضایی  $P4mm$  که با یک اعوجاج کوچک به ساختار تتراگونال  $P4mm$  انتقال می‌یابد [۵]. از کاربردهای فریت بیسموت می‌توان به استفاده در حسگرها، ارتباطات ماهواره‌ای، فیلترهای بهینه شده و وسایل هوشمند اشاره کرد [۶]. از میان مجموعه مطالعات انجام شده بر روی  $\text{BiFeO}_3$ ، می‌توان به بررسی خواص کشسانی با کد محاسباتی VASP [۷] و ویژگی‌های نوری در حالت لایه نازک تتراگونال اشاره کرد [۵]. هم‌چنین در پژوهش دیگری، ترکیب  $\text{BiFeO}_3$  در حالت انبوهه تتراگونال یک نیم‌رسانا با گاف ۳ الکترون‌ولت گزارش شده است [۸].

#### ۲- روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و به کارگیری روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) به کمک کد محاسباتی Wien2k انجام شده است [۹].

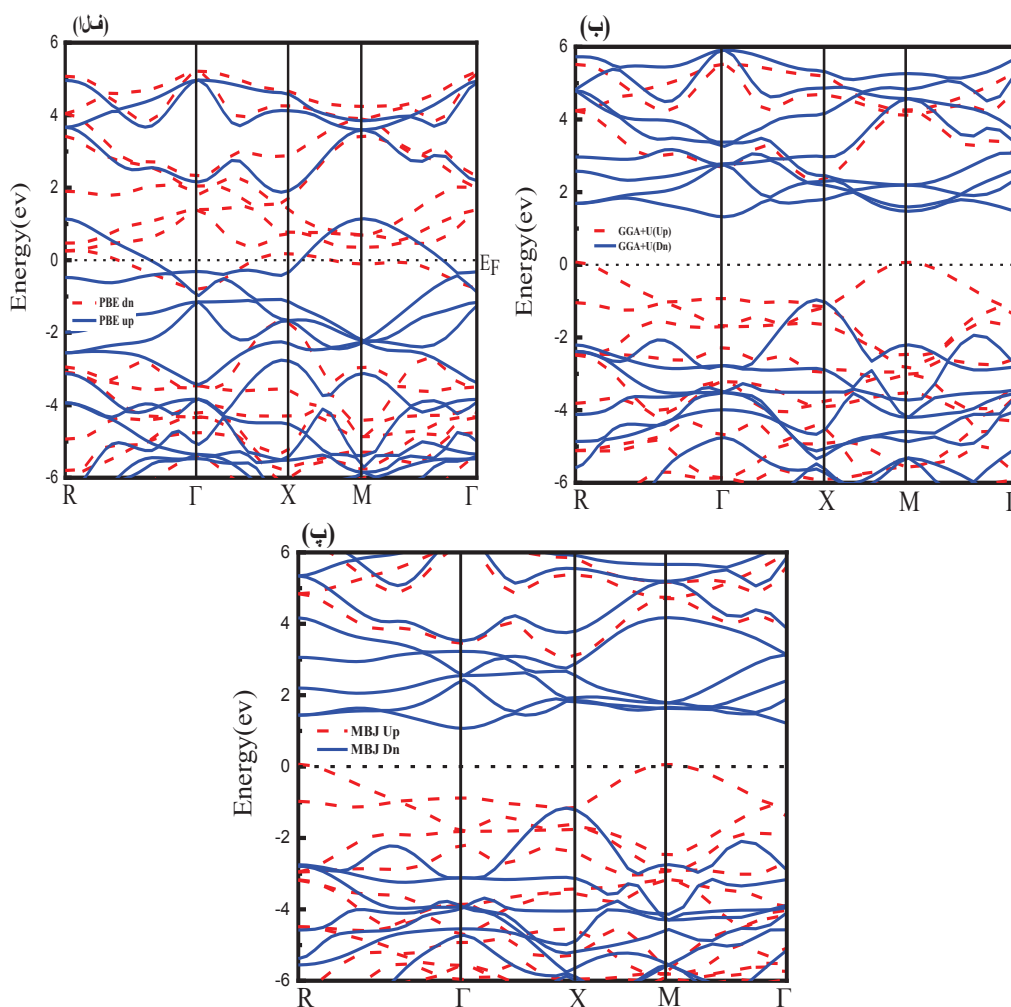


به کمک تقریب PBE به فلز بودن ترکیب حکم می‌کند، که این امر دور از انتظار است؛ زیرا نتایج محاسبات نظری و تجربی انجام شده بر روی این ترکیب دلالت بر نیم‌رسانا بودن آن در حالت تتراگونال دارد.

نواری از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است؛ به همین علت در شکل (۱) ساختار نواری ترکیب فریت بیسموت در بازه  $-6$  تا  $6$  الکترون ولت نشان داده شده است. نتایج به دست آمده از مقدار گاف نواری محاسبه شده

جدول ۱- مشخصات ساختاری ترکیب  $\text{BiFeO}_3$  در حالت تتراگونال

شعاع کره مافین - تین بر حسب a.u			گروه فضایی	ساختار	ترکیب
$R_{\text{MT}}(\text{Bi})=2.29$	$R_{\text{MT}}(\text{Fe})=1.71$	$R_{\text{MT}}(\text{O})=1.47$	P4mm	تتراگونال	$\text{BiFeO}_3$



شکل ۱- ساختار نواری فریت بیسموت در دو جهت اسپین بالا و پایین با تقریب (الف) MBJ، (ب) GGA+U و (ج) PBE



که با فرود فوتون‌های کم‌انرژی در محدوده کم‌تر از گاف نواری، تنها گذارهای درون نواری رخ می‌دهد و با اعمال فوتون‌هایی با انرژی بیش‌تر از انرژی گاف، گذارهای بین نواری آغاز می‌گردد. لذا تابع دی‌الکتریک از دو سهم حقیقی و موهومی تشکیل شده است که داده می‌شود با [۱۱]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (1)$$

که سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک به کمک رابطه کرامرز-کرونیک به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۱]:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \left\{ \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \right\} \quad (2)$$

سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نیز ناشی از گذارهای درون نواری است. لذا در این نوع گذار با توجه به گسسته بودن انرژی بین نوارهای مختلف، باید از روابط کوانتومی تبعیت کنند. در نتیجه سهم موهومی تابع دی‌الکتریک به صورت زیر نوشته می‌شود [۱۱، ۱۲]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_j |M_{ij}|^2 f_i (1 - f_j) \times \delta(E_f - E_i - \omega) d^3k \quad (3)$$

که در آن  $M$  عنصر ماتریسی مؤلفه اندازه حرکت در راستای قطبش نور و  $i$  و  $f$  حالت اولیه و نهایی و انرژی الکترون در حالت نام می‌باشد. لازم به ذکر است که در محاسبات ویژگی‌های نوری در ساختار انبوهه فریت بیسموت حالت تترائگونال، به دلیل خاصیت نیم‌رسانا بودن آن، فقط سهم گذارهای بین نواری در نظر گرفته شده است. با محاسبه سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک می‌توان ویژگی‌های مهم نوری مانند ضریب شکست ( $n(\omega)$ )، ضریب بازتاب ( $R(\omega)$ )، ضریب جذب ( $I(\omega)$ )، ضریب خاموشی ( $k(\omega)$ )، و طیف اتلاف انرژی ( $L(\omega)$ ) را می‌توان به دست آورد.

علاوه بر این، برای سامانه‌هایی که حاوی الکترون‌هایی با همبستگی قوی در اربیتال‌های  $d$  و  $f$  هستند تقریب PBE به تنهایی پاسخ‌گو نبوده و لازم است تصحیحاتی به این تقریب اعمال گردد. لذا نکات گفته شده ما را به سمت اعمال تصحیحاتی به تقریب PBE و استفاده از روش‌هایی نظیر GGA+U و MBJ سوق می‌دهد. در این پژوهش، در تقریب GGA+U با افزایش  $U=3$  eV تا  $U=5$  eV گاف نواری به ترتیب ۲٫۲۲ الکترون‌ولت و ۲٫۴۰ الکترون‌ولت به دست آمد. لذا با توجه به این که از میان پتانسیل‌های اعمالی، چون مقدار گاف گزارش شده در پتانسیل ۵ الکترون‌ولت همخوانی بهتری با نتایج دارد؛ پس  $U=5$  eV را به عنوان پتانسیل مؤثر گزارش می‌شود. همچنین، با توجه به مقدار گاف محاسبه شده در تابعی اصلاحی بک جانسون (GGA+MBJ) که به اندازه ۲٫۵۱ الکترون‌ولت می‌باشد؛ می‌توان مشاهده کرد که تابعی اصلاحی بک جانسون مقدار گاف نزدیک‌تری را به مقادیر گزارش شده ارائه می‌دهد. لذا ویژگی‌های نوری ترکیب  $\text{BiFeO}_3$  با تقریب MBJ بررسی می‌شود. علاوه بر این در جدول (۲) نتایج حاصل از این کار همراه با دیگر داده‌های موجود آورده شده است.

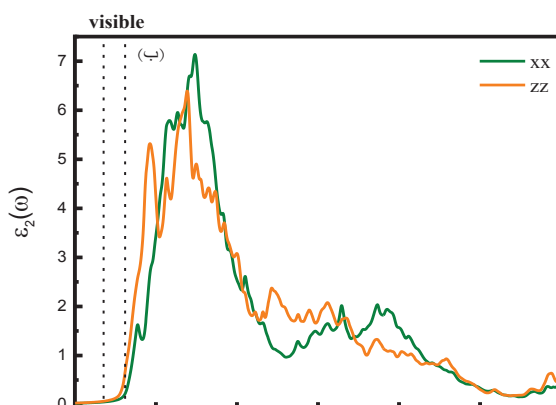
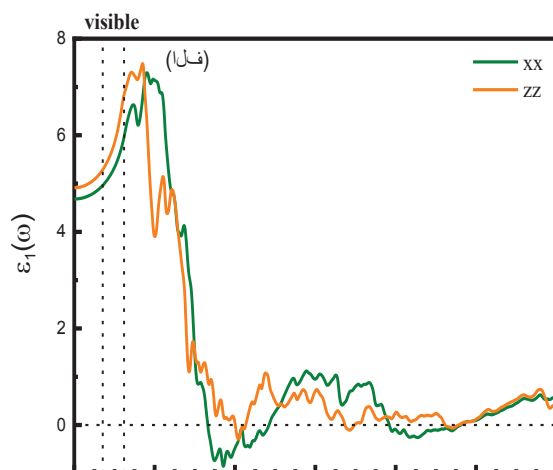
### ۳-۲- ویژگی‌های نوری

طیف نوری نیم‌رساناها منبع وسیعی از اطلاعات جهت مطالعه ساختار نواری، خواص الکترونی و نوسانات شبکه را در اختیار ما قرار می‌دهد. این خواص مبنای بسیاری از کاربردهای نیم‌رسانا از قبیل لیزرها، دیوهای گسیل نور و آشکار سازهای نوری هستند [۱۰]. تابع دی‌الکتریک مختلط یکی از مهم‌ترین پارامترها برای توصیف ویژگی‌های نوری است که دارای دو سهم گذار درون‌نواری و بین‌نواری است



جدول ۲- مقدار گاف نواری محاسبه شده ترکیب فریت بیسموت در حالت تتراگونال بر حسب الکترون ولت

مطالعات انجام شده		کار حاضر		
نظری <sup>[۹]</sup>	تجربی <sup>[۱۴]</sup>	GGA+U(5ev)	GGA+MBJ	GGA-PBE
۳,۰۰	۳,۱	۲,۴۰	۲,۵۱	۰

شکل ۲- نمودار (الف) سهم حقیقی تابع دی الکتریک و (ب) سهم موهومی تابع دی الکتریک  $\text{BiFeO}_3$  در فاز تتراگونال

در نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک نیز تا قبل از انرژی  $2/7$  الکترون ولت، تغییرات انرژی دارای روند آرامی بوده که ناشی از جذب فوتون های کم انرژی است و معرف گاف اپتیکی  $2/7$  الکترون ولت می باشد. اما بعد از انرژی  $7/7$  الکترون ولت، سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می

ویژگی های نوری، شامل سهم حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب شکست، ضریب بازتاب، ضریب خاموشی، ضریب جذب، ضریب رسانندگی و تابع اتلاف انرژی بر حسب انرژی در محدوده صفر تا  $30$  الکترون ولت برای ساختار انبوهه فریت بیسموت مورد مطالعه و در شکل های (۲) تا (۴) آورده شده است. چون ویژگی های نوری ترکیب در دو جهت  $X$  و  $Z$  بر هم منطبق نبوده و رفتار متفاوتی دارند، لذا دارای خاصیت غیرهمسانگردی بوده و منجر به ایجاد ثابت های دی الکتریک و ضریب شکست استاتیکی متفاوت در دو جهت  $X$  و  $Z$  می گردد. در میان مجموعه ویژگی های نوری ترکیب فریت بیسموت، با بررسی سهم حقیقی تابع دی الکتریک ( شکل ۲ الف) می توان مشاهده کرد در نواحی  $(8/35-12/21)$  و  $(19/21-25/32)$  که منفی است، امواج الکترومغناطیس منتشر نمی شوند و بلور شفافیت خود را از دست می دهد و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می گیرد. در این بازه های انرژی به علت وجود آمدن حفره ها و شرکت این حامل ها در رسانندگی، ما بیشترین جذب و رسانندگی را خواهیم داشت. در انرژی  $4/22$  الکترون ولت که سهم حقیقی تابع دی الکتریک دارای مقدار بیشینه می باشد، ساختار فریت بیسموت بیشترین شفافیت، کمترین جذب و رسانندگی را از خود نشان می دهد. طیف سهم موهومی تابع دی الکتریک (شکل ۲ ب)، طیف جذبی (شکل ۴ پ) و طیف رسانندگی (شکل ۴ ت) این گفته ها را تصدیق می کند.



محاسبه سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر می‌توان به ضریب شکست استاتیک سیستم دست یافت [۱۱]:

$$n(0) = \sqrt{\varepsilon_1(0)} \quad (6)$$

ضریب خاموشی برای ماده، سنجشی از میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. اگر موج الکترومغناطیسی به آسانی از داخل ماده عبور کند، ماده ضریب خاموشی پایینی دارد [۱۲]. همان طور که در شکل (۳ ب) نشان داده شده است تا انرژی‌هایی در بازه گاف نوری که هنوز گذار الکترون‌ها آغاز نشده است موج الکترومغناطیسی قادر به عبور آسان‌تر از درون ترکیب است اما با افزایش انرژی فوتون‌های فرودی رفته‌رفته گذار آغاز می‌شود و عبور موج به سادگی قبل از آن نخواهد بود که این با افزایش ضریب خاموشی همراه است تا در نهایت پس از انجام گذارهای اولیه تا انرژی ۸ الکترون‌ولت، ضریب خاموشی کاهش می‌یابد، و مشاهده می‌شود که براساس شکل (۲ ب) و (۳ الف)، ثابت دی‌الکتریک استاتیک و ضریب شکست استاتیک ترکیب در جهت X به ترتیب برابر با  $4/68$ ،  $2/16$  و در جهت Z برابر  $4/91$  و  $2/21$  می‌باشد که از طریق رابطه  $n(0) = \sqrt{\varepsilon_1(0)}$  به یکدیگر ارتباط پیدا می‌کنند. با توجه به طیف ضریب خاموشی شکل (۳ ب) که معیاری جهت سنجش میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی است می‌توان دریافت که؛ مقادیر بیشینه  $7/5$  الکترون‌ولت و  $19/38$  الکترون‌ولت در جهت محور X، متناظر با صفرهای حقیقی تابع دی‌الکتریک بوده و در انرژی‌های بالاتر از قله پلاسمونی ضریب خاموشی به سمت صفر می‌رود. با بررسی نمودارهای ضریب شکست و ضریب خاموشی نیز می‌توان به تشابه آن‌ها با نتایج حاصل از تابع دی‌الکتریک پی برد و در

یابد که این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان نوری انجام می‌گیرد.

### ۳-۲-۱- ضریب شکست و ضریب خاموشی

ضریب شکست مختلط به صورت کلی زیر نوشته می‌شود [۱۲]:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (4)$$

که در آن سهم حقیقی  $(N(\omega))$  همان ضریب شکست متعارف ماده و سهم موهومی آن ضریب خاموشی نامیده می‌شود و به جذب ماده مربوط می‌شود و بر اساس تابع دی‌الکتریک داده می‌شود با:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| + \text{Re}\varepsilon(\omega)}{2}}, \quad (5)$$
$$k(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| - \text{Re}\varepsilon(\omega)}{2}}$$

مقدار ضریب شکست استاتیک بر طبق شکل (۳ الف) در جهت X برابر با  $2/16$  و در جهت Z برابر  $2/21$  می‌باشد که در بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک نیز ذکر گردیده است. با افزایش انرژی فوتون فرودی، ضریب شکست ابتدا تا انرژی در بازه گاف دارای تغییرات بسیار محدود است اما بعد از محدوده گاف با توجه به این که گذار الکترون‌ها به نوار رسانش آغاز می‌گردد سرعت نور در ترکیب کاهش می‌یابد و به دنبال آن ضریب شکست ترکیب افزایش می‌یابد. با انجام گذارهای اولیه که انرژی آن‌ها هم در ساختار نوری و هم در سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نشان داده شد الکترون‌هایی که در لبه بالایی نوار ظرفیت قرار دارند گذار انجام می‌دهند و الکترون‌های بعدی که جای‌گزینی بیشتری در اتم دارند به انرژی‌های بالاتری برای گذار احتمالی خود نیاز دارند لذا میزان گذار الکترون‌ها کاهش یافته و سرعت نور در ترکیب افزایش می‌یابد و به دنبال آن ضریب شکست روند نزولی در پیش می‌گیرد. ریشه‌های مفهوم فیزیکی دارند؛ به عبارتی، با



بازه‌های (۸/۳۵-۱۲/۲۱) و (۱۹/۲۱-۲۵/۳۲) امواج الکترومغناطیس منتشر نمی‌شوند و در این مناطق سهم موهومی تابع دی‌الکتریک دارای بیشینه مقدار است. در این مناطق از انرژی بلور شفافیت خود را از دست می‌دهد و بیشترین جذب و رسانندگی را به علت به وجود آمدن حفره‌ها و شرکت آن‌ها در رسانندگی را خواهیم داشت.

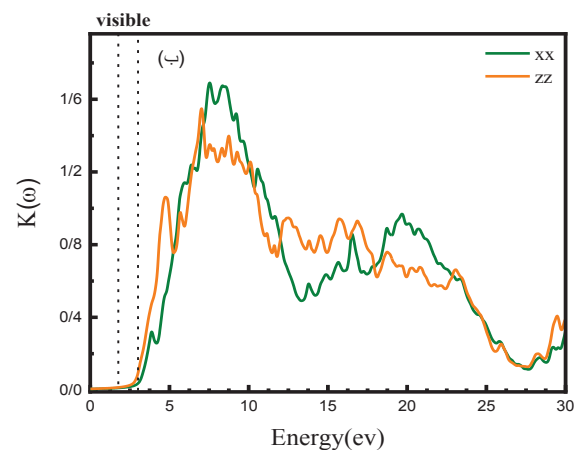
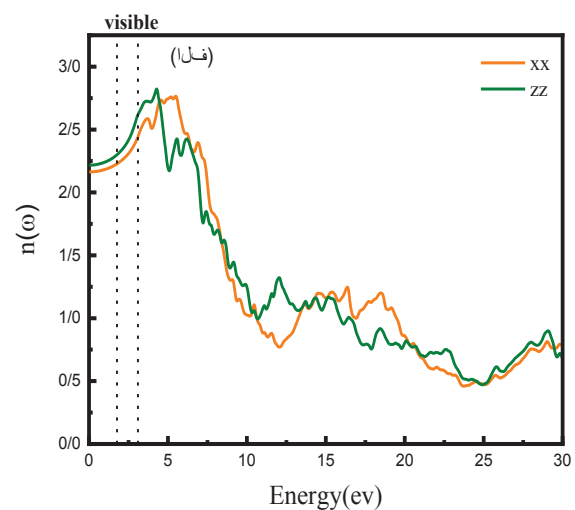
### ۳-۲-۲- ضریب بازتاب

یکی دیگر از پارامترهای مهم نوری ضریب انعکاس  $R$  است که انرژی انعکاس یافته از قسمت فصل مشترک جامد را توصیف می‌کند. ضریب بازتاب مشخص‌کننده شدت موج بازتابیده نسبت به موج فرودی می‌باشد که با استفاده از رابطه (۷) می‌توان این ضریب را تعیین کرد:

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2} \quad (7)$$

ضریب انعکاس وابسته به انرژی فوتون فرودی است. کمینه نمودار بازتابندگی بیانگر بیشترین مقدار جذب است. در نتیجه، مقایسه ضریب بازتاب در دو جهت  $X$  و  $Z$  (شکل ۴ پ) نشان می‌دهد که ترکیب  $\text{BiFeO}_3$  در ناحیه فرابنفش در جهت  $Z$  بازتابندگی بهتری نسبت به محور  $X$  داشته و در انرژی ۸/۴۵ الکترون‌ولت در جهت  $X$  دارای بیشترین مقدار بازتابندگی است. از طرفی، چون کمینه نمودار بازتابندگی بیشینه مقدار جذب است؛ با مقایسه شکل (۴ پ و ت) مشاهده می‌شود که در حوالی قله با انرژی ۱۹/۴۴ الکترون‌ولت بیشترین مقدار جذب را داریم که با کمینه نمودار بازتابندگی مطابقت دارد. همچنین، در بازه صفر تا ۲/۷ الکترون‌ولت که انرژی فوتون فرودی از انرژی گاف نواری بیشتر است موج الکترومغناطیسی کاملاً جذب نیم‌رسانا شده است و در محدوده انرژی‌های بالاتر از ۲/۷ الکترون

حالت کلی می‌توان گفت که ضریب شکست رفتاری مشابه با سهم حقیقی و ضریب خاموشی رفتاری مانند سهم موهومی تابع دی‌الکتریک دارد. در محدوده انرژی ۷/۵ الکترون‌ولت در جهت محور  $X$ ، ضریب خاموشی دارای یک مقدار بیشینه است که با شکل (۲ الف) مطابقت دارد.



شکل ۳- نمودار (الف) ضریب شکست و (ب) ضریب خاموشی فریت بیسموت در فاز تتراگونال.

نتایج نشان می‌دهد که در نواحی غیر مجاز تابع دی‌الکتریک (نواحی از انرژی که در آن  $\epsilon_1(\omega)$  منفی می‌باشد) یعنی



درصد) می‌تواند به عنوان حفاظ موج الکترومغناطیس فرابنفش مورد استفاده قرار گیرد. لازم به ذکر است که ترکیب به علت پایین بودن ضریب جذب، با وجود داشتن ضریب بازتاب کم در محدوده نور مرئی کاندیدای مناسبی برای استفاده در سلول‌های خورشیدی به‌عنوان لایه جذب نمی‌باشد. همچنین طیف اتلاف انرژی می‌تواند ناشی از تحرک الکترون‌های تک انرژی در جامد و یا از تحریک دسته‌جمعی الکترون‌های ظرفیت می‌باشد. تابع اتلاف انرژی از کمیت‌های مهم دیگر برای بررسی خواص میکروسکوپی و ماکروسکوپی جامدات بوده و متناسب با احتمال اتلاف انرژی  $E$  در واحد طول برای الکترون در حال عبور از محیط است و رابطه آن به شکل زیر است [۱۳]:

$$EELS(\omega) = \text{Im}\left[-\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right] = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \quad (9)$$

در تابع اتلاف انرژی نیز، بیش‌ترین شدت نوار ناشی از برانگیختگی پلاسمون‌های حجمی است و مابقی قله‌ها ناشی از گذارهای میان نواری است. قله اصلی در نمودار افت، همان قله پلاسمونی است و ترکیب در بسامدهای بالاتر از آن به‌صورت شفاف رفتار می‌کند. ممکن است چندین قله برای یک ماده وجود داشته باشد. با بررسی طیف اتلاف انرژی نمایش داده شده در شکل (۴ الف) می‌توان دریافت که در انرژی  $24/6$  الکترون‌ولت در جهت  $Z$  و  $25$  الکترون‌ولت در جهت  $X$  بیش‌ترین اتلاف را خواهیم داشت که در واقع متناظر با پلاسمون‌های حجمی بوده و در انرژی‌هایی که تابع اتلاف انرژی بی‌شینه است؛ شدت انتقال بین نواری کمینه می‌باشد و ترکیب در برابر تابش موج الکترومغناطیس با انرژی بیش‌تر از  $24/6$  در جهت  $Z$  و  $25$  الکترون‌ولت در جهت  $X$  به‌صورت شفاف رفتار می‌کند. در قله

ولت، چون انرژی فوتون‌ها به انرژی گاف نواری نزدیک است جذب با شیب تندی شروع به افزایش می‌کند. پارامتر مهم دیگر در بررسی ویژگی‌های نوری ضریب جذب است که رابطه آن به شکل زیر است:

$$\alpha(\omega) = 2k(\omega) = \frac{\omega}{cn(\omega)} \varepsilon_2(\omega) \quad (8)$$

ضریب جذب معیاری از فاصله‌ای است که شدت باریکه وارد شده در درون نمونه به مقدار اولیه خود می‌رسد [۱۲]. شکل (۴ ب) نحوه تغییرات رسانش نوری در دو راستای  $X$  و  $Z$  نسبت به انرژی فوتون فرودی را نشان می‌دهد. با بررسی محور انرژی این نمودار، می‌توان دریافت که رسانش نوری از انرژی  $2/7$  الکترون‌ولت آغاز شده و با افزایش انرژی فوتون نیز افزایش می‌یابد و در انرژی  $7/13$  الکترون‌ولت به بیش‌ترین مقدار خود می‌رسد. دلیل شروع رسانش نوری از انرژی حدود  $2/7$  الکترون‌ولت، گاف اپتیکی می‌باشد؛ زیرا در گستره انرژی‌های پایین‌تر از  $2/7$  الکترون‌ولت، انرژی فوتون‌های فرودی کوچک‌تر از انرژی گاف می‌باشد. لذا الکترون‌های برانگیخته شده انرژی کافی جهت عبور از گاف انرژی را نداشته و نمی‌توانند به نوار رسانش منتقل شوند؛ در نتیجه رسانش نوری به صفر می‌رسد.

از بررسی طیف‌های ضریب بازتاب (شکل ۴ پ) و ضریب جذب (شکل ۴ ت) می‌توان نتیجه گرفت که این ترکیب در هر دو راستای  $X$  و  $Z$  در ناحیه نور مرئی به علت پایین بودن ضریب جذب و ضریب بازتاب (حدود ۱۵ تا ۲۰ درصد) می‌تواند به عنوان لایه شفاف ضد بازتاب در سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد؛ در حالی که در ناحیه فرابنفش به علت بالا بودن ضریب جذب ( $10^4 \times 100 - 50 \text{ cm}^{-1}$ ) و ضریب بازتاب بالا (بین ۲۰ تا ۳۰



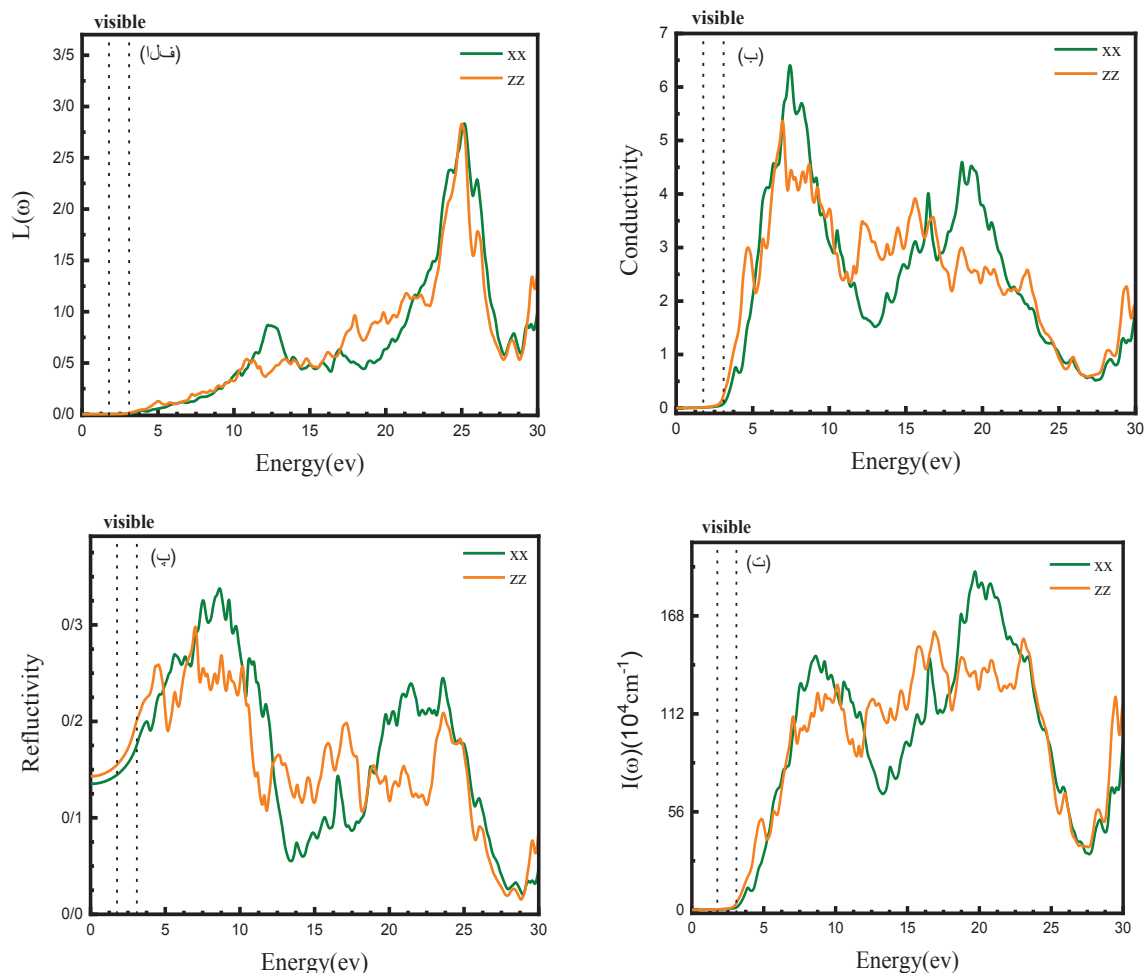


محاسبه شده ساختار فریت بیسموت با تقریب‌های GGA+U، GGA-PBE و GGA+MBJ، نتایج حاصل از تابعی اصلاحی یک جانسون (MBJ) با مقدار  $2/51$  الکترون ولت سازگاری بهتری با نتایج گزارش شده دارد. کلیه طیف‌های نوری مانند سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، ضریب جذب، ضریب بازتاب، ضریب شکست، ضریب خاموشی، رسانندگی و تابع اتلاف انرژی محاسبه و گزارش شده است.

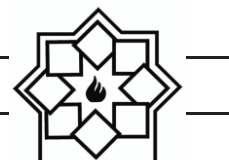
پلاسمونی یعنی در انرژی‌های فوق، شدت انتقال بین نواری کم‌ترین مقدار خود را دارد.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این کار ویژگی‌های نوری ترکیب انبوه  $\text{BiFeO}_3$  با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه چگالی با استفاده از کد محاسباتی Wien2k مورد بررسی قرار گرفت. از میان مقدار گاف انرژی



شکل ۴- نمودار (الف) تابع اتلاف انرژی، (ب) رسانندگی، (پ) بازتابندگی و (ت) ضریب جذب ترکیب فریت بیسموت در فاز تتراگونال.



- Ahmad, "First-principles study of  $\text{BiFeO}_3$  and  $\text{BaTiO}_3$  in tetragonal structure," *International Journal of Modern Physics B* 33(21), 1-19(2019).
- [9] S.Cotteniers, Agust 6, "Density Functional Theory and the Family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction", (2004).
- [10] A. Shaukat, Y. Saeed, S. Nazir, N. Ikram, M. Tanveer, "Ab initio of structural, electronic and optical property of  $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{S}$  compounds," *physica B*, 405, 3964(2009).
- [11] C. Ambrosch-Draxl, J. O. Sofo, "Linear optical properties of solids within the full potential linearized augmented plane wave method," *Computer Physics Communications* 175 (1), 1-14, (2006).
- [12] H. Wang, Y. Zheng, M.Q. Cai, H. Huang, H. L. W. Chan, "First-principles study on the electronic and optical properties of  $\text{BiFeO}_3$ ," *Solid State Communications* 149 (15-16), pp. 641-644, (2009).
- [13] M. Dresselhaus, M. Dresselhaus, "Optical property of solids", *Proceeding of the International School of "Enrico Fermi"*, J. Tauc, Editor, Academic Press. NY, (1966).
- [14] P. Chen, N. J. Podraza, X. S. Xu, A. Melville, E. Vlahos, V. Gopalan, R. Ramesh, D. G. Scholm and G. L. Musfeldt, "Optical properties of quasi-tetragonal  $\text{BiFeO}_3$  thin films," *Applied physics letters* 96, 131907(2010).

شروع ر سانش نوری از انرژی  $2/7$  الکترون‌ولت، دلیل وجود گاف اپتیکی و نیم‌رسانا بودن ترکیب فریت بیسموت می باشد. نتایج حاکی از آن است؛ ویژگی‌های نوری این ترکیب ناهمسانگرد بوده و ساختار در راستاهای  $x$  و  $y$  رفتاری یکسان و متفاوت با راستای  $z$  از خود نشان می‌دهد. به همین علت کلیه طیف‌های نوری در هر دو راستای  $x$  و  $z$  محاسبه و آنالیز شده‌اند.

### مراجع

- [1] J. B. Goodenough, "Electronic and ionic transport properties and other physical aspects of perovskites," *Reports on progress in physics*, 67, p. 1915. (2004).
- [2] D. Khomskii, "Classifying multiferroics: Mechanism and effects," *physic* 2, 20(2009).
- [3] R. Ramesh, "Emerging routes to multiferroics," *Materials science, Nature*, 461, pp.1218-1219, (2009).
- [4] M. Cebela, D. Zagorac, K. Batalovic, J. Radakovic, B. Stojadinovic, V. Spasojevic, R. Hercigoja, "BiFeO<sub>3</sub> Perovskites: A multidisciplinary approach to multiferroics," *Ceramics International*, 43. Issue, Part B, 1256-12642(2017).
- [5] P. Chen, N. J. Podraza, X. S. Xu, A. Melville, E. Vlahos, V. Gopalan, R. Ramesh, D. G. Scholm, and J. L. Musfeldt, "Optical properties of quasi-tetragonal  $\text{BiFeO}_3$  thin films," *Applied physics letters* 96, 131907(2010).
- [6] C. Chen, J. Cheng, S. Yu, L. Che, Z. Meng, "Hydrothermal synthesis of perovskite bismuth ferrite crystallites," *Journal of Crystal Growth*, 291, Issue 1, 135-139(2006).
- [7] H. Dong, Ch. Chen, Sh. Wang, W. Duan, and j. Li, "Elastic property of tetragonal  $\text{BiFeO}_3$  from first-principle calculations," *Applied physics letters* 102, 1829905(2013).
- [8] A. Ali, I. Khan, Z. Ali, F. Khan and I.

## Investigation of Optical Property of Tetragonal BiFeO<sub>3</sub>

Hamdollah Salehi<sup>1</sup>, Elham Kordestani<sup>1</sup>, Vahid Mehrabi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Faculty of Sciences, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

<sup>2</sup>Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Ayatollah Boroujerdi University of Boroujerd, Boroujerd, Iran.

\*salehi@scu.ac.ir

**Abstract:** In this paper, investigated the optical properties of bulk BiFeO<sub>3</sub> by using the full potential linearized augmented plan wave in framework density functional theory (DFT) with wien2k code. The band structure and energy gap of the bulk structures are calculated with GGA-PBE, GGA+U and GGA+MBJ approximations, and results obtained from the MBJ function are more consistent with the reported experimental results. The optical properties such as real and imaginary parts of dielectric function, absorption coefficient, reflection coefficient, refractive index, extinction coefficient, conductivity and electron energy loss spectrum have been calculated and studied. The results show that the bulk of tetragonal ferrite bismuth is a semiconductor with a optical gap of 2.7 electron volt. Since compound has magnetic properties, all calculations of compound is performed in full spin polarization.

**Keywords:** ferrite bismuth, Density Functional Theory, Optical Property, Spin-Polarized.