

Research Paper

Investigation of the Optical Properties of Yttrium Oxide by DFT¹

Hamdollah Salehi*², Hojatollah Badehian³

Received: 2019.10.31

Accepted: 2020.01.25

Abstract

Optical properties of the yttrium oxide, such as the dielectric function, refractive index and electron energy loss spectroscopy (EELS), are studied. Calculations are done by full-potential augmented plane waves (FP-LAPW) in density functional theory (DFT) framework by Wien2k package. According to EELS curve, the plasmon energy is estimated about 13eV. The obtained static refractive index is 1.92. In addition, optical conductivity diagrams show that due to the band gap at 4 eV, it is not able to excite the conduction band. The results are in good agreement with that of other theoretical and experimental works.

Keywords: *Refractive Index, DFT, Electron Energy Loss Spectroscopy, Y₂O₃.*

¹ DOI: 10.22051/jap.2020.28974.1136

² Associate Professor, *Department of Physics, Faculty of Science*, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. (Corresponding Author). Email: salehi_h@scu.ac.ir

³ MSc in Physics, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. (Corresponding Author). Email: hbadehian@gmail.com

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا
سال نهم، پیاپی ۱۹، زمستان ۱۳۹۸

مقاله پژوهشی

بررسی خواص اپتیکی اکسید ایتیریم با استفاده از نظریه تابعی چگالی^۱

حمدالله صالحی*^۲، حجت‌الله بادیه‌یان^۳

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۰۸/۰۹

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۱۱/۰۵

چکیده

در این مقاله برخی ویژگی‌های اپتیکی از قبیل تابع اتلاف انرژی الکترون و تابع دی‌الکتریک بلور ترکیب Y_2O_3 بررسی و محاسبه شده است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی Wien2k صورت گرفته است. با توجه به منحنی تابع اتلاف انرژی (EELS)، انرژی پلاسما در حدود ۱۳eV محاسبه شد. ضریب شکست ایستایی ۱,۹۲ به دست آمد، که سازگاری خوبی با نتایج دیگران دارد. علاوه بر این، نمودار رسانندگی اپتیکی نشان داد به دلیل وجود شکاف نواری، در انرژی ۴ الکترون‌ولت توانایی برانگیختگی به تراز رسانش را ندارد.

واژگان کلیدی: Y_2O_3 ، نظریه تابعی چگالی، ضریب شکست، تابع اتلاف

انرژی

^۱ DOI: 10.22051/jap.2020.28974.1136

^۲ دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول).

salehi_h@scu.ac.ir

^۳ دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

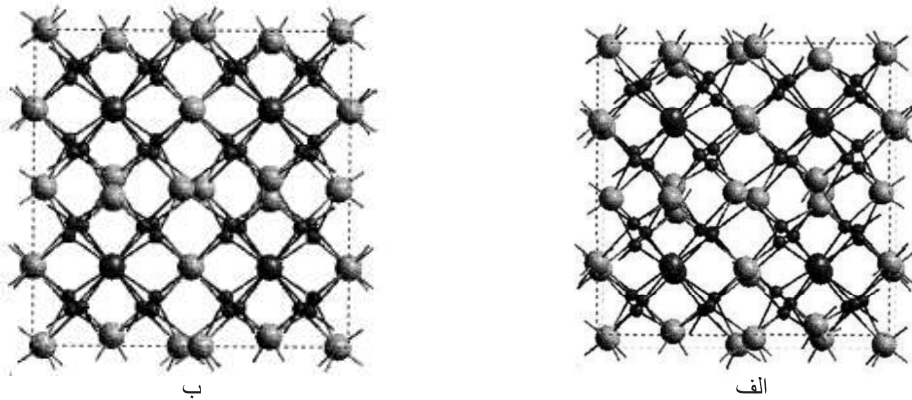
hbadehian@gmail.com

۱. مقدمه

اکسید ایتیریم را در سال ۱۷۹۴، جوهان گادولینا در فنلاند کشف کرد. همچنین، فردریک وهلر توانست این عنصر را به صورت ناخالص از احیای کلرید بی آب آن با پتاسیم به دست آورد. این ترکیب در ساخت فسفر قرمز برای لوله‌های تصویری تلویزیون رنگی استفاده می‌شود. اکسید ایتیریم با فرمول ملکولی Y_2O_3 یک ماده مهم فسفوری با پایه اکسید است، که به عنوان ماده‌ای میزبان در لیزرهای تزریقی خاک‌های کمیاب به کار می‌رود. علاوه بر این، به علت داشتن نقطه ذوب بالا به صورت گسترده در ساخت سرامیک و شیشه استفاده می‌شود [۱]. اخیراً، اکسید ایتیریم به عنوان جایگزینی مطلوب برای دی اکسید سیلیکون (SiO_2) به عنوان یک ماده گیت دی‌الکتریک در ترانزیستورهای اکسید فلزی (MOS) توجه زیادی را به خود جلب کرده است و به عنوان عایقی با شکاف نواری پهن در الکترونیک و مطالعات فیزیک نظری جایگاه خاصی دارد [۲]. این ماده دارای ساختار مکعبی با گروه فضایی $(No.206) (T_h^7-32)$ ، دمای ذوب ۲۴۲۵ درجه سلسیوس، دمای جوش ۴۳۰۰ درجه سلسیوس و ثابت شبکه $a=10/604A^0$ است [۳]. این ترکیب در وسایل الکترونیکی عایق از قبیل لیزرهای تزریقی دیودی و تکنولوژی لیزرهای اپتیکی و ماشین‌های ظریف کاربرد دارد [۴]. اکسید ایتیریم یکی از مهمترین اکسیدهای دوتایی است و یک فاز شناخته شده دارد [۵]. کارهای تجربی مختلف و تعداد کارهای نظری محدودی بر این ترکیب انجام شده است، که در ادامه برخی از آن‌ها را بیان می‌کنیم.

در سال ۱۹۹۷، یانگ و همکاران ویژگی‌های ساختاری و الکترونی و اپتیکی ترکیب اکسید ایتیریم را با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل و تقریب چگالی موضعی محاسبه و مقدار تابع دی‌الکتریک را در بسامد صفر ۳,۲۰ محاسبه کردند [۶]. در سال ۲۰۱۳، رمضان و همکاران ویژگی‌های مکانیکی و الکترونی و اپتیکی این ترکیب را با استفاده از نظریه تابعی چگالی محاسبه کردند [۷]. در همین سال، صالحی و همکاران ویژگی‌های ساختاری، کشسانی، الکترونی و غیره این ترکیب را با استفاده از محاسبات ابتدایه ساکن به دست آوردند [۸]. بابو و همکاران در سال ۲۰۱۶ ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی آن را با استفاده از اصول اولیه و روش ترکیب خطی اربیتال‌های اتمی محاسبه کردند که نتایج آن‌ها با دیگر داده‌های موجود سازگاری داشت [۹] (برای اطلاعات بیشتر می‌توان به مراجع [۱۰-۱۳] مراجعه کرد).

در این مقاله قصد داریم ویژگی اپتیکی اکسید ایتیریم از جمله ضریب شکست ایستایی، رسانندگی اپتیکی، تابع اتلاف و برخی دیگر از ویژگی‌های این ترکیب را به دست آوریم. شکل ۱ ساختار Y_2O_3 را برای این ترکیب نشان می‌دهد [۱۴].



شکل ۱ ساختار یاخته واحد ترکیب Y_2O_3 . (الف) در امتداد جهت $[001]$ و (ب) در جهت کمی منحرف شده از $[001]$ ، دایره‌های روشن و بزرگ Y و دایره‌های سیاه و کوچک O را نشان می‌دهند [۳].

۲. روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش FP-LAPW و تقریب‌های مختلف شیب تعمیم‌یافته و چگالی موضعی در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام گرفته است. استفاده از نظریه تابعی چگالی راه حل مناسبی برای حل معادله شرودینگر است. شعاع‌های مافین-تین برای اتم‌های تشکیل‌دهنده این ترکیب به صورت $R_{MT}(Y) = 2.0bohr$ و $R_{MT}(O) = 1.9bohr$ و با توجه به شعاع کره اتمی و طول پیوندها انتخاب شده‌اند. برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه، انرژی ۶- ریدبرگ را انتخاب و در اجرای برنامه همگرایی انرژی را مدنظر قرار دادیم که با اختلاف انرژی ۰/۰۰۰۰۳۱ ریدبرگ به همگرایی رسیدیم. این انرژی جداسازی با توجه به آرایش الکترونی و پیکربندی ترکیب در مورد الکترون‌های ظرفیت و مغزه و شبه مغزه انتخاب شده است. برای این همگرایی ۸۱۶۰ موج تخت تولید شده است. تعداد نقاط در نظر گرفته شده ۳۰۰ نقطه بود که به ازای آن یک شبکه (k-mesh) $6 \times 6 \times 6$ ایجاد شده است. پارامتر همگرایی RK_{max} را برابر با ۷ انتخاب کردیم که این پارامتر تعداد پایه‌ها را در محاسبات تنظیم می‌کند. ثابت شبکه تجربی $10/604 \text{ \AA}$ است که در محاسبات از آن استفاده می‌کنیم [۱۵]. در تجزیه و تحلیل نتایج و جفت‌وجور کردن آن‌ها با خواص اپتیکی مختلط از تبدیلات کرامرز-کرونیگ (KK) استفاده می‌کنیم. تبدیلات کرامرز-کرونیگ به ما این امکان را می‌دهد که سهم حقیقی تابع پاسخ نوری را با علم به سهم موهومی در تمام بسامدها و بالعکس تعیین کنیم.

۳. نتایج

الف. تابع دی الکتریک

خواص اپتیکی مواد زمینه‌ای مناسب برای مطالعه ساختار نواری و برانگیختگی‌ها و نوسانات شبکه در اختیار ما قرار می‌دهد. برای دست‌یابی به خواص اپتیکی ماده جامد لازم است رفتار ثابت‌های اپتیکی مختلف بر حسب انرژی تابش بررسی شود. یکی از مهمترین ثابت‌های اپتیکی تابع دی الکتریک مختلط است. این تابع نقطه شروع مناسبی برای دست‌یابی به سایر خواص اپتیکی است. تابع دی الکتریک گاز الکترونی، $\epsilon(\omega, k)$ ، که در آن وابستگی به بسامد و بردار موج قوی است، پیامدهای چشمگیری در زمینه ویژگی‌های فیزیکی جامدات در بر دارد. این تابع برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار می‌رود. تابع دی الکتریک به شیوه حساسی به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد و دانستن آن، با استفاده از طیف نمایی اپتیکی در تعیین ساختار نواری کلی بلور بسیار سودمند است. خواص اپتیکی هر ماده را می‌توان با تابع دی الکتریک مختلط $\epsilon(\omega)$ توصیف کرد و آن را می‌توان به صورت زیر نوشت [۸، ۱۵-۱۷]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

که در آن، $\epsilon_1(\omega)$ سهم حقیقی و $\epsilon_2(\omega)$ سهم موهومی تابع دی الکتریک است. در این محاسبات از اثرهای برانگیختگی صرف‌نظر کرده‌ایم، اما اثر میدان موضعی را در نظر گرفته‌ایم. سهم درون‌نواری سهم موهومی تابع دی الکتریک با در نظر گرفتن تمام گذارهای ممکن از حالت‌های اشغال شده به اشغال نشده را محاسبه می‌کند. ماهیت مکعبی Y_2O_3 سبب تولید یک تانسور دی الکتریک قطری و همگن می‌شود. سهم موهومی تابع دی الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ با رابطه زیر بیان می‌شود [۱۸]:

$$\epsilon_2(\omega) = \left(\frac{4p^2 e^2}{m^2 \omega^2}\right) \sum_{i,j} \langle i | M | j \rangle^2 f_i (1 - f_j) \delta(E_j - E_i - \omega) d^3k \quad (2)$$

که در آن، M ماتریس دوقطبی، i و j به ترتیب حالت‌های اولیه و نهایی، f_i تابع توزیع فرمی برای حالت i ام و E_i انرژی الکترون در حالت i ام می‌باشند. سهم حقیقی $\epsilon_1(\omega)$ تابع دی الکتریک از سهم موهومی با استفاده از رابطه کرامرز-کرونینگ به دست می‌آید [۱۹]:

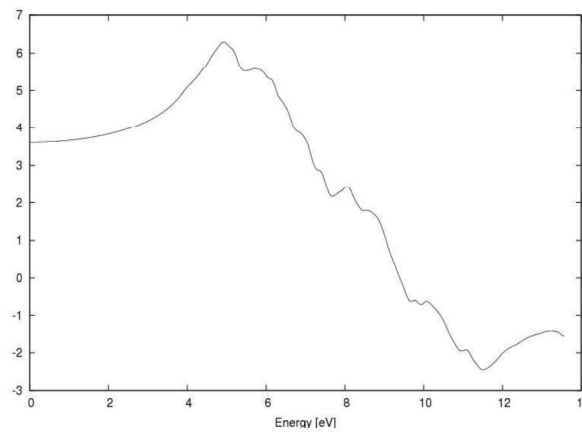
$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{p} P \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega') d\omega'}{(\omega'^2 - \omega^2)} \quad (3)$$

که در آن، p مقدار اصلی انتگرال است. ثابت‌های اپتیکی دیگر مانند ضریب شکست و ضریب خاموشی را می‌شود بر حسب سهم‌های موهومی و حقیقی تابع دی الکتریک مختلط بیان کرد. رابطه ضریب شکست با تابع دی الکتریک به صورت زیر است،

$$e_1(w) = n^2(w) - k^2(w) \quad (4)$$

$$e_2(w) = 2n(w)k(w)$$

که در آن، $e_1(w)$ سهم حقیقی و $e_2(w)$ سهم موهومی تابع دی الکتریک است. سهم حقیقی تابع دی الکتریک محاسبه و در بازه صفر تا ۱۴ الکترون ولت در شکل (۲) آمده است، که مشابه نمودار موجود در مرجع [۸] است. برای تابع $e_1(w)$ ، یک قله اصلی در انرژی حدود ۵ الکترون ولت مشاهده می شود. پس از آن تابع با شیب منفی کاهش می یابد و در انرژی حدود ۱۱٫۸ الکترون ولت کمینه می شود.



شکل ۲ نمودار سهم حقیقی تابع دی الکتریک اکسید ایتربیم، $e_1(w)$.

محاسبات به انرژی فوتون کمتر از 20 eV محدود شده است. ممکن است در بیشتر از 20 eV گذار از ترازهای شبه مغزه $4p - Y$ اهمیت داشته باشند. توابع دی الکتریک به دست آمده با اندازه گیری فرابنفش خلأ توسط Tomiki [۱۱] از بلور Y_2O_3 در تطابق کامل است. آستانه جذب تجربی $5/5 \text{ eV}$ در مقایسه با لبه جذب محاسبه شده، 5 eV ، نتیجه خوبی است. این احتمالاً بدان معناست که گذار درون نواری مستقیم بین بالای نوار ظرفیت و نوار رسانش در نقطه Γ ممنوع است. همچنین، در ناحیه ای که $e_1(w)$ منفی است، امواج منتشر نمی شوند و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می گیرد که در این نمودار از انرژی ۹ الکترون ولت به بالاست.

ضریب شکست پارامتر فیزیکی مهمی است که وابسته به اثر متقابل میکروسکوپیکی اتمی است و از $e_1(w)$ در شکل ۲ مشاهده می شود که سهم حقیقی ثابت دی الکتریک ایستایی در بسامد صفر حدود $3/7$ است. در نتیجه، ضریب شکست ایستایی آن برابر $1/92$ می شود، که

سازگاری خوبی با مقادیر به دست آمده توسط دیگران دارد. ضریب شکست ایستایی از رابطه زیر به دست می آید،

$$n = \sqrt{\epsilon(0)} = \sqrt{3.7} = 1.92$$

همچنین، ریشه های $\epsilon_1(\omega)$ مفهوم فیزیکی دارند و در واقع شرط لازم برای پلاسمون های حجمی در ماده هستند ولی شرط کافی برای آن ها، وجود اتلاف انرژی است. در جدول ۱، مقادیر ضریب شکست محاسبه شده در کار حاضر با کار دیگران جهت مقایسه آورده شده است. نتایج موجود در این جدول نشان می دهد که تقریب GGA96¹ سازگاری بهتری با تجربه دارد.

جدول ۱ ضریب شکست محاسبه شده در تقریب های مختلف.

کار حاضر			کار دیگران			
نوع تقریب	GGA96	GGA91	LDA	تجربی	نظری	نظری
ضریب شکست	۱/۹۲	۱/۹۶	۲/۰۱	[۲۱]۱/۸۷	[۲۰]۱/۹	۱/۷۹[۶]
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۲/۶۷	۴/۸	۷/۴	-	۱	۴/۳

ب. رسانندگی اپتیکی

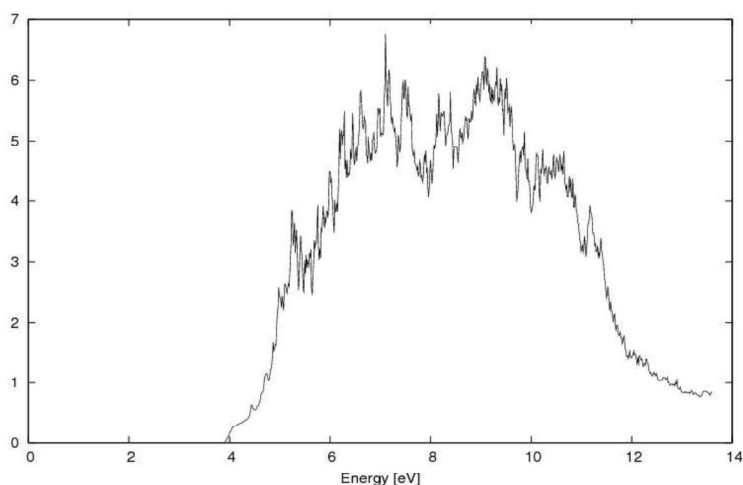
رسانندگی اپتیکی درون نواری وابسته به بسامد، $S(\omega)$ ، بر اساس زیر محاسبه می شود [۲۱]،

$$s(\hbar\omega) = \frac{e^2}{(2p)^2 m \hbar \omega} \sum_{n,m} \int_{\Gamma} dk \left| \langle y_m(k, \Gamma) | p | y_n(k, \Gamma) \rangle \right|^2 \frac{f_n(k) [1 - f_m(k)]}{E_m(k) - E_n(k) - \hbar\omega} \quad (5)$$

که در آن، $y_m(k, \Gamma)$ تابع بلاخ برای m امین نوار در $k, \hbar\omega$ انرژی فوتون و f تابع فرمی حالت n ام است. عناصر ماتریس اپتیکی در هر نقطه k با استفاده از توابع موج ابتدایه ساکن محاسبه می شود. انتگرال بر منطقه بریلوئن با روش تحلیلی تراهرون خطی انجام می شود. از $S(\omega)$ سهم موهمی تابع دی الکتریک $\epsilon_2(\omega) = (4p / \omega) s(\omega)$ به دست می آید. رسانندگی اپتیکی اکسید ایتیریم محاسبه و در شکل (۳) نشان داده شده است.

¹ Generalized gradient approximation

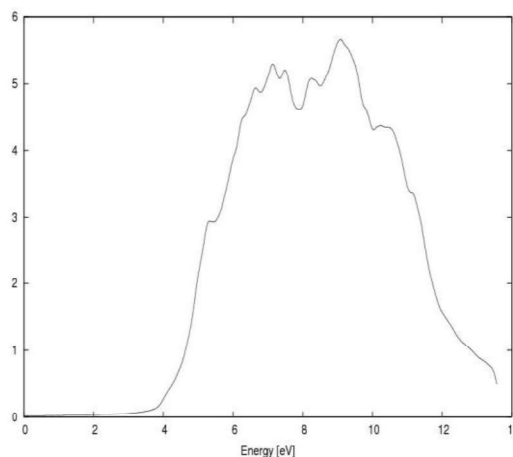
با توجه به این شکل مشاهده می شود که رسانندگی اپتیکی در انرژی ۷ الکترون ولت به مقدار بیشینه خود می رسد که این قله به سبب گذار الکترون از حالت های اشغال شده در زیر تراز فرمی به اولین قله حالت های اشغال نشده در نوار رسانش است. همچنین، رسانندگی اپتیکی گذارهای بین نواری را نشان می دهد که یک مقدار آستانه دارد و مقدار آن برابر شکاف نواری است. از بررسی نمودار رسانندگی اپتیکی در شکل ۳ متوجه می شویم که به دلیل وجود شکاف نواری در این ترکیب، در انرژی کمتر از ۴ الکترون ولت توانایی برانگیختگی به نوارهای رسانش را ندارد، ولی اگر انرژی فوتون فرودی از این مقدار بیشتر شود، برانگیختگی هایی به حالت های اشغال نشده نوار رسانش مشاهده می شود. با افزایش انرژی فوتون فرودی، ابتدا رسانندگی افزایش و سپس کاهش و دوباره افزایش می یابد که نشان دهنده لبه های جذب است.



شکل ۳ رسانندگی اپتیکی اکسید ایتیریم، $S(\omega)$.

از طرفی، در شکل ۴ سهم موهومی تابع دی الکتریک آورده شده است که با استفاده از آن می توان ضریب خاموشی اکسید ایتیریم را با استفاده از رابطه ۴ محاسبه کرد. در بسامد صفر، ضریب خاموشی اکسید ایتیریم برابر با ۰/۴۱ است، که مقدار تجربی آن وجود ندارد تا مقایسه کنیم. علاوه بر این، ضریب خاموشی برای یک ماده ویژه، سنجشی از میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. اگر موج الکترومغناطیسی به آسانی از داخل ماده عبور کند، ماده ضریب خاموشی کوچکی دارد. برعکس، اگر پرتو به سختی داخل ماده نفوذ کند، ماده ضریب خاموشی بزرگی دارد، که با توجه به مقدار کم آن بیانگر عبور آسان موج از ترکیب اکسید ایتیریم است. در این

شکل مشاهده می‌کنیم، که سهم موهومی تا قبل از انرژی ۲/۵ الکترون‌ولت تغییراتی آرام دارد، که ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی است که سبب تولید گذارهای درون نواری می‌شوند، اما بعد از انرژی ۲/۵ الکترون‌ولت سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان‌نواری رخ می‌دهد. با توجه به این شکل مشاهده می‌شود که شکاف اپتیکی این سامانه در فشار صفر حدود ۲/۵ الکترون‌ولت است.



شکل ۴ نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک اکسید ایتیریم، $\epsilon_2(\omega)$.

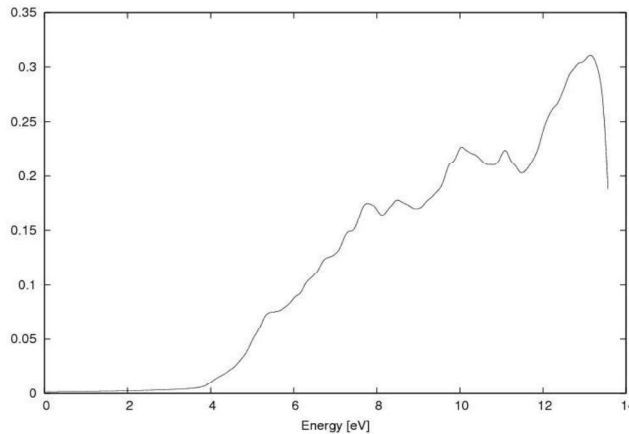
ج. تابع اتلاف انرژی

تابع اتلاف معکوس سهم موهومی تابع دی‌الکتریک است. بلندترین قله در طیف اتلاف، قله پلاسمونی و بسامد منطبق با آن بسامد پلاسما نامیده می‌شود. در واقع این قله نشان‌دهنده تحریک دسته جمعی الکترون‌های نوار ظرفیت به نوار رسانش است. اسپکتروسکوپی اتلاف انرژی الکترون روش قدرتمندی در تجزیه و تحلیل حالت‌های اشغال‌شده بالای تراز فرمی یا تفکیک جزئی زیرنومتر است. این طیف دربردارنده تحریک دسته جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون‌ها) به داخل حالت‌های اشغال‌شده در نوار ظرفیت است. رابطه بین تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی، (EELS (Electron energy loss spectroscopy)، به صورت زیر وجود دارد،

$$\text{EELS}(\omega) = \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\epsilon(\omega - \omega')} d\omega' = \frac{\epsilon''}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (6)$$

تابع اتلاف انرژی برای Y_2O_3 در فاز مکعبی در شکل ۵ رسم شده است. مطابق این شکل، اتلاف انرژی از انرژی‌های ۲ eV شروع و در انرژی ۱۳ eV بیشترین اتلاف انرژی را مشاهده می‌کنیم که

در واقع همان انرژی مربوط به پلاسماهای حجمی است. در انرژی‌های بیشتر از آن به صفر می‌رسد که در شکل ۵ نشان داده شده است. اولین قله در ۸ و دومین قله در ۱۰ الکترون‌ولت دیده می‌شود. انرژی بیشینه اصلی برابر ۱۳ eV است.



شکل ۵ تابع انرژی اتلاف Y_2O_3 .

۴. نتیجه گیری

در این مقاله محاسبات با استفاده از روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. آستانه جذب محاسبه شده ۵ eV است و مشاهده می‌کنیم که گذار درون‌نواری مستقیم بین بالای نوار ظرفیت و نوار رسانش در نقطه Γ ممنوع است. همچنین، با توجه به تابع اتلاف، انرژی پلاسما حدود ۱۳ eV محاسبه شده است. ضریب شکست ایستایی در فاز مکعبی Y_2O_3 ، ۱٫۹۲ محاسبه شده است که سازگاری خوبی با نتایج دیگران دارد.

نمودار رسانندگی اپتیکی نشان می‌دهد که به دلیل وجود شکاف نواری در ترکیب، در انرژی کمتر از ۴ الکترون‌ولت توانایی برانگیختگی به نوارهای رسانش را ندارد.

منابع

- [1] Jollet F., Noguera C., Thromat N., Gautier M. and Duraud J. -P., *Phys. Rev. B* **42** (12), 7587-7595 (1990).
- [2] Zheng J.X., Ceder G., Masich T., Chim W.K. and Choi W.K. "Native point defects in yttria as a high-dielectric-constant gate oxide material: a first-principle study", *Phys. Rev. B* **73**, 104101 (2006).
- [3] Jollet F., Noguera C., Gautier M., Thromat N., and Duraud J.P., *Ceram. Soc.*, **74**(2), 358-364 (1991).

- [4] Mueller D. R., Ederer D. L., VanEk J., L.Obrien W., Dong Q. Y., Jia J. J., and Callcott T. A., *Phys. Rev. B* **54**(21), 15034-15039(1996).
- [5] Ching W.Y., Ouyang L. and Xu Y.N., "Electronic and optical properties of Y_2SiO_5 and $Y_2Si_2O_7$ with comparisons to alfa- SiO_2 and Y_2O_3 ", *Phys. Rev. B* **67** 245108-8 (2003).
- [6] Xu Yong-Nian, Gu Zhong-quan, and Ching W. Y., Electronic, structural, and optical properties of crystalline yttria, *Phys. Rev. B* **56** 14993(1997).
- [7] Ramzan M., Li Y., Chimata R, and Ahuja R., "Electronic, mechanical and optical properties of Y_2O_3 with hybrid density functional (HSE06)", *Computational Materials Science* **71** 19-24 (2013).
- [8] Bادهیان H., Salehi H. and Ghoohestani M., "First-principles study of elastic, structural, electronic, thermodynamical and optical properties of yttria (Y_2O_3) ceramic in cubic phase", *Journal of the American Ceramic Society*, 1-9 (2013).
- [9] Ahuja B. L., Sharma S., Heda N. L., Tiwari S., Kumar K., Meena B. S. and Bhatt S., "Electronic and optical properties of ceramic Sc_2O_3 and Y_2O_3 : Compton spectroscopy and first principles calculations", *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **92** 53-63 (2016).
- [10] Zhu P., Wang W. *et al.*, "Optical properties of Eu^{+3} -Doped Y_2O_3 Nanotubes and Nanosheets synthesized by hydrothermal method", *IEEE Photonics Journal* **10** 4500210 (2018).
- [11] Saddeek Y. B., Aly K., Abbady Gh., Afify N., Shaaban K. H. S. and Dahshan A., "Optical and structural evaluation of bismuth alumina-borate glasses doped with different amounts of (Y_2O_3)", *Journal of Non-Crystalline Solids* **454** 13-18 (2016).
- [12] Xiaoyi S. and Yuchun Z., "Preparation and optical properties of Y_2O_3 / SiO_2 Powder", *Rare Metals* **30** 33-38 (2011).
- [13] Tessari G., Bettinelli M., Speghini A. *et al.*, "Synthesis and optical properties of nanosized powders: lanthanide-doped Y_2O_3 ", *Applied Surface Science*, 144-145, 686-689 (1999).
- [14] Blaha P., Schwarz K., *Wien2k*, Vienna university of technology, Austria (2010).
- [15] Toll J. S., "Causality and the Dispersion Relation: Logical Foundations", *Phys. Rev.* **104** 1760(1956).
- [16] Landau L. D., Lifshitz E. M., *Electrodynamics in Continuous Media*, Pergamon Press, Oxford, (1960).
- [17] Kramers H. A., *Collected Science Papers*, North Holland, Amsterdam (1956).
- [18] Puschnig P. and Ambrosch-Draxl C., "Optical absorption spectra of semiconductors and insulators including electron-hole correlations: An ab-initio study within the LAPW method", *Phys. Rev. B* **66** 165105-1-9(2002).
- [19] Yu P. and Cardona M., *Contains problems to whose solution the student is carefully guided; Physical and intuitive approach enhance understanding; Includes extensive tables of material properties*, Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties, Springer-Verlag, Berlin (1999).
- [20] Tomiki T., Tamashiro J., Tanahara Y., Yamada A., Fukutani H., Miyahara T., Kato H., Shin S., and Ishigame M., *J. Vac. Sci. Technol. B* **55** 4543(1986).
- [21] Thromat N., Noguera C., Gautier M., Jollet F., and Duraud J. P., "Electronic structure and atomic arrangement around Zr substituted for Y in Y_2O_3 ", *Phys. Rev. B* **44** 7904-7911 (1991).