Supplementary Information (SI) File for:

Experimental and Computational Study on the Influence of Cobalt Substitution on Structural, Impedance, Electronic, Magnetic, and Optical Properties of Pseudobrookite-structured Fe_2TiO_5

M. Naveed-Ul-Haq[a,*], Anum Shafiq[b], Layiq Zia[b], and Arif Mumtaz[b]

[a]Department of Physics, Rawalpindi Women University, 6th Road, Satellite Town, 46300, Rawalpindi, Pakistan.
[b]Department of Physics, Quaid-i-Azam University Islamabad, Pakistan.
*Corresponding Authors,
Email: naveed.haq@f.rwu.edu.pk,

Table S1: The Fitting parameters obtained from 3 circuit model as displayed in Figure 8 (a) for $FeTi_2O_5$.

T (°C)	Fitting Parameters								
	Q_1 ($F.s^{a-1}$)	a_1	R_1 (Ω)	Q_2 ($F.s^{a-1}$)	a_2	R_2 (Ω)	Q_3 ($F.s^{a-1}$)	a_3	R_3 (Ω)
25	1.6×10^{-9}	0.8	9490	1.15×10^{-9}	0.99	2.5×10^{6}	1.55×10^{-9}	0.86	9.5×10^{6}
40	6.5×10^{-9}	0.73	4700	3.5×10^{-9}	0.81	3.9×10^{6}	1.1×10^{-9}	0.97	1.9×10^{5}
60	1.9×10^{-9}	0.98	1.43×10^{6}	25×10^{-9}	0.64	3.3×10^{5}	1.8×10^{-9}	0.95	8.8×10^{4}
80	8.3×10^{-9}	0.77	1.5×10^{6}	0.92×10^{-9}	1	3.2×10^{4}	1.97×10^{-9}	0.4	574×10^{6}
100	11×10^{-9}	0.75	0.85×10^{6}	5.84×10^{-6}	0.36	3.5×10^{6}	0.9×10^{-9}	1	1.2×10^{4}
120	4.5×10^{-9}	0.98	0.12×10^{6}	24×10^{-9}	0.68	2.3×10^{4}	9×10^{-9}	0.88	7.3×10^{4}
140	5.2×10^{-9}	0.88	8.5×10^{4}	32×10^{-9}	0.95	1.4×10^{4}	39×10^{-9}	0.66	8046
160	0.03×10^{-9}	0.6	170	7.1×10^{-9}	0.8	2250	6.6×10^{-9}	0.86	4.8×10^{4}
180	4.2×10^{-9}	0.91	2.3×10^{4}	4.3×10^{-9}	1	1800	90×10^{-9}	0.62	1650

Table S2: The Fitting parameters obtained from 3 circuit model as displayed in Figure 8 (a) for $FeTi_2O_5$.

T (°C)	Fitting Parameters								
	Q_1 ($F.s^{a-1}$)	R_1 (Ω)	a_1	Q_2 ($F.s^{a-1}$)	R_2 (Ω)	a_2	Q_3 ($F.s^{a-1}$)	R_3 (Ω)	a_3
25	10×10^{-9}	1.0×10^{6}	0.8	6.7×10^{-9}	9268	0.71	40×10^{-9}	1.65×10^{5}	1
40	11×10^{-9}	3.3×10^{5}	0.84	19×10^{-9}	1.17×10^{6}	0.84	20×10^{-9}	6953	0.65
60	9×10^{-9}	6.8×10^{5}	0.84	0.1×10^{-6}	1.07×10^{4}	0.83	19×10^{-9}	3590	0.66
80	1.2×10^{-6}	13×10^{6}	1	6.4×10^{-9}	4.3×10^{5}	0.89	8.1×10^{-6}	78×10^{6}	0.3
100	4.3×10^{-7}	1497	0.48	7.6×10^{-9}	2.2×10^{5}	1	14×10^{-9}	1.5×10^{5}	0.82
120	9.6×10^{-9}	5165	0.98	1.0×10^{-7}	1064	0.58	5.4×10^{-9}	1.6×10^{5}	0.90
140	10×10^{-9}	3×10^{4}	1	7×10^{-9}	6.5×10^{5}	0.88	41×10^{-9}	580	0.64
160	5×10^{-9}	5.5×10^{5}	0.9	2.2×10^{-6}	437	0.39	1.32×10^{-6}	12	1
180	1.5×10^{-4}	202	0.05	9.4×10^{-9}	1.4×10^{4}	0.88	5.6×10^{-9}	1.4×10^{-4}	1

Table S3: The Hirschfeld Charge and Spin Analysis of $Fe_{2-x}Co_xTiO_5$ (x = 0) in supercell configuration consisting of 2 formula units.

Species	Ion	Hirschfeld Charge (e)	Spin ($\frac{\hbar}{2}$)
O	1	-0.3	-0.13
O	2	-0.31	0.01
O	3	-0.3	0.13
O	4	-0.31	-0.01
O	5	-0.31	0
O	6	-0.3	-0.13
O	7	-0.31	0.01
O	8	-0.3	0.13
O	9	-0.31	-0.01
O	10	-0.31	0
Ti	1	0.53	0
Ti	2	0.53	0
Fe	1	0.5	4.06
Fe	2	0.5	-4.06
Fe	3	0.5	4.06
Fe	4	0.5	-4.06

Table S4: The Hirschfeld Charge and Spin Analysis of $Fe_{2-x}Co_xTiO_5$ (x = 0.1) in supercell configuration consisting of 10 formula units.

Species	Ion	Hirschfeld Charge (e)	Spin ($\frac{\hbar}{2}$)
O	1	-0.31	-0.12
O	2	-0.31	0.01
O	3	-0.3	0.09
O	4	-0.31	0.23
O	5	-0.31	0.12
O	6	-0.31	-0.01
O	7	-0.3	-0.09
O	8	-0.31	-0.24
O	9	-0.31	0
O	10	-0.31	0
O	11	-0.3	-0.09
O	12	-0.31	-0.23
O	13	-0.3	-0.09
O	14	-0.31	-0.23
O	15	-0.3	0.09
O	16	-0.31	0.23
O	17	-0.3	0.09
O	18	-0.31	0.23

O	19	-0.31	0
O	20	-0.31	0
O	21	-0.3	0.09
O	22	-0.31	0.23
O	23	-0.3	0.07
O	24	-0.3	0.22
O	25	-0.28	-0.03
O	26	-0.31	-0.22
O	27	-0.3	-0.09
O	28	-0.31	-0.23
O	29	-0.3	-0.01
O	30	-0.31	0
O	31	-0.3	-0.09
O	32	-0.31	-0.23
O	33	-0.3	-0.1
O	34	-0.31	-0.23
O	35	-0.28	0.15
O	36	-0.3	0.22
O	37	-0.3	0.1
O	38	-0.31	0.23
O	39	-0.31	0
O	40	-0.31	-0.01
O	41	-0.3	0.09
O	42	-0.31	0.24
O	43	-0.31	-0.12
O	44	-0.31	0
O	45	-0.3	-0.1
O	46	-0.31	-0.23
O	47	-0.31	0.12
O	48	-0.31	-0.01
O	49	-0.31	0
O	50	-0.31	0
Ti	1	0.53	0
Ti	2	0.53	0
Ti	3	0.53	0
Ti	4	0.53	0
Ti	5	0.53	0
Ti	6	0.53	0
Ti	7	0.52	-0.01
Ti	8	0.53	0
Ti	9	0.53	0

Ti	10	0.53	0
Fe	1	0.5	4.02
Fe	2	0.5	4.07
Fe	3	0.5	-4.02
Fe	4	0.5	-4.08
Fe	5	0.5	-4.04
Fe	6	0.5	-4.03
Fe	7	0.5	4.04
Fe	8	0.5	4.04
Fe	9	0.5	4.04
Fe	10	0.5	-4.04
Fe	11	0.5	-4.04
Fe	12	0.5	-4.04
Fe	13	0.5	-4.03
Fe	14	0.5	4.03
Fe	15	0.5	4.04
Fe	16	0.5	4.07
Fe	17	0.5	4.02
Fe	18	0.5	-4.08
Fe	19	0.5	-4.02
Co	20	0.43	2.97

*****