

## عنوان مقاله:

بررسی تأثیر نظم مغناطیسی بر خواص ساختاری و الکترونی پروسکایت‌های دوگانه  $Sr_2BWO_6$  ( $B = Co, Cu, Ni$ ) در فاز تتراگونال با روش ابتدا به ساکن

## محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 19، شماره 2 (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

## نویسندگان:

طیبه سادات هاشمی فر - گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

علی مختاری - گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

## خلاصه مقاله:

خواص ساختاری و الکترونی پروسکایت‌های دوگانه  $Sr_2BWO_6$  ( $B = Co, Ni, Cu$ ) در سه نظم غیرمغناطیسی، فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، با استفاده از نظریه تابعی چگالی، در تقریب‌های شیب تعمیم یافته (GGA) و تصحیح همبستگی قوی (GGA+U) مورد مطالعه قرار گرفت. با از بین رفتن نظم پادفرومغناطیس و گذار به فاز غیرمغناطیسی در ساختار تتراگونال  $Sr_2CoWO_6$ ، یک گذار الکترونی از حالت نیم‌فلز به فلز و در دو ساختار تتراگونال  $Sr_2NiWO_6$  و  $Sr_2CuWO_6$  از عایق به فلز صورت می‌گیرد. علاوه بر این در  $Sr_2CoWO_6$  گذار الکترونی دیگری تحت تأثیر چرخش هشت‌وجهی کبالت و احتمالاً در اثر تغییرات برهم‌کنش‌های مغناطیسی ناشی از آن، از حالت فلز به نیم‌فلز رخ می‌دهد. به لحاظ ساختاری، با حذف برهم‌کنش‌های مغناطیسی پارامترهای شبکه در  $Sr_2CoWO_6$  و  $Sr_2NiWO_6$  کوچک‌تر می‌شوند، اما پارامترهای شبکه  $Sr_2CuWO_6$  به دلیل غلبه انحراف یان-تلا، با از بین رفتن نظم مغناطیسی بزرگ‌تر می‌شوند.

## کلمات کلیدی:

پروسکایت دوگانه، نظریه تابعی چگالی، تصحیح همبستگی قوی، برهم‌کنش مغناطیسی، نیم‌فلز

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1157485>

