



Contribution ID : 90

Type : poster

## Efecto de la temperatura y análisis del GAP teórico-experimental en las nanopartículas de BiFeO<sub>3</sub>

Friday, 25 September 2020 10:00 (10)

Dentro de los multiferroicos la ferrita de Bismuto (BiFeO<sub>3</sub>) es uno de los sistemas más estudiados. Este material presenta propiedades ferromagnéticas, ferroeléctricas y ópticas observadas a temperatura ambiente, que le permite ser aplicable para dispositivos de almacenamiento de datos y fotovoltaicos. [1]

El estudio comprende en la variación de la temperatura (0°C, 500°C y 600°C) en la caracterización del material y como esta afecta a su estructura y a sus propiedades ópticas. El análisis de la estructura cristalina se realizó mediante el método de Rietveld, la comparación de su propiedad óptica por medio de la Banda Prohibida (teórico- experimental) utilizando la simulación en el software Quatum Espresso y los valores obtenidos mediante el equipo de espectrofotómetro.

Dentro de los resultados obtenidos se encontró que la variación de temperatura afecta el ángulo entre los átomos de hierro Fe-O-Fe provocando una variación en los valores de banda prohibida, obteniendo como mejor valor (teórico experimental) 2,14 eV. Mediante la densidad de estados DOS se comprueba los valores del GAP. [2]

Palabras claves: Banda Prohibida, Densidad de estados, Quantum Espresso, Ferrita de bismuto, Rietveld y temperatura.

### References

- [1] Ayala, Z & Peñalva Sanchez, Jhon & Hernández, J & Loro, H & Eyzaguirre, Carmen. (2020). Study of the optical and photovoltaic properties in nanoparticles of BiFeO<sub>3</sub>. Journal of Physics: Conference Series. 1558. 012010. 10.1088/1742-6596/1558/1/012010.
- [2] Peñalva Sanchez, Jhon & Lazo, A. (2018). Synthesis of Bismuth Ferrite BiFeO<sub>3</sub> by solution combustion method. Journal of Physics: Conference Series. 1143. 012025. 10.1088/1742-6596/1143/1/012025.

**Primary author(s)** : AYALA, Zait (Universidad Privada del Norte)

**Co-author(s)** : Dr EYZAGUIRRE, Carmen (UNI); Mr PEÑALVA SANCHEZ, Jhon (Universidad Nacional de Ingeniería)

**Presenter(s)** : AYALA, Zait (Universidad Privada del Norte)

**Session Classification** : Poster session

**Track Classification** : Materials Science and Nanotechnology