

BiTiO₃ 电子结构及光学性质的第一性原理研究*骆最芬¹⁾ 岑伟富¹⁾ 范梦慧¹⁾³⁾ 汤家俊²⁾ 赵宇军^{2)†}

1) (贵州民族大学理学院, 贵阳 550025)

2) (华南理工大学物理系, 广州 510640)

3) (贵州大学大数据与信息工程学院, 贵阳 550025)

(2015年1月16日收到; 2015年3月14日收到修改稿)

采用基于第一性原理的赝势平面波方法, 对 BiTiO₃ 的多种结构进行了计算. 计算结果表明, C1C1 结构最为稳定, 对应晶格参数为 $a = b = 5.606 \text{ \AA}$, $c = 9.954 \text{ \AA}$; $\alpha = \beta = 105.1^\circ$, $\gamma = 61.2^\circ$. 进一步对 C1C1 结构的 BiTiO₃ 的能带结构、电子性质和光学性质进行了研究, 发现 BiTiO₃ 是间接带隙半导体, 其费米面附近的能带主要由 Ti-3d 和 O-2p 层的电子态构成. 通过介电函数、复折射率和反射率等的研究, 发现 BiTiO₃ 的光学性质为近各向同性.

关键词: BiTiO₃, 电子结构, 光学性质, 第一性原理

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 78.20.Ci, 71.15.-m

DOI: 10.7498/aps.64.147102

1 引言

Bi-Ti-O 结合可以形成具有多种晶相结构的氧化物, 如 Bi₄Ti₃O₁₂, Bi₂Ti₂O₇, Bi₂Ti₄O₁₁, Bi₁₂TiO₂₀ 等, 通称为钛酸铋化合物. 它们是一类已被广泛研究的功能材料, 其中 Bi₄Ti₃O₁₂ 与常用的锆钛酸铅 Pb(Zr, Ti) O₃ 类铁电功能材料相比, 具有低介电常数、低介电损耗、高居里温度和无毒无污染等优点, 适用于高温、高频、高稳定的工作环境, 在铁电存储器、电光器件及高温超导混合电路中具有广泛的应用前景; 由于 Bi₂Ti₂O₇ 的铁电和高介电性质, 已用于微电子器件的制备; Bi₁₂TiO₂₀ 同时具有光电、电光、荧光、磁光、声光、旋光及压电等性质, 特别是其优良的光电和电光性质, 已被用作光信息处理材料^[1-4]. 许效红等^[2] 的实验结果表明, Bi₁₂TiO₂₀, Bi₄Ti₃O₁₂, Bi₂Ti₂O₇ 的反射谱均较 TiO₂ 明显红移, 在可见光区 (400—560 nm) 具有显著的吸收, 这与它们的粉末呈现淡黄色相符合; 据文献^[2-4] 报道, 它们的本征禁带宽度均为 3.2 eV 左右; 紫外光照射下, 它们对水溶液中甲

基橙的降解脱色均具有较强的光催化活性, 表明它们都具有半导体光催化剂的特性, 其中 Bi₁₂TiO₂₀ 的光催化活性最强^[2]. Bi₁₂TiO₂₀ 属于典型的软铋矿结构铋氧化物, Bi₂Ti₂O₇ 的结构为焦绿石结构, Bi₄Ti₃O₁₂ 是一种层状钙钛矿结构的铁电材料^[5-7]. 关于钙钛矿结构的钛酸铋 BiTiO₃, 骆最芬等^[8] 利用第一原理计算并根据热力学平衡原理对其稳定性进行了研究, 结果表明 BiTiO₃ 的稳定性较差, 很难在热平衡下制备, 但可通过高压或外延生长制备得到, 至今对 BiTiO₃ 的其他物理性质研究甚少.

钙钛矿结构的铋基 3d 过渡金属氧化物具有丰富的磁学和电学性质, 对其磁学和电学、特别是一些相变性质的测量往往通过其光学性质来实现^[9], 因此它们的光学性质备受关注^[10-13]. BiTiO₃ 虽然稳定性较差, 但可辅以高压等手段制备, 对其光学性质的研究具有一定的科学价值, 对其光谱响应范围和电子结构的全面了解, 有助于寻找新型高效且对可见光具有明显响应的半导体光催化剂, 为磁性光催化剂的应用提供更多的选择. 因此, 本文

* 国家自然科学基金 (批准号: 11174082) 和贵州省科学技术基金 (批准号: 黔科合 J 字 LKM[2 013]15 号) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhaoyj@scut.edu.cn

系统地计算了BiTiO₃的电子结构和描述光学性质的复介电响应函数、复折射率、反射率、吸收系数、光电导率,并对计算结果进行分析,获得了该材料的电子结构,对其光谱的响应范围有了进一步的了解.

2 计算方法

本文采用基于第一性原理的赝势平面波方法进行计算,由CASTEP^[14,15]软件包完成.选取Perdew-Burke-Ernzerhof交换关联势来处理其电子关联势,采用Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno^[15]算法对BiTiO₃晶体的九种可能结构进行优化,在此基础上选取最稳定的结构体系计算其能带结构、电子态密度和光学性质,以确保计算的可靠性.为了尽量减少平面波基矢个数,采用超软赝势^[15,16]来描述离子实与价电子之间的相互作用,平面波的截断能 E_{cut} 取为450 eV.选取Bi-6s²6p³, Ti-3d²4s², O-2s²2p⁴组态电子作为价电子,其余轨道电子为芯电子进行计算.由于Ti原子在其氧化物中具有强关联作用,计算中对Ti的3d电子,用适合处理强关联过渡金属系统的广义梯度近似+ U (GGA+ U)方法^[8,17-19]进行计算.采用GGA+ U 方法优化BiTiO₃结构和计算总能时,库仑势 U 的值经测试后取为3.0 eV.电子结构自洽精度设为每个原子能量收敛至 2×10^{-5} eV,原子间最大相互作用力为0.005 eV/Å,最大应力为0.1 GPa,原子最大位移为0.002 Å.计算在倒易空间中进行,

布里渊区积分采用Monkhorst-Pack^[20]形式的高对称特殊 k 点方法, k 点网格设置为 $5 \times 5 \times 3$.

3 计算结果与讨论

3.1 几何结构

结合能是用来表征原子之间的结合力强度和相对稳定性的重要基础参数. BiTiO₃的结合能可以通过以下公式计算^[21]:

$$\Delta E_{\text{bin}}^{\text{BiTiO}_3} = E_{\text{atom}}^{\text{Bi}} + E_{\text{atom}}^{\text{Ti}} + 3E_{\text{atom}}^{\text{O}} - E_{\text{total}}^{\text{BiTiO}_3}, \quad (1)$$

其中 $\Delta E_{\text{bin}}^{\text{BiTiO}_3}$ 为BiTiO₃的结合能; $E_{\text{atom}}^{\text{Bi}}$, $E_{\text{atom}}^{\text{Ti}}$ 和 $E_{\text{atom}}^{\text{O}}$ 分别为自由的Bi原子、Ti原子和O原子总能; $E_{\text{total}}^{\text{BiTiO}_3}$ 为一个分子式BiTiO₃的总能.用交换关联势PBE对BiTiO₃的九种可能结构: $C12C1$, $PNMA$, $R3CH$, $P1-$, $P1211$, $P4MM$, $C1C1$, $C1213$, $PM-3M$ 进行结构优化,然后再做静态总能计算,根据(1)式求出九种结构的结合能.比较结合能可知 $C1C1$ 结构的结合能最大,说明把 $C1C1$ 结构的BiTiO₃晶体拆散成一个个自由原子所需要的能量比拆散其他结构的晶体所需要的能量多,因此该结构较其他结构稳定. $C1C1$ 代表BiTiO₃的基态结构.各种结构的结合能与 $C1C1$ 结构的结合能之差列于表1. $C1C1$ 结构的晶格常数为: $a = b = 5.606$ Å, $c = 9.954$ Å; $\alpha = \beta = 105.1^\circ$, $\gamma = 61.2^\circ$, 晶胞结构如图1.

表1 BiTiO₃九种可能结构的结合能比较

Table 1. The comparisons of binding energy of BiTiO₃ in nine possible structures.

结构	$C12C1$	$PNMA$	$R3CH$	$P1-$	$P1211$	$P4MM$	$C1C1$	$C1213$	$PM-3M$
$\Delta E_{\text{bin}}/\text{eV}$	-0.007	-0.042	-0.065	-0.054	-0.166	-0.147	0	-0.006	-8.164

ΔE_{bin} 为各种结构的结合能与 $C1C1$ 结构结合能的差值.

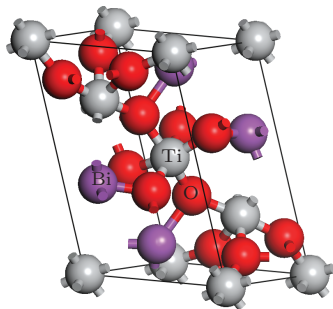


图1 (网刊彩色) BiTiO₃的 $C1C1$ 结构

Fig. 1. (color online) $C1C1$ structure of BiTiO₃.

3.2 能带结构

$C1C1$ 结构的BiTiO₃的能带结构如图2(a)和图2(c)所示.第一布里渊区中高对称 k 点在价带顶(VBM)和导带底(CBM)的特征能量值见表2.由表2可以看出,对于BiTiO₃的自旋向上能带,CBM和VBM分别位于 L (或 Z)点和 A 点,带隙为1.1 eV;而自旋向下的能带,CBM和VBM分别位于 L (或 Z)点和 M 点,带隙为2.9 eV.由图2(b)可以看出,自旋向上和自旋向下的电子态密度不同,使得BiTiO₃显磁性,总磁矩为1.0 μB . CBM和VBM

不在同一点处, 并且在两个自旋方向上的能带中, 费米面处均存在一定宽度的带隙, 因此BiTiO₃为间接带隙磁性半导体.

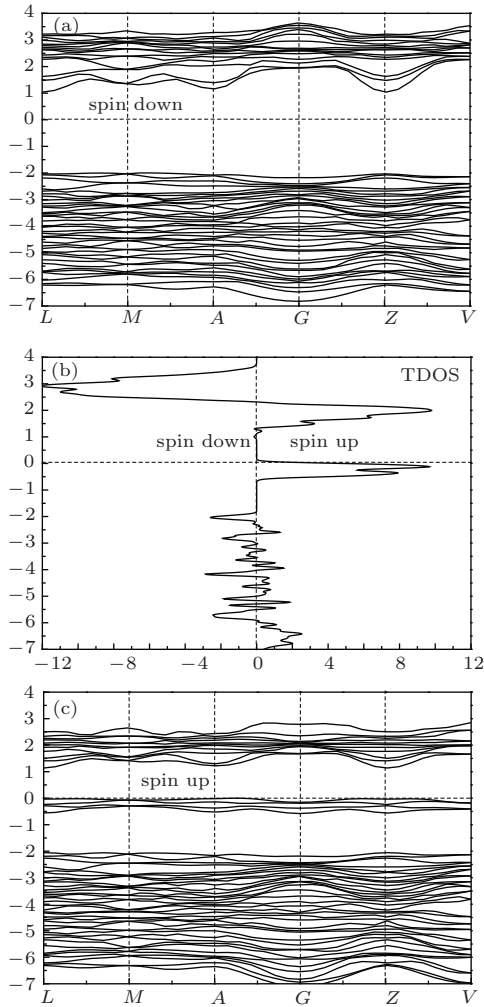


图2 (a) BiTiO₃ 自旋向下的能带结构; (b) BiTiO₃ 总态密度; (c) BiTiO₃ 自旋向上的能带结构

Fig. 2. (a) Spin-down band structure; (b) total density of states; (c) spin-up band structure of BiTiO₃.

表2 BiTiO₃ 第一布里渊区中高对称 *k* 点在VBM和CBM的特征能量值

Table 2. Eigenvalues of VBM and CBM for BiTiO₃ at high symmetry *k* points in the first Brillouin zone.

	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>A</i>	<i>G</i>	<i>Z</i>	<i>V</i>
E_{C-up}/eV	1.139	1.418	1.221	1.670	1.139	1.659
E_{V-up}/eV	-0.037	-0.072	0	-0.15	-0.037	-0.185
E_{C-down}/eV	0.858	1.231	1.057	1.481	0.858	1.664
E_{V-down}/eV	-2.034	-2.031	-2.079	-2.174	-2.034	-2.139

E_{C-up} 和 E_{V-up} 分别为自旋向上的能带结构中高对称 *k* 点在导带底和价带顶的特征能量值, E_{C-down} 和 E_{V-down} 分别为自旋向下的能带结构中高对称 *k* 点在导带底和价带顶的特征能量值.

3.3 电子态密度

图3为C1C1结构的BiTiO₃的电子态密度图, 它反映了各电子态对导带和价带的贡献. 由图3可知, 价带中BiTiO₃位于-7—-1.858 eV能量区间的态密度主要由O-2p态电子贡献, Bi-6p和Ti-3d的贡献较少. -0.671—0 eV区间的态密度主要由Ti-3d态决定, Bi-6p和O-2p的贡献较少. 在导带0.937—3.731 eV区间的态密度主要由Ti-3d态决定, 也有少量Bi-6p和O-2p态电子的贡献. 结合图2和图3可知, 在费米面附近, 总电子态密度几乎完全来自于Ti-3d和O-2p电子态密度的贡献, 表明Ti-3d轨道和O-2p轨道发生强烈的轨道杂化, Ti原子和O原子之间存在强烈的共价作用. 因此, BiTiO₃的电子输运性质及载流子类型主要由Ti-3d态和O-2p态电子决定.

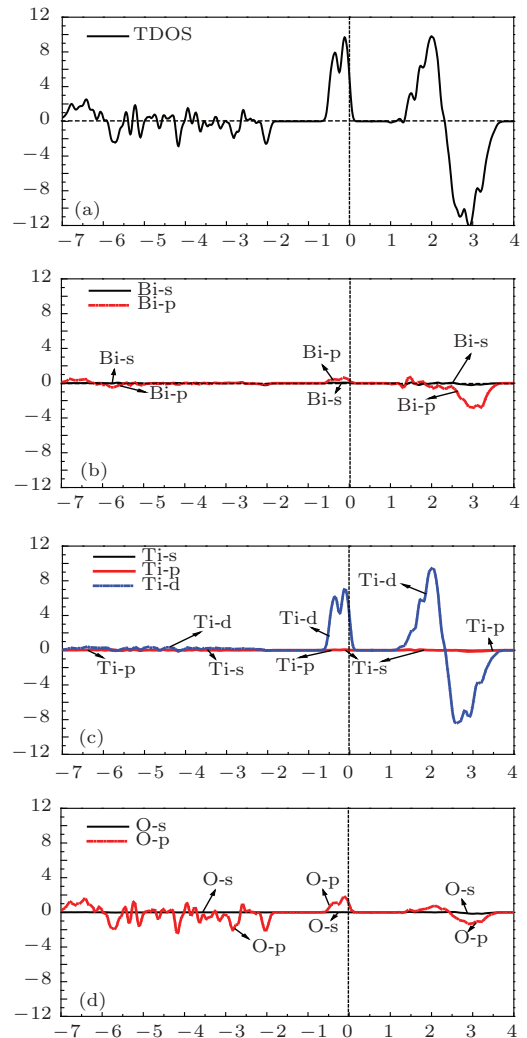


图3 (网刊彩色)(a) BiTiO₃ C1C1结构的总电子态密度; (b) Bi的分电子态密度; (c) Ti的分电子态密度; (d) O的分电子态密度

Fig. 3. (color online) (a) TDOS of BiTiO₃ of C1C1 structure; (b) PDOS of Bi; (c) PDOS of Ti; (d) PDOS of O.

3.4 光学性质

介电函数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ ^[22] 是连接带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁, 通过介电函数可以得到其他各种光谱信息. BiTiO_3 作为半导体材料, 其光谱是由能级间电子跃迁所产生, 各个介电峰可以通过 BiTiO_3 的能带结构和态密度得到解释. 图 4 给出了入射光子能量在 0—30 eV 范围内, BiTiO_3 晶胞沿三个方向的介电常数实部 $\varepsilon_1(E)$ 和虚部 $\varepsilon_2(E)$. 图 4(a) 表明, a 轴(或 [100])方向和 b 轴(或 [010])方向的静态介电常数 $\varepsilon_1(0)$ 均为 7.554, c 轴(或 [001])方向的静态介电常数 $\varepsilon_1(0)$ 为 7.608, 非常接近. 0—12.923 eV 能量范围内, 随着入射光能量的增大, 三个方向的 ε_1 都迅速变化: $E = 1.182, 4.240, 12.932$ eV 时, [100] 方向和 [010] 方向同时出现第一、第二、第三峰值, $E = 2.354, 8.163$ eV 时, 同时两次达到最小值; 而 [001] 方向则在 $E = 1.692, 3.577, 11.934$ eV 时出现第一、第二、第三峰值, $E = 2.303, 8.469$ eV 时, 两次达到最小值. 之后的变化都比较缓慢. 复介电函数的虚部决定体系在较小波矢下对光的线性响应, 由图 4(b) 可见, 在 0—0.876 eV 能量范围内, [100] 方向和 [010] 方向的 ε_2 都为零, 在 0—0.978 eV 能量范

围内 [001] 方向的 ε_2 为零. 从能带图可以看出, 这是由于在这一能量范围内没有电子从 VBM 跃迁到 CBM. 当能量值高于此数值时, 可能发生跃迁的状态数增多, 因此, 在 0.978—14.736 eV 能量范围内, 随着入射光能量的增大, 三个方向的 ε_2 迅速变化, $E = 1.793, 5.106, 14.736$ eV 时, [100] 方向和 [010] 方向同时出现第一、第二、第三峰值, $E = 2.609, 10.914$ eV 时同时两次达到最小值; 而 [001] 方向则在 $E = 2.150, 4.545, 14.227$ eV 时出现第一、第二、第三峰值, $E = 2.762, 11.016$ eV 时两次达到最小值. 之后的变化也都比较缓慢. 这主要是由于电子在 Bi-6p 轨道、Ti-3d 轨道和 O-2p 轨道之间的强烈跃迁导致的. 由图 4 可知, [100], [010] 两个方向的 $\varepsilon_1(E)$ 和 $\varepsilon_2(E)$ 曲线完全重合, 且与 [001] 方向的 $\varepsilon_1(E)$ 和 $\varepsilon_2(E)$ 曲线基本重合, 说明在 [100], [010] 两个方向的复介电函数完全相同, 且与 [001] 方向的复介电函数基本相同. 这表明 BiTiO_3 晶体光学性质的各向异性不是很强, 为近各向同性.

由复折射率、反射率、吸收系数和光电导率与复介电函数的关系:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega), \quad (2)$$

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \quad (3)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk, \quad (4)$$

$$\omega^2 \varepsilon = L^2 (\mathbf{K} \cdot \mathbf{K}), \quad (5)$$

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad (6)$$

$$\alpha = \frac{\omega}{nc} \varepsilon_2, \quad (7)$$

$$\alpha = \frac{2k\omega}{c} = \frac{4k\pi}{\lambda_0}, \quad (8)$$

$$\sigma(E) = \sigma_1(E) + i\sigma_2(E) = -i \frac{\omega}{4\pi} [\varepsilon(\omega) - 1] \quad (9)$$

可知, 在 [100]、[010] 和 [001] 方向上, 这些光学量基本相同, 因此在后面的光学性质分析中, 只需选择一个方向进行分析即可. 本文选择 [100] 方向进行分析. 上述各式中, N 为复折射率, n 为反射率, k 为消光系数, ε_1 为复介电函数实部, ε_2 为复介电函数虚部, \mathbf{K} 为波矢, R 为反射系数, α 为吸收系数, c 为光速, σ_1 为光电导率实部, σ_2 为光电导率虚部.

图 5(a) 为 BiTiO_3 的复折射率, 由图可知 BiTiO_3 的静折射率 n_0 为 2.749, 在可见光的低能区随着光子能量的增加折射率 n 迅速减小, 而在可见光的高能区折射率 n 随着光子能量的增加而迅速增大. 在 6.533—10.609 eV 范围内消光系数 k 大于折

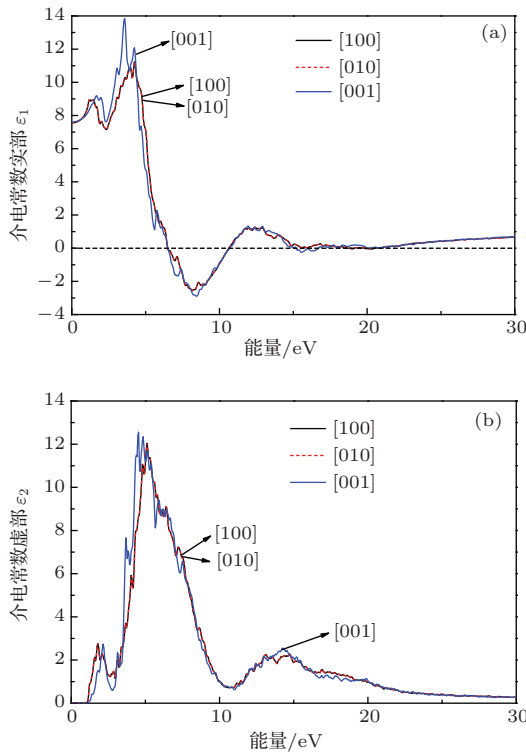


图 4 (网刊彩色) BiTiO_3 的介电函数 (a) 介电函数的实部; (b) 介电函数的虚部

Fig. 2. (color online) Dielectric functions of BiTiO_3 : (a) real part; (b) imaginary part.

射率 n , 这是因为在这一能量范围内, 复介电函数的 $\epsilon_1 < 0$. 从波矢方程 (5) 式可知, 对于实的 ω , $\epsilon_1(\omega) < 0$ 意味着波矢 \mathbf{K} 为虚数, 即在此范围内的光不能在 BiTiO_3 中传播. 由 (3) 式可知, 在这一范围内 $k(\omega) > n(\omega)$.

图 5(b) 为 BiTiO_3 的反射率随光子能量变化的关系, 由图可知, BiTiO_3 的反射率均小于 50%, 在可见光范围内的反射率没超过 25%. 因此, BiTiO_3 可用于要求光的反射较小的领域.

图 5(c) 为 BiTiO_3 的吸收系数与光子能量的关系, 由图可知, $E = 7.654 \text{ eV}$ 和 14.787 eV , 分别出现第一个和第二个吸收峰; 在可见光范围内吸收很

弱, 光子能量大于可见光能量时, 存在较宽的光子能量范围内具有较大数量级 (10^5 cm^{-1}) 的吸收系数, 主要表现为紫外吸收.

光电导率描述的是半导体材料电导率随着光照能量变化的物理参量, 在它与介电函数的关系中其实部 σ_1 和介电函数虚部 ϵ_2 互相对应, 也能够反映光吸收和能隙的情况. 图 5(d) 为 BiTiO_3 的光电导率随能量变化的关系, 由图可知, 在 $E < 30 \text{ eV}$ 的能量范围, 光电导率实部 σ_1 有三个峰值点, 第一、第二、第三个峰值点对应的能量分别为 $1.736, 5.106, 14.736 \text{ eV}$. 对应这些能量值介电函数虚部 ϵ_2 虚部同样有三个峰值.

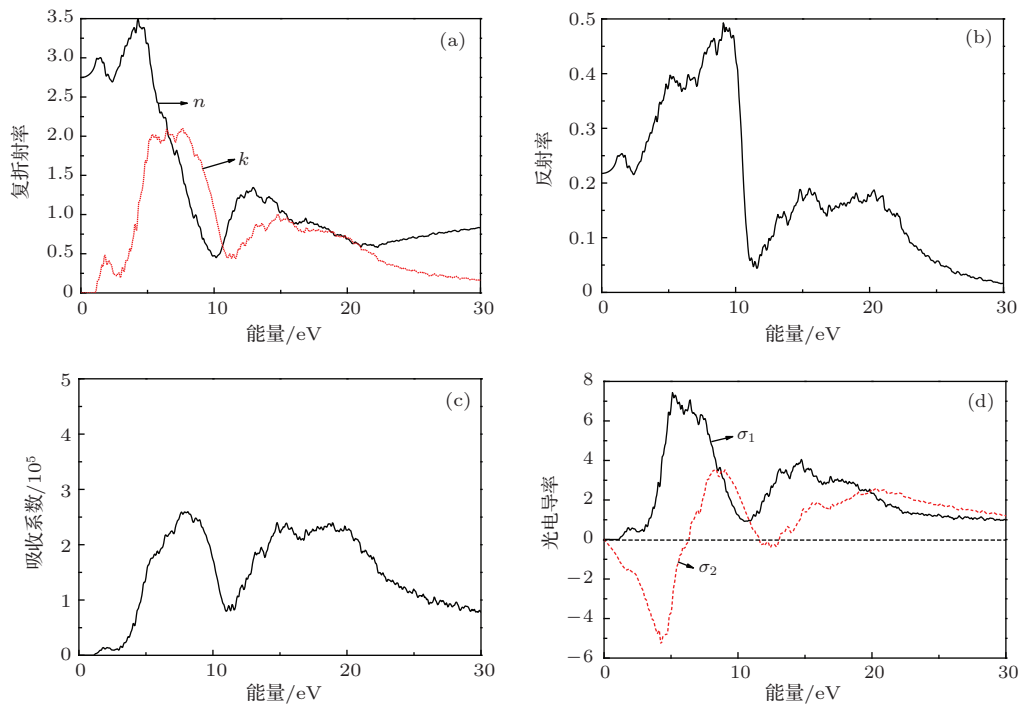


图 5 (网刊彩色) (a) BiTiO_3 的复折射率; (b) BiTiO_3 的反射谱; (c) BiTiO_3 的吸收谱; (d) BiTiO_3 的光电导率
 Fig. 5. (color online) (a) Complex refractive index; (b) reflection spectra; (c) absorption spectra; (d) conductivity of BiTiO_3 .

4 结 论

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理赝势平面波方法, 对 BiTiO_3 晶体结构进行优化, 在此基础上计算了能带结构、电子态密度和光学性质, 并对计算结果进行了分析. 文中的计算考虑到 Ti 原子在其氧化物中具有强关联作用, 故采用特别适合处理强关联过渡金属系统的 GGA+ U 方法进行计算研究. 研究结果表明: 1) BiTiO_3 的费米面附近的能带结构几乎完全由 Ti-3d 和 O-2p 电子态密度决定, 体系为磁性半导体, 总磁矩为 $1.0 \mu\text{B}$, 其零

频介电常数 $\epsilon_1(0)$ 约为 2.750; 2) BiTiO_3 沿 [100] 和 [010] 方向的各个光学量都完全相同, 且与沿 [001] 方向的各光学量相比都略有偏差, 但非常接近, 可以忽略不计, 这表明该体系光学性质的各向异性不是很强, 是近各向同性; 3) BiTiO_3 对可见光的反射较小; 4) $\epsilon_2(\omega)$, $k(\omega)$, $\alpha(\omega)$ 和 $\sigma_1(\omega)$ 从各个侧面反映了该体系对可见光的吸收能力比较弱.

参考文献

[1] Yang X W, Yan Y P, Han L X, Zeng Y W 2011 *Journal of Nanjing University of Technology (Natural Science*

- Edition*) **33** 41 (in Chinese) [杨晓伟, 阎玉萍, 韩龙祥, 曾燕伟 2011 南京工业大学学报(自然科学版) **33** 41]
- [2] Xu X H, Yao W F, Zhang Y, Zhou A Q, Hou Y, Wang M 2005 *Acta Chim. Sin.* **63** 5 (in Chinese) [许效红, 姚伟峰, 张寅, 周爱秋, 侯云, 王民 2005 化学学报 **63** 5]
- [3] Wei W, Dai Y, Huang B B 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 5658
- [4] Murugesan S K, Muhammad N H, Yanfa Y, Mowafak M J, Vaidyanathan S 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 10598
- [5] Du X F, Chen I W 1998 *J. Am. Ceram. Soc.* **81** 3253
- [6] Shoji K, Uehara Y, Sakata K 1996 *Jpn. J. Appl. Phys.* **35** 5126
- [7] Takahashi M, Noguchi Y J, Miyayama M 2002 *Jpn. J. Appl. Phys.* **41** 7053
- [8] Luo Z F, Chen X Y, Tang J J, Lin S Y, Fan M H, Zhao Y J 2013 *J. Synth. Cryst.* **42** 2188 (in Chinese) [骆最芬, 陈星源, 汤家俊, 林诗源, 范梦慧, 赵宇军 2013 人工晶体学报 **42** 2188]
- [9] He C, Ma Z J, Sun B Z, Sa R J, Wu K C 2015 *J. Alloys Compd.* **623** 393
- [10] Sharan A, An I, Chen C, Collins R W, Lettieri J, Jia Y F, Schlom D G, Gopalan V 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 5169
- [11] Li C L, Wang Z Q, Wang C Y 2011 *Physica B* **406** 2028
- [12] Bensaid D, Benkhetou N E, Kourdassi A 2011 *J. Modern Phys.* **2** 642
- [13] Haislmaier R C, Podraza N J, Denev S, Melville A, Schlom D G, Gopalan V 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 031906
- [14] Milman V, Refson K, Clark S J, Pickard C J, Yates J R, Gao S P, Hasnip P J, Probert M I J, Perlov A, Segall M D 2010 *J. Mol. Struct.: Theochem.* **954** 22
- [15] Yang C Y, Zhang R, Zhang L M, Ke X W 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 077702 (in Chinese) [杨春燕, 张蓉, 张莉民, 可祥伟 2012 物理学报 **61** 077702]
- [16] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [17] Luo Z F, Chen X Y, Lin S Y, Zhao Y J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 053102 (in Chinese) [骆最芬, 陈星源, 林诗源, 赵宇军 2013 物理学报 **62** 053102]
- [18] Zhang Z, Wu P, Chen L 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 232906
- [19] Wang L, Maxisch T, Ceder G 2006 *Phys. Rev. B* **73** 195107
- [20] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 518
- [21] Zhao L K, Zhao E J, Wu Z J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 046201 (in Chinese) [赵立凯, 赵二俊, 武志坚 2013 物理学报 **62** 046201]
- [22] Lu C L, Zhang L, Zhang Y W, Liu S Y, Mei Y 2015 *Chin. Phys. B* **24** 017501

First-principles study of electronic and optical properties of BiTiO_3 ^{*}

Luo Zui-Fen¹⁾ Cen Wei-Fu¹⁾ Fan Meng-Hui¹⁾³⁾ Tang Jia-Jun²⁾ Zhao Yu-Jun²⁾†

1) (Guizhou Minzu University, Polytechnic College, Guiyang 550025, China)

2) (Department of Physics, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

3) (Guizhou University, College of Big Data and Information Engineering, Guiyang 550025, China)

(Received 16 January 2015; revised manuscript received 14 March 2015)

Abstract

BiTiO_3 of $C1C1$ structure is found to be the most stable phase according to our first-principles calculations for nine possible structures, with corresponding optimized crystal parameters of $a = b = 5.606 \text{ \AA}$, $c = 9.954 \text{ \AA}$; $\alpha = \beta = 105.1^\circ$, $\gamma = 61.2^\circ$. Subsequently, we have investigated the electronic and optical properties of BiTiO_3 in $C1C1$ structure. It is found that BiTiO_3 is a semiconductor with an indirect band gap with its energy band near Fermi level being dominated by O-2p and Ti-3d levels. Additionally, the dielectric function, refractive index, and reflectivity of BiTiO_3 are also calculated, and it is shown that the optical properties of BiTiO_3 are nearly isotropic.

Keywords: BiTiO_3 , electronic structure, optical property, first-principles

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 78.20.Ci, 71.15.-m

DOI: [10.7498/aps.64.147102](https://doi.org/10.7498/aps.64.147102)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11174082), and the Science Technology Foundation of Guizhou, China (Grant No. LKM[2013]15).

† Corresponding author. E-mail: zhaoyj@scut.edu.cn