

Estudio teórico de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la ferrita de gadolinio ($GdFeO_3$) en fase cúbica

Theoretical study of the structural, electronic and optical properties of gadolinium ferrite ($GdFeO_3$) in cubic phase

B. O. Sosa-Rosas ^a, M. Arteaga-Varela ^b, A. Sánchez-Castillo ^c, M. I. Reyes-Valderrama ^b
M. A. Camacho-González ^a, V. Rodríguez-Lugo ^{b,*}

^a Universidad Tecnológica de Tecámac, 55740, Tecámac, Estado de México, México.

^b Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

^c Departamento de Nanotecnología, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 43920 Hidalgo, México.

Resumen

En el presente trabajo se realizó la predicción de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la perovskita de ferrita de gadolinio ($GdFeO_3$), obtenidos mediante cálculos ab-initio basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés), implementado en el Código SIESTA. El estudio se realizó empleando la Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA, por sus siglas en inglés), y la Aproximación Local de la Densidad (LDA, por sus siglas en inglés), con los funcionales de intercambio-correlación de PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) para la GGA, y el funcional CA (Ceperley y Alder) para la LDA con el fin de comparar estos resultados con los parámetros experimentales disponibles para inferir con cuál de las dos aproximaciones (LDA o GGA) se obtienen resultados más confiables. El parámetro de red calculado con estas aproximaciones fue de $a_0 = 3.841 \text{ \AA}$ y $a_0 = 3.701 \text{ \AA}$ para GGA y LDA, respectivamente. Por otro lado, se realizó el cálculo de estructura de bandas y densidad de estados *encontrando que el material tiene un comportamiento metálico*. Finalmente, la parte imaginaria de la función dieléctrica muestra un pico de absorción significativo a una energía de aproximadamente 0.377 eV para GGA y 0.272 eV para LDA en el rango infrarrojo perteneciente a los modos vibracionales del sistema.

Palabras Clave:

Perovskita, $GdFeO_3$, DFT, pseudopotencial, estructura de bandas, densidad de estados, tensor dieléctrico.

Abstract

In the present work, the prediction of the structural, electronic, and optical properties of gadolinium perovskite ferrite ($GdFeO_3$) was performed, obtained through ab-initio calculations based on the Density Functional Theory (DFT), implemented in the SIESTA Code. The study was carried out using the Generalized Gradient Approximation (GGA), and the Local Approximation of Density (LDA), with the exchange-correlation functionalities of PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) for the GGA, and the functional CA (Ceperley and Alder) for the LDA to compare these results with the available experimental parameters to infer with which of the two approximations (LDA or GGA) they are obtained more reliable results. The lattice parameter calculated with these approximations was $a_0 = 3.841 \text{ \AA}$ and $a_0 = 3.701 \text{ \AA}$ for GGA and LDA, respectively. On the other hand, the calculation of Band Structure and State Density was carried out, finding that the material has a metallic behavior. Finally, the imaginary part of the dielectric function shows a significant absorption peak at an energy of approximately 0.377 eV for GGA and 0.272 eV for LDA in the infrared range belonging to the vibrational modes of the system.

Keywords:

Perovskite, $GdFeO_3$, DFT, pseudopotential, band structure, density of states, dielectric tensor.

1. Introducción

Los óxidos metálicos en fase de perovskita con fórmula $MFeO_3$ (donde M es un metal), exhiben una variedad de propiedades físicas interesantes que incluyen comportamiento

ferroeléctrico, dieléctrico, piroeléctrico y piezoeléctrico, magnético, fluorescencia, etc. Algunos de ellos son óxidos conductores transparentes que pueden utilizarse para aplicaciones optoelectrónicas. En general, son materiales funcionales que tienen aplicaciones como catalizadores, sensores, semiconductores, materiales magnéticos y magneto-ópticos. Sus propiedades eléctricas, ópticas y magnéticas, que suelen ser

*Autor para la correspondencia: ventura.rl65@gmail.com

Correo electrónico: braos98sosa@gmail.com (Brayan Oswaldo Sosa-Rojas), miguelnano1@gmail.com (Miguel Arteaga-Varela), ariadna_sanchez@uaeh.edu.mx (Ariadna Sánchez-Castillo), isareyv@hotmail.com (María Isabel Reyes-Valderrama), ibqmony@gmail.com (Mónica Araceli Camacho-González), ventura.rl65@gmail.com (Ventura Rodríguez-Lugo).

inusuales, dependen del arreglo de átomos en su estructura cristalina (Blanco et al., 2015).

Entre este tipo de materiales se encuentra el GdFeO_3 , el cual puede encontrarse con diferentes arreglos estructurales pertenecientes a los grupos espaciales, Pnma , Pc21n , Pbnm , Pm-3m y R3c con iones Fe^{3+} en el centro y Gd^{3+} en las esquinas rodeados por octaedros de oxígeno. La estructura que más se ha estudiado es la ortorrómbica, en esta fase se ha comprobado que el GdFeO_3 posee ferroelectricidad sintonizable magnéticamente debido al mecanismo de restricción de cambio. Tokura et. al, establecieron que la interacción entre los giros de Fe y Gd y la restricción de intercambio asociada puede dar lugar a una apreciable distorsión de la red polar que da como resultado una polarización relativamente grande alrededor de la temperatura de transición anti-ferromagnética.

De tal manera que la GdFeO_3 en fase ortorrómbica se ha sintetizado mediante varias técnicas como síntesis hidrotermal (Zhang et al., 2012), sol-gel (Karoblis et al., 2021), coprecipitación (Albadi et al., 2020), microondas (Tang et al., 2014), combustión (Chavan & Tyagi, 2005), poliol, etc. (Cortés-Escobedo et al., 2014) y también se han estudiado sus propiedades, ferroeléctricas, magnéticas, fotoluminiscentes, entre otras (Prakash et al., 2014). Otra característica importante del GdFeO_3 en esta fase, es que a bajas temperaturas cuenta con propiedades paramagnéticas y a medida que aumenta la temperatura, presenta una transición de paramagnetismo al antiferromagnetismo. Por otro lado, (Wu et al., 2014) demostraron que la polarización ferroeléctrica y magnetización son controlados con éxito por campos magnéticos y eléctricos.

En contraste, hay pocos estudios acerca de la estructura cúbica de este material, y dado que muchas propiedades son derivadas de su configuración atómica, consideramos de interés científico y tecnológico estudiar las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de esta fase para determinar sus posibles aplicaciones. Por lo tanto, en el presente trabajo de investigación se realizó un estudio ab-initio comparativo empleando la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA), utilizando el funcional de intercambio y correlación de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), y la Aproximación de la Densidad Local (LDA) y el funcional de intercambio y correlación de Ceperley y Alder (CA, por sus siglas en inglés), mediante el principio de la mínima energía, para obtener la estructura cúbica optimizada con un arreglo espacial de Pm-3m del GdFeO_3 , su estructura de bandas, densidad de estados y finalmente la parte imaginaria del tensor dieléctrico .

2. Metodología

El código SIESTA se basa en la Teoría del Funcional de la Densidad, usando funciones de orbitales atómicos localizados (LCAO) para describir la función de onda, la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) y la Aproximación Local de la Densidad (LDA) (Ordejón, 2000).

Las ecuaciones de la Teoría del Funcional de la Densidad se resuelven utilizando el método de campo autoconsistente (SCF); para un hamiltoniano, la ecuación de Schrödinger de una partícula e resuelve minimizando la matriz de energía y densidad electrónica para obtener el estado fundamental. Esto se realiza mediante diagonalización de la matriz o mediante un algoritmo de

escala lineal. Estos han sido revisados extensamente en varias publicaciones. SIESTA implementa dos algoritmos $O(N)$ basados en funciones de onda localizadas, (Ordejón, 2000).

La ecuación de Schrödinger ayuda a predecir la distribución de los resultados o eventos. Todas las propiedades de la estructura electrónica de la materia se rigen por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Para interacciones independientes del tiempo como se muestra en la ecuación 1.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Psi}(r) = \hat{H} E_{tot} \hat{\Psi}(r) \quad (1)$$

Donde E_{tot} y $\hat{\Psi} = \hat{\Psi}(r_1, r_2, \dots, r_N; R_1, R_2, \dots, R_M)$ son la energía total del sistema y la función de onda de muchos cuerpos que contiene información sobre los N -electrones y los núcleos M del sistema. \hat{H} es el operador hamiltoniano y que representa la contribución de energía cinética y potencial del sistema dada por la ecuación 2.

$$\hat{H} = \hat{T}_e + T_n - \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn} + \hat{V}_{ee}, \quad (2)$$

La simulación del sistema se inició considerando como estructura base la estructura ortorrómbica de ferrita de gadolinio (Geller, 1956) y que se encuentra en un grupo espacial Pnma . Por otro lado, se tomará el grupo espacial de Pm-3m , con una cantidad total de 5 átomos, un átomo de gadolinio, un de hierro y tres de oxígeno. La imposición de las condiciones de contorno periódicas al modelo tiene sentido en el presente caso considerando la aproximada naturaleza.

De tal manera, se realizó una optimización de la estructura usando gradientes analíticos de la energía con respecto los parámetros de red y las coordenadas atómicas de la estructura GdFeO_3 cúbica, para obtener las posiciones de los átomos y hacer converger los cálculos por el método de campo autoconsistente. En la Tabla 1 se muestran los parámetros estructurales como parámetro de red, ángulos y posiciones de Wyckoff para la fase cúbica del GdFeO_3 .

Tabla 1. Coordenadas atómicas de GdFeO_3 con una estructura cúbica.

Grupo espacial	# 221	Pm-3m
Parámetro de red (Å)	$a = 3.8654$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Elemento	Wyckoff	
Gd	1b	
Fe	1a	
O	3c	

Para predecir las propiedades estructurales del sistema, se realizaron los ajustes del tamaño de la función de onda y de puntos k de la red recíproca. Con dichos ajustes se realizó la optimización estructural en condiciones de mínima energía se calculó la estructura de bandas, la densidad de estados y la parte imaginaria del tensor dieléctrico.

a. Ajuste de la función de onda de prueba y ajuste de puntos de alta simetría

En primer lugar, se ajustó el tamaño de la función de onda (meshcutoff) mediante el movimiento rígido de la estructura en el espacio. Se probaron energías de corte de 100 hasta 550 Ry para expandir las funciones de onda 550 Ry (valores de la constante de Rydberg) para el caso de GGA (Figura 1a), y de 200 Ry a 500 Ry para LDA (Figura 1b) delimitando así las ondas planas a un número finito; las cuales se utilizan para encontrar el valor de las fuerzas interatómicas menor a 0.1 eV.

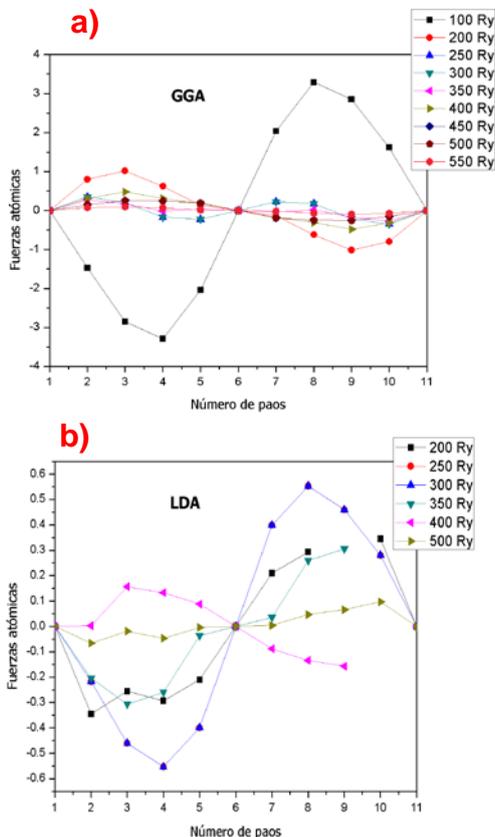


Figura 1. Gráficas de convergencia del tamaño de la función de onda de prueba de las fuerzas interatómicas con respecto al Meshcutoff en valores de Ry para GGA (a) y LDA (b).

Por otra parte, se empleó el ajuste del mallado de puntos k, usando el método de Monkhorst-Pack, en la cual se determina el número mínimo de puntos k necesarios para describir la red recíproca del sistema. Las mallas utilizadas para determinar el mallado óptimo fueron: 5x5x5, 7x7x7, 9x9x9, 11x11x11 y 13x13x13 para GGA y LDA, dando como resultado que el mejor ajuste de la malla de Monkhorst-Pack es 5x5x5 para GGA y 7x7x7 para LDA.

b. Optimización estructural

Con los ajustes óptimos del tamaño de función de onda y el número de puntos k, se determina la constante de red de la estructura de la ferrita de gadolinio. Con la finalidad de obtener la estructura más estable, se calcula la energía total del sistema para diferentes constantes de red, en este caso se utilizaron valores de 3.501 a 4.291 Å. En la Figura 2 se presentan los valores de la energía obtenidos en función del parámetro de red para GGA y en la Figura 3 para la aproximación de LDA. Se puede observar que la energía mínima corresponde al parámetro de red de 3.841 Å y de 3.701 Å para GGA y LDA, respectivamente.

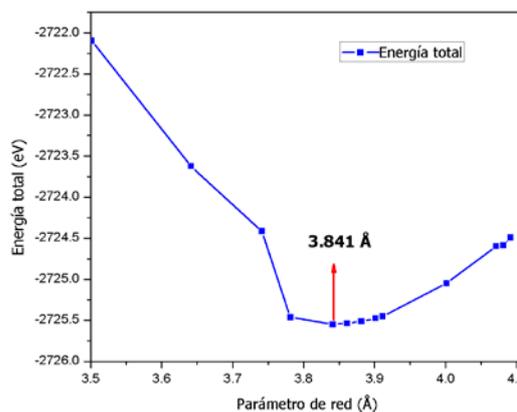


Figura 2. Optimización estructural de GdFeO₃ para GGA con variación de parámetro de red con 0.01 Å

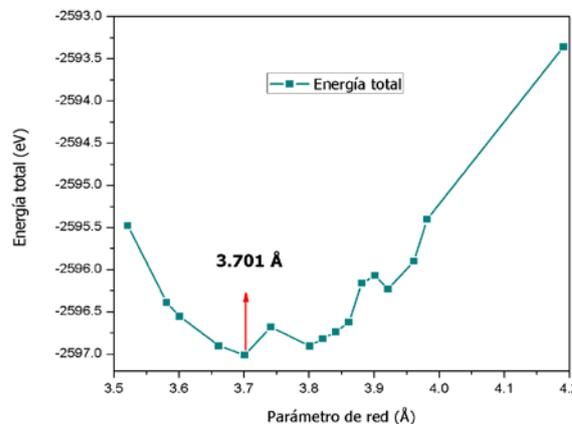


Figura 3. Optimización estructural de GdFeO₃ para LDA con variación de parámetro de red con 0.01 Å.

c. Estructura de bandas y Densidad de Estados

Usando la estructura de mínima energía, se llevaron a cabo los cálculos para determinar la estructura de bandas y densidad de estados electrónica (DOS, por sus siglas en inglés) usando los puntos de alta simetría Γ , X, M, Γ , R y X de la zona de Brillouin correspondiente al espacio recíproco (Ver Tabla 2).

Tabla 2. Coordenadas de puntos de alta simetría (puntos K) en un espacio recíproco.

Zona de Brillouin	Vectores en el espacio recíproco		
Γ	0.000	0.000	0.000
X	0.500	0.000	0.000
M	0.500	0.500	0.000
Γ	0.000	0.000	0.000
R	0.500	0.500	0.500
X	0.500	0.000	0.000

La Densidad de estados (DOS) se calculó en el intervalo de energías de -25.44 a 231.09 eV con un espaciado de 0.2 eV como se muestra en la Figura 4.

```
%block ProjectedDensityOfStates
-25.4456005 231.092194 0.200 500 eV
%endblock ProjectedDensityOfStates
```

Figura 4. Script original con bloque para Densidad de Estados (DOS).

d. Tensor dieléctrico

El último estudio realizado permite observar el espectro de absorción de la ferrita de gadolinio, el cual está directamente relacionado con la parte imaginaria del tensor dieléctrico que se calculó en un rango de energía de 0 a 3 Ry con un ensanchamiento de 0.02 Ry y una malla de 5x5x5 como puede observarse en la Figura 5.

```
OpticalCalculation true
Optical.Energy.Minimum 0 Ry
Optical.Energy.Maximum 3 Ry
Optical.Broaden 0.02 Ry
Optical.Scissor 0 Ry

%block Optical.Mesh
5 5 5
%endblock Optical.Mesh
```

Figura 5. Script original con bloque para la parte imaginaria del tensor dieléctrico.

3. Resultados

a. Propiedades estructurales

Por medio de la optimización estructural del GdFeO_3 utilizando las aproximaciones GGA y LDA se obtuvo una estructura estable con un grupo espacial Pm-3m mostrada en la Figura 6. La estructura cristalina está formada por un total de 5 átomos distribuidos de la siguiente forma: un átomo de Fe^{+3} en el centro, un átomo de Gd^{+3} en los vértices y 3 átomos de O^{-2} en el centro de las caras, formando una estructura cúbica centrada en las caras (FCC, por sus siglas en inglés).

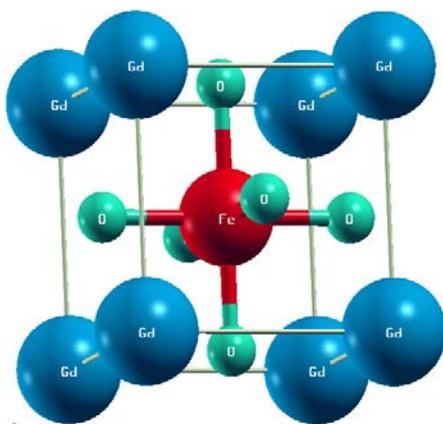


Figura 6. Representación 3D de la estructura cristalina de la perovskita GdFeO_3 con grupo espacial Pm-3m generada por Xcrysden.

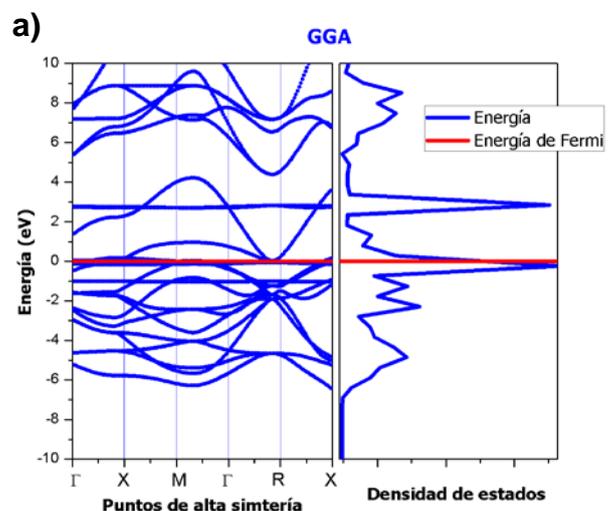
El parámetro de red de la estructura de mínima energía calculada con GGA es de 3.841 Å, mientras que el calculado con LDA de 3.701 Å. De acuerdo con lo reportado en la literatura de manera experimental, el parámetro de red de esta estructura es de 3.865 Å (Blasco et al., 2006); por lo que se puede concluir que la aproximación de GGA es más adecuada para predecir las propiedades estructurales de este sistema, puesto que se obtiene un valor más aproximado al experimental con un error del 0.042 Å. En cuanto a reportes teóricos, solo se han desarrollado para estructuras ortorrómbicas con grupos espaciales Pbnm (Paul et al., 2021) y Pnma (Jain et al., 2013). En estas estructuras las posiciones de Gd_1 , Fe_1 y Fe_2 se encuentran rodeadas por un octaedro de oxígeno lo que ocasiona una distorsión en la red, (Li & Li, 2020) que son las responsables de las propiedades que presentan estos sistemas.

b. Propiedades electrónicas

La estructura de bandas, describe la estructura electrónica de un material como una estructura de bandas electrónicas (Pliego et al., 2006). Por otra parte, la densidad de estados (DOS) describe el número de estados electrónicos disponibles para que los electrones ocupen en los orbitales atómicos proyectados en un espacio recíproco.

La estructura de bandas electrónica para la GdFeO_3 se calculó siguiendo como ruta los puntos K de alta simetría de la primera zona Brillouin descritos en la sección 2.3 usando las aproximaciones de GGA y LDA, las cuales se representan en la Figura 7a) y Figura 7b), respectivamente. En el gráfico correspondiente a la estructura de bandas (lado izquierdo en ambas gráficas) es posible observar las regiones de energía definidos como Bandas de Conducción (BC) en la parte superior y la Bandas de Valencia (BV) en la parte inferior que están delimitadas por una línea roja conocida como energía de Fermi.

En la estructura de bandas calculada con GGA, Figura 7a) izquierda, se observa que no existe brecha prohibida en la perovskita de GdFeO_3 , la densidad de estados (Figura 7a) concuerda con la estructura de bandas, confirmando que se trata de un material conductor. Para el caso del cálculo de estructura de bandas con LDA (Figura 7b), se observa un resultado semejante al de la aproximación GGA, dado que el punto de transición en la banda de valencia localizado en el punto Γ supera la energía de Fermi propiciando una brecha nula.



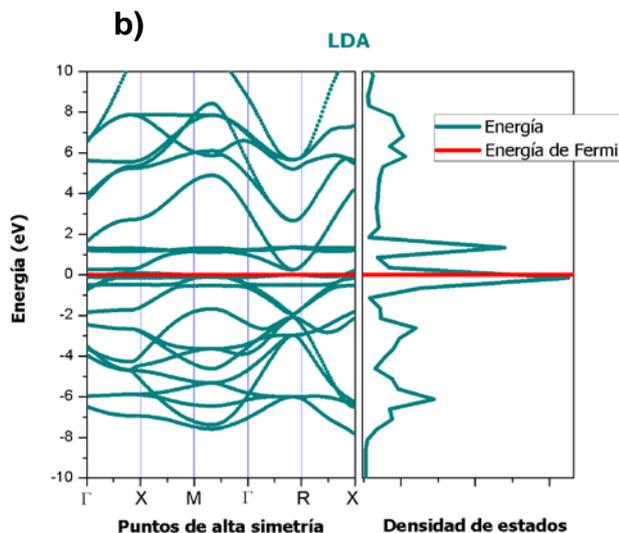


Figura 7. Gráfico de estructura de bandas y densidad de estados (DOS) de los pseudopotenciales GGA y LDA para el sistema GdFeO_3 .

Por el contrario, de acuerdo con los resultados experimentales y computacionales reportados por Zhu y colaboradores (Zhu, 2017), la estructura ortorrómbica muestra un comportamiento semiconductor con una brecha prohibida de aproximadamente 0.6 eV, por lo que podemos concluir que el comportamiento electrónico está asociado con la estructura atómica del GdFeO_3 .

Tal comportamiento es reafirmado por la densidad de estados, Figura 7b) derecha, donde el pico con mayor intensidad se encuentra en la energía de Fermi, resaltando los estados electrónicos disponibles en el sistema de interés.

c. Propiedades ópticas

El análisis de espectroscopia óptica es una herramienta sumamente útil para determinar la estructura de la banda de energía de un material sólido (Zhu et al., 2017a). Es posible explicar que la función dieléctrica compleja está directamente relacionada con la estructura de la banda de energía de los sólidos.

La permitividad dieléctrica compleja es un parámetro constitutivo de cualquier material dieléctrico y de ella depende la interacción de la materia junto con un campo eléctrico incidente, (Rodríguez Moré et al., 2016).

Para GdFeO_3 con una estructura cúbica, la Figura 8 muestra las curvas calculadas con las aproximaciones GGA y LDA de la función dieléctrica compleja (imaginaria) la cual es directamente proporcional al coeficiente de absorción del sistema. La parte imaginaria proporciona información sobre el comportamiento de absorción de GdFeO_3 . La parte imaginaria de la función dieléctrica se calculó en un intervalo de energía de 0 a 30 eV. El umbral de energía de la función dieléctrica es $E_0 = 26.426$ eV y $E_0 = 27.942$ eV para GGA y LDA respectivamente, (Zhu et al., 2017).

Los resultados de la parte imaginaria indican que para el sistema de GdFeO_3 los valores máximos de absorción están alrededor 0.377 eV para GGA, y de 0.272 para LDA.

Al comparar los dos picos de máxima intensidad en la Fig. 8 con la DOS, Figura 7, se pueden asociar estos dos picos a las

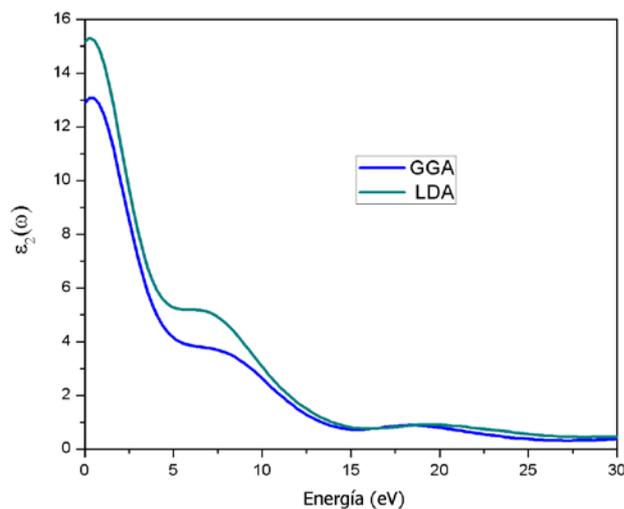


Figura 8. Diagrama de la parte imaginaria de tensor dieléctrico para los pseudopotenciales GGA y LDA.

transiciones interbandas entre los estados p del O en la banda de valencia a estados d del Fe^{3+} y f del Gd en la banda de conducción. El pico de absorción promedio de 0.377 eV para GGA, y de 0.272 eV para LDA, corresponde aproximadamente a la transición entre los picos localizados en DOS, a -0.350 eV para GGA y -0.240 eV para LDA, en la BV y a 2.8 eV para GGA y 1.2 eV en la BC. Por otro lado, el ancho de absorción situado entre 6-8 eV de la parte imaginaria del tensor dieléctrico, corresponde a las transiciones interbandas del Fe^{3+} y Gd^{3+} en -5 eV para GGA y -6 eV para LDA en la BV, así como a los valores energéticos en +7.2 a +8.2 eV para GGA, y +5.7 a +6.7 eV para LDA en la BC. (Valencia, 2011).

La absorción obtenida para ambos valores en GGA y LDA se encuentran un rango infrarrojo que está dada por 10^{12} Hz a 10^{14} Hz perteneciente a los modos vibracionales del sistema. Conforme la energía se incrementa es posible apreciar que hay una adsorción aproximada de 7.114 apreciada en GGA, mientras que para LDA es de 7.522, la cual nos confiere una absorción el rango ultravioleta y visible.

4. Discusión

El código de SIESTA parte de las aproximaciones empleadas, por un lado, LDA ha sido durante mucho tiempo la opción por excelencia a utilizar, debido a que funciona muy bien para una amplia variedad de materiales, especialmente por los cálculos convergentes que a menudo concuerdan con los datos experimentales, sin embargo, no es lo suficientemente precisa para describir la energía de las reacciones químicas pero que sirve como referencia para la aproximación de GGA, por ejemplo la energía de activación suele tener una sobreestimación de las energías de moléculas y sólidos de silicatos en particular. Por el contrario, GGA ha superado tales deficiencias en gran medida, dando una descripción más efectiva de las brechas energéticas en superficies metálicas y semiconductoras. De tal manera las funciones GGA dependen de la densidad local, así como de la variación espacial de la densidad.

Posterior al estudio de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la ferrita de gadolinio (GdFeO_3) en su fase cúbica, empleando las aproximaciones GGA y LDA, se estableció la comparación de la demanda computacional y experimental mediante la proximidad y/o consistencia de los resultados obtenidos, con los reportados en trabajos anteriores. Se

encuentran distintos estudios empíricos que datan de 1954 hasta estudios computacionales del 2021, los cuales exponen las diferentes propiedades que corresponden al $GdFeO_3$ que es dependiente de la estructura, en la Tabla 3, se indican de forma breve los resultados obtenidos de acuerdo con diferentes autores que llevaron a cabo metodologías computacionales, donde es posible identificar y comparar sus resultados con los obtenidos en el presente estudio.

Tabla 3. Descripción de datos y variables reportados en la literatura con métodos computacionales para la perovskita $GdFeO_3$.

Autores	(Paul et al., 2021)	Material project
Mallas	7x7x5	11x10x7
Parámetro de red (Å)	5.299 5.735 7.564	5.395 5.666 7.776
Código empleado	Vienna Ab-initio Simulation package (VASP)	Quantum Espresso
Estructura	Ortorrónica	Ortorrónica
Energía de Fermi (eV)	-	0
Band Gap (eV)	-	0

Los comportamientos resultantes, varían desde la malla utilizada que está dada por el método Monkhorst-Pack, hasta el parámetro de red, como ya se mencionó con anterioridad las distorsiones son el reflejo de las posiciones atómicas que confieren distorsiones en la estructura cristalina. El código también es una variable fundamental en la metodología computacional, para cada una de las aproximaciones empleadas y su diferente funcional para modelar la densidad electrónica.

De manera empírica, la literatura inicial está dada por (Geller, 1956), la cual muestra los primeros estudios experimentales para la ferrita de gadolinio, determinado una estructura que no se comporta como ortorrónica o cúbica sino más bien un conjunto de ejes ortogonales; determinado las distintas propiedades que ofrece la perovskita con respecto a la temperatura. En la Tabla 4, se presenta un resumen de los datos empíricos más sobresalientes descritos hasta la fecha de la ferrita de gadolinio.

Tabla 4. Descripción de datos y variables reportados en la literatura con métodos empíricos para la perovskita $GdFeO_3$.

Autores	(Li & Li, 2020)	(Blasco et al., 2006)
Parámetro de red (Å)	-	3.8654
Código empleado	Experimental	Experimental
Estructura	Ortorrónica	Cúbica
Energía de Fermi (eV)	0	-
Band Gap (eV)	0	-

De acuerdo con las comparativas, se encuentra una variedad de estructuras para la ferrita de gadolinio que dependen de los distintos métodos y condiciones de síntesis. Por consiguiente, este estudio, contribuye a establecer propiedades del $GdFeO_3$ con un arreglo espacial de Pm-3m, permitiendo incrementar la información en la literatura acerca de ellas, y en gran medida las propiedades estudiadas son diferentes en comparación con las reportadas para la estructura ortorrónica, por lo que se espera que este hecho motive a la síntesis y el estudio de las propiedades electrónicas, ópticas y magnéticas de esta fase

5. Conclusiones

Se hizo un estudio de primeros principios usando el código SIESTA basado en la DFT empleando aproximaciones GGA y LDA para determinar las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la $GdFeO_3$ tipo perovskita con una estructura cristalina FCC. Los resultados muestran un comportamiento conductor debido a la ausencia de una brecha energética en las dos metodologías empleadas (LDA y GGA) y con picos de absorción máximas en el rango infrarrojo y con menor intensidad en los rangos ultravioleta y visible.

Los resultados obtenidos del parámetro de red son muy similares al reportado experimentalmente, por lo que se determina que la predicción de las propiedades electrónicas y ópticas calculadas están en concordancia con las experimentales.

A partir de lo anterior es posible inferir que los métodos ab initio o de primeros principios son útiles para calcular propiedades de un material conductor o semiconductor en el cual la estructura cristalina juega un papel importante puesto que el arreglo atómico es determinante en la predicción de las demás propiedades del sistema.

Agradecimientos

Agradecimiento del autor al CONACYT por el apoyo a Miguel Arteaga Varela por la beca otorgada en el doctorado (4192) perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales e Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo.

Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses.

Referencias

- Albadi, Y., Martinson, K. D., Shvidchenko, A. V., Buryanenko, I. V., Semenov, V. G., & Popkov, V. I. (2020). Synthesis of $GdFeO_3$ nanoparticles via low-temperature reverse co-precipitation: The effect of strong agglomeration on the magnetic behavior. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 11(2), 252–259. <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2020-11-2-252-259>
- Blanco, M., Fuertes, V., & Carbonio, R. (2015). Hablemos de Perovskitas. *Bitácora Digital*, 2(6), 1–8.
- Blasco, J., Stankiewicz, J., & García, J. (2006). Phase segregation in the $Gd_{1-x}Sr_xFeO_{3-\delta}$ series. *Journal of Solid State Chemistry*, 179(3), 898–908. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2005.12.023>
- Chavan, S. V., & Tyagi, A. K. (2005). Nanocrystalline $GdFeO_3$ via the gel-combustion process. *Journal of Materials Research*, 20(10), 2654–2659. <https://doi.org/10.1557/JMR.2005.0337>
- Cortés-Escobedo, C. A., Gaudisson, T., & Sánchez de Jesús, F. (2014). Obtención de la perovskita cúbica $GdFeO_3$ por el método del polioli.

- Centro de Investigaciones En Óptica, A. C.*, 1–4.
- Geller, S. (1956). Crystal structure of gadolinium orthoferrite, GdFeO₃. *The Journal of Chemical Physics*, 24(6), 2–4. <https://doi.org/10.1063/1.1742746>
- Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G., & Persson, K. A. (2013). Commentary: The materials project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials*, 1(1). <https://doi.org/10.1063/1.4812323>
- Karoblis, D., Zarkov, A., Mazeika, K., Baltrunas, D., Niaura, G., Beganskiene, A., & Kareiva, A. (2021). YFeO₃-GdFeO₃ solid solutions: Sol-gel synthesis, structural and magnetic properties. *Solid State Sciences*, 118, 12. <https://doi.org/10.1016/J.SOLIDSTATESCIENCES.2021.106632>
- Li, Q., & Li, J. (2020). Tunable double resonance with negative permittivity and permeability in GdFeO₃ material by sintering temperature. *Journal of Alloys and Compounds*, 817, 152778. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.152778>
- Ordejón, P. (2000). Linear scaling ab initio calculations in nanoscale materials with SIESTA. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 217(1), 335–356. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3951\(200001\)217:1<335::AID-PSSB335>3.3.CO;2-Q](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(200001)217:1<335::AID-PSSB335>3.3.CO;2-Q)
- Paul, P., Ghosh, P. S., Rajarajan, A. K., Babu, P. D., & Rao, T. V. C. (2021). Ground state spin structure of GdFeO₃: A computational and experimental study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 518, 1–18. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.167407>
- Pliego, O. H., Rodríguez, C. S., & Contini, L. (2006). Influencia de las terminologías de la teoría de bandas sobre la aparición de desconceptos referidos a las propiedades de los metales. *Facultad de Ciencias Exactas*.
- Prakash, B. J., Rudramadevi, B. H., & Buddhudu, S. (2014). Analysis of ferroelectric, dielectric and magnetic properties of GdFeO₃ nanoparticles. *Ferroelectrics, Letters Section*, 41, 110–122. <https://doi.org/10.1080/07315171.2014.956020>
- Rodríguez Moré, Z. O., Lobato Morales, H., Chávez Pérez, R. A., & Medina Monroy, J. L. (2016). Estudio de la permitividad dieléctrica compleja en ron y sus mezclas con metanol, etanol y agua a frecuencia de microondas usando prueba coaxial. *Congreso Internacional de Telecomunicaciones y Telemática*, 1–18.
- Tang, P., Hu, Y., Lin, T., Jiang, Z., & Tang, C. (2014). Preparation of nanocrystalline GdFeO₃ by microwave method and its visible-light photocatalytic activity. *Integrated Ferroelectrics*, 153(1), 73–78. <https://doi.org/10.1080/10584587.2014.902720>
- Wu, A., Wang, Z., Wang, B., Ban, X., Jiang, L., Xu, J., Yuan, S., & Cao, S. (2014). Crystal growth and magnetic properties of GdFeO₃ crystals by floating zone method. *Solid State Communications*, 185, 14–17. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2014.01.011>
- Zhang, Y., Zheng, A., Yang, X., He, H., Fan, Y., & Yao, C. (2012). Cubic GdFeO₃ particle by a simple hydrothermal synthesis route and its photoluminescence and magnetic properties. *CrystEngComm*, 14(24), 8432–8439. <https://doi.org/10.1039/c2ce26233a>
- Zhu, X. H., Xiao, X. B., Chen, X. R., & Liu, B. G. (2017). Electronic structure, magnetism and optical properties of orthorhombic GdFeO₃ from first principles. *RSC Advances*, 7(7), 4054–4061. <https://doi.org/10.1039/c6ra25259a>