فصلنامه‌ی علمی

علم و مهندسی سرامیک

دوره‌ی ۱۰، شماره‌ی ۳، پاییز ۱۴۰۰

مطالعهٔ ویژگی‌های نوری ترکیب $BiFeO_3$ در حالت تتراگونال

نوع مقاله: علمی پژوهشی

حمداله صالحی[1*]، الهام کردستانی[1]، وحید مهرابی[2]

[1]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

[2]گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم پایه، دانشگاه آیت اله بروجردی، بروجرد، ایران

*salehi@scu.ac.ir

اطلاعات مقاله:

دریافت: ۲۶ تیر ۱۴۰۰

پذیرش: ۲۰ شهریور ۱۴۰۰

صفحه ۱۳ تا صفحه ۲۳

در دسترس در نشانی:

www.ijcse.ir

زبان نشریه: فارسی

شاپا چاپی: ۲۳۵۲-۲۳۲۲

شاپا الکترونیکی:

۲۷۸۳-۳۰۰۳

کلیدواژه:

فریت بیسموت، نظریهٔ تابعی چگالی، ویژگی‌های نوری، قطبش اسپینی

چکیده:

در این مطالعه خواص نوری ترکیب $BiFeO_3$ با استفاده از روش امواج بهبودیافتهٔ خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریهٔ چگالی (DFT) با استفاده از کد محاسباتی Wien2k مورد بررسی قرار گرفت. ساختار نواری و انرژی گاف با تقریب‌های GGA-PBE، GGA+U و GGA+MBJ محاسبه و نتایج حاصل از تابعی 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 تتراگونال یک نیم رسانا با گاف اپتیکی ۲/۷ الکترون ولت می‌باشد. از آن جا که ترکیب دارای خاصیت مغناطیسی می‌باشد کلیهٔ محاسبات به‌صورت کاملاً قطبش اسپینی انجام شده است.

کد DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6

۱- مقدمه

فریت بیسموت یک ترکیب چندفروئی می‌باشد که دو کاتیون آهن و بیسموت در شبکهٔ این ماده سه ظرفیتی می‌باشند، به همین دلیل ساختار این ماده را پرووسکیت ۳-۳ نیز می‌نامند. این ترکیب متشکل از کاتیون‌های Fe^{3+} و Bi^{3+} بوده که در آن کاتیون های Fe^{3+} در فضاهای خالی هشت‌وجهی اکسیژن و فضاهای خالی بین این هشت‌وجهی‌ها توسط یون های Bi^{3+} پر می‌شود [۱]. منشأ اصلی خاصیت فروالکتریکی از یون Bi^{3+} نشأت می‌گیرد. در ساختار الکترونی این یون،

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

یک جفت الکترون s ۶ 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 Fe^{3+}، یک نظم مغناطیسی را به‌وجود می‌آورد. در نتیجه به‌دلیل وجود این دو عنصر، به‌طور 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 (۱۱۱) یک ساختار هشت‌وجهی با گروه فضایی R3c بوده 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 $BiFeO_3$، 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 $BiFeO_3$ در حالت انبوهۀ تتراگونال یک نیم‌رسانا با گاف ۳ الکترون‌ولت گزارش شده است [۸].

۲- روش محاسبات

محاسبات بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی و به‌کارگیری روش امواج تخت بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) به کمک کد محاسباتی Wien2k انجام شده است [۹].

نرم‌افزار Wien2k به کمک روش خودسازگار به حل دسته معادلات کوهن- شم به روش FP-LAPW می‌پردازد. بعد از حل کامل معادلات، مجموعه‌ای از توابع موج تک- الکترونی به‌دست 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 ناحیهٔ کره‌های مافین- تین و ناحیهٔ بین جایگاهی است.

در روش FP-LAPW مجموعه پایهٔ معرفی شده در داخل کرهٔ مافین- تین با شعاع RMT، تلفیقی خطی از توابع شعاعی است و مجموعهٔ پایهٔ معرفی شده در ناحیهٔ 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 بهینهٔ Rk_{max} برابر با ۸/۵، انرژی جداسازی حالت‌های مغزه از ظرفیت برابر با Ry7- و G_{max} برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیهٔ بین جایگاهی برابر با ($a.u^{-1}$) ۱۲ انتخاب شد. تعداد ۵۰۰ نقطه را به‌عنوان مقدار بهینه برای تعداد نقاط k انتخاب نموده‌ایم که به ازای آن یک شبکهٔ 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 به‌عنوان الکترون‌های لایهٔ ظرفیت در نظر گرفته شده است و معیار همگرایی را بر مبنای انرژی ۰/۰۰۰۱ قرار دادیم. مشخصات ساختاری ترکیب $BiFeO_3$ در جدول (۱) آورده شده است.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- ساختار نواری

از آنجا که در محاسبات ویژگی‌های نوری پیش‌بینی ساختار

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

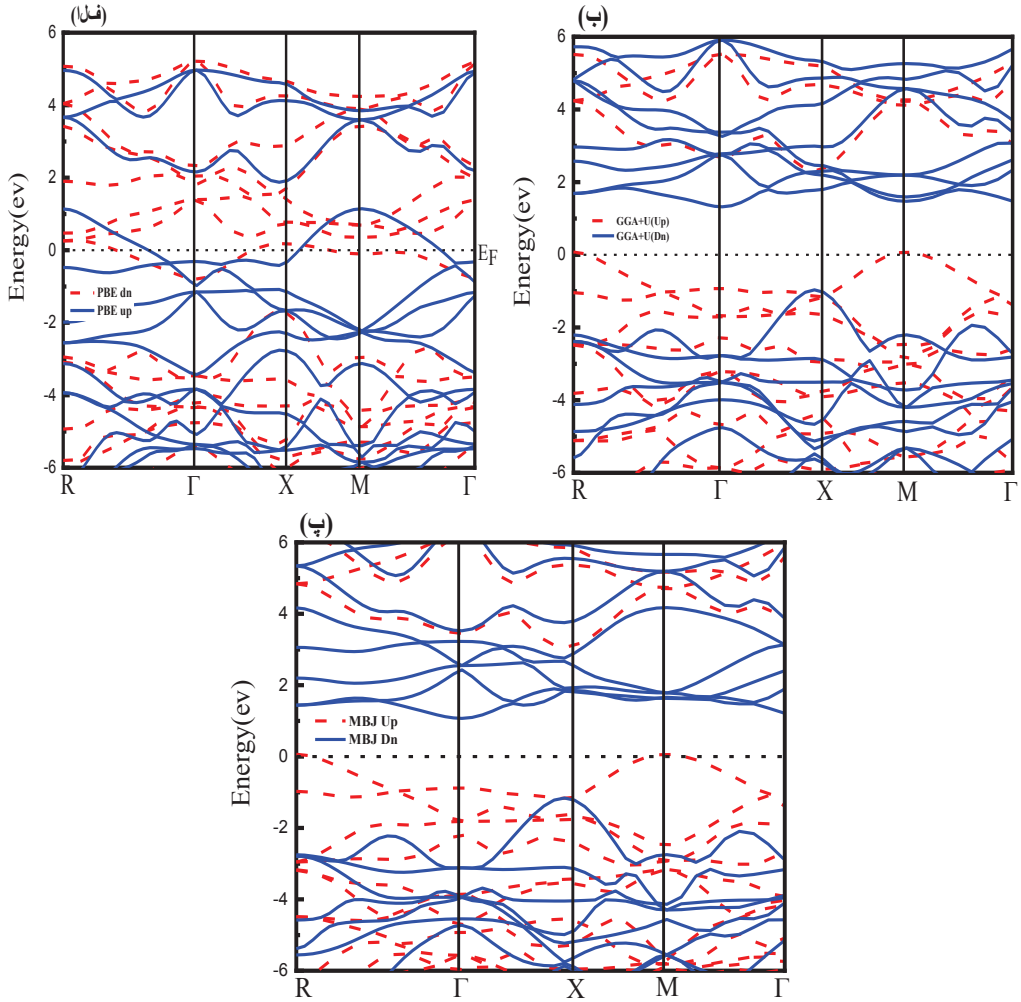
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

نواری از اهمیت ویژه‌ای برخوردار اســـت؛ به‌همین علت در شکل (۱) ساختار نواری ترکیب فریت بی سموت در بازهٔ ۶- تا ۶ الکترون ولت نشان داده شده است.

نتایج به‌دســـت آمده از مقدار گاف نواری محاســـبه شـــده به‌کمک تقریب PBE به فلز بودن ترکیب حکم می‌کند، که این امر دور از انتظار اســـت؛ زیرا نتایج محاســـبات نظری و تجربی انجام شـــده بر روی این ترکیب دلالت بر نیم‌رســـانا بودن آن در حالت تتراگونال دارد.

جدول ۱- مشخصات ساختاری ترکیب $BiFeO_3$ در حالت تتراگونال

ترکیب	ساختار	گروه فضایی	شعاع کره مافین- تین برحسب a.u		
$BiFeO_3$	تتراگونال	P4mm	$R_{MT}(O)=1.47$	$R_{MT}(Fe)=1.71$	$R_{MT}(Bi)=2.29$



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

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

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= ۳ eV تا U=۵ eV گاف نواری به ترتیب ۲٫۲۲ الکترون‌ولت و ۲٫۴۰ الکترون‌ولت به‌دست 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=۵ eV را به‌عنوان پتانسیل مؤثر گزارش می‌شود. هم‌چنین، با توجه به مقدار گاف محاسبه شده در تابعی اصلاحی بک جانسون (GGA+MBJ) که به اندازهٔ ۲٫۵۱ الکترون‌ولت می‌باشد؛ می‌توان مشاهده کرد که تابعی اصلاحی بک جانسون مقدار گاف نزدیک‌تری را به مقادیر گزارش‌شده ارائه می‌دهد. لذا ویژگی‌های نوری ترکیب $BiFeO_3$ با تقریب MBJ بررسی می‌شود. علاوه براین 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 مطالعهٔ ساختار نواری، خواص الکترونی و نوسانات شبکه را در اختیار ما قرار می‌دهد. این خواص مبنای بسیاری از کاربردهای نیم‌رسانا از قبیل لیزرها، دیودهای گسیل نور و آشکارسازهای نوری هستند [۱۰]. تابع دی‌الکتریک مختلط یکی از مهم‌ترین پارامترها برای توصیف ویژگی‌های نوری است که دارای دو سهم گذار درون‌نواری و بین نواری است که با فرود فوتون‌های کم‌انرژی در محدودهٔ 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]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \qquad (۱)$$

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

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P\{\int_0^\infty \frac{\omega'\varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'\} \qquad (۲)$$

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 به‌صورت زیر نوشته می‌شود [۱۱، ۱۲]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2\omega^2} \Sigma \int < i|M|j >^2 f_i(1-f_i) \times \delta(E_f - E_i - \omega) d^3k \qquad (۳)$$

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

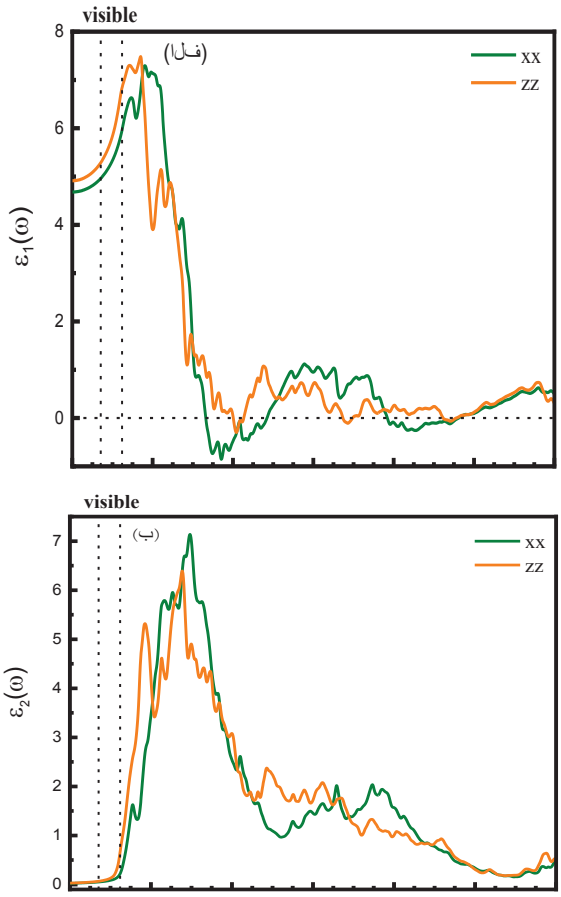
[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

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

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

ویژگی‌های 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 محدودهٔ صفر تا ۳۰ الکترون‌ولت برای ساختار انبوهۀ فریت بیسموت مورد مطالعه و در شکل‌های (۲) تا (۴) آورده شده است. چون ویژگی‌های 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 ثابت‌های دی‌الکتریک و ضریب شکست استاتیک متفاوت در دو جهت X و Z می‌گردد. در میان مجموعه ویژگی‌های نوری ترکیب فریت بیسموت، با بررسی سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک (شکل ۲ الف) می‌توان مشاهده کرد در نواحی (۸/۳۵-۱۲/۲۱) و (۱۹/۲۱-۲۵/۳۲) که منفی است، امواج الکترومغناطیس منتشر نمی‌شوند و بلور شفافیت خود را از دست می‌دهد و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. در این بازه‌های انرژی به علت به وجود آمدن حفره‌ها و شرکت این حامل‌ها در رسانندگی، ما بیش‌ترین جذب و رسانندگی را خواهیم داشت. در انرژی ۴/۲۲ الکترون‌ولت که سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک دارای مقدار بیشینه می‌باشد، ساختار فریت بیسموت بیش‌ترین شفافیت، کم‌ترین جذب و رسانندگی را از خود نشان می‌دهد. طیف سهم موهومی تابع دی‌الکتریک (شکل ۲ ب)، طیف جذبی (شکل ۴ پ) و طیف رسانندگی (شکل ۴ ت) این گفته‌ها را تصدیق می‌کند.



شکل ۲- نمودار (الف) سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک و (ب) سهم موهومی تابع دی‌الکتریک $BiFeO_3$ در فازتتراگونال

در نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نیز تا قبل از انرژی ۲/۷ الکترون‌ولت، تغییرات انرژی دارای روند آرامی بوده که ناشی از جذب فوتون‌های کم‌انرژی است و معرف گاف اپتیکی ۲/۷ الکترون‌ولت می‌باشد. اما بعد از انرژی ۲/۷ الکترون‌ولت، سهم موهومی به‌صورت ناگهانی افزایش می

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

یابد که این امر بیانگر جذبی ا ست که به دنبال آن گذارهای میان نواری انجام می‌گیرد.

۳-۲-۱- ضریب شکست و ضریب خاموشی

ضریب شکست مختلط به‌صورت کلی زیر نوشته می‌شود [۱۲]:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \qquad (۴)$$

که درآن سهم حقیقی ($N(\omega)$) همان ضریب شکست متعارف ماده و سهم موهومی آن ضریب خاموشی نامیده می شود و به جذب ماده مربوط می‌شود وبر اساس تابع دی الکتریک داده می‌شود با:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)|+Re\varepsilon(\omega)}{2}}, \quad k(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)|-Re\varepsilon(\omega)}{2}} \qquad (۵)$$

مقدار ضریب شکست استاتیک بر طبق شکل (۳ الف) درجهت x برابر با ۲/۱۶ و در جهت z برابر ۲/۲۱ می‌باشد که در بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک نیز ذکر گردیده است. با افزایش انرژی فوتون فرودی، ضریب شکست ابتدا تا انرژی در بازهٔ گاف دارای تغییرات بسیار محدود است اما بعد از محدودهٔ گاف با توجه به این که گذار الکترون ها 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 نواری و هم در سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نشان داده شد الکترون‌هایی که درلبهٔ بالایی نوار ظرفیت قرار دارند گذار انجام می‌دهند و الکترون های بعدی که جای‌گزیدگی بیش‌تری در اتم دارند به انرژی‌های بالاتری برای گذار احتمالی خود نیاز دارند لذا میزان گذار الکترون‌ها کاهش‌یافته 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 محاسبهٔ سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر می‌توان به ضریب شکست استاتیک سیستم دست یافت [۱۱]:

$$n(0) = \sqrt{\varepsilon_1(0)} \qquad (۶)$$

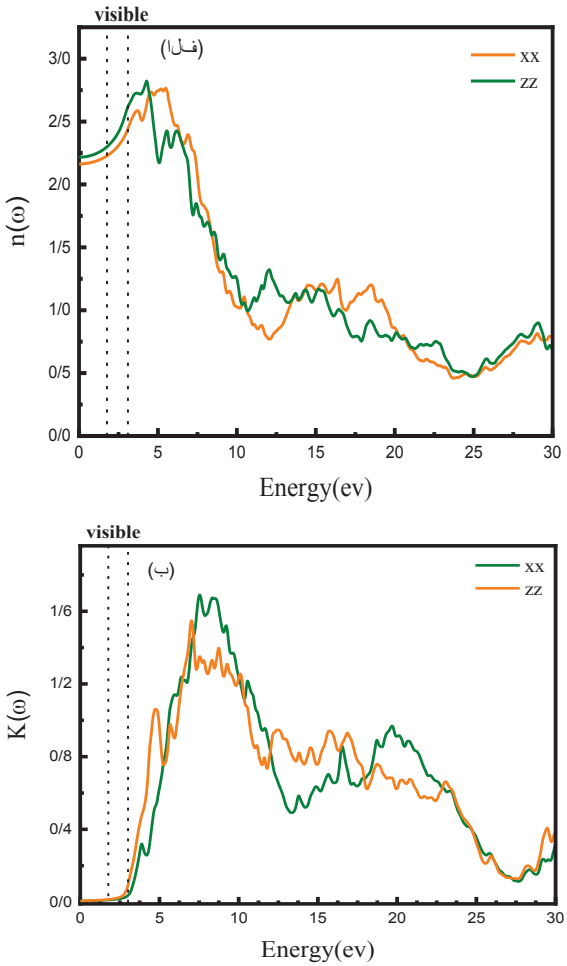
ضریب خامو شی برای ماده، سنج شی از میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. اگر موج الکترومغناطیسی به آسانی از داخل ماده عبور کند، ماده ضریب خامو شی پایینی دارد [۱۲]. همان طور که در شکل (۳ ب) نشان داده شده است تا انرژی‌هایی در بازهٔ گاف نواری که هنوز گذار الکترون ها آغاز نشده است موج الکترومغناطیسی قادر به عبور آسان‌تر از درون ترکیب ا ست 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 خامو شی همراه ا ست تا در نهایت پس از انجام گذار های اولیه تا انرژی ۸ الکترون‌و لت، ضر یب خاموشی کاهش می‌یابد، و مشاهده می‌شود که براساس شکل (۲ ب) و (۳ الف)، ثابت دی‌الکتریک استاتیک و ضریب شکست ا ستاتیک ترکیب در جهت x به ترتیب برابر با ۴/۶۸، ۲/۱۶ و در جهت z برابر ۴/۹۱ و ۲/۲۱ می‌باشد که از طریق رابطهٔ $n(0)=\sqrt{\varepsilon_1(0)}$ به یکدیگر ارتباط پیدا می کنند. با توجه به طیف ضریب خاموشی شکل (۳ ب) که معیاری جهت سنجش میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی ا ست می‌توان دریافت که؛ مقادیر بیشینهٔ ۷/۵ الکترون‌ولت و ۱۹/۳۸ الکترون‌ولت در جهت محور x، متناظر با صفرهای حقیقی تابع دی‌الکتریک بوده و در انرژی‌های بالاتر از قلهٔ پلاسمونی ضریب خاموشی به سمت صفر می‌رود. با بررسی نمودارهای ضریب شکست و ضریب خاموشی نیز می‌توان به تشابه آن‌ها با نتایج حا صل از تابع دی‌الکتریک پی برد و در

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

حالت کلی می‌توان گفت که ضریب شکست رفتاری مشابه با سهم حقیقی و ضریب خاموشی رفتاری مانند سهم موهومی تابع دی‌الکتریک دارد.

در محدودهٔ 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 درفاز تتراگونال.

نتایج نشان می‌دهد که در نواحی غیر مجاز تابع دی‌الکتریک (نواحی از انرژی که در آن $\varepsilon_1(\omega)$ منفی می‌باشد) یعنی بازه‌های (۱۲/۲۱-۸/۳۵) و (۲۵/۳۲-۱۹/۲۱) 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 بیش ترین جذب و رسانندگی را به علت به‌وجود 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 مشخص‌کنندهٔ شدت موج بازتابیده نسبت به موج فرودی می‌باشد که با استفاده از رابطهٔ (۷) می‌توان این ضریب را تعیین کرد:

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2} \qquad (۷)$$

ضریب انعکاس وابسته به انرژی فوتون فرودی است. کمینهٔ نمودار بازتابندگی بیانگر بیش‌ترین مقدار جذب است. در نتیجه، مقایسهٔ ضریب بازتاب در دو جهت x و z (شکل ۴ پ) نشان می‌دهد که ترکیب $BiFeO_3$ در ناحیهٔ 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 کمینهٔ نمودار بازتابندگی بیشینهٔ مقدار جذب است؛ با مقایسهٔ شکل (۴ پ و ت) مشاهده می شود که در حوالی قلهٔ با انرژی ۱۹/۴۴ الکترون ولت بیش‌ترین مقدار جذب را داریم که با کمینهٔ نمودار بازتابندگی مطابقت دارد. هم‌چنین، در بازهٔ صفر تا ۲/۷ الکترون‌ولت که انرژی فوتون فرودی از انرژی گاف نواری بیش‌تر است موج الکترومغناطیسی کاملاً جذب نیم‌رسانا شده است و در محدودهٔ انرژی‌های بالاتر از ۲/۷ الکترون

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

ولت ، چون انرژی فوتون ها 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 رابطهٔ آن به شکل زیر است:

$$\alpha(\omega) = 2k(\omega) = \frac{\omega}{cn(\omega)}\varepsilon_2(\omega) \qquad (۸)$$

ضریب جذب معیاری از فاصله‌ای است که شدت باریکهٔ وارد شده در درون نمونه به مقدار اولیه خود می‌رسد [۱۲].

شکل (۴ ب) نحوهٔ 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 ۲/۷ الکترون‌ولت آغاز شده و با افزایش انرژی فوتون نیز افزایش می‌یابد و در انرژی ۷/۱۳ الکترون‌ولت به بیش‌ترین مقدار خود می‌رسد. دلیل شروع رسانش نوری از انرژی حدود ۲/۷ الکترون‌ولت، گاف اپتیکی می‌باشد؛ زیرا در گسترهٔ انرژی‌های پایین‌تر از ۲/۷ الکترون‌ولت، انرژی فوتون های فرودی کوچک‌تر از انرژی گاف می‌باشد. لذا الکترون های 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 ناحیهٔ نور مرئی به علت پایین بودن ضریب جذب و ضریب بازتاب (حدود ۱۵ تا ۲۰ در صد) می تواند به عنوان لایهٔ شفاف ضد بازتاب در سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد؛ در حالی که در ناحیهٔ فرابنفش به علت بالا بودن ضریب جذب ($۱۰^۴\times۱۰۰$–۵۰ cm^{-1}) و ضریب بازتاب بالا(بین ۲۰ تا ۳۰ درصد) می‌توانند 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 محدودهٔ نور مرئی کاندیدای مناسبی برای استفاده در سلول‌های خورشیدی به‌عنوان لایهٔ جاذب نمی‌باشد. هم‌چنین طیف اتلاف انرژی می‌تواند ناشی از تحرک الکترون های تک انرژی در جامد و یا از تحریک دسته‌جمعی الکترون‌های ظرفیت می‌باشد. تابع اتلاف انرژی از کمیت‌های مهم دیگر برای بررسی خواص میکرو سکوپی و ماکروسکوپی جامدات بوده و متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول برای الکترون در حال عبور از محیط است و رابطهٔ آن به شکل زیر است [۱۳]:

$$EELS(\omega) = \mathrm{Im}[-1/\varepsilon(\omega)] = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \qquad (۹)$$

در تابع اتلاف انرژی نیز، بیش‌ترین شدت نوار ناشی از برانگیختگی پلاسمون‌های حجمی است و مابقی قله‌ها ناشی از گذارهای میان نواری است. قلهٔ اصلی در نمودار افت، همان قلهٔ 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 ۲۴/۶ الکترون‌ولت در جهت z و ۲۵ الکترون‌ولت درجهت x بیش‌ترین اتلاف را خواهیم داشت که درواقع متناظر با پلاسمون‌های حجمی بوده و در انرژی هایی که تابع اتلاف انرژی بیشینه است؛ شدت انتقال بین نواری کمینه می‌باشدو ترکیب در برابر تابش موج الکترومغناطیس باانرژی بیش‌تر از۲۴/۶ در جهت z و ۲۵ الکترون‌ولت درجهت x به‌صورت شفاف رفتار می‌کند. در قلهٔ

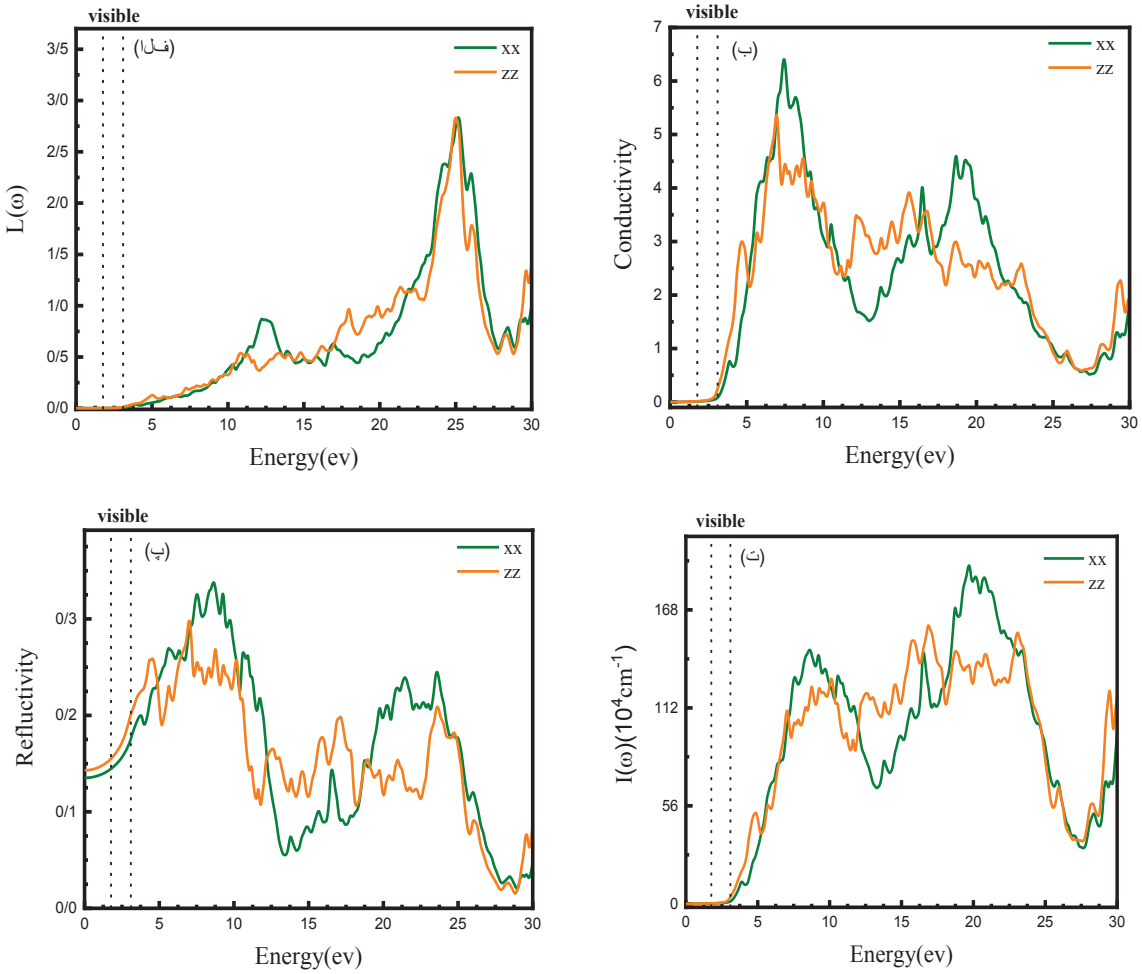
[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

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

۴- نتیجه‌گیری

در این کار ویژگی های نوری ترکیب انبو هۀ $BiFeO_3$ با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافتۀ خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریۀ چگالی با ا ستفاده از کد محا سباتی Wien2k مورد بررسی قرار گرفت. از میان مقدار گاف انرژی محاسبه شدۀ ساختار فریت بیسموت با تقریب‌های GGA-PBE، GGA+U و GGA+MBJ، نتایج حاصل از تابعی ا صلاحی بک جانسون (MBJ) با مقدار ۲/۵۱ الکترون ولت سازگاری بهتری با نتایج گزارش شده دارد. کلیۀ طیف های نوری مانند سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، ضریب جذب، ضریب بازتاب، ضریب شکست، ضریب خامو شی، ر سانندگی و تابع اتلاف انرژی محا سبه و گزارش شده است.



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

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

شروع ر سانش نوری از انرژی ۲/۷ الکترون‌ولت، دلیل وجود گاف اپتیکی و نیم‌رســانا بودن ترکیب فریت بیســموت می با شد. نتایج حاکی ازآن ا ست؛ ویژگی‌های نوری این ترکیب ناهمســانگرد بوده و ســاختار در راســتاهای x و y رفتاری یکســان و متفاوت با راســتای z از خود نشــان می‌دهد. به همین علت کلیهٔ طیف‌های نوری در هر دو راســتای x و z محاسبه و آنالیز شده‌اند.

مراجع

[1] J. B. Goodenough, "Electronic and ionic transport properties and other physical aspects of provskites," 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, "$BiFeO_3$ 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. Schlom, and J. L. Musfeldt, "Optical properties of quasi-tetragonal $BiFeO_3$ 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 $BiFeO_3$ from frist-principle calculations," Applied physics letters 102, 1829905(2013).

[8] A. Ali, I. Khan, Z. Ali, F. Khan and I. Ahmad, "First-principles study of $BiFeO_3$ and $BaTiO_3$ in tetragonal structure," International Journal of Modern Physics B 33(21), 1-19(2019).

[9] S.Cottenirs, 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 inito of structural, electronic and optical property of Ca1-X SrX 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 planewave 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 $BiFeO_3$," 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 $BiFeO_3$ thin films," Applied physics letters 96, 131907(2010).

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]

Iranian Journal of
Ceramic Science & Engineering
Vol. 10, No. 3, 2021

Investigation of Optical Property of Tetragonal $BiFeO_3$

Hamdollah Salehi[1], Elham Kordestani[1], Vahid Mehrabi[2]

[1]Department of Physics, Faculty of Sciences, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran
[2]Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Ayatollah Boroujerdi University of Boroujerd, Boruojerd, Iran.

*salehi@scu.ac.ir

Abstract: In this paper, investigated the optical properties of bulk BiFeO3 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.

[Downloaded from ijcse.ir on 2025-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.3.6]