



بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰



مطالعه خواص اپتیکی BiFeO_3 در حالت مکعبی

حمداله صالحی^۱، الهام کردستانی^۲

^۱دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، salehi_h@scu.ac.ir

^۲کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، kordestani.phys@gmail.com

چکیده - در این پژوهش خواص اپتیکی BiFeO_3 با استفاده از روش امواج بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از کد محاسباتی Wien2k مورد بررسی قرار گرفت. خواص اپتیکی نظیر قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب شکست و ضریب خاموشی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که فریت بیسموت در حالت مکعبی یک فلز می‌باشد. از آنجایی که ترکیب دارای خاصیت مغناطیسی می‌باشد، کلیه محاسبات به صورت کاملاً اسپینی انجام شده است.

کلید واژه - «خواص اپتیکی، فریت بیسموت، نظریه تابعی چگالی».

Study Optical Property of Cubic BiFeO_3

Hamdollah Salehi¹, Elham Kordestani²

¹Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Sciences, Shahid Chamran University of Ahvaz, Email: salehi_h@scu.ac.ir

²M. Sc in Physics, Department of Physics, Faculty of Sciences, Shahid Chamran University of Ahvaz, Email: kordestani.phys@gmail.com

Abstract- In this study, investigated the optical properties of BiFeO_3 by using the full potential linearized augmented plan wave (FP-LAPW) in framework density functional theory(DFT) with wien2k code. The optical properties such as real and imaginary parts of dielectric function, refractive index, extinction coefficient have been calculated and studied. The results show that of cubic ferrite bismuth is a metallic. Since compound has magnetic properties, all calculations of compound is performed in full spin.

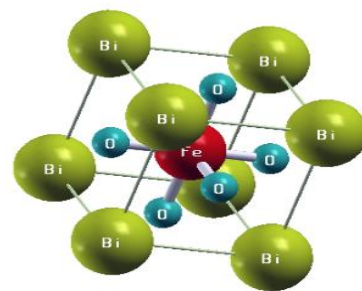
Keywords: Optical Property, Ferrite Bismuth, Density Functional Theory.

مقدمه

مواد چندفروئی پرووسکیت با فرمول شیمیایی ABO_3 از قبیل موادی هستند که می‌توانند به‌طور هم‌زمان دو یا چند نظم فروئیکی را داشته باشند [۱]. در این میان فریت بیسموت از قبیل مواد چند فروئی است که ساختار ایده‌آل آن به‌صورت پرووسکیت مکعبی با گروه فضایی $Pm3m$ می‌باشد [۲]. در میان مطالعات نظری انجام شده بر روی این ترکیب، می‌توان به بررسی خواص ساختاری، الکترونی و کشسانی انبوهه $BiFeO_3$ در فاز مکعبی اشاره کرد [۳، ۴] و در پژوهشی دیگر ترکیب فریت بیسموت در فاز مکعبی به‌عنوان یک فلز گزارش شد [۵].

روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و به کمک کد محاسباتی Wien2k انجام شده است [۶]. در این پژوهش، مقادیر بهینه Rk_{max} برابر با ۸، انرژی جداسازی حالت‌های مغزه از ظرفیت برابر با $-7Ry$ و G_{max} برابر با $12(a.u^{-1})$ انتخاب شد. تعداد نقاط در نظر گرفته شده در منطقه اول بریلوئن ۳۰۰ نقطه است که به‌ازای آن یک شبکه $6 \times 6 \times 6$ ایجاد شده است. شعاع کره‌های مافین-تین برای عناصر Bi ، Fe و O به ترتیب ۲/۵، ۱/۹۱ و ۱/۶۴ (در واحد اتمی) می‌باشد و سلول قراردادی فریت بیسموت در فاز مکعبی در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل ۱: ساختار بلوری فریت بیسموت در فاز مکعبی.

خواص اپتیکی

ثابت‌های اپتیکی پاسخی از تابش امواج الکترومغناطیسی اعمال شده در چارچوب نظریه پاسخ خطی می‌باشند که توسط روابط کرامرز-کرونیک به هم مرتبط می‌شوند. برای بررسی خواص اپتیکی یک بلور بایستی ثابت‌های اپتیکی مختلف آن را برحسب انرژی تابشی مورد بررسی قرار داد. یکی از مهم‌ترین کمیت‌های اپتیکی، تابع دی‌الکتریک مختلط است. تابع دی‌الکتریک توسط رابطه زیر تعریف می‌شود [۷]:

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

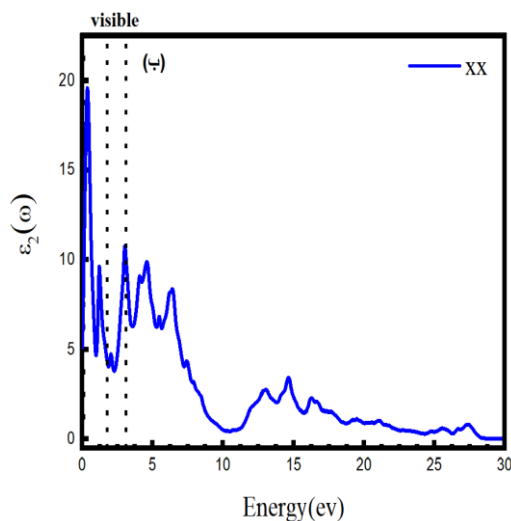
این تابع تانسوری از مرتبه دوم می‌باشد و برای ساختارهای مکعبی چون $a = b = c$ می‌باشد؛ فقط محاسبه یک مؤلفه از تابع دی‌الکتریک ضروری و سامانه در حالت مکعبی همسانگرد می‌باشد و در هر سه جهت x و y و z رفتار یکسانی از خود نشان می‌دهد. در رابطه (۱)، $\varepsilon_1(\omega)$ سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک می‌باشد که توسط رابطه کرامرز-کرونیک به‌صورت زیر تعریف می‌شود [۷]:

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

P قسمت اصلی انتگرال است. $\varepsilon_2(\omega)$ سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نیز ناشی از گذارهای درون نواری است که توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود [۷]:

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

M عنصر ماتریسی انداره حرکت، i و f حالت اولیه و نهایی و E_i انرژی حالت اولیه می‌باشد. نمودار مربوط به سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک در انبوهه فریت بیسموت در ساختار مکعبی در شکل (۲) و (۳) آورده شده



شکل ۳: سهم موهومی تابع دی‌الکتریک در انبوهه فریت بیسموت در فاز مکعبی.

ضریب شکست و ضریب خاموشی

ضریب شکست، پارامتر فیزیکی مهم دیگری است که مانند تابع دی‌الکتریک مختلط بوده و می‌توان آن را براساس تابع دی‌الکتریک به شکل رابطه زیر نوشت [۷]:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| + \text{Re } \varepsilon(\omega)}{2}} \quad (۵)$$

ضریب خاموشی، سنجشی از میزان جذب موج الکترومغناطیسی می‌باشد؛ یعنی اگر موج الکترومغناطیسی به راحتی از ماده عبور پیدا کند ضریب خاموشی کمی دارد و اگر پرتویی به سختی در ساختاری نفوذ کند ماده ضریب خاموشی بزرگی دارد و توسط رابطه (۶) به دست می‌آید [۷]:

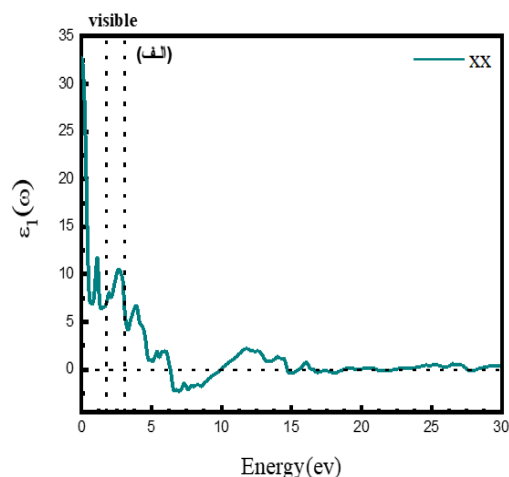
$$k(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| - \text{Re } \varepsilon(\omega)}{2}} \quad (۶)$$

نمودارهای مربوط به ضریب شکست و ضریب خاموشی ترکیب BiFeO_3 در فاز مکعبی در شکل (۴) آورده شده است. قله‌های بیشینه‌ای که در نمودار ضریب شکست (شکل ۴ الف) مشاهده می‌شود؛ نشان می‌دهد که در این نقاط عبور موج الکترومغناطیسی به حداقل می‌رسد و بعد از آن ضریب شکست روند کاهشی خواهد داشت. یعنی در انرژی‌های بالاتر امواج می‌توانند از ماده عبور کنند. با توجه

است. جذر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر منجر به ضریب شکست استاتیک می‌شود؛ که به کمک رابطه زیر محاسبه می‌شود [۷]:

$$n(0) = \sqrt{\varepsilon_1(0)} \quad (۴)$$

که برای ترکیب فریت بیسموت در فاز مکعبی برابر با ۵/۷۱ می‌باشد. با توجه به نمودار سهم حقیقی (شکل ۲) مشاهده می‌شود که این نمودار در محدوده‌ای از انرژی (۱/۱-۶) الکترون ولت دارای مقادیر منفی است. لذا در ناحیه‌ای که ε_1 منفی است امواج منتشر نمی‌شوند و بلور شفافیت خود را از دست می‌دهد و بیشترین جذب و رسانندگی را خواهیم داشت. با توجه به نمودار سهم موهومی (شکل ۳) می‌توان دریافت؛ شروع جذب از مقادیر بسیار کوچک انرژی بیانگر این است که ترکیب در این فاز گاف انرژی ندارد. سپس نمودار با شیب تندی افزایش می‌یابد که با توجه به صفر بودن گاف انرژی، الکترون‌ها بدون نیاز به گرفتن انرژی می‌توانند از نوار ظرفیت وارد نوار رسانش شوند. هم‌چنین، به‌ازای انرژی‌های بالاتر سهم موهومی نمودار صفر می‌شود؛ به‌این معنی که در این نواحی موج الکترومغناطیسی نفوذ نمی‌کند.



شکل ۴: سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انبوهه فریت بیسموت در فاز مکعبی.

نتیجه‌گیری

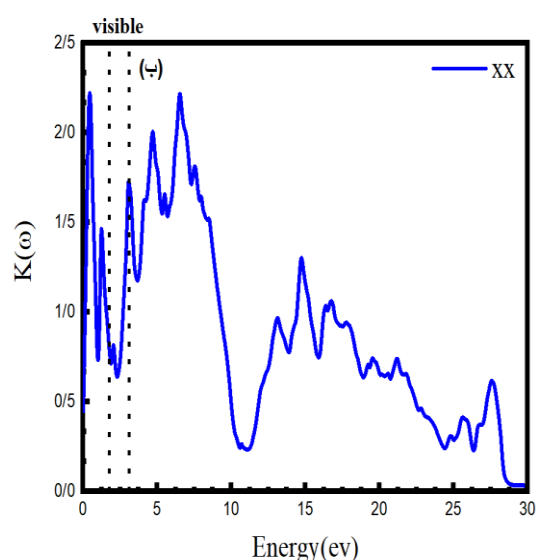
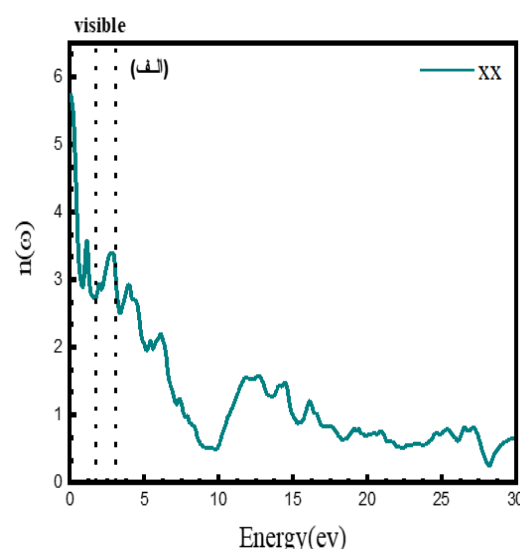
خواص اپتیکی ترکیب فریت بیسموت در فاز مکعبی با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT)، کد محاسباتی Wien2k و تقریب GGA مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاکی از آن است؛ در نواحی که ϵ_1 منفی است امواج منتشر نمی‌شوند و بلور شفافیت خود را از دست می‌دهد. علاوه بر این، سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نشان می‌دهد که ترکیب BiFeO_3 در فاز مکعبی فلز می‌باشد؛ که با نتایج گزارش شده سازگاری خوبی دارد. همچنین، مقادیر بیشینه ضریب خاموشی متناظر با صفرهای حقیقی تابع دی‌الکتریک می‌باشد.

مرجع‌ها

- [1] W. Eerenstien, N. D. Mathur and J. F. Scott, "Multiferroic and magnetoelectric materials", Nat., Vol. 442, pp. 759-765, 2006.
- [2] P. Ravindran, R. Vidya, A. Kjekshas, H. Fjellvag and O. Eriksson, "Theoretical investigation of magnetoelectric behavior in BiFeO_3 ", Phys. Rev., Vol. 74, No. 22, pp. 1-18, 2006.
- [3] K. Koumpouras and L. Glanakis, "Ab-initio study of competing magnetic configurations in cubic BiFeO_3 alloys", Mag. Mag. Mat., Vol. 323, No. 17, pp. 2328-2333, 2011.
- [4] M. K. Yakkob, M. F. M. Tab, M. S. M. Deni, A. Chandra, L. Lu and M. Z. A. Yahya, "First Principle Study on Structural elastic and electronic properties of cubic BiFeO_3 ", Ceram. Inter., Vol. 39, pp. 283-286, 2013.
- [5] C. He, Z. J. Ma, B. Z. Sun, R. J. Sa, K. Wu, "The electronic, optical and ferroelectric property of BiFeO_3 during polarization reversal: A first principle study", Alloy. Com., Vol. 623, pp. 393-400, 2015.
- [6] E. K. U. Gross, W. Kohn, "Local Density-Functional Theory of Frequency-Dependent Linear Response", Phys. Rev. Lett., Vol. 55, No. 26, pp. 2850-2852, 1985.

[۷] صالحی، حمداله، ساختار الکترونی و خواص مغناطی و اپتیکی جامدات، انتشارات کردگار، ۱۳۹۱.

به طیف ضریب خاموشی (شکل ۴ ب) می‌توان یافت که مقادیر بیشینه ۰/۵ و ۷/۳ در جهت محور x متناظر با صفرهای حقیقی تابع دی‌الکتریک بوده و در انرژی‌های بالاتر ضریب خاموشی به صفر می‌رود. به طور کلی، با بررسی نمودارهای ضریب شکست و ضریب خاموشی می‌توان مشاهده کرد که ضریب شکست رفتاری مشابه با سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک و ضریب خاموشی رفتاری مانند سهم موهومی تابع دی‌الکتریک دارد.



شکل ۴: نمودار (الف) ضریب شکست و (ب) ضریب خاموشی ترکیب فریت بیسموت در فاز مکعبی.