



TUYỂN TẬP BÁO CÁO HỘI NGHỊ TOÀN QUỐC

KHOA HỌC TRÁI ĐẤT VÀ TÀI NGUYÊN VỚI PHÁT TRIỂN BỀN VỮNG

Hà Nội, 11 - 11 - 2022

ERSD 2022



NHÀ XUẤT BẢN GIAO THÔNG VẬN TẢI

Toàn bộ thông tin khoa học về hội nghị được tích hợp vào Website chính thức của Hội nghị tại địa chỉ: <http://ersd.humg.edu.vn/>.

Ban tổ chức xin trân trọng cảm ơn Trường Đại học Mở - Địa chất, với tư cách là đơn vị đăng cai tổ chức Hội nghị, cùng các đơn vị đồng tổ chức đã hợp tác chặt chẽ và góp phần quan trọng vào việc tổ chức Hội nghị này. Cảm ơn các nhà khoa học và nhà chuyên môn đã đóng góp các công bố khoa học có giá trị cho Hội nghị. Ban tổ chức cũng đánh giá cao sự nỗ lực của các chuyên gia đọc bài đã có nhiều nỗ lực và đóng góp để nâng cao chất lượng khoa học của các báo cáo, góp phần quan trọng vào thành công của hội nghị này.

Ban tổ chức mong muốn tiếp tục nhận được sự hợp tác chặt chẽ và góp ý chân thành của các đơn vị và cá nhân đối với việc chuẩn bị và tổ chức hội nghị, chất lượng báo cáo, biên tập, và xuất bản kỷ yếu hội nghị nhằm nâng cao chất lượng của các hội nghị tiếp theo, góp phần thúc đẩy sự phát triển bền vững của hoạt động nghiên cứu khoa học và trao đổi học thuật thuộc các lĩnh vực Khoa học Trái đất và Tài nguyên và các lĩnh vực khoa học khác có liên quan.

Hà Nội, tháng 11 năm 2022
THAY MẶT BAN TỔ CHỨC

GS.TS Trần Thanh Hải

Thống kê R trong bài toán kiểm định tham số <i>Phạm Ngọc Anh</i>	1106
The experience of organizing EFL online teaching <i>Nguyen Thi Nguyet Anh</i>	1111
Đặc trưng dao động cưỡng bức của hệ lò xo - khối lượng trong mặt phẳng có tính đến ma sát với hiệu ứng Stribeck <i>Phạm Ngọc Chung, Nguyễn Như Hiếu</i>	1117
Tổng quan về một số phương pháp chế tạo vật liệu bán dẫn hệ thấp chiều <i>Nguyễn Xuân Chung</i>	1123
Nghiên cứu tổng hợp và đặc trưng tính chất vật liệu hydroxit lớp kép Zn-Al <i>Công Tiến Dũng, Phương Thảo, Lê Thị Phương Thảo</i>	1128
Tổng hợp và nghiên cứu khả năng bảo vệ chống ăn mòn thép CT3 của màng phủ polypyrrole trong môi trường axit sulfuric <i>Phạm Tiến Dũng, Nguyễn Thị Kim Thoa, Hà Mạnh Hùng</i>	1134
Nghiên cứu khả năng hấp phụ Ni^{2+} bằng hydroxyapatit tổng hợp <i>Lê Thị Duyên, Hoàng Thanh Bình, Trần Thị Thu Hương, Nguyễn Việt Hùng, Lê Thị Phương Thảo, Võ Thị Hạnh, Đỗ Thị Hải, Nguyễn Thị Thu Hiền, Phạm Tiến Dũng, Công Tiến Dũng, Đinh Thị Mai Thanh</i>	1141
Mô hình hóa và thiết lập hệ phương trình chuyển động cho robot song song 3RRR có khâu đàn hồi <i>Đinh Công Đạt</i>	1147
Nghiên cứu quy trình chiết xuất L-tetrahydropalmatine trong cây Bình Vôi chữa bệnh mất ngủ <i>Nguyễn Thu Hà, Vũ Duy Thịnh</i>	1153
Common errors in using English collocations by students at Hanoi University of Mining and Geology <i>Le Thi Thuy Ha, Dang Thanh Mai</i>	1157
Tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ <i>Đỗ Thị Hồng Hải, Nguyễn Xuân Chung, Hồ Quỳnh Anh</i>	1161
Nghiên cứu khả năng xử lý ion Ni^{2+} trong nước bằng vật liệu tự nhiên sericit ở mỏ Sơn Bình, Hà Tĩnh <i>Võ Thị Hạnh, Lê Thị Duyên, Nguyễn Mạnh Hà, Đỗ Thị Hải, Nguyễn Thị Thanh Thảo, Bùi Hoàng Bắc</i>	1167
Ước lượng xác suất đuôi của nghiệm mô hình CIR với nhiễu là chuyển động Brown phân thứ <i>Nguyễn Thu Hằng</i>	1173
Xây dựng thuật toán tiến cho bài toán quan sát đa mục tiêu MTT sử dụng HMM không tuần nhất <i>Nguyễn Thị Hằng</i>	1178
Ảnh hưởng của áp suất ngoài lên sự hình thành trạng thái điện môi exciton trong các hợp chất đất hiếm chalcogenide <i>Nguyễn Thị Hậu, Đỗ Thị Hồng Hải</i>	1184
Mối quan hệ giữa Glucocorticoid và tế bào tự diệt NK <i>Vũ Thị Minh Hồng, Phạm Tiến Dũng</i>	1190

Glucocorticoid và các tác động khi sử dụng <i>Vũ Thị Minh Hồng, Đỗ Thị Hải</i>	1196
Existence and asymptotic behavior of solutions to a class of semilinear degenerate parabolic equations with exponential nonlinearities <i>Nguyen Thi Hong, Dao Xuan Hung</i>	1202
Khả năng quang xúc tác và thu hồi của vật liệu tổ hợp $\text{Ag}_3\text{PO}_4/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ <i>Nguyễn Mạnh Hùng, Đào Việt Thắng, Nguyễn Thị Diệu Thu, Hồ Quỳnh Anh</i>	1208
Tái sử dụng nước thải làng nghề tái chế nhôm bằng công nghệ màng <i>Nguyễn Việt Hùng, Nguyễn Hoàng Nam, Lê Thị Phương Thảo, Vũ Thị Minh Hồng Nguyễn Mạnh Hà</i>	1213
Dạng điệu biên của hàm Squeezing gần điểm biên lỗi tuyến tính <i>Nguyễn Thị Lan Hương</i>	1219
ESP teachers' roles at a technical university from teachers' perspectives <i>Duong Thuy Huong</i>	1224
Độ đo xác suất trên $C[0,1]$ <i>Nguyễn Thế Lâm</i>	1230
Điều kiện tối ưu cho bài toán cực tiểu <i>Nguyễn Thùy Linh</i>	1234
Cấu trúc lõi/vỏ và tính chất vật lý của vật liệu composite $(1-x)\text{PbTiO}_3/x\text{CoFe}_2\text{O}_4$ <i>Ngô Thị Cẩm Linh, Đào Việt Thắng</i>	1238
The application of teaching English as an international language for HUMG students <i>Dang Thanh Mai, Lê Thị Thuy Hà, Vu Thanh Tam</i>	1243
Nghiên cứu nâng cao hiệu suất truyền năng lượng không dây sử dụng tấm vật liệu biến hóa có cấu trúc lục giác ở vùng MHz <i>Bùi Hữu Nguyên, Vũ Đình Lâm, Đào Việt Thắng, Lê Đức Tuyên, Nguyễn Mạnh Hùng, Tống Bá Tuấn, Nguyễn Đức Khoát</i>	1247
Improving HUMG students' speaking skills through the English prosodic features <i>Nguyen Dao Ly Nhan Phuc</i>	1253
Why do we only need to one of the accuracy measures? <i>Le Bích Phương, Hà Hữu Cao Trình, Nguyen Thi Mai Hoa</i>	1258
Convexity of ROC curves <i>Le Bích Phương, Hà Hữu Cao Trình, Nguyen Thi Mai Hoa</i>	1262
Finite time stability of fractional-order neural networks with time-varying delay <i>Nguyen Truong Thanh</i>	1266
Techniques for teaching culture for non-English major college students <i>Nguyen Thi Thao</i>	1271
Đánh giá khả năng chống ăn mòn của lớp mạ tổ hợp Ni-TiO_2 bằng phương pháp đo phổ tổng trở	

Lê Thị Phương Thảo, Nguyễn Thị Kim Thoa	1275
Ảnh hưởng của ion đất hiếm (Y^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+}) lên cấu trúc tinh thể, tính chất quang học và tính chất từ của vật liệu $BiFeO_3$	
Đào Việt Thắng, Nguyễn Mạnh Hùng, Hồ Quỳnh Anh, Nguyễn Thị Diệu Thu	1280
Nghiên cứu cấu trúc tinh thể, tính chất sắt điện và sắt từ của vật liệu $Bi_{0,95}RE_{0,05}Fe_{0,975}Ni_{0,025}O_3$ ($RE = La, Ho$)	
Đào Việt Thắng, Nguyễn Mạnh Hùng, Hồ Quỳnh Anh, Nguyễn Thị Diệu Thu	1285
Nghiên cứu vai trò của cation kim loại chuyển tiếp và nhiệt động học của quá trình tạo phức	
Vũ Duy Thịnh, Nguyễn Thu Hà	1291
Nghiên cứu ảnh hưởng của lovastatin đến khả năng giải phóng lovastatin từ vật liệu tổ hợp chitosan/carrageenan	
Nguyễn Thị Kim Thoa, Vũ Quốc Mạnh, Hà Mạnh Hùng, Võ Thị Hạnh, Vũ Quốc Trung	1296
Kết quả nghiên cứu thành phần hóa học và đánh giá hoạt tính hạ đường huyết của loài Địa hoàng <i>Rehmannia glutinosa</i>	
Vũ Kim Thư, Công Tiến Dũng, Nguyễn Thị Thu Hiền, Nguyễn Thị Kim Thoa, Đỗ Thị Hải, Trương Thị Thanh Thủy	1303
Các hợp chất phenolic phân lập từ loài Sóc xéo <i>Glochidion obliquum</i> Decne	
Vũ Kim Thư, Nguyễn Thị Thu Hiền, Nguyễn Thị Kim Thoa	1309
Trải nghiệm ứng dụng Classkick trong dạy và học tiếng Anh trực tuyến tại trường Đại học Mở - Địa chất	
Trương Thị Thanh Thủy	1313
Tính tự chủ của sinh viên trong học tiếng Anh trực tuyến tại trường Đại học Mở - Địa chất	
Trương Thị Thanh Thủy	1318
Dao động tham số của hệ phi tuyến cấp ba có chứa ma sát Coulomb, ma sát động và cản nhớt cấp phân số	
Bùi Thị Thúy	1323
Bài toán dòng chảy một chiều đối xứng trục tới giếng khai thác	
Trần Thị Trâm	1329
Classifying the idioms concerning money according to their meanings	
Nguyen Hong Van	1334
Introducing new social media terminologies	
Nguyen Hong Van	1338
Tăng cường khả năng phát quang của vật liệu $YVO_4:Eu^{3+}$ ứng dụng trong y sinh	
Lê Thị Vinh, Hà Thị Phương, Hoàng Thị Khuyên, Nguyễn Thanh Hương, Phạm Thị Liên, Trần Thu Hương	1342
Kỹ thuật cộng gộp sóng mang trong truyền dẫn dữ liệu qua mạng di động 4G-LTE	
Tổng Ngọc Anh, Hà Thị Chúc	1346
Thuật toán lọc sai số thô trong hệ thống đo ứng dụng công nghệ IOT Gateway	
Đặng Văn Chí, Nguyễn Thế Lực	1353

Ảnh hưởng của ion đất hiếm (Y^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+}) lên cấu trúc tinh thể, tính chất quang học và tính chất từ của vật liệu $BiFeO_3$

Đào Việt Thắng*, Nguyễn Mạnh Hùng, Hồ Quỳnh Anh và Nguyễn Thị Diệu Thu
Trường Đại học Mở - Địa chất

TÓM TẮT

Vật liệu $BiFeO_3$ (BFO) pha tạp ion đất hiếm RE^{3+} ($RE^{3+} = Y^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}$) được chế tạo bằng phương pháp sol-gel. Cấu trúc tinh thể, tính chất quang học và tính chất từ của vật liệu được khảo sát bằng các kỹ thuật khác nhau như: Giản đồ nhiễu xạ tia X (XRD), phổ hấp thụ quang học và chu trình từ trễ. Kết quả phân tích XRD cho thấy các mẫu chế tạo kết tinh đơn pha trong cấu trúc mặt thoi thuộc nhóm không gian R_{3C} . Vật liệu BFO có hằng số mạng $a = 5,585 \text{ \AA}$ và $c = 13,866 \text{ \AA}$. Vật liệu BFO pha tạp ion đất hiếm RE^{3+} với nồng độ pha tạp 5% cho thấy hằng số mạng tinh thể a , c đều giảm. BFO có độ rộng vùng cấm quang học $E_g = 2,28 \text{ eV}$. Độ rộng vùng cấm quang học của vật liệu BFO giảm khi pha tạp các ion đất hiếm. Kết quả khảo sát chu trình từ trễ chỉ ra tất cả các mẫu thể hiện trật tự sắt từ yếu. Vật liệu BFO có từ độ bão hòa $M_s = 0,046 \text{ emu/g}$, từ độ dư $M_r = 0,007 \text{ emu/g}$. Tính chất sắt từ của các vật liệu pha tạp được cải thiện tốt hơn so với vật liệu BFO. Trong báo cáo này, chúng tôi sẽ thảo luận về nguồn gốc dẫn tới sự thay đổi hằng số mạng tinh thể, độ rộng vùng cấm quang học và tính chất sắt từ của vật liệu.

Từ khóa: $BiFeO_3$, pha tạp (Y^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+}), nhiễu xạ tia X, $M-H$, hấp thụ quang học.

1. Đặt vấn đề

Vật liệu đa pha điện từ là vật liệu tồn tại đồng thời tính chất sắt điện (hoặc phản sắt điện), sắt từ (hoặc phản sắt từ) và sắt đàn hồi. Loại vật liệu này tồn tại hiệu ứng từ điện nghĩa là ta có thể sử dụng điện trường để thay đổi các trật tự từ hoặc ngược lại có thể dùng từ trường để thay đổi các trật tự điện. Nhờ vậy, vật liệu đa pha điện từ có nhiều ứng dụng thực tế như: thiết bị đọc và ghi từ, các bộ nhớ, bộ thu phát sóng siêu âm, cảm biến, hoặc thiết bị đa chức năng (Eerenstein, Mathur *et al.*, 2006; Kim, Han *et al.*, 2012; Schmid, 1994). Tuy nhiên, do trật tự sắt điện và sắt từ thường có xu hướng triệt tiêu lẫn nhau nên vật liệu đa pha điện từ tồn tại rất ít trong tự nhiên. $BiFeO_3$ (BFO) là một trong số rất ít vật liệu đa pha điện từ tồn tại tự nhiên với hai trật tự sắt điện có nhiệt độ Curie $T_C = 1100 \text{ K}$ và phản sắt từ có nhiệt độ Néel $T_N = 640 \text{ K}$ (Xue, Tan *et al.*, 2014). Nhưng ở nhiệt độ phòng vật liệu BFO có từ độ M_s và độ phân cực điện P_s nhỏ làm hạn chế khả năng ứng dụng của vật liệu. Để giải quyết vấn đề này, các nghiên cứu đã tiến hành theo hai hướng là pha tạp nguyên tố tạp chất vào mạng tinh thể BFO hoặc tạo vật liệu composite giữa vật liệu BFO với vật liệu sắt từ nhằm cải thiện tính chất sắt từ và sắt điện của vật liệu (Khalid, Saleem *et al.*, 2020; Mansour, Imam *et al.*, 2020). Theo hướng pha tạp, các nghiên cứu trước đây đã cho thấy tính chất sắt từ của vật liệu BFO được cải thiện đáng kể khi pha tạp các ion đất hiếm (La^{3+} , Gd^{3+} , Nd^{3+} , Eu^{3+}) (Li, Zhu *et al.*, 2016; Thang, Hung *et al.*, 2022; Thang, Nguyen *et al.*, 2020) vào vị trí ion Bi^{3+} hoặc pha tạp các ion kim loại chuyển tiếp (Ni^{2+} , Co^{3+} , Mn^{3+}) (Iyyappa Rajan, Mahalakshmi *et al.*, 2017; Srinivas, Raghavender *et al.*, 2016) vào vị trí ion Fe^{3+} hoặc pha tạp đồng thời các ion đất hiếm và kim loại chuyển tiếp vào vị trí ion Bi^{3+} và Fe^{3+} trong mạng tinh thể BFO (Wang, Wang *et al.*, 2018). Hướng nghiên cứu pha tạp đã có nhiều kết quả khả quan, đã thu hút nhiều sự quan tâm của các nhà khoa học vì chúng có khả năng mang lại nhiều tính chất mới, tăng khả năng ứng dụng của vật liệu nền BFO. Tuy nhiên, hướng nghiên cứu này còn nhiều điểm cần được khai thác như: nghiên cứu các tính chất quang, tính chất quang từ của vật liệu, ... nhằm thiết kế, chế tạo các thiết bị đa chức năng.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi dựa vào các nghiên cứu trước đây và các kết quả đã công bố để lựa chọn loại tạp chất và nồng độ tạp để pha vào mạng nền BFO. Do đó, chúng tôi đã tiến hành pha tạp 5% ion đất hiếm RE^{3+} ($RE^{3+} = Y^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}$) vào vị trí ion Bi^{3+} mạng tinh thể BFO, nghiên cứu ảnh hưởng của các ion đất hiếm lên cấu trúc, tính chất quang học của vật liệu, cải thiện tính chất sắt từ của vật liệu BFO.

* Tác giả liên hệ

Email: daovietthang@hmg.edu.vn

2. Phương pháp chế tạo và các phép đo

2.1. Phương pháp chế tạo

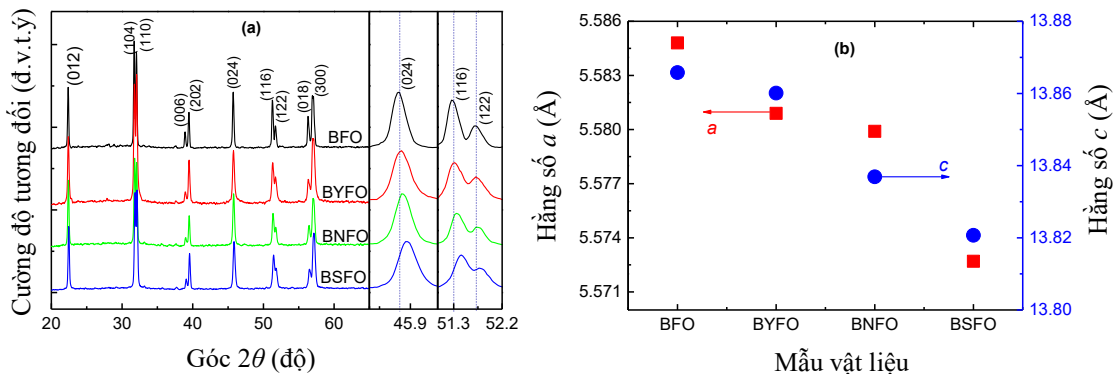
Vật liệu BiFeO₃, BiFeO₃ pha tạp 5% mol ion đất hiếm RE³⁺ (RE³⁺ = Y³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺) được chế tạo bằng phương pháp Sol-gel. Các tiền chất được dùng để chế tạo vật liệu gồm có Bi(NO₃)₃.5H₂O, Fe(NO₃)₃.9H₂O, Y(NO₃)₃.6H₂O, Nd(NO₃)₃.6H₂O, Sm(NO₃)₃.6H₂O, axit citric C₆H₈O₇ và ethylen glycol C₂H₆O₂. Đầu tiên, các muối Bi(NO₃)₃.5H₂O, Fe(NO₃)₃.9H₂O và các muối đất hiếm RE(NO₃)₃.6H₂O được cân đúng tỉ phần. Sau đó, các chất này được khuấy trộn đều trong 10 ml nước bằng máy khuấy từ trong thời gian 15 phút thu được hỗn hợp A. Bước tiếp theo, thêm 35 ml dung dịch axit citric vào hỗn hợp A, tiếp tục khuấy bằng máy khuấy từ đồng thời gia nhiệt và giữ ở nhiệt độ 50 °C - 60 °C trong thời gian 1 giờ thu được dung dịch Sol. Bước tiếp theo nhỏ thêm 15 ml dung dịch ethylen glycol, tiếp tục khuấy bằng máy khuấy từ trong thời gian 30 phút. Sau đó, tăng nhiệt độ dung dịch Sol lên 100 °C để làm nước bay hơi sau 3 giờ thu được Gel ướt. Gel ướt được sấy ở 130 °C trong thời gian 3 giờ thu được Gel khô. Cuối cùng, Gel khô được ủ ở nhiệt độ 800 °C trong thời gian 7 giờ thu được vật liệu dạng bột. Các mẫu BiFeO₃, BiFeO₃ pha tạp ion Y³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺ được ký hiệu tương ứng là BFO, BYFO, BNFO, BSFO.

2.2. Các phép đo

Trong nghiên cứu này, cấu trúc tinh thể, tính chất sắt từ và quang học của vật liệu được khảo sát bằng các kỹ thuật khác nhau như: Giản đồ nhiễu xạ tia X (XRD) trên hệ đo Equinox 5000 (Cu-Kα, λ = 1,5406 Å) dùng để nghiên cứu cấu trúc tinh thể các mẫu. Tính chất từ được xác định bằng chu trình từ trễ trên hệ đo Lake Shore Cryotronics, 7404 VSM. Phổ hấp thụ quang học được đo trên hệ đo Jasco V670.

3. Kết quả và thảo luận

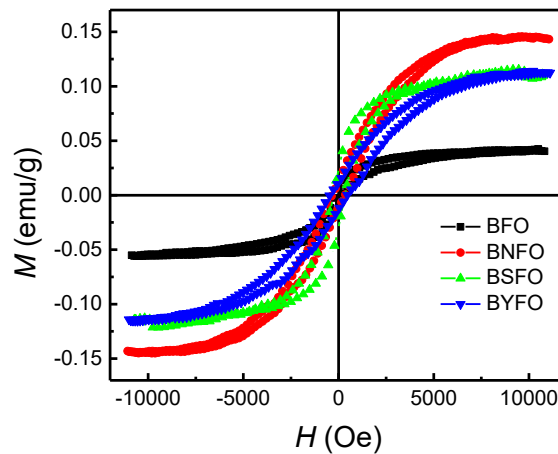
Hình 1a là giản đồ nhiễu xạ tia X của các mẫu BFO, BYFO, BNFO, BSFO. Kết quả cho thấy các đỉnh nhiễu xạ xuất hiện phù hợp với thẻ chuẩn JCPDS số 71-2494. Theo thẻ chuẩn này các mẫu có cấu trúc mặt thoi thuộc nhóm không gian R_{3C}, các đỉnh nhiễu xạ chính xuất hiện tương ứng với các mặt phẳng mạng (012), (104), (110), (006), (202), (024), (116), (122), (018) và (300). Quan sát trên Hình 1a, ta nhận thấy vị trí các đỉnh nhiễu xạ của các mẫu pha tạp ion đất hiếm so với mẫu BFO có sự dịch về phía góc 2θ lớn. Từ dữ liệu phân tích XRD, sử dụng phần mềm UnitCell chúng tôi xác định được hằng số mạng tinh thể của các mẫu BFO, BYFO, BNFO và BSFO, kết quả thể hiện trong Hình 1b. Có thể thấy hằng số mạng tinh thể của vật liệu giảm khi pha tạp pha tạp các ion đất hiếm. Nguyên nhân là do các bán kính ion của Y³⁺ (1,019 Å), Nd³⁺ (1,109 Å), Sm³⁺ (1,079 Å) nhỏ hơn bán kính ion Bi³⁺ (1,170 Å) nên khi các ion đất hiếm RE³⁺ (Y³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺) thay thế vị trí ion Bi³⁺ trong mạng tinh thể BFO sẽ làm co mạng tinh thể dẫn tới hằng số mạng tinh thể giảm. Ngoài ra, sự sai khác về độ âm điện của các nguyên tố đất hiếm Y (1,22), Nd (1,14), Sm (1,17) so với Bi (2,02) làm thay đổi độ dài liên kết giữa Bi/RE-O cũng dẫn tới sự thay đổi hàng số mạng tinh thể. Kết quả phân tích giản đồ nhiễu xạ tia X là bằng chứng cho thấy có sự thay thế của các nguyên tố đất hiếm vào vị trí Bi trong mạng tinh thể. Sự thay thế của ion đất hiếm vào vị trí ion Bi³⁺ sẽ làm thay đổi tính chất quang học và tính chất sắt từ của vật liệu. Điều này, sẽ được chúng tôi đề cập trong phần tiếp theo.



Hình 1. (a) Giản đồ nhiễu xạ tia X của các mẫu BFO, BYFO, BNFO, BSFO; (b) Hằng số mạng tinh thể của các mẫu BFO, BYFO, BNFO, BSFO

Để xác định ảnh hưởng của ion đất hiếm lên tính chất từ của vật liệu, chúng tôi tiến hành khảo sát chu trình điện trễ (M-H) của các mẫu chế tạo. Hình 2 là chu trình từ trễ của các mẫu BFO, BYFO, BNFO và BSFO đo ở nhiệt độ phòng với từ trường ngoài cực đại 11 kOe. Ta nhận thấy tất cả các mẫu thể hiện tính chất sắt từ yếu. Dựa vào kết quả đo M-H, chúng tôi xác định được từ độ bão hòa M_s, từ độ dư M_r và lực kháng từ H_c của tất cả các mẫu, kết quả chi trên Bảng 1. Quan sát Bảng 1, ta có thể thấy vật liệu BFO có từ

độ bão hòa $M_s = 0,046$ emu/g, từ độ dư $M_r = 0,007$ emu/g và lực kháng từ $H_c = 167$ Oe. Giá trị M_s , và M_r của các mẫu pha tạp ion đất hiếm được tăng cường hơn so với mẫu BFO. Với nồng độ pha tạp như nhau (5% mol), mẫu pha tạp ion Nd (BNFO) tính chất từ được cải thiện tốt nhất với $M_s = 0,147$ emu/g và $M_r = 0,010$ emu/g. Chúng tôi có thể lý giải điều này như sau: Như đã biết tính chất từ của vật liệu BFO có nguồn gốc từ tương tác siêu trao đổi giữa các điện tử lớp 3d của Fe và các nút khuyết ôxy. Khi các ion đất hiếm Y^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+} được thay thế vào vị trí ion Bi^{3+} khi nung mẫu ở nhiệt độ cao sẽ tạo ra các nút khuyết ôxy và các sai hỏng mạng dẫn tới cải thiện tính chất sắt từ của vật liệu. Mặt khác, sự thay thế ion Y^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+} vào vị trí ion Bi^{3+} làm xuất hiện tương tác siêu trao đổi giữa các electron lớp 4f của RE (RE) với các electron lớp 3d của Fe. Vì vậy, tính chất sắt từ của các mẫu pha tạp được tăng cường hơn so với mẫu nền BFO. Các nghiên cứu trước đây cũng chỉ ra rằng tương tác siêu trao đổi giữa các electron lớp 4f của nguyên tố đất hiếm RE và các electron lớp 3d của Fe giúp tăng cường tính chất sắt từ của vật liệu BFO pha tạp các nguyên tố đất hiếm RE (Chandra Sati, Kumar *et al.*, 2015; Thang, Nguyen *et al.*, 2020). Ngoài ra, sự sai khác về bán kính ion và độ âm điện của các nguyên tố đất hiếm so với Bi dẫn tới sự lấp không đầy ở hốc 12 mặt tạo bởi các bát diện FeO_6 . Vì vậy, có sự xoay các bát diện FeO_6 làm cho tương tác siêu trao đổi $Fe^{3+}-O^{2-}-Fe^{3+}$ mạnh hơn, tính chất sắt từ được tăng cường (Thang, Nguyen *et al.*, 2020; Xue, Tan *et al.*, 2014).

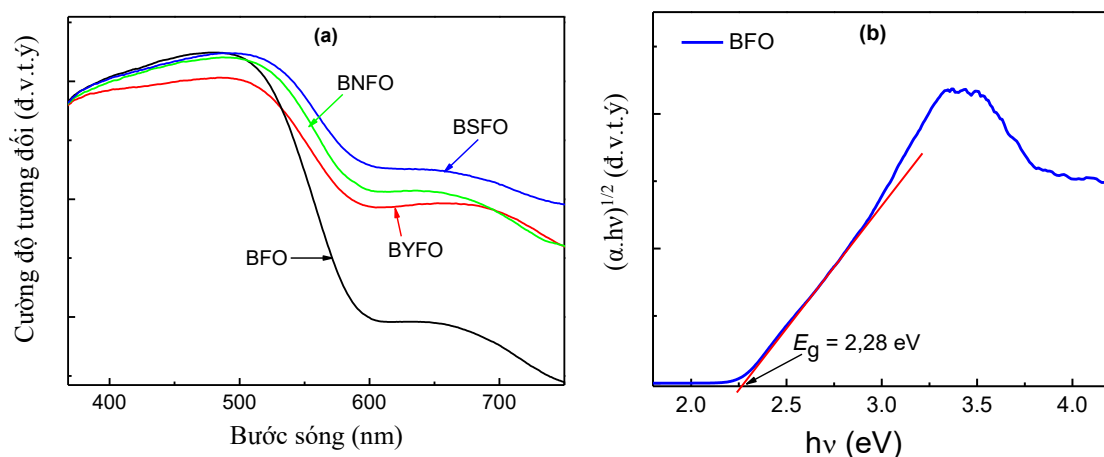


Hình 2. Chu trình từ trễ của các mẫu BFO, BYFO, BNFO và BSFO

Bảng 1. Từ độ bão hòa M_s , từ độ dư M_r và lực kháng từ H_c của các mẫu BFO, BYFO, BNFO và BSFO

Mẫu	M_s (emu/g)	M_r (emu/g)	H_c (Oe)
BFO	0,046	0,007	167
BYFO	0,098	0,012	586
BNFO	0,147	0,010	342
BSFO	0,103	0,026	310

Để xác định ảnh hưởng của các ion đất hiếm lên tính chất quang học khi pha tạp chúng vào vật liệu BFO, chúng tôi đã tiến hành đo phổ hấp thụ quang học trên hệ đo Jasco V670, trong khoảng bước sóng 230-750 nm. Hình 3a là phổ hấp thụ quang học của các mẫu BFO, BYFO, BNFO và BSFO. Ta nhận thấy phổ hấp thụ của các mẫu xuất hiện đỉnh hấp thụ ở vị trí bước sóng 500 nm, hai bờ hấp thụ ở vị trí bước sóng 500-600 nm và 650-750 nm. Trong đó, bờ hấp thụ ở vị trí bước sóng 500-600 nm có nguồn gốc từ chuyển dời điện tử từ trạng thái 2p của O trong vùng hóa trị lên trạng thái 3d của Fe trong vùng dẫn. Bờ hấp thụ ở vị trí bước sóng 650-750 nm liên quan tới chuyển dời điện tử từ mức năng lượng t_{2g} lên mức năng lượng e_g trong dải dẫn (He, Ma *et al.*, 2015). Điều này cũng phù hợp với nghiên cứu của Liu (Liu, Fan *et al.*, 2011) đã chỉ ra đóng góp phần lớn vào phổ hấp thụ là do điện tử chuyển từ trạng thái 2p của O lên trạng thái 3d ($t_{2g} e_g$) của Fe. Quan sát trên Hình 3a, ta có thể thấy rằng đỉnh hấp thụ, bờ hấp thụ và chân bờ hấp thụ của các mẫu pha tạp dịch về phía bước sóng lớn so với mẫu BFO. Để xác định độ rộng vùng cấm quang học của các mẫu, chúng tôi sử dụng phương pháp Wood Tauc biểu diễn $(\alpha \cdot hv)^{1/2}$ theo hv để tính độ rộng vùng cấm quang học của các mẫu (Thang, Nguyen *et al.*, 2020). Hình 3b minh họa cách xác định E_g của mẫu BFO, cách xác định E_g đối với các mẫu còn lại được làm tương tự. Kết quả cho thấy các mẫu BFO, BYFO, BNFO và BSFO có bề rộng vùng cấm quang học tương ứng là 2,28 eV, 2,14 eV, 2,10 eV và 2,05 eV.



Hình 3. (a) Phổ hấp thụ quang học của BFO, BYFO, BNFO, BSFO;
(b) Minh họa cách xác định bề rộng vùng cấm quang học của mẫu BFO

4. Kết luận

Trong báo cáo này, chúng tôi đã chế tạo thành công vật liệu BiFeO_3 , BiFeO_3 pha tạp 5% ion đất hiếm RE^{3+} ($\text{RE} = \text{Y}^{3+}$, Nd^{3+} , Sm^{3+}) bằng phương pháp sol-gel. Các mẫu chế tạo kết tinh đơn pha cấu trúc rhombohedral. Vật liệu BFO có hằng số mạng tinh thể $a = 5,585 \text{ \AA}$ và $c = 13,866 \text{ \AA}$, bề rộng vùng cấm quang học $E_g = 2,28 \text{ eV}$, vật liệu thể hiện tính chất sắt từ yếu với $M_s = 0,046 \text{ emu/g}$ và $M_r = 0,007 \text{ emu/g}$. Vật liệu BFO pha tạp các ion đất hiếm có hằng số mạng tinh thể a , c và bề rộng vùng cấm quang E_g giảm so với vật liệu BFO. Tính chất từ của vật liệu pha tạp đất hiếm Y^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+} được tăng cường so với mẫu BFO. Trong đó mẫu pha tạp ion Nd^{3+} (BNFO) cải thiện tính chất từ tốt nhất với M_s tăng gấp 3,20 lần so với mẫu BFO.

Lời cảm ơn

Báo cáo được hỗ trợ kinh phí từ đề tài Khoa học và Công nghệ cấp cơ sở của Trường Đại học Mở - Địa chất mã số T22-18.

Tài liệu tham khảo

- Chandra Sati, P., M. Kumar, and S. Chhoker, 2015. *Low temperature ferromagnetic ordering and dielectric properties of $\text{Bi}_{1-x}\text{Dy}_x\text{FeO}_3$ ceramics*. *Ceramics International* 41(2): 3227-3236.
- Eerenstein, W., N.D. Mathur, and J.F. Scott, 2006. *Multiferroic and magnetoelectric materials*. *Nature* 442: 759-765.
- He, C., Z.-J. Ma, B.-Z. Sun, R.-J. Sa, and K. Wu, 2015. *The electronic, optical and ferroelectric properties of BiFeO_3 during polarization reversal: A first principle study*. *J. of Alloy. Compd.* 623: 393-400.
- Iyyappa Rajan, P., S. Mahalakshmi, and S. Chandra, 2017. *Establishment of half-metallicity, ferrimagnetic ordering and double exchange interactions in Ni-doped BiFeO_3 – A first-principles study*. *Comp. Mater. Sci.* 130: 84-90.
- Khalid, A., M. Saleem, S. Naseem, S.M. Ramay, H.M. Shaikh, and S. Atiq, 2020. *Magneto-electric coupling and multifunctionality in BiFeO_3 - CoFe_2O_4 core-shell nano-composites*. *Ceram. Int.* 46(8): 12828-12836.
- Kim, A.Y., S.H. Han, H.W. Kang, H.G. Lee, J.S. Kim, and C.I. Cheon, 2012. *Dielectric and magnetic properties of BiFeO_3 ceramics prepared by hydrothermal synthesis*. *Ceram. Int.* 38: S397-S401.
- Li, X., Z. Zhu, X. Yin, F. Wang, W. Gu, Z. Fu, and Y. Lu, 2016. *Enhanced magnetism and light absorption of Eu-doped BiFeO_3* . *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 27(7): 7079-7083.
- Liu, K., H. Fan, P. Ren, and C. Yang, 2011. *Structural, electronic and optical properties of BiFeO_3 studied by first-principles*. *J. Alloy. Compd.* 509(5): 1901-1905.
- Mansour, S.F., N.G. Imam, S. Goda, and M.A. Abdo, 2020. *Constructive coupling between BiFeO_3 and CoFe_2O_4 ; promising magnetic and dielectric properties*. *Journal of Materials Research and Technology* 9(2): 1434-1446.
- Schmid, H., 1994. *Multiferroic Magnetoelectrics*. *Ferroelectrics* 162: 317-338.
- Srinivas, V., A.T. Raghavender, and K.V. Kumar, 2016. *Structural and Magnetic Properties of Mn*

Doped BiFeO₃ Nanomaterials. Physics Research International 2016: 1-5.

Thang, D.V., N.M. Hung, N.P. Thao, N.C. Khang, L.T.M. Oanh, N.T.C. Linh, and B.D. Tu, 2022. *Effect of Eu Doping on Structural, Optical and Magnetic Properties of BiFeO₃ Materials*. VNU Journal of Science: Mathematics – Physics 38(1): 58-64.

Thang, D.V., V.Q. Nguyen, N.M. Hung, L.T.M. Oanh, N.C. Khang, B.D. Tu, D.T.X. Thao, and N. Van Minh, 2020. *Structural, Optical, Ferroelectric and Ferromagnetic Properties of Bi_{1-x}Gd_xFeO₃ Materials*. Journal of Electronic Materials 49(7): 4443-4449.

Wang, Q.Q., C.C. Wang, N. Zhang, H. Wang, Y.D. Li, Q.J. Li, S.G. Huang, Y. Yu, Y.M. Guo, and Z.Q. Lin, 2018. *Dielectric relaxations in pure, La-doped, and (La, Co)-codoped BiFeO₃ : Post-sintering annealing studies*. Journal of Alloys and Compounds 745: 401-408.

Xue, X., G. Tan, G. Dong, W. Liu, and H. Ren, 2014. *Studies on structural, electrical and optical properties of multiferroic (Ag, Ni and In) codoped Bi_{0.9}Nd_{0.1}FeO₃ thin films*. Appl. Surf. Sci. 292: 702-709.

ABSTRACT

Effect of rare earth ions (Y³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺) on crystal structure, optical and magnetic properties of BiFeO₃ materials

Dao Viet Thang*, Nguyen Manh Hung, Ho Quynh Anh, and Nguyen Thi Dieu Thu
Hanoi University of Mining and Geology

BiFeO₃ (BFO), BiFeO₃ doped 5% molar of rare earth ions RE³⁺ (Y³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺) were synthesized by a sol-gel method. The crystal structure, ferromagnetic and optical properties of the samples were investigated by different techniques such as X-ray diffraction pattern (XRD), optical absorption spectra UV-vis, and magnetic hysteresis loops (*M-H*). The XRD results show the single-phase crystalline of all the samples in the rhombohedral structure belonging to the *R_{3c}* space group. Lattice parameters of BFO are *a* = 5.585 Å, *c* = 13.866 Å. The BiFeO₃ doped 5% molar of RE³⁺ ions the lattice parameters of *a* and *c* both decreased compared with those of BFO. The optical band gap of BFO material is *E_g* = 2.28 eV. The value band gap of BFO materials doped ions RE³⁺ decreases compared with that of BFO materials. The BFO materials exhibit simultaneously weak ferromagnetic and ferroelectric properties with saturation magnetization *M_s* = 0.046 emu/g, remnant magnetization *M_r* = 0.007 emu/g. The ferromagnetic of the BFO doped materials are improved better than that of the BFO materials. In this report, we will discuss the origin of the ferromagnetic, and optical properties of materials.

Keywords: BiFeO₃, BiFeO₃ doped (Y³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺), XRD, *M-H*, optical absorption