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

مطالعهٔ خواص اپتیکی $BiFeO_3$ در حالت مکعبی

حمداله صالحی[۱]، الهام کردستانی[۲]

[۱]دانشیار، گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، salehi_h@scu.ac.ir

[۲] کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، kordestani.phys@gmail.com

چکیده - در این پژوهش خواص اپتیکی $BiFeO_3$ با ا ستفاده از روش امواج بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی(DFT) با ا ستفاده از کد محا سباتی Wien2k مورد برر سی قرار گرفت. خواص اپتیکی نظیر ق سمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب شکست و ضریب خامو شی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که فریت بیسموت در حالت مکعبی یک فلز می‌باشد. از آن‌جایی که ترکیب دارای خاصیت مغناطیسی می‌باشد، کلیهٔ محاسبات به‌صورت کاملاً اسپینی انجام شده است.

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

Study Optical Property of Cubic $BiFeO_3$

Hamdollah Salehi [1], Elham Kordestani [2]

[1]Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Sciences, Shahid Chamran University of Ahvaz, Email: salehi_h@scu.ac.ir
[2] M. 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 useing 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 metalic. Since compound has magnetic properties, all calculations of compound is performed in full spin.

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

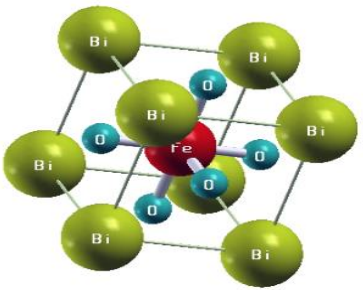
[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27]

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 به‌بررسی خواص ساختاری، الکترونی وکشسانی انبوهۀ $BiFeO_3$ 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 پایۀ نظریۀ تابعی چگالی و روش امواج بهبود یافتۀ خطی با پتانسیل کامل با تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) و به‌کمک کد محاسباتی Wien2k انجام شده است [۶]. در این پژوهش، مقادیر بهینۀ Rk_{max} برابر با ۸، انرژی جداسازی حالت‌های مغزه از ظرفیت برابر با ۷Ry- و G_{max} برابر با $12(a.u^{-1})$ انتخاب شد. تعداد نقاط در نظر گرفته شده در منطقۀ اول بریلوئن ۳۰۰ نقطه است که به‌ازای آن یک شبکۀ $6\times6\times6$ ایجاد شده است. شعاع کره‌های مافین-تین برای عناصر Bi، Fe و O به‌ترتیب 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 نظریۀ پاسخ خطی می‌باشند که توسط روابط کرامرز-کرونیک به‌هم 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 رابطۀ زیر تعریف می‌شود [۷]:

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

این تابع تانسوری از مرتبۀ دوم می‌باشد و برای ساختارهای مکعبی چون $a=b=c$ می‌باشد؛ فقط محاسبۀ 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 رابطۀ (۱)، $\varepsilon_1(\omega)$ سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک می‌باشد که توسط رابطۀ کرامرز-کرونیک به‌صورت زیر تعریف می‌شود [۷]:

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

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

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

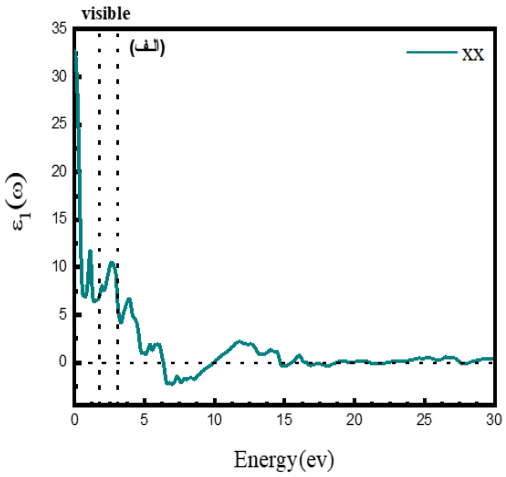
M عنصر ماتریسی انداره حرکت، i و f حالت اولیه و نهایی و E_i انرژی حالت اولیه می‌باشد. نمودار مربوط به‌سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک در انبوهۀ فریت بیسموت در ساختار مکعبی در شکل (۲) و (۳) آورده شده

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27]

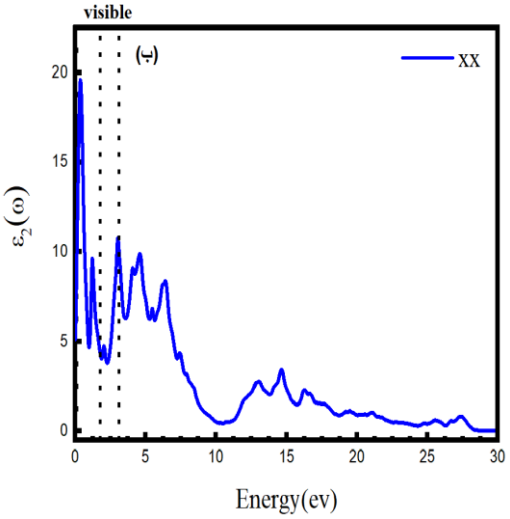
است. جذر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر منجر به‌ضریب شکست استاتیک می‌شود؛ که به‌کمک رابطهٔ زیر محاسبه می‌شود [۷]:

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

که برای ترکیب فریت بیسموت در فاز مکعبی برابر با ۵/۷۱ می‌باشد. با توجه به‌نمودار سهم حقیقی (شکل۲) مشاهده می‌شود که این نمودار در محدوده‌ای از انرژی(۱۰/۱-۶) 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 به‌نمودار سهم موهومی (شکل۳) 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 به‌صفر بودن گاف انرژی، الکترون‌ها بدون نیاز به‌گرفتن 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 ۲: سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انبوهۀ فریت بیسموت در فاز مکعبی.



شکل ۳: سهم موهومی تابع دی‌الکتریک در انبوهۀ 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 به‌شکل رابطهٔ زیر نوشت [۷]:

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

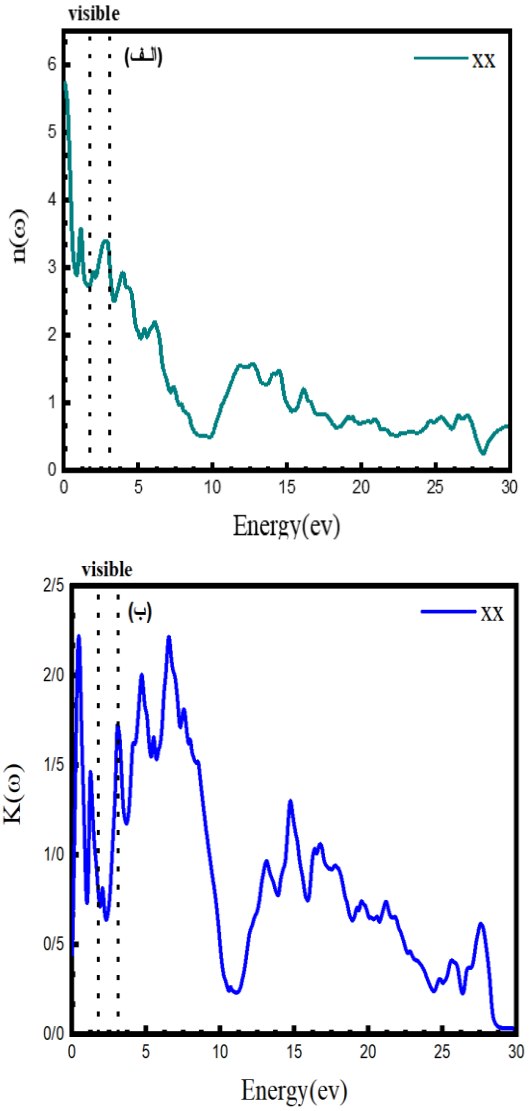
ضریب خاموشی، سنجشی از میزان جذب موج الکترومغناطیسی می‌باشد؛ یعنی اگر موج الکترومغناطیسی به‌راحتی از ماده عبور پیدا کند ضریب خاموشی کمی دارد و اگر پرتویی به‌سختی در ساختاری نفوذ کند ماده ضریب خاموشی بزرگی دارد و توسط رابطهٔ (۶) به‌دست می‌آید [۷]:

$$k(\omega)=\sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)|-\mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega)}{2}} \qquad (۶)$$

نمودارهای مربوط به‌ضریب شکست و ضریب خاموشی ترکیب $BiFeO_3$ در فاز مکعبی در شکل (۴) آورده شده است. قله‌های بیشینه‌ای که در نمودار ضریب شکست (شکل۴ الف) مشاهده می‌شود؛ نشان می‌دهد که در این نقاط عبور موج الکترومغناطیسی به‌حداقل می‌رسد و بعد از آن ضریب شکست روند کاهشی خواهد داشت. یعنی در انرژی‌های بالاتر امواج می‌توانند از ماده عبور کنند. با توجه

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27]

به‌طیف ضریب خاموشی (شکل۴ 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 به‌صفر می‌رود. به‌طور 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.

نتیجه‌گیری

خواص اپتیکی ترکیب فریت بیسموت در فاز مکعبی با استفاده از نظریهٔ 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 بیشینهٔ 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, “Theorical 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 مغناطو اپتیکی جامدات*، انتشارات کردگار، ۱۳۹۱.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27]