

取向对铁酸铋薄膜漏电机制和光伏性能的影响

于笑妍¹, 魏一², 李昊阳¹, 张萌¹, 李奕瑄¹, 高洁¹, 张宪贵¹, 宋建民¹, 曾浩宇^{1*}

¹河北农业大学理学院, 河北 保定

²河北工程大学医学院, 河北 邯郸

收稿日期: 2022年3月21日; 录用日期: 2022年5月5日; 发布日期: 2022年5月12日

摘要

本文通过偏轴磁控溅射法, 以不同取向钛酸锶SrTiO₃ (STO)单晶基片为衬底, 钆锶钴氧La_{0.5}Sr_{0.5}CoO₃ (LSCO)为底电极, 铁酸铋BiFeO₃ (BFO)为铁电介质, 构架了Pt/BFO/LSCO/STO异质结电容器。XRD结果显示不同取向的BFO薄膜均为外延结构。研究了不同取向Pt/BFO/LSCO异质结的漏电机制和光伏性能。J-V数据拟合表明, Pt/BFO/LSCO漏电流大小依赖于BFO薄膜取向, 满足(001)J > (110)J > (111)J 规律。不同取向Pt/BFO/LSCO异质结的导电机制均为: 低电场欧姆导电和高电场肖特基导电。通过铁电光伏系统对Pt/BFO/LSCO异质结的光伏性能进行了测量, 结果表明开路电压V_{oc}和短路电流J_{sc}强烈依赖于BFO薄膜取向, (111)取向最大、(110)取向次之、(001)取向最小。

关键词

铁酸铋, 异质结, 偏轴磁控溅射法, 漏电流机制, 铁电光伏效应

Effect of Orientation on Leakage Mechanism and Photovoltaic Properties in Bismuth Ferrite Thin Films

Xiaoyan Yu¹, Yi Wei², Haoyang Li¹, Meng Zhang¹, Yixuan Li¹, Jie Gao¹, Xiangui Zhang¹, Jianmin Song¹, Haoyu Zeng^{1*}

¹College of Science, Hebei Agricultural University, Baoding Hebei

²Medical College of Hebei Engineering University, Handan Hebei

Received: Mar. 21st, 2022; accepted: May 5th, 2022; published: May 12th, 2022

*通讯作者。

文章引用: 于笑妍, 魏一, 李昊阳, 张萌, 李奕瑄, 高洁, 张宪贵, 宋建民, 曾浩宇. 取向对铁酸铋薄膜漏电机制和光伏性能的影响[J]. 纳米技术, 2022, 12(2): 41-48. DOI: 10.12677/nat.2022.122006

Abstract

The Pt/BFO/LSCO/STO heterojunction capacitor were fabricated on three oriented SrTiO_3 (STO) single crystal substrates by off-axis RF magnetron sputtering, $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ (LSCO) as bottle electrode and BiFeO_3 (BFO) film as ferroelectric medium. XRD results show that BFO films with different orientations are epitaxial. The leakage mechanism and photovoltaic performance of Pt/BFO/LSCO heterostructure are studied. The fitting of J-V data shows that the leakage current of Pt/BFO/LSCO depends on the orientation of BFO films, which satisfies the rule of $(001)J > (110)J > (111)J$. The conduction mechanisms of Pt/BFO/LSCO heterostructure with different orientations are: low electric field ohmic conduction and high electric field Schottky conduction. The photovoltaic characteristics of Pt/BFO/LSCO heterostructure are characterized by ferroelectric photovoltaic system. The results show that the V_{oc} and J_{sc} strongly depend on the orientation of BFO film, with (111) orientation the largest, (110) the second and (001) the smallest.

Keywords

Bismuth Ferrite, Heterostructure, Off Axis Magnetron Sputtering, Leakage Current Mechanism, Ferroelectric Photovoltaic Effect

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

清洁、可再生的太阳能是现代能源生产过程中取代化石燃料的重要资源。光伏发电是利用太阳能的一种主要形式，其原理是利用光生伏特效应将入射光子转换成载流子，直接获取太阳能，从而产生电能的过程。然而传统的光伏器件受到内建电场大小的限制，光电转换效率不高，所产生的光生电压已经远远不能满足人们现在的需求[1]。

半世纪前，人们在铁电材料中发现了一种奇特的现象，并称其为光伏效应，由于铁电材料没有中心对称性，因此可以产生稳定的光伏响应，而且光伏效应产生原理与传统的 p-n 结有很大差距，它的光伏特性与禁带宽度(E_g)无关，我们能通过多方面来控制材料的光伏效应，从而使其在铁电光伏电池、光传感器、光驱动器等方面具有宽阔的发展前景[2]。铁电材料具有非中心对称结构，这种晶体可以发生自发极化，在一定条件下，施加不同方向电场，材料内部自发极化的偶极距方向也会随之改变，并且当电场消失后仍存在剩余极化[3]。铁电材料中 BiFeO_3 ，由于其在室温下表现出铁电和磁电有序的共存，从而产生了所需的磁电效应，因此得到了广泛的研究[4]。迄今为止，很多铁电材料如铌酸锂(LiNbO_3)、钛酸钡(BaTiO_3)、钛酸铋($\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$)等都具有光伏效应，但它们禁带宽度均较大，可见光容易穿过，因而不能真正投入生产用作铁电光伏响应材料[5]。然而，铁酸铋 BiFeO_3 (BFO)具有较大的自发极化和较窄的禁带宽度，其产生的光电流较大，在一定程度上增强了光电转换效率，因此被广泛应用于铁电光伏电池研究中[6]。经过对 BFO 的一系列研究，已经取得许多成果，例如：Zhang 等人[7]研究了 $\text{Pt}/\text{BaTiO}_3/\text{BiFeO}_3/\text{TiO}_2$ 多层异质结构，发现多层异质结构的短路电流密度和开路电压显著提高。

Wang 等人[8]研究了 Mn 掺杂对 BFO 薄膜性能的影响,发现 Mn 掺杂的 BFO 薄膜具有比 BFO 薄膜更强的饱和磁化强度和更小的光学带隙。Pavana 等人[9]通过改变 BFO 薄膜中氧空穴的含量,使其带隙宽度得到了改变,从而改变其对可见光的吸收强度,进一步影响其光伏效应。另外,BFO 薄膜的光伏效应取决于薄膜的极化方向、取向等多种方面。Qiao 人[10]在研究氧化镍(NiO)薄膜的光伏效应时发现,相比于(110)和(111)取向,(100)取向的 NiO 薄膜具有更高的光电流密度,这说明取向对材料的铁电光伏效应有一定影响。目前,BFO 薄膜光伏性能的取向依赖性一直缺乏系统的研究,尽管已有不同取向的 BFO 薄膜及其基本极化行为的报道,但对于取向对其光伏性能的影响报道较少。因此本文采用磁控溅射法,在不同取向 STO 单晶基片上构建 Pt/BFO/LSCO/STO 异质结光伏器件,研究 BFO 薄膜取向对其铁电光伏性能的影响。

2. 实验

本实验以不同取向的 STO 薄膜为衬底,采用磁控溅射法,制备了 Pt/BFO/LSCO/STO 异质结,具体步骤如下:1) 准备 STO 基片。将(001)、(110)、(111)取向单晶 STO 基片先后放入丙酮和无水乙醇中,利用超声波各清洗 10 min。2) 制备 LSCO 薄膜。将 STO 基片放入实验仪的真空腔,用机械泵和分子泵将腔体中的内背底真空气度抽至 2.0×10^{-4} Pa 以下。打开氩气、氧气阀门,流量计及混合气路旋钮,通入两气体的体积比为 Ar:O₂ = 3:1; 转动闸板阀,使压强控制在 1.4 Pa; 启动温控程序,以 20°C/min 的速度升温至 650°C; 靶间距为 55 mm; 打开 LSCO 靶材(纯度 99.99%)挡板,将射频功率调至 70 W,预溅射 15 min 后发现无异常,此时打开靶材与基片挡板,正式溅射 40 min。溅射完毕后充氧,保持压强为 8×10^{-4} Pa,退火 130 min。LSCO 膜厚约为 70 nm。3) 制备 BFO 薄膜,BFO 靶材(纯度 99.99%)。同(2)中方式类似,待温度降至室温时,继续将内背底真空气度抽至 2.0×10^{-4} Pa; 打开氩气旋钮,保持氩气流量为 50 mL/min; 以相同速度升温至 750°C; 射频功率为 50 W; 预溅射 15 min,正式溅射 6 h。溅射完成后,氧气氛下退火 150 min。BFO 膜厚约为 300 nm。4) 制备 Pt 电极。在自然条件下,将掩膜板覆盖到样品上,并与托盘相固定,放入磁控溅射仪中生长上电极 Pt,构成 Pt/BFO/LSCO 异质结,生长条件:压强保持 3 Pa; 功率为 60 W; 正式溅射 3 min,之后在退火炉中 550°退火 1 min。Pt 电极厚约为 40 nm。采用 X 射线衍射仪(XRD,丹东 TD3700)对 BFO/LSCO/STO 异质结的结构进行表征; 使用 I-V 测试仪(Keithley 2601B,美国)探究了光伏性能和漏电流特性。

3. 结果与讨论

3.1. 不同取向 Pt/BFO/LSCO 异质结的结构表征

为研究三种取向的 BFO 薄膜的外延结构,我们进行了 θ - 2θ 扫描和摇摆曲线扫描,测量时通常将管压降设置为 30 kV,电流设置为 20 mA,步宽为 0.02°,时间 1 s, 2θ 扫描角度范围为 20°~50°。如图 1(a)、图 1(b)所示,自下而上分别为 BFO (001)、(110)、(111)薄膜的 XRD 图谱和摇摆曲线。由图 1(a)所示,在扫描范围 20°~50°内,STO (001)基底上生长的薄膜有 LSCO (001)和 BFO (001)、STO (002)和 BFO (002)两个特征峰;STO (110)基底上生长的薄膜仅出现 LSCO (110)和 BFO (110)一个特征峰;STO (111)上生长的薄膜也只有 LSCO (111)和 BFO (111)一个特征峰,且峰的衍射强度较高,无其他杂峰,由上述现象表明不同取向 BFO 在底电极上实现择优外延生长。薄膜生长的均匀性即结晶质量由扫描可得,如图 1(b)所示,(001)、(110)、(111)取向衍射峰的 FWHM 值依次为 0.249°、0.137°和 0.071°,说明三个取向 BFO 薄膜外延生长的均匀性较好,结晶度高。其中(111)取向衍射峰的 FWHM 值最小,则其 c 轴取向一致性越好,表明(111)取向薄膜性能最好。

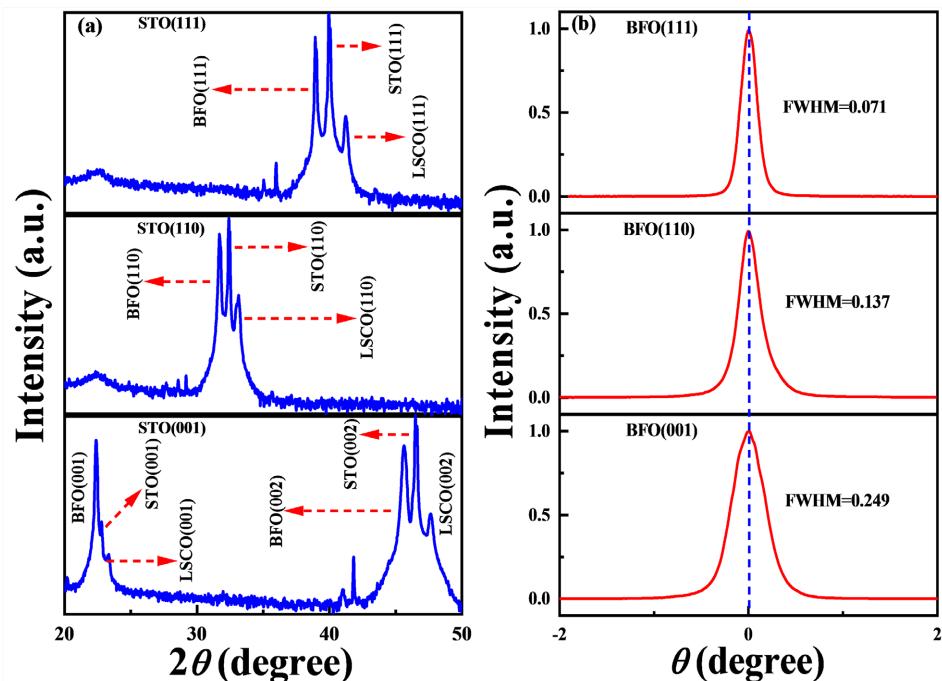


Figure 1. (001), (110), (111) oriented BFO films: (a) X-ray spectrum and (b) Rocking curve
图 1. (001)、(110)、(111)取向 BFO 薄膜：(a) X 射线图谱；(b) 摆摆曲线

3.2. 不同取向 Pt/BFO/LSCO 异质结的漏电特性

漏电流是决定铁电薄膜光性能的重要因素，小的电流密度更有利于薄膜器件的正常运行。图 2(a)，图 2(b)为不加光和加光条件下(001)、(110)、(111)取向 BFO 薄膜的 J-V 特性曲线。由图可知，在外加电压为 3 V 的情况下，不加光时(001)、(110)、(111) BFO 薄膜的漏电流密度分别为 $4.57 \times 10^{-4} \text{ A/cm}^2$ 、 $2.07 \times 10^{-4} \text{ A/cm}^2$ 和 $2.48 \times 10^{-5} \text{ A/cm}^2$ ；加光时三种取向的漏电流密度依次为 $7.77 \times 10^{-4} \text{ A/cm}^2$ 、 $3.53 \times 10^{-4} \text{ A/cm}^2$ 和 $4.75 \times 10^{-5} \text{ A/cm}^2$ 。可见加光可以增大薄膜的漏电流，而且无论是在加光或不加光条件下，BFO (111)薄膜都具有最小的漏电流密度，其原因可能与不同取向薄膜中可流动载流子的浓度有关，同(001)、(110)取向相比，(111)取向的 BFO 薄膜中可流动载流子浓度较低，流动性较高的氧空位、空穴等缺陷粒子较少，那么薄膜中的电阻率就越大，从而使其漏电流变小。另外，由图也可看出在有光和无光条件下，负偏压下的漏电流密度均比正偏压下的大。这是由于异质结的上部比下部电阻率低，负偏压下有更大的漏电流。为研究取向对电容器漏导机制的影响，我们对图 2 中的 J-V 曲线进行不同机制拟合，得到图 2(c)~(f)。

图 2(c)~(f)是正向偏压下三种取向的机制拟合图像。由图可知，三种取向异质结的漏导机制都不满足福勒-诺德海姆(F-N) [11] 和普尔-弗兰克(P-F) [12] 发射。同时，我们发现在低电压下，(001)、(110)和(111)取向 $\log(J)-\log(V)$ 拟合曲线斜率分别为 0.68、1.08 和 0.23，大致符合欧姆导电机制(S~1) [13]；高电压下不同取向异质结的 $\ln(J)$ 与 $V^{1/2}$ 拟合曲线均呈线性关系，基本符合肖特基发射机制[14]。

此外，本次实验通过加光和不加光时 J-V 拟合曲线对比，分析得到光照对于不同取向 Pt/BFO/LSCO 异质结导电机制的影响。图 3(a)，图 3(b)为加光和不加光时(001)取 Pt/BFO/LSCO 异质结的拟合曲线图。由图 3(a)可以看出 0→3 V 范围内，低电压($V < 0.3 \text{ V}$)下，加光时 $\log(J)-\log(V)$ 拟合曲线的斜率为 0.44，不加光的斜率为 0.72，可判断其满足欧姆导电机制；不加光时，当正向偏压大于 0.3 V 时 $\ln(J)-V^{1/2}$ 拟合曲线为直线，符合 Schottky 导电机制[14]，而加光后在整个正向偏压内都符合 Schottky 导电机制，且加光

和不加光的斜率明显不同。如图 3(c), 图 3(d)所示为加紫光和不加光时(110)取向的拟合曲线图。由图 3(c)可知, 低电场下加光和不加光的漏电机制可由肖特基模型来拟合, 由图 3(d)可以看出, 当 $V > 1$ V 时, 不加光时符合肖特基发射机制; 加光时正向偏压下 $\ln(J)-V^{1/2}$ 拟合曲线线性关系良好, 符合肖特基发射机制, 其斜率与不加光时的近似相等。图 3(e), 图 3(f)为加光和不加光时(111)取向的拟合曲线图。由图 3(e)可知, 无光时, 在较低电压($V < 0.1$ V)下, 满足欧姆导电; $0.1 < V < 1$ V 时, 斜率为 1.77, 符合空间电荷限制电流(SCLC) [15] 导电机制; 在较高电压($V > 1$ V)下满足肖特基导电机制。加紫光时, 由图 3(f)可以看出, 与(110)取向情况相同, $\ln(J)-V^{1/2}$ 曲线线性关系明显, 完全符合肖特基发射机制, 斜率与不加光相同。由此可以看出, 加光不仅可以增大薄膜的漏电流, 也可以在一定程度上改变不同取向异质结的漏导机制。由于 LSCO 和 Pt 电极的费米能量不同, 会在界面形成较大的肖特基势垒。当加一定光照后, 电极内的电子受到热激发获得了能量, 从而有能力跨过电极与 BFO 薄界面间的势垒, 跃迁至 BFO 薄膜的导带进行导电, 而此时在低电压下材料本身产生的欧姆导电已被肖特基发射所掩盖。而不同取向异质结的漏导机制存在差异, 是因为薄膜的功函数与取向密切相关[16]。

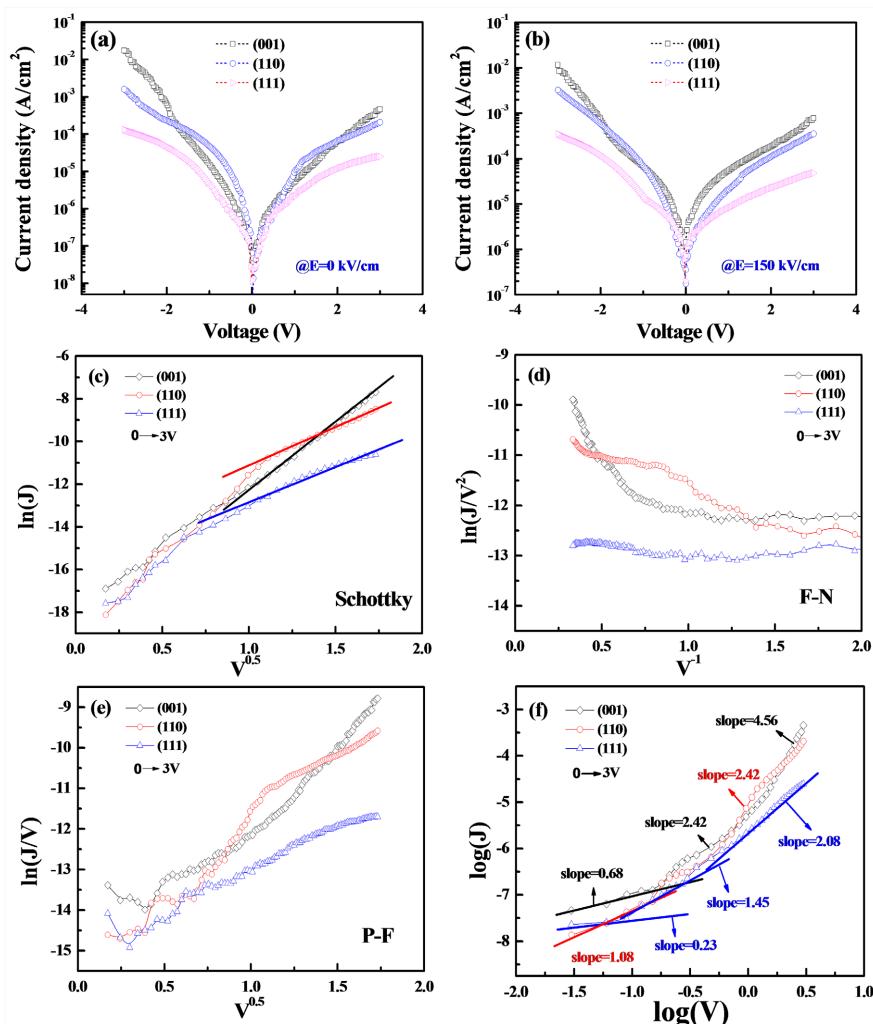


Figure 2. J-V curve of Pt/BFO/LSCO heterostructure: (a) without light; (b) J-V curve of light and (c) (d) (e) (f) leakage conduction mechanism analysis of Pt/BFO/LSCO heterostructure under positive bias voltage

图 2. Pt/BFO/LSCO 异质结的 J-V 曲线: (a) 不加光; (b) 加光的 J-V 曲线; (c) (d) (e) (f) 正偏压下 Pt/BFO/LSCO 异质结的漏导机制分析

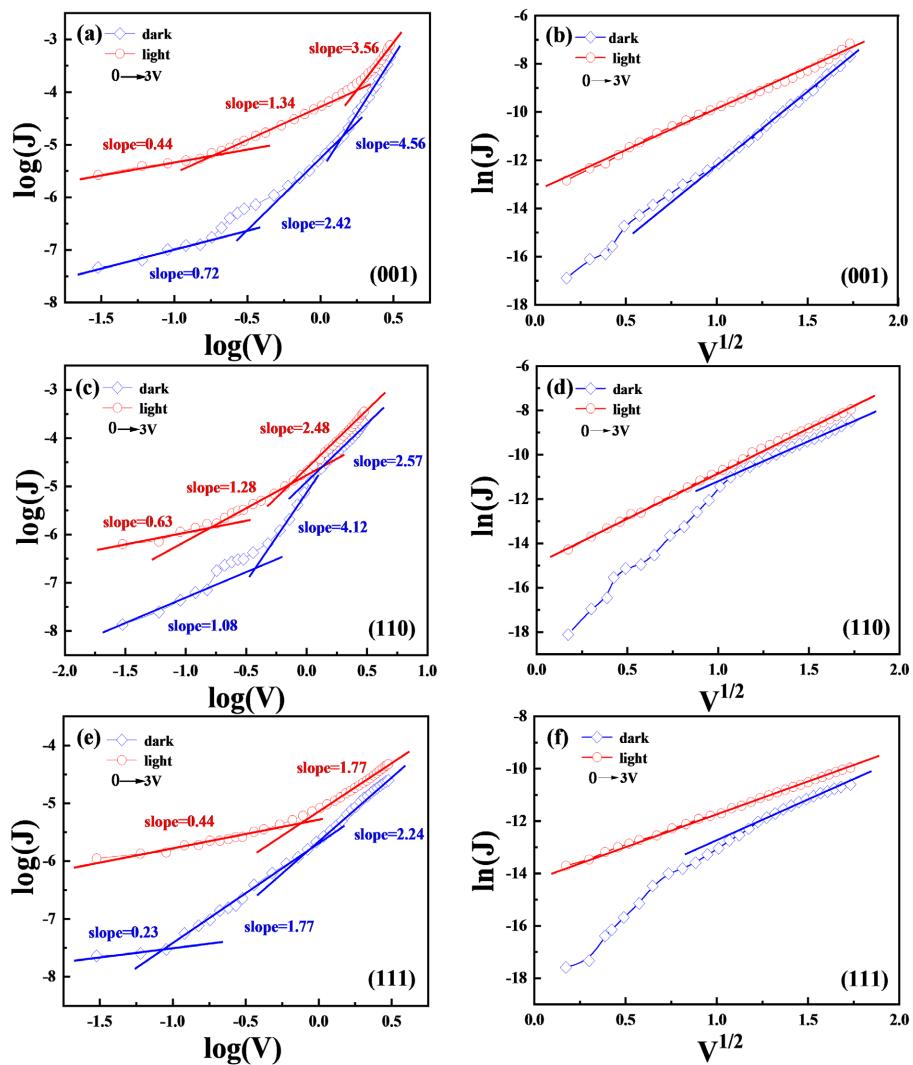


Figure 3. (001) oriented Pt/BFO/LSCO heterostructure: (a) $\log(J)$ - $\log(V)$ curve; (b) $\ln(J)$ - $V^{1/2}$ curve; (110) oriented Pt/BFO/LSCO heterojunction; (c) $\log(J)$ - $\log(V)$ curve; (d) $\ln(J)$ - $V^{1/2}$ curve; (111) oriented Pt/BFO/LSCO heterostructure; (e) $\log(J)$ - $\log(V)$ curve; (f) $\ln(J)$ - $V^{1/2}$ curve

图 3. (001) 取向 Pt/BFO/LSCO 异质结: (a) $\log(J)$ - $\log(V)$ 曲线; (b) $\ln(J)$ - $V^{1/2}$ 曲线; (110) 取向 Pt/BFO/LSCO 异质结; (c) $\log(J)$ - $\log(V)$ 曲线; (d) $\ln(J)$ - $V^{1/2}$ 曲线; (111) 取向 Pt/BFO/LSCO 异质结; (e) $\log(J)$ - $\log(V)$ 曲线; (f) $\ln(J)$ - $V^{1/2}$ 曲线

3.3. 不同取向 Pt/BFO/LSCO 异质结的光伏效应

为探究不同取向 Pt/BFO/LSCO 异质结的光伏效应, 实验采用 Keithley2601B 数字源表对其进行外加极化, 并得到了 I-V 特性曲线。极化电压为 -5 V, 光照强度为 150 mW/cm^2 的紫光。如图 4 所示, 在紫外光照射下的样品经过极化后, 它的开路电压(V_{OC})和短路电流(J_{sc})都有所增加。其中, (001)、(110)、(111) 取向 BFO 薄膜的 V_{OC} 依次为 -0.16 V、-0.34 V 和 -0.60 V; J_{sc} 依次为 19.2 mA/cm^2 、 25.9 mA/cm^2 和 110.0 mA/cm^2 , 可见(111)取向的开路电压和短路电流最大, 光伏效应最为明显, 并且(111)取向的 J_{sc} 约为(001)取向的 5 倍, 这结果表明开路电压 V_{OC} 和短路电流 J_{sc} 强烈依赖于 BFO 薄膜取向。出现这种差异的一个潜在原因是不同取向的 BFO 薄膜在畴结构上存在差异。(001)取向薄膜具有 71° 畴壁, 而(111)取向为单畴结构, 而且薄膜的导电情况与畴壁密切相关, BFO 薄膜的漏电流主要流经 109° 畴壁和 180° 畴壁, 几乎不会流经 71° 畴壁[17]。因此相比来说, (001)取向光电流最小, (111)取向最大。

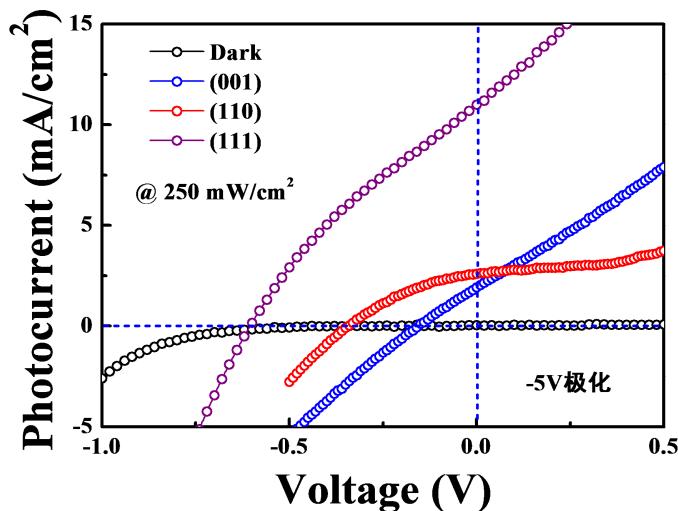


Figure 4. J-V curves of different orientation in Pt/BFO/LSCO heterostructure with and without light
图 4. 不同取向 Pt/BFO/LSCO 异质结在有光和无光下的 J-V 曲线

4. 结论

本文主要研究取向对 BFO 薄膜结构和铁电光伏效应的影响，利用磁控溅射技术在不同取向钛酸锶基片上构架了 Pt/BFO/LSCO/STO 异质结。XRD 结果显示不同的 BFO 薄膜均为外延结构。研究了 Pt/BFO/LSCO 异质结的漏电机制和光伏性能 J-V 数据拟合表明，Pt/BFO/LSCO 漏电流大小依赖于 BFO 薄膜取向，满足(001)J > (110)J > (111)J 规律。不同取向 Pt/BFO/LSCO 异质结的导电机制均为：低电压下为体控制的欧姆导电，高电压下为由界面控制的肖特基发射。加紫光后，不同取向异质结均为肖特基导电机制。通过铁电光伏系统对 Pt/BFO/LSCO 异质结的光伏特性进行了测试，结果表明材料的 VOC 和 Jsc 强烈依赖于 BFO 薄膜取向，(111)取向最大、(110)取向次之、(001)取向最小，主要原因是不同取向的 BFO 薄膜在畴结构上存在一定差异。

基金项目

河北农业大学自主培养博士科研启动经费(PY201809, PY2021005, PY2021012); 河北农业大学师生协同项目(2021-BHXT-20); 河北农业大学创新创业训练计划项目(S202110086039, 2020259, 2022164)。

参考文献

- [1] Deng, Q., Wang, Z., Wang, S., et al. (2017) Simulation of Planar Si/Mg₂Si/Si p-i-n Heterojunction Solar Cells for High Efficiency. *Solar Energy*, **158**, 654-662. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2017.10.028>
- [2] Tablero, C. (2017) An Evaluation of BiFeO₃ as a Photovoltaic Material. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, **171**, 161-165. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2017.06.049>
- [3] 李冬雯, 刘守清. 铁酸铋可见光催化降解黄腐酸[J]. 苏州科技大学学报(自然科学版), 2020, 37(3): 50-55.
- [4] 项欣, 杨俊和, 程晋荣. 纳米 BiFeO₃的制备及其光催化性能研究进展[J]. 广州化工, 2020, 48(15): 10-12.
- [5] Nie, C., Zhao, S., Bai, Y., et al. (2016) The Ferroelectric Photovoltaic Effect of BiCrO₃/BiFeO₃ Bilayer Composite Films. *Ceramics International*, **42**, 14036-14040. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.06.010>
- [6] Chen, G., Chen, J., Pei, W., et al. (2018) Bismuth Ferrite Materials for Solar Cells: Current Status and Prospects. *Materials Research Bulletin*, **110**, 39-49. <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2018.10.011>
- [7] Zhang, F., Li, M., Zhu, Y., et al. (2017) Ferroelectric Polarization Enhancement of Photovoltaic Effects in Ba-TiO₃/BiFeO₃/TiO₂ Heterostructure by Introducing Double-Functional Layers. *Journal of Alloys and Compounds*, **695**, 3178-3182. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.11.321>

-
- [8] Wang, X.W., Liang, Y.F., Sun, L.Y., *et al.* (2020) Effects of Mn Doping on Ferroelectric, Ferromagnetic and Optical Properties of BiFeO₃ Thin Films. *Physica B*, **594**, Article ID: 412317. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2020.412317>
 - [9] Mocherla, P., Karthik, C., Uabic, R., *et al.* (2013) Tunable Bandgap in BiFeO₃ Nanoparticles: The Role of Microstrain and Oxygen Defects. *Applied Physics Letters*, **103**, 2463-2485. <https://doi.org/10.1063/1.4813539>
 - [10] Luo, Y., Qiao, L., Zhang, Q., *et al.* (2018) Tunable Photoelectric Response in NiO-Based Heterostructures by Various Orientations. *Applied Physics Letters*, **112**, Article ID: 093301. <https://doi.org/10.1063/1.5016950>
 - [11] Zhu, W.M., Zhang, X.M., Liu, A.Q., *et al.* (2008) A Micromachined Optical Double Well for Thermo-Optic Switching via Resonant Tunneling Effect. *Applied Physics Letters*, **92**, Article ID: 251101. <https://doi.org/10.1063/1.2951621>
 - [12] Jeong, D.S., Park, H.B. and Hwang, C.S. (2005) Reasons for Obtaining an Optical Dielectric Constant from the Poole-Frenkel Conduction Behavior of Atomic-Layer-Deposited HfO₂ Films. *Applied Physics Letters*, **86**, Article ID: 072903. <https://doi.org/10.1063/1.1865326>
 - [13] Shang, D.S., Wang, Q., Chen, L.D., *et al.* (2006) Effect of Carrier Trapping on the Hysteretic Current-Voltage Characteristics in Ag/La_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃/Phterostructures. *Physical Review B*, **73**, Article ID: 245427. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.245427>
 - [14] Liu, F., Ma, Y., Yang, F., *et al.* (2010) Schottky Barrier Height and Conduction Mechanisms in Ferroelectric Bismuth Titanate. *Applied Physics Letters*, **96**, Article ID: 052102. <https://doi.org/10.1063/1.3298645>
 - [15] Li, Q., Shen, K., Li, X., *et al.* (2018) Space-Charge Limited Current in CdTe Thin Film Solar Cell. *Applied Physics Letters*, **112**, Article ID: 173901. <https://doi.org/10.1063/1.5023106>
 - [16] Ji, D.P., Zhu, Q. and Wang, S.Q. (2016) Detailed First-Principles Studies on Surface Energy and Work Function of Hexagonal Metals. *Surface Science*, **651**, 137-146. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2016.04.007>
 - [17] Huang, D., Deng, H., Yang, P., *et al.* (2010) Optical and Electrical Properties of Multiferroic Bismuth Ferrite Thin Films Fabricated by Sol-Gel Technique. *Materials Letters*, **64**, 2233-2235. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2010.07.020>