

بررسی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی پروسکایت مضاعف Sr_2NiWO_6 با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن

طیبه سادات هاشمی‌فر، علی مختاری*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

پروسکایت‌های مضاعف (دوگانه) به دلیل داشتن خواص فیزیکی متنوع، جذابیت زیادی در بین محققین پیدا کرده‌اند. در این مقاله پروسکایت دوگانه Sr_2NiWO_6 با استفاده از بسته محاسباتی اسپرسو بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) مورد مطالعه قرار گرفت. مطابق گزارشات تجربی، این پروسکایت در دمای اتاق عایق و دارای گاف در حدود ۳/۱ الکترون ولت می‌باشد. بعد از بهینه‌سازی‌های ساختاری، در مرحله اول خواص الکترونی ترکیب با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و همچنین تصحیح همبستگی قوی (GGA+U) با مقادیر مختلف پارامتر هابارد محاسبه شد. در مرحله دوم با استفاده از نتایج تصحیح همبستگی قوی و مقایسه آنها با تجربه، U مناسب انتخاب شد. در نهایت با استفاده از مقدار بهینه پارامتر هابارد فاز مغناطیسی پایدار Sr_2NiWO_6 از بین فازهای پارامغناطیس، فرومغناطیس و پادفرومغناطیس مورد مطالعه قرار گرفت.

کلیدواژگان: پروسکایت دوگانه، نظریه تابعی چگالی، تقریب شیب تعمیم یافته، تصحیح همبستگی قوی، پارامتر هابارد.

مقدمه

حافظه‌ها، حسگرهای مغناطیسی، خازن‌ها و سلول‌های

خورشیدی پیدا کرده‌اند.

مطالعه اکسیدهای فلز واسطه با ساختار پروسکایت دوگانه، در ابتدای دهه ۱۹۵۰ شروع شد [۳] و پس از آن اولین مطالعه در مورد ساختارهای A_2BWO_6 (A=Ba, Sr; B = Fe, Co, Ni) در سال ۱۹۵۹ توسط فرزیا و همکارانش [۴] انجام گرفت. مطابق مطالعه آنها ترکیبات استرانسیم در دمای اتاق یک انحراف چهاروجهی نشان داده‌اند، اما در دماهای بالا مکعبی می‌شوند. بنابراین، Ba_2CoWO_6 در دمای اتاق مکعبی و Sr_2NiWO_6 دارای ساختار چهاروجهی گزارش شدند.

در مطالعه حاضر ما از میان خانواده بزرگ و جذاب پروسکایت‌های دوگانه، Sr_2NiWO_6 را انتخاب کرده و خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آن را با

در ساختار اکسیدهای پروسکایت دوگانه با فرمول عمومی $A_2BB'O_6$ ، کاتیون‌های فلزی عناصر خاکی کمیاب، قلیایی و قلیایی خاکی می‌توانند در جایگاه A و کاتیون فلزات واسطه در جایگاه B قرار بگیرند. بنابراین حداقل ۳۰ درصد عناصر جدول تناوبی می‌توانند موقعیت کاتیون A و حدود نیمی از جدول تناوبی موقعیت کاتیون B را اشغال کنند [۱] و این انعطاف پذیری شیمیایی بالا باعث تنوع کاربرد این خانواده از ترکیبات بسته به انتخاب اتم‌های جایگاه‌های A و B شده است. همچنین این ترکیبات با داشتن خواصی مثل مقاومت مغناطیسی بزرگ (GMR)، ابررسانایی دمای بالا و نیمه فلزی بودن [۲] کاربردهای متنوعی در زمینه‌های مختلف از جمله طراحی و فناوری

* نویسنده مسئول: mokhtari@sci.sku.ac.ir

پارامتر تبادلی است. اما در اینجا برای راحتی از U به جای U مؤثر استفاده نموده‌ایم. لازم به ذکر است که در تمام این مراحل فاز مغناطیسی پایدار Sr_2NiWO_6 را پادفرومغناطیس در نظر گرفتیم. زیرا این ترکیب، پادفرومغناطیس با دمای نل ۵۴ کلوین [۸] می‌باشد. با این وجود در مرحله آخر محاسبات فاز پایدار پروسکایت دوگانه Sr_2NiWO_6 را از بین سه فاز مغناطیسی پارامغناطیس، فرومغناطیس و یک نوع پادفرومغناطیس (شکل ۵) بررسی نمودیم.

نتایج و بحث

خواص ساختاری

در جدول ۱ مقادیر محاسبه شده پارامترهای شبکه و حجم سلول واحد با استفاده از بهینه‌سازی ساختاری کامل فاز پایدار چهار وجهی، با مقادیر تجربی موجود مقایسه شده‌اند. طول میانگین پیوند $\langle \text{Ni-O} \rangle$ و انرژی همدوسی در واحد مولکول نیز در این جدول ذکر شده‌اند. مطابق جدول با افزایش U هر دو پارامتر شبکه a و c کمی بزرگتر می‌شوند و به دنبال آن حجم سلول واحد افزایش می‌یابد. در واقع با بزرگتر شدن پارامتر هابارد طول پیوندها از جمله طول میانگین پیوند $\langle \text{Ni-O} \rangle$ کمی افزایش یافته‌اند. از آنجا که انرژی همدوسی قدرت پیوند را در جامدات مشخص می‌کند انتظار داریم که با افزایش طول پیوند مقدار این انرژی کاهش یابد. همان‌طور که در جدول ۱ مشاهده می‌شود مطابق انتظار ما با اعمال پارامتر هابارد و افزایش آن تا ۸ الکترون ولت انرژی همدوسی به اندازه ۰/۰۶ الکترون ولت کاهش می‌یابد. در قسمت‌های بعدی با توجه به چگالی حالت‌های الکترونی نشان می‌دهیم که مقدار بهینه پارامتر هابارد ۸ الکترون ولت است. در این U حجم سلول واحد به اندازه حدود چهار و نیم درصد، پارامتر شبکه a به مقدار حدود یک درصد و طول

استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن و بر پایه نظریه تابعی چگالی بررسی نموده‌ایم.

روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از کد شبیه‌سازی کوانتوم اسپرسو [۵] انجام گرفتند. بخش کوانتومی برهم‌کنش الکترون‌های ظرفیت با استفاده از تابعی همبستگی-تبادلی PBE در تقریب شیب تعمیم یافته و برهم‌کنش الکترون-یون با استفاده از شبه‌پتانسیل PAW با الکترون‌هایی از اوربیتال‌های $3d$ و $4s$ استرانسیم، $3d$ و $4s$ و نیکل، $3d$ ، $4p$ ، $5s$ ، $5p$ و $5d$ و $6s$ تنگستن و $2s$ و $2p$ اکسیژن در نظر گرفته شدند. پس از بهینه‌سازی در تقریب GGA+U و با استفاده از مقدار پارامتر هابارد ۵ الکترون ولت پیشنهاد شده توسط لیو و همکارانش [۶]، شبکه نقاط k در فضای بریلوئن $3 \times 4 \times 4$ ، انرژی قطع امواج تخت ۵۵ ریدبرگ و انرژی قطع چگالی ۴۴۰ ریدبرگ قرار گرفتند. همچنین دقت همگرایی انرژی 10^{-6} الکترون ولت و حداکثر نیروی وارد بر اتم‌ها از مرتبه 10^{-3} Ry/a.u. بودند.

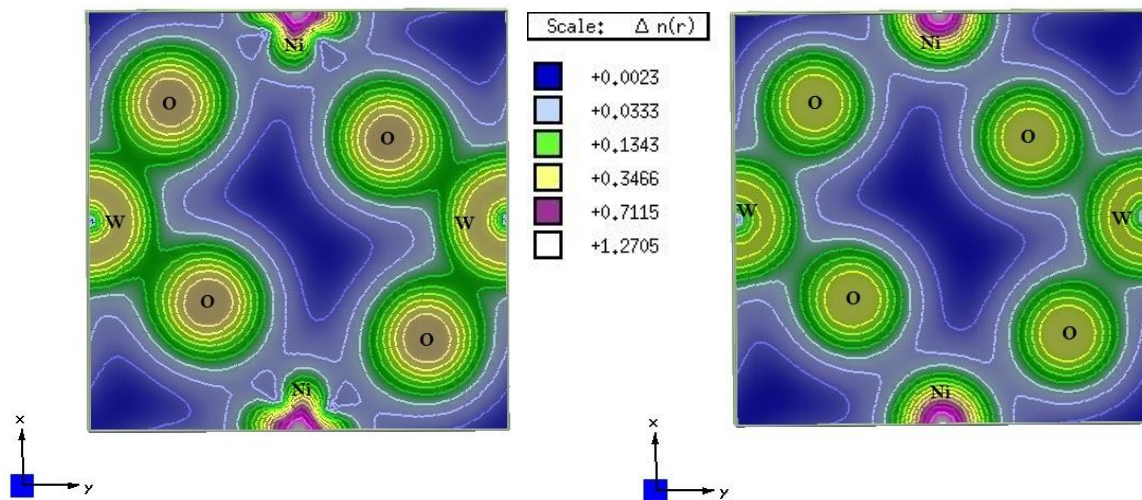
در اکسیدهای فلزهای واسطه به دلیل وجود الکترون‌های جایگزیده اوربیتال‌های d و f به تقریب شیب تعمیم یافته با تصحیح همبستگی قوی (GGA+U) نیاز داریم که در این دیدگاه، تابعی انرژی GGA با یک جمله اضافه وابسته به برهم‌کنش الکترون-الکترون جایگاهی تصحیح می‌گردد. نشان داده شده است که برای یک ثابت شبکه، مقدار پارامتر برهم‌کنش کولنی U در مقدار انرژی کل و در نتیجه تعیین فاز پایدار بلور مؤثر است [۷]. بنابراین در این کار برای قرار دادن مقدار مناسب پارامتر هابارد، چگالی حالت‌های الکترونی را برای مقادیر متفاوت U برای نیکل محاسبه کرده و گاف به دست آمده را با تجربه مقایسه کرده‌ایم. منظور از پارامتر هابارد در این مقاله، U مؤثر و به عبارت دیگر $U-J$ می‌باشد که در آن J

بدون نیاز به وارد کردن پارامتر هابارد هم می‌توانند قابل اعتماد باشند. اما، در بخش‌های بعدی خواهیم دید که این تقریب در محاسبه گاف نواری، با مشکل مواجه خواهد شد و مقدار گاف را کمتر از مقدار تجربی آن به‌دست خواهد داد.

میانگین پیوند بین نیکل و اکسیژن حدود دو درصد بزرگتر از مقدار تجربی تخمین زده شده‌اند. پارامترهای ساختاری به‌دست آمده از تقریب‌های GGA و GGA+U و مقایسه آنها با تجربه نشان می‌دهند که نتایج خواص ساختاری حاصل از تقریب GGA حتی

جدول ۱. پارامترهای ساختاری و مغناطیسی به‌دست آمده پس از بهینه‌سازی ساختار چهار وجهی (I4/m) برای مقادیر مختلف پارامتر هابارد.

$E_c(eV/mol)$	$\langle Ni-O \rangle (\text{\AA})$	$V(\text{\AA}^3)$	c/a	$a(\text{\AA})$	U
۲,۸۹۹	۲,۰۸۰	۲۵۰,۵۸	۱,۴۲۶	۵,۵۹۰	۰
۲,۸۶۵	۲,۰۹۰	۲۵۳,۱۰	۱,۴۳۴	۵,۶۰۴	۴
۲,۸۵۱	۲,۰۹۸	۲۵۴,۳۹	۱,۴۳۶	۵,۶۱۴	۶
۲,۸۳۹	۲,۱۰۵	۲۵۵,۶۶	۱,۴۳۶	۵,۶۲۱	۸
-	۲,۰۵۷	۲۴۴,۸۴	۱,۴۲۴	۵,۵۶۱	تجربی [۸]
-	-	۲۴۹,۶۴	۱,۴۱۴	۵,۶۱۰	محاسباتی [۶]



شکل ۱. چگالی بار در صفحه [۰۰۱] برای اسپین بالا (سمت راست) و اسپین پایین (سمت چپ) در $U = 8$ الکترون ولت.

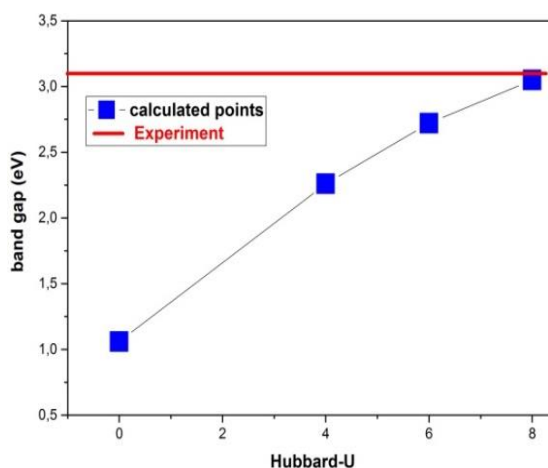
جایگزیده می‌شوند. بنابراین در نظر گرفتن پارامتر هابارد تنها برای عنصر نیکل کفایت می‌کند [۱۱]. طبق نظر مرجع [۱۲] یکی از رهیافت‌های متداول برای تعیین مقدار U مناسب، مقایسه گاف نواری محاسبه شده توسط یک مجموعه از مقادیر U با گاف نواری تجربی است. بر طبق گزارشات تجربی گاف نواری ترکیب

خواص الکترونی

طبق گزارش ژائو و همکاران [۱۰] پیکربندی الکترونی در ترکیب Sr_2NiWO_6 ، به صورت $W^{6+}: 5d^0$ و $Ni^{2+}: 3d^8$ است. همچنین با توجه به چگالی بار رسم شده در شکل ۱، تمام الکترون‌های d تنگستن شش ظرفیتی به‌خاطر هیبرید شدن با اوربیتال $2p$ اکسیژن غیر

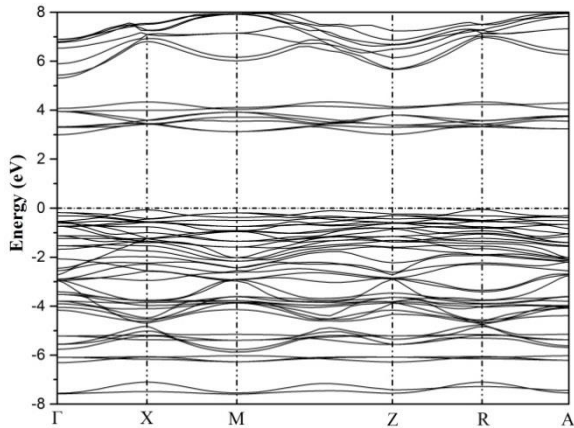
کوچکتر از مقدار تجربی آن یعنی $3/1$ الکترون ولت می‌باشد. با اعمال پارامتر هابارد تا 4 الکترون ولت اوربیتال‌های خالی $Ni2\ 3d$ ، $W\ 5d$ و $O\ 2p$ بعد از تراز فرمی به سمت انرژی‌های بزرگتر و نوارهای پر $Ni1\ 3d$ و $Ni2\ 3d$ زیر تراز فرمی به سمت انرژی‌های کوچکتر حرکت کرده و مقدار گاف افزایش می‌یابد. در اینجا ذکر دو نکته لازم است: (۱) با این که W را غیر مغناطیسی در نظر گرفته بودیم، با اعمال U هابارد شاهد جابه‌جایی حالت‌های آن هستیم. این جابه‌جایی ناشی از تأثیر غیر مستقیم هیبرید شدن $Ni\ 3d$ و $O\ 2p$ (شکل ۱) روی ترازهای انرژی W می‌باشد [۱۴]. (۲) در $U = 4$ الکترون ولت هنوز محدوده انرژی نوارهای $Ni1\ 3d$ و $Ni2\ 3d$ وسیع بوده و جایگزیدگی الکترون‌های d دیده نمی‌شود. با افزایش بیشتر U تا 8 الکترون ولت نوارهای خالی $W\ 5d$ و $O\ 2p$ و همچنین نوار ظرفیت به‌سختی جابه‌جا شده ولی اوربیتال $3d$ نیکل ضمن این که به حرکت خود ادامه می‌دهد جایگزیده‌تر نیز می‌گردد. در $U = 6$ الکترون ولت هر سه اوربیتال خالی $Ni2\ 3d$ ، $W\ 5d$ و $O\ 2p$ با هم همپوشانی دارند ولی در نهایت در $U = 8$ الکترون ولت با جدا شدن اوربیتال $Ni2\ 3d$ از دو اوربیتال دیگر گاف نواری به مقدار تجربی خود بسیار نزدیک می‌شود. به‌منظور تکمیل خواص الکترونی و تعیین مکان و نوع گاف، ساختار نواری فاز پادرومغناطیس ترکیب $SNWO$ را در تقریب $GGA+U$ و در $U = 8$ الکترون‌ولت، در شکل ۶ رسم نموده‌ایم. انتهای نوار ظرفیت در نقطه R و ابتدای نوار رسانش در نقطه Z از ناحیه اول بریلوئن قرار دارند. بنابراین، ساختار دارای گاف نواری غیر مستقیم می‌باشد.

Sr_2NiWO_6 ، $3/1$ الکترون ولت می‌باشد [۱۳]. در کار حاضر گاف نواری را برای مقادیر متفاوت 4 ، 6 ، 8 و 0 الکترون ولت با استفاده از چگالی حالت‌های الکترونی محاسبه کرده و منحنی حاصل را در شکل ۲ رسم نمودیم. در ضمن محاسبات $DFT+U$ با افزایش مقدار U ، گاف



شکل ۲. گاف نواری محاسبه شده با $DFT+U$ برحسب پارامتر هابارد و مقایسه با مقدار تجربی (خط افقی قرمز رنگ).

نواری بزرگتر شده و در $U = 8$ الکترون ولت به مقدار تجربی خود می‌رسد. این نتیجه در واقع تأیید کننده این حقیقت است که وارد کردن تصحیح هابارد دقت محاسبه گاف نواری را در مقایسه با DFT بهبود می‌بخشد [۱۲]. شکل‌های ۳، ۴ و ۵ نیز به ترتیب چگالی حالات کل و جزئی برای مقادیر متفاوت U و چگالی حالات جزئی برای $U = 8$ الکترون ولت را نشان می‌دهند. لازم به ذکر است که $Ni1$ و $Ni2$ در شکل ۴ و ۵ بیانگر اتم‌های نیکل قطبیده اسپینی و به ترتیب نشان دهنده اتم‌های با اسپین بالا و پایین هستند. با توجه به شکل ۳ در تقریب GGA نوار ظرفیت عمدتاً از اوربیتال‌های $Ni\ 3d$ و $O\ 2p$ و نوار رسانش از $Ni2\ 3d$ تشکیل شده‌اند. با توجه به رسانش از $Ni2\ 3d$ تشکیل شده‌اند. با توجه به نزدیکی نوار اوربیتال $3d$ نیکل به تراز فرمی و نوار ظرفیت مقدار گاف بسیار

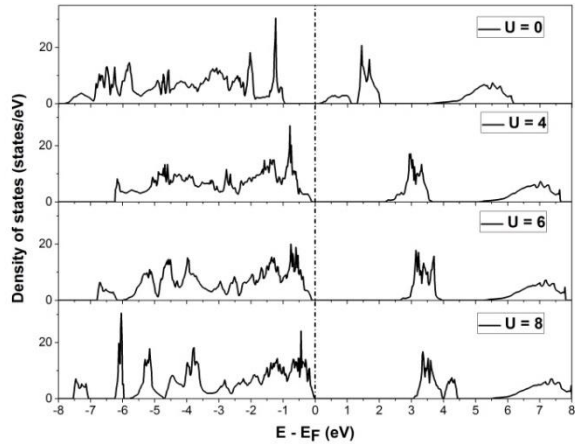


شکل ۱. ساختار نواری فاز پادفرومغناطیس SNWO در تقریب $GGA+U$ در $U = 8$ الکترون ولت در نقاط $\Gamma (0, 0, 0)$ ، $X (0, 0, 0.5)$ ، $M (0, 0.5, 0.5)$ ، $Z (0, 0, 0.5)$ ، $R (0.5, 0, 0.5)$ و $A (0.5, 0, 0.5)$ از ناحیه اول بریلوئن.

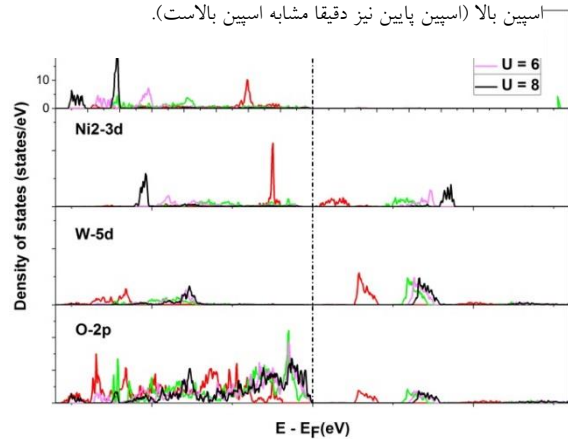
خواص مغناطیسی

خواص مغناطیسی پروسکایت‌های دوگانه نوعاً تحت کنترل برهم‌کنش‌های ابرتبادلی بلندبرد است که در مورد ترکیب Sr_2NiWO_6 این برهم‌کنش از طریق زنجیره‌های $Ni^{2+}-O^{2-}-W^{6+}-O^{2-}-Ni^{2+}$ صورت می‌گیرد [۸]. با دقت در چگالی حالت‌های جزئی در شکل ۵ می‌توان بینش بیشتری نسبت به این برهم‌کنش به دست آورد. محدوده انرژی اورتیتال $2p$ اکسیژن از -6 تا 0 الکترون ولت قرار دارد. در این محدوده اورتیتال $3d$ مربوط به اتم $Ni1$ در جهت اسپین پایین و اورتیتال $3d$ مربوط به اتم $Ni2$ در جهت اسپین بالا با $2p$ اکسیژن تشکیل هیبرید داده‌اند. بنابراین در حقیقت برهم‌کنش ابرتبادلی مغناطیسی بین دو اتم نیکل از طریق تشکیل هیبرید بین $Ni 3d$ و $O 2p$ رخ می‌دهد (شکل ۱).

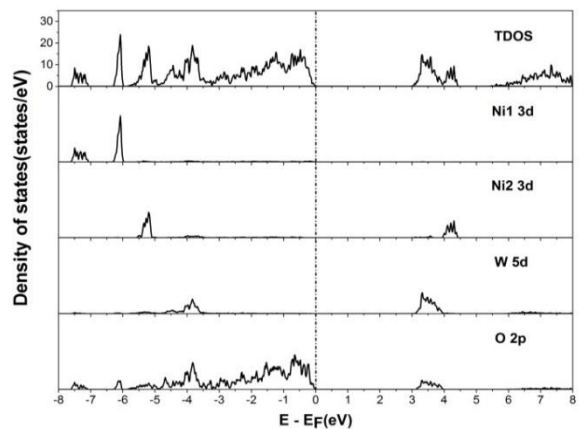
در قسمت قبل اشاره شد که پیکربندی الکترونی در ترکیب Sr_2NiWO_6 ، به صورت W^{6+} و Ni^{2+} می‌باشد. درستی این پیکربندی با توجه به شکل ۵ قابل تأیید است. همان‌طور که مشاهده می‌شود بیشتر حالت‌های $W 5d$ بالای تراز فرمی بوده و فقط تعداد کمی حالت



شکل ۳. چگالی حالت‌های الکترونی کل برحسب پارامتر هابارد برای اسپین بالا (اسپین پایین نیز دقیقاً مشابه اسپین بالاست).



شکل ۴. چگالی حالت‌های الکترونی جزئی برای مقادیر متفاوت پارامتر هابارد.



شکل ۵. چگالی حالت‌های الکترونی کلی و جزئی برای $U = 8$ الکترون ولت.

مختلف پارامتر هابارد در جدول ۲ ذکر شده‌اند (گشتاور مداری زاویه‌ای به علت کوچک بودن صرف نظر شده است). همان‌طور که مشاهده می‌شود گشتاورهای مغناطیسی بلور SNWO و یون نیکل به دست آمده در کار حاضر سازگاری خوبی با نتایج حاصل از محاسبات تیم تحقیقاتی لیو دارد [۶]. گشتاور مغناطیسی در تقریب GGA برابر با $1/58 \mu_B$ به دست آمد. با اعمال تصحیح همبستگی قوی و افزایش پارامتر هابارد، به علت جایگزیده‌تر شدن الکترون‌ها این مقدار افزایش یافته و در نهایت در $U = 8$ الکترون ولت به $1/81 \mu_B$ رسید.

زیر تراز فرمی قرار دارند که ناشی از هیبرید شدن این اوربیتال با اوربیتال O 2p می‌باشند. به عبارت دیگر همان‌طور که فرض کرده بودیم تنگستن در این ساختار غیر مغناطیسی بوده و الکترونی در نوار d خود ندارد، $W^{6+}: 5d^0$. در مورد اتم نیکل نیز با توجه به تقارن $Ni1$ و $Ni2$ ، تمام حالت‌های با اسپین بالا (Ni1) زیر تراز فرمی و کاملاً پر بوده ولی حالت‌های با اسپین پایین (Ni2) کمی بیشتر از نیمه پر هستند. به عبارت دیگر پیکربندی الکترونی این یون به صورت $Ni^{2+}: 3d^8$ بوده و دارای مغناطش غیر صفر می‌باشد. گشتاور مغناطیسی اسپینی مؤثر نیکل و همچنین بلور SNWO برای مقادیر

جدول ۲. گشتاور مغناطیسی مؤثر نیکل و بلور SNWO در مطالعه حاضر و کار دیگران.

تجربی [۹]	محاسباتی [۶]		کار حاضر				پارامتر هابارد
	۵	۰	۸	۶	۴	۰	
-	۱/۷۵	۱/۵۸	۱/۸۱	۱/۷۶	۱/۷۰	۱/۵۸	گشتاور مغناطیسی اسپینی مؤثر نیکل (μ_B)
۲/۸۷	۲/۰۰	۲/۰۰	۱/۹۹	۲/۰۰	۲/۰۰	۲/۰۲	گشتاور مغناطیسی مؤثر بلور (μ_B)

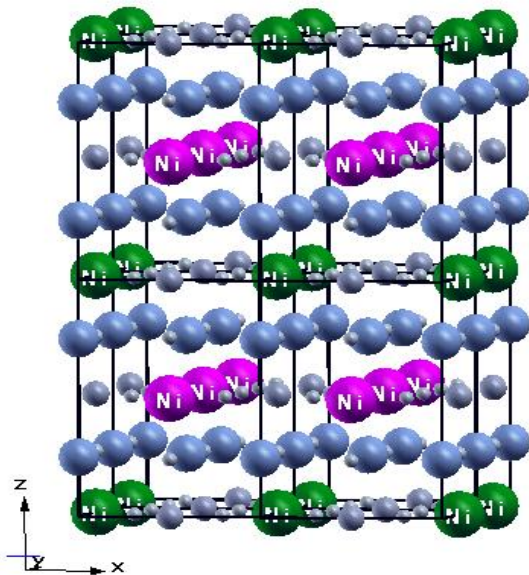
مداری کوچک (حدود 0.07 مگنتون بوهر برای اتم نیکل) اثر اسپین-مدار قابل توجهی ندارد.

جدول ۳. انرژی کل به ازاء واحد مولکول در فازهای مغناطیسی مختلف

فاز مغناطیسی	پارامغناطیس	فرومغناطیس	پادفرومغناطیس
انرژی (Ry)	۱۷۱۶,۹۵۳۴	۱۷۱۷,۱۶۵۹	۱۷۱۷,۱۷۵۰

پس از یافتن مقدار مناسب U_{Ni} ، محاسبات را برای سه فاز مغناطیسی پارامغناطیس، فرومغناطیس و پادفرومغناطیس به منظور یافتن پایدارترین فاز ادامه داده و نتایج را در جدول ۳ ذکر نموده‌ایم. در ساختار پادفرومغناطیس مورد مطالعه ما اسپین اتم‌های نیکل در یک صفحه ab به صورت فرومغناطیس و در امتداد محور c و در صفحات ab متوالی به صورت

می‌توان گشتاور مغناطیسی یون‌های Ni را با فرض صفر شدن گشتاور مداری زاویه‌ای با رابطه $\mu_{eff} = 2\mu_B\sqrt{S(S+1)}$ که با استفاده از آن $\mu_{eff} = 2/83$ خواهد شد. در حقیقت به خاطر اینکه در بلور، الکترون‌های d نیکل به دلیل تشکیل هیبرید با اوربیتال‌های دیگر کاملاً جایگزیده نیستند، مقدار گشتاور مغناطیسی به دست آمده توسط کد از مقدار حاصل از رابطه مذکور کوچکتر است [۱۵]. همچنین گشتاور کل محاسبه شده در این مقاله حدود 0.88 مگنتون بوهر با تجربه اختلاف دارد. برای یافتن دلیل این اختلاف، اثر اسپین-مدار مورد بررسی قرار گرفت. همان‌طور که از ابتدا نیز قابل پیش بینی بود، گشتاور



شکل ۷. فاز پادفرومغناطیس مطالعه شده (رنگ سبز و بنفش به ترتیب بیانگر جهت اسپینی بالا و پایین می‌باشند. اتم‌های خاکستری از کوچک به بزرگ: اکسیژن، تنگستن و استرانسیم).

مراجع

- [1] M.A. Islam, J.M. Rondinelli, J.E. Spanier, Normal mode determination of perovskite crystal structures with octahedral rotations: theory and applications, *Journal of Physics: Condensed Matter* 25 (2013) 175902 (14pp).
- [2] M. Bonilla, D.A. Landnez Téllez, J. Arbey Rodriguez, J. Albino Aguiar, J. Roa-Rojas, Study of half-metallic behavior in Sr_2CoWO_6 perovskite by ab initio DFT calculations, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 320 (2008) e397-e399.
- [3] L. Ortega-SanMartin, J.P. Chapman, E. Hernández-Bocanegra, M. Insausti, M. I. Arriortua, T. Rojo, Structural phase transitions in the ordered double perovskite $\text{Sr}_2\text{MnTeO}_6$, *Journal of Physics: Condensed Matter* 16 (2004) 3879-3888.
- [4] E.J. Fresia, L. Katz, R. Ward, Cation Substitution in Perovskite-like Phases, *Journal of American Chemical Society* 81 (1959) 4783-4785.
- [5] P. Giannozzi et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open- source software project for

پادفرومغناطیس در نظر گرفته شده‌اند (شکل ۷). با توجه به این که طبق گزارشات تجربی دمای نل ترکیب Sr_2NiWO_6 حدود ۵۴ کلوین می‌باشد [۸] انتظار داریم فاز پادفرومغناطیس کمترین مقدار انرژی را داشته باشد. همان‌طور که در جدول ۳ مشاهده می‌شود ساختار پادفرومغناطیس با اختلاف حدود ۰٫۰۰۹ الکترون ولت با فرومغناطیس و اختلاف حدود ۰٫۲۲۳ الکترون ولت با پارامغناطیس به‌عنوان فاز مغناطیسی پایدار به‌دست آمد.

نتیجه‌گیری

در این کار ابتدا با بهینه‌سازی کامل ساختار چهار وجهی Sr_2NiWO_6 برای مقادیر مختلف پارامتر هابارد، پارامترهای شبکه ترکیب محاسبه و با تجربه و کارهای دیگران مقایسه شدند. در مرحله دوم برای یافتن مقدار مناسب پارامتر هابارد نیکل، گاف نواری ترکیب را با استفاده از چگالی حالت‌های الکترونی در تقریب $\text{GGA}+U$ و GGA برای مقادیر مختلف U محاسبه نمودیم که در $U = 8$ الکترون ولت کافی نزدیک به تجربه و در حدود ۳٫۰۵ الکترون ولت به‌دست آمد. سپس با به‌کار بردن تصحیح همبستگی قوی و با مقدار پارامتر هابارد مناسب، خواص مغناطیسی ترکیب، مورد مطالعه قرار گرفته و گشتاور مغناطیسی مؤثر نیکل μ_B ۱٫۸۱ به‌دست آمد. در نهایت و پس از آخرین مرحله محاسبات، ساختار Sr_2NiWO_6 به‌عنوان عایق پادفرومغناطیس شناخته شد که این نتیجه با تجربه سازگاری کامل دارد [۸ و ۱۳].

- [11] S. Vasala, H. Saadaoui, E. Morenzoni, O. Chmaissem, T.Sh. Chan, J.M. Chen, Y.Y. Hsu, H. Yamauchi, M. Karppinen, Characterization of magnetic properties of Sr_2CuWO_6 and $\text{Sr}_2\text{CuMoO}_6$, *Physical Review B* 89 (2014) 134419 (9pp).
- [12] M.E. Arroyo-de Dompablo, A. Morales-García, M. Taravillo, DFT+U calculations of crystal lattice, electronic structure, and phase stability under pressure of TiO_2 polymorphs, *The Journal of Chemical Physics* 135 (2011) 054503 (9pp).
- [13] T. Kumar Mandal and J. Gopalakrishnan, New Route to Ordered Double Perovskites: Synthesis of Rock Salt Oxides, Li_4MWO_6 , and Their Transformation to Sr_2MWO_6 (M = Mg, Mn, Fe, Ni) via Metathesis, *Chemistry of Materials* 17 (2005) 2310-2316.
- [14] Sh. Lv, X. Liu, H. Li, Zh. Wu, J. Meng, Magnetic and electronic structures of $\text{Ba}_2\text{MnMoO}_6$ from first-principles calculations, *Computational Materials Science* 49 (2010) 266–269.
- [15] Y. Fujioka, J. Frantti, R.M. Nieminen, Electronic Energy Band Structure of the Double Perovskite Ba_2MnWO_6 , *Journal of Physical Chemistry B* 112 (2008) 6742–6746.
- quantum simulations of materials, *Journal of Physics: Condensed Matter* 21 (2009) 395502 (19pp).
- [6] Y.P. Liu, H.R. Fuh, Y.K. Wang, Expansion research on half-metallic materials in double perovskites of $\text{Sr}_2\text{BB}_0\text{O}_6$ (B = Co, Cu, Ni; B_0 = Mo, W, Tc, Re, BB_0 = FeTc), *Computational Materials Science* 92 (2014) 63–68.
- [7] H. Hsu, P. Blaha, R.M. Wentzcovitch, Ferromagnetic insulating state in tensile-strained LaCoO_3 thin films, *Physical Review B* 85 (2012) 140404 (12pp).
- [8] C.G.F. Blum, A. Holcombe, M. Gellesch, M. I. Sturza, S. Rodan, R. Morrow, A. Maljuk, P. Woodward, P. Morris, A.U.B. Wolter, B. Büchner, S. Wurmehl, Flux growth and characterization of Sr_2NiWO_6 single crystals, *Journal of Crystal Growth* 421 (2015) 39-44.
- [9] S.Z. Tian, J.C. Zhao, C.D. Qiao, X.L. Ji, B.Z. Jiang, Structure and properties of the ordered double perovskites Sr_2MWO_6 (M = Co, Ni) by sol-gel route, *Materials Letters* 60 (2006) 2747–2750.
- [10] F. Zhao, Zh. Yue, Zh. Gui, L. Li, Preparation, Characterization and Microwave Dielectric Properties of A_2BWO_6 (A = Sr, Ba; B = Co, Ni, Zn) Double Perovskite Ceramics, *Japanese Journal of Applied Physics* 44 11 (2005) 8066–8070

Investigation structural, electronic and magnetic properties of Sr_2NiWO_6 double perovskite using ab initio calculations

Tayebeh Sadat Hashemifar, Ali Mokhtari¹

Department of Physics, Faculty of Science, Shahrekord University, Shahrekord , Iran

Abstract

Double perovskites have been found to be very interesting material among researchers since they exhibit a wide variety of physical properties. In this paper, the Sr_2NiWO_6 double perovskite was studied using ESPRESSO package within the framework of Density Functional Theory (DFT). According the experimental results, this perovskite is an insulator and has a band gap about 3.1 eV. After structural optimization, in the first step, electronic properties of compound were calculated using generalized gradient approximation (GGA) and strong correlation correction (GGA+U) with different values of Hubbard parameter (U). The optimum value of the U parameter was chosen using results of strong correlation correction and available experimental data in the step. Finally, the stable magnetic phase of Sr_2NiWO_6 between paramagnetic, ferromagnetic and anti-ferromagnetic phases was studied using optimized Hubbard parameter.

Keywords: Double perovskite, density functional theory, generalized gradient approximation, strong correlation correction, Hubbard parameter.

¹Corresponding Author: mokhtari@sci.sku.ac.ir