فصلنامه‌ی علمی

علم و مهندسی سرامیک

دوره‌ی ۱۰، شماره‌ی ۲، تابستان ۱۴۰۰

محاسبه‌ی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی پروسکایت مضاعف Sr_2NiWO_6 در دو فاز با استفاده از روش FP-LAPW

نوع مقاله: علمی پژوهشی

حمدالله صالحی*، راضیه میرسالاری، پیمان امیری

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

*salehi_h@scu.ac.ir**

اطلاعات مقاله:

دریافت: ۱۷ خرداد ۱۳۹۹

پذیرش: ۱۳ تیر ۱۴۰۰

صفحه ۶۴ تا صفحه ۸۰

در دسترس در نشانی:
www.ijcse.ir

زبان نشریه: فارسی

شاپا چاپی: ۲۳۵۲-۲۳۲۲

شاپا الکترونیکی:
۲۷۸۳-۳۰۰۳

چکیده:

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی پروسکایت مضاعف Sr_2NiWO_6 در دو فاز ساختاری تتراگونال و مکعبی مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده‌ی خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از تقریب GGA و اعمال پارامتر هابارد با کد محاسباتی Wien2k انجام شد. در این تحقیق خواص ساختاری ترکیب مورد نظر از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی و مشتق آن محاسبه شده است. بررسی ساختار نواری وجود شکافی به اندازه ی ۲/۸۰ الکترون ولت را برای فاز تتراگونال و ۲/۷۶ الکترون ولت برای فاز مکعبی را نشان می‌دهد که با شکاف اپتیکی آن هم‌خوانی دارد .هم‌چنین ضریب‌شکست آن برابر ۲/۲ به دست آمد، که تطابق خوبی با نتایج تجربی دارد.

کلیدواژه:

پروسکایت مضاعف، نظریه ی تابعی چگالی، مدول حجمی، ساختار نواری.

کد DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5

۱- مقدمه

نام ساختار پروسکایت بعد از کشف ماده ی معدنی کلسیم تیتانات با فرمول شیمیایی $CaTiO_3$ نام‌گذاری شد. پروسکایت‌ها به دلیل داشتن ویژگی‌های فیزیکی وسیع، جذابیت‌های زیادی در بلورشناسی ایجاد کردند. اغلب یون های فلزی و تعداد قابل توجهی از آنیون‌های جدول تناوبی در ساختار پروسکایت جای می‌گیرند. اکسیدهای پروسکایت

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

با فرمول شیمیایی ABO_3 دارای ترکیبات متنوعی هستند که خصوصیت‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی جالبی دارند. اگر مکان B توسط دو کاتیون مختلف B و'B اشغال شود پروسکایت مضاعف با فرمول شیمیایی $A_2BB'O_6$ تشکیل می‌شود. پروسکایت‌های مضاعف دارای فرمول شیمیایی $A_2BB'O_6$ هستند که عناصر زیادی می‌توانند در مکان B و 'B قرار بگیرند [۱]. درساختارهای پروسکایت مضاعف فلزات قلیایی (A) و فلزات واسطه (B و 'B) می توانند به روش‌های مختلفی با هم ترکیب و به مواد فرومغناطیس، پادفرومغناطیس، نیم‌فلز و ابررسانا تبدیل شوند. باتوجه به نوع ساختار مشترک این ترکیبات، سازگاری شبکه در سرتاسر ساختار پروسکایت‌های مضاعف قابل مشاهده است. ویژگی‌های پروسکایت‌های مضاعف عمدتاً توسط مکان B و 'B به دست می‌آید [۲]. این ترکیبات دارای خواص فیزیکی متنوع و انعطاف‌پذیری شیمیایی بالایی هستند. در طول دهه‌های گذشته مشخص شد با تغییرتعداد الکترون‌های d کاتیون B یا تغییر در اندازه‌ی کاتیون‌ها خواص ساختاری و مغناطیسی پروسکایت‌های مضاعف $A_2BB'O_6$ تغییر می‌کند [۳].

تعدادی از پروسکایت‌های مضاعف $A_2BB'O_6$ عایق هستند که این ترکیبات به عنوان مواد دی‌الکتریک استفاده می شوند. به عنوان مثال در دی‌الکتریک‌های ماکروویو که در ارتباطات کاربرد دارند. ترکیبات عایق پروسکایت‌های مضاعف می‌توانند دی‌الکتریک‌های خوبی باشند و ثابت شده پروسکایت‌های مضاعف دارای ثابت دی‌الکتریک بالا هستند. هم چنین ترکیبات نیم‌رسانایی با شکاف انرژی کوچک در پروسکایت‌های مضاعف وجود دارند که می‌توانند به عنوان الکترود سلول‌های سوختی مفید باشند. پروسکایت های مضاعف دارای خواص مغناطیسی جالبی هستند و اکثر آن‌ها با ساختار پادفرومغناطیس گزارش شده‌اند. تعداد بسیار کمی از این ترکیبات فرومغناطیس هستند، حدود ۳۰ عضو فرومغناطیس در این ترکیبات شناسایی شده است با این حال در پروسکایت‌های مضاعف با دو مکان مختلف B و 'B ابرتبادل فرومغناطیسی بین کاتیون‌های همسایه اتفاق می افتد. همچنین ۳۰ ترکیب با چینش فری مغناطیس در این پروسکایت‌ها کشف شده که بسیاری از آن‌ها نیم‌فلز هستند [۳].

مطالعه‌ی اکسیدهای فلزات واسطه با ساختار پروسکایت مضاعف در سال ۱۹۵۰ شروع و بسیاری از آن‌هادر اواخر دهه‌ی ۱۹۵۰ تا اواسط دهه‌ی ۱۹۷۰ مورد مطالعه قرار گرفتند، اما به دلیل ویژگی‌های مغناطیسی این ترکیبات در دمای اتاق در اواخر دهه‌ی ۱۹۹۰ دوباره مورد توجه پژوهشگران قرار گرفت.

اولین مطالعات تجربی روی این خانواده در سال ۱۹۵۹ توسط فرزیا و همکاران انجام شد [۴]. Sr_2NiWO_6 عضوی از خانواده‌ی بزرگ پروسکایت‌های مضاعف است که در دستهٔ عایق‌های پادفرومغناطیس جای می‌گیرد. این ترکیب در دمای اتاق دارای ساختار تتراگونال [۵]، اما در دماهای بالا دارای گذارفاز است ومشخص شده است که ترکیب های Sr_2NiWO_6 و Sr_2MgWO_6 در دماهای بالا (۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد) از ساختار تتراگونال به ساختار مکعبی تغییر شکل می‌دهند [۶]. فاز مکعبی این ترکیب در سال ۲۰۰۵ توسط ژائو و همکاران شرح داده شد [۷]. در سال

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

۲۰۰۶ تیان[۱] و همکاران ساختار و مشخصات پروسکایت‌های مضاعف Sr_2NiWO_6 و Sr_2CoWO_6 را به روش سل-ژل بررسی کردند و موفق شدند با استفاده از این روش هر دو ترکیب را تهیه و ساختار بلوری و خواص مغناطیسی‌شان را بررسی کنند. آن‌ها دمای نیل را برای این ترکیبات به دست آوردند. علاوه بر این گشاور مغناطیسی اسپینی مؤثر Sr_2NiWO_6 را ۲/۸۷ به دست آوردند که تقریباً برابر با اسپین Ni^{2+}، ۲/۸۲ است که نشان‌دهنده ی عدم وجود گشتاور در W است. نتایج کار آن‌ها نشان داد گشتاور مغناطیسی در پروسکایت‌های مضاعف از واکنش بین یون های Ni و Co با W انجام می‌شود [۸]. هم چنین درسال ۲۰۱۰ و ۲۰۱۲ منون[۲] و همکاران با استفاده از اسپکتروسکوپی رامان در دمای بالا گذارهای فاز پروسکایت های مضاعف از جمله Sr_2NiWO_6 بررسی و یک انتقال فاز برای Sr_2NiWO_6 (از I4/m به Fm3m در دمای حدود ۳۰۰ درجه‌ی سانتیگراد) پیدا کردند [۶]. در سال ۲۰۱۴ بلام[۳] و همکاران افزایش شار و مشخصات Sr_2NiWO_6 را به صورت تجربی مورد بررسی قرار دادند و توانستند تک بلور این ترکیب را بسازند هم چنین خواص ساختاری، مغناطیسی و ترمودینامیکی آن را بررسی کنند [۹] و ثابت کرد که این ترکیب در دمای ۵۴ کلوین به صورت پادفرومغناطیس رفتار می‌کند. در این مقاله خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی ترکیب Sr_2NiWO_6 در دو فاز تتراگونال و مکعبی در فاز مغناطیسی پایدار پادفرومغناطیس محاسبه شده است.

۲- روش انجام محاسبات

محاسبات با استفاده ازنظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)[۴] و روش امواج تخت تقویت شده‌ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW)[۵] و با استفاده ازکد محاسباتی Wien2k [۱۰]، انجام شده است. پارامترهمگرایی RK_{max}=۷ در نظرگرفته شده است،این پارامتراندازه‌ی اتم‌های پایه را در محاسبات کنترل می‌کند و تعداد نقاط فضای k برای انتگرال‌گیری درمنطقه‌ی اول بریلوئن ۵۰۰ نقطه در نظرگرفته شد. برای جداسازی الکترون‌های ظرفیت از مغزه، انرژی جدایی بین الکترون‌های ظرفیت و مغزه ۶- ریدبرگ در نظر گرفته شده است. پس ازبررسی ساختار بلور، شعاع کره‌ی مافین-تین برای عناصر Sr، Ni، Wو O برابر با ۲/۴۰، ۱/۹۰، ۱/۹۰و ۱/۷۰ آنگستروم در نظر گرفته شد. هم چنین با تعیین مبنای همگرایی ۰/۰۰۰۱ ریدبرگ برای انرژی، بعد از ۱۵ چرخه همگرایی مورد نظر به دست آمد. در این محاسبات مقدار ثابت شبکه برای فاز تتراگونال برابر a=b=۵/۶۳ و c=۷/۹۳، و برای فاز مکعبی a=۷/۸۹ آنگستروم استفاده شده است. در این ترکیب به دلیل وجود الکترون‌های جایگزیده f و d، و وجود برهم‌کنش قوی، نیروی کولنی بین این الکترون‌ها توسط تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) به خوبی توصیف نمی‌شود. پس باید جمله‌ی جایگزیدگی هابارد[۶] (ایده‌ی اصلی این روش به این صورت است که الکترون‌ها را به دو زیرگروه تقسیم می‌کنند. یک زیرگروه الکترون های جایگزیده‌ی d و f که اندرکنش

[۱] S. Z. Tian
[۲] B. Manoun
[۳] C.G.F. Blum

[۴] Density Functional Theory
[۵] Full Potential Linear Augmented plane wave
[۶] Hubbard

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

کولنی d-d یا f-f برای آن‌ها از طریق یک هامیلتونی مدل وارد می‌شود و زیرگروه دیگر الکترون‌های غیرجایگزیده‌ی s و p هستند که با استفاده از پتانسیل تک‌ذره‌ای مستقل از اربیتال توصیف می‌شوند.در این روش، اندرکنش کولنی استتارشده، (جایگزیده) عامل قطبش اسپینی و قطبش اربیتالی است.) به تقریب شیب تعمیم‌یافته اضافه شود. به این صورت که الکترون‌های جایگزیده‌ی d و f به وسیله‌ی جمله‌ی هابارد و الکترون‌های غیرجایگزیده‌ی s و p با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته محاسبه می‌شوند.

در این کار مقادیر مختلف پارامتر هابارد برای ترکیب محاسبه و با مقایسه‌ی مقادیر مختلف شکاف انرژی [۱] با مقدارتجربی، مقدار U=6 الکترون را برای هر دو فاز ساختاری انتخاب شد. با توجه به این که ترکیب عایق پادفرومغناطیس است، و هم‌چنین با مقایسه‌ی انرژی در دو فاز مغناطیسی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، فاز پایدار پادفرومغناطیس برای محاسبات انتخاب شده است.هم‌چنین در تجزیه و تحلیل داده‌های به دست آمده و جفت و جور کردن آن‌ها با خواص اپتیکی مختلط ازتبدیلات کرامرز-کرونیگ (KK) استفاده شد. تبدیلات کرامرز-کرونیگ این امکان را می‌دهد که سهم حقیقی تابع پاسخ نوری را با علم به سهم موهومی در تمام بسامدها و بالعکس تعیین کرد.

۳- نتایج

۳-۱- پارامترهای ساختاری

نمودار تغییرات انرژی نسبت به حجم (E-V) علاوه بر پارامترهای ساختاری، بینشی نسبت به پایداری سامانه در اختیارقرار می‌دهد. هم‌چنین مدول حجمی بیانگر سختی و مقاومت مواد در برابر فشار و شکنندگی است، هر چه این کمیت بیش‌تر باشد بلور سخت‌تر و خاصیت تراکم‌پذیری آن کم‌تر است. تراکم‌پذیری (K) وارون مدول حجمی (B_0) است، و با سختی بلور رابطه‌ی عکس دارد. با استفاده از پارامترهای بهینه شده، ثابت شبکه‌ی تعادلی توسط تقریب GGA+U محاسبه شده است. هم‌چنین مدول حجمی و مشتق مدول حجمی با محاسبه‌ی سامانه در حجم‌های مختلف و سپس برازش منحنی‌های انرژی- حجم استخراج شده‌اند. با مقایسه‌ی انرژی مربوط به حجم‌های مختلف سلول واحد می‌توان پایدارترین حالت را شناسایی و به کمک آن مؤلفه‌های ساختاری بهینه را به دست آورد. تغییرات انرژی بر حسب حجم با استفاده ازمعادله‌ی مورناگون[۲] به صورت زیرمحاسبه می‌شود [۱۱].

$$E(V) = E + \frac{BV}{B'}\left[\frac{(V/V_0)^{1-B'} - B'}{B'-1}\right] \qquad (۱)$$

که در آن V_0 حجم سلول اولیه، E انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر، B مدول حجمی و B' مشتق آن (نسبت به فشار است و بیانگر معیاری از تغییر سختی بلور با اعمال فشار است و بیانگر وابستگی مدول حجمی به فشار است) می‌باشد. نمودار تغییرات انرژی برحسب حجم در دو فاز تتراگونال و مکعبی به ترتیب در شکل ۱ (الف) و (ب) نشان داده شده است. نتایج حاصل از محاسبه‌ی ثابت شبکه‌ی تعادلی، مدول حجمی و مشتق آن با اعمال پارامتر هابارد (U=6) در جدول ۱ آورده. نتایج به دست آمده سازگاری

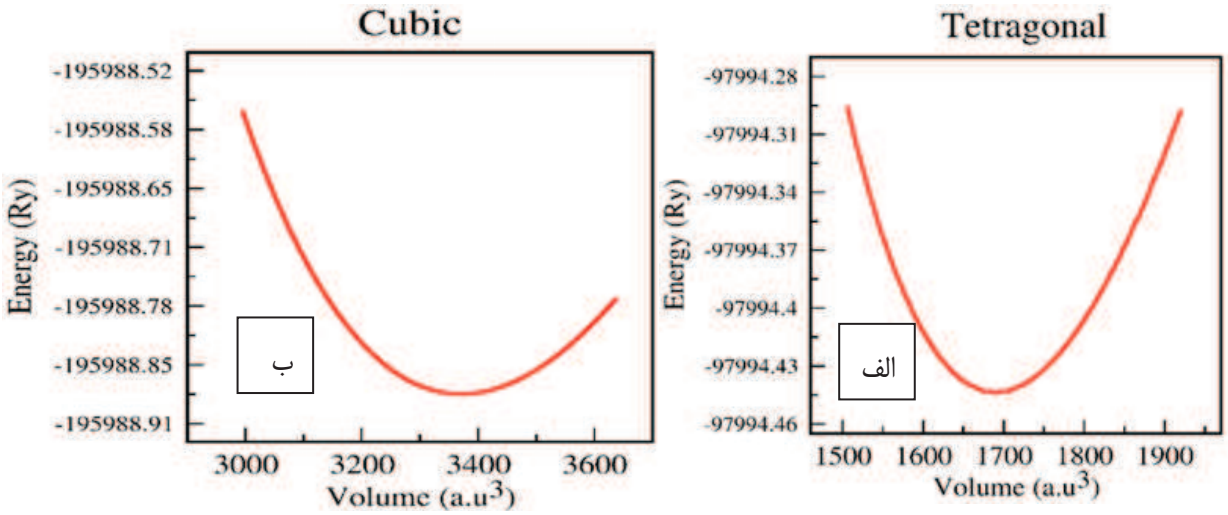
[۱] Band gap

[۲] Francis Dominic Murnaghan

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

خوبی با نتایج تجربی دارد [۹].



شکل ۱- نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم (الف) تتراگونال و (ب) مکعبی.

جدول ۱- نتایج حاصل از پارامترهای ساختاری ترکیب Sr_2NiWO_6

فاز ساختاری	ثابت شبکه a (A^0)	ثابت شبکه c (A^0)	B(GPa)	B'	$K(Gpa)^{-1}$
تتراگونال	۵٫۶۲	۷٫۹۲	۱۷۲٫۹۷	۴٫۶۹	۰٫۰۰۵۸
مقدار تجربی [۹]	۵٫۶۳	۷٫۹۳	ـــــ	ـــــ	-
مقدار نظری [۱۲]	۵٫۶۱	۷٫۹۳	ـــــ	ـــــ	-
مکعبی	۷٫۹۳	۷٫۹۳	۱۷۱٫۵۸	۵٫۰۰	۰٫۰۰۵۸
مقدار تجربی [۷]	۷٫۹۰	۷٫۹۰	ـــــ	-	-
مقدار نظری	ـــــ	ـــــ	ـــــ	-	-

۳-۲- ساختار نواری

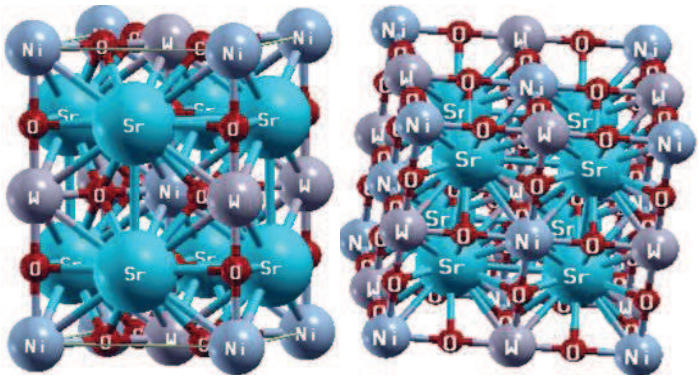
ترکیب Sr_2NiWO_6 دارای گروه فضایی m/ ۱۴ با شماره ی ۸۷ است [۵]، و فاز مکعبی دارای گروه فضایی Fm3m با شماره ی ۲۲۵ است [۷]. در شکل ۲ ساختار Sr_2NiWO_6 در هر دو فاز ساختاری توسط نرم‌افزار Xcrysden نمایش داده شده است.

نمودار ساختار نواری در بازه‌ی انرژی ۱۰ تا ۱۰- الکترون‌ولت برای ترکیب Sr_2NiWO_6 در هر دو فاز ساختاری تتراگونال و مکعبی پادفرومغناطیس با استفاده از تقریب GGA+U در شکل های ۳ و ۴ نشان داده شده است. در فاز تتراگونال در حالت اسپین بالا و پایین یک شکاف انرژی غیرمستقیم در مسیر $X \rightarrow \Gamma$ مشاهده می‌شود و برای فاز مکعبی در حالت اسپین بالا و پایین، شکاف

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

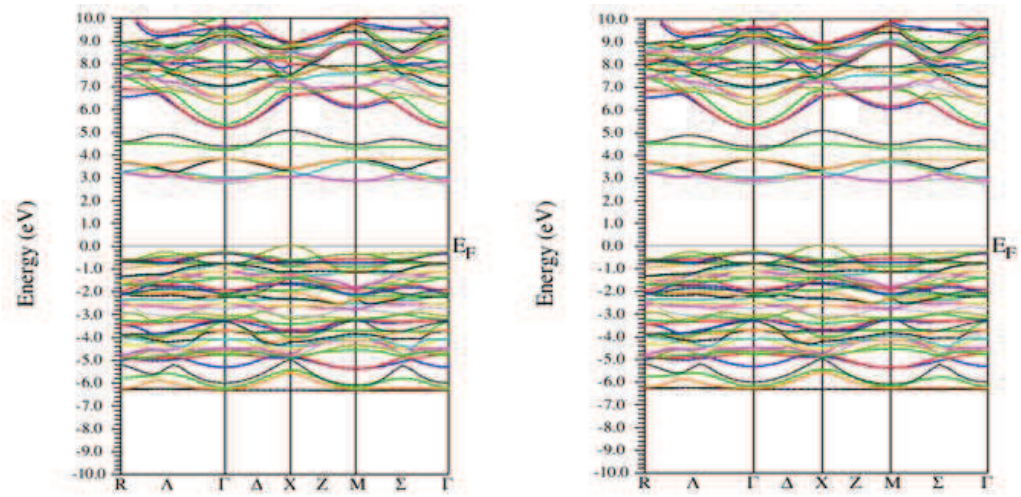
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

انرژی $X \rightarrow \Gamma$ غیرمستقیم در مسیر مشاهده می‌شود. شکاف انرژی این ترکیب در فـاز تتراگونـال در نتـایج تجربـی ۳/۱ الکترون ولت به دست آمده است، امـا درفـاز مکعبـی مقـدار شکاف انرژی ۲/۷۶ الکترون ولـت بـرآورد شـد، کـه داده‌ی تجربی در این مورد وجود ندارد. بنـابراین شـکاف انـرژی در این فاز با ترکیبات مشابه مقایسه شده است. نتایج حاصل از ساختار نواری تطابق خوبی بـا داده‌هـای تجربـی دارد [۱۳]. غیرمستقیم بودن ایـن شـکاف نیـز بـه ایـن معناسـت کـه، الکترون علاوه بر این که باید از این شکاف عبور کنـد بایـد در مسیری افقی با انرژی ثابت اما به ازای مقادیر مختلف k حرکت نماید که این امر با جذب و یا گسیل فوتـون همـراه اسـت. پهنـای نـوار ظرفیـت در هـر دو فـاز سـاختاری ۵/۵ الکترون ولت است. پهنای نـوار رسـانش تقریبـاً ۷ الکتـرون ولت است. با توجه به نمودارهای سـاختار نـواری در دو فـاز ساختاری مشاهده شد که شکاف انرژی در کانال اسپینی بالا و پایین وجود دارد.



الف ب

شکل ۲- ساختار بلوری پروسکایت مضاعف Sr_2NiWO_6 (الف) فاز تتراگونال و (ب) فازمکعبی.

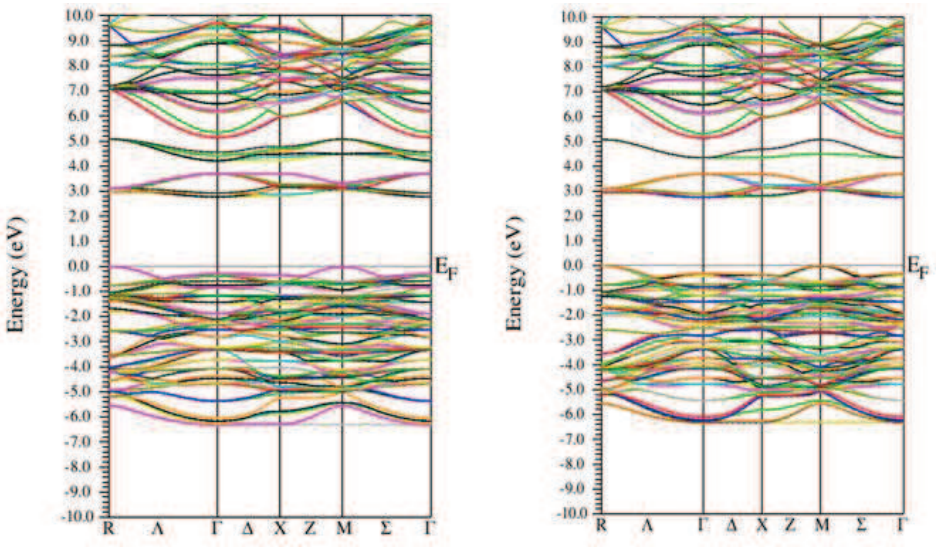


الف ب

شکل ۳- :نمودار ساختار نواری ترکیب Sr_2NiWO_6در فاز تتراگونال در حالت (الف) اسپین بالا و (ب) اسپین پایین.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

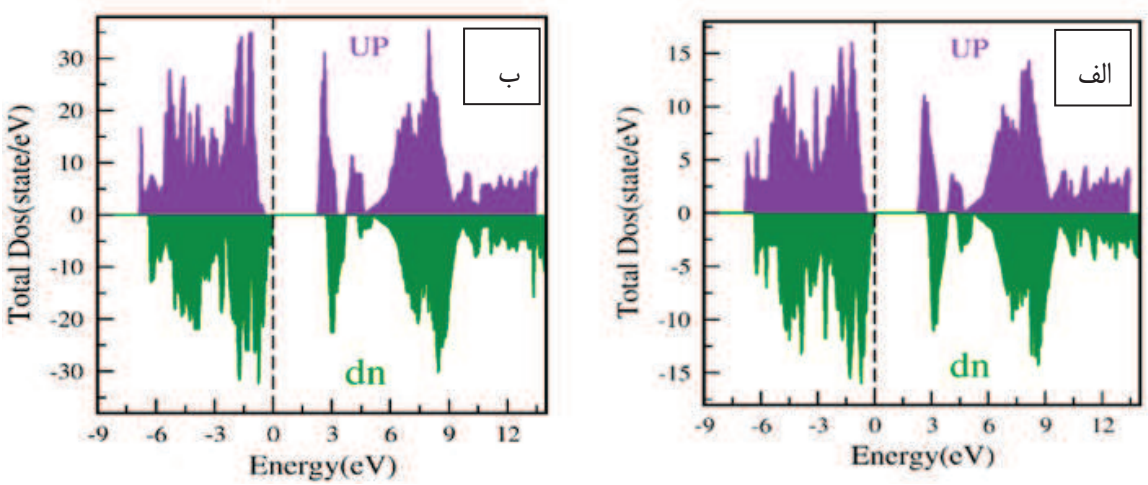
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]



شکل ۴- نمودار ساختار نواری ترکیب Sr_2NiWO_6 در فاز مکعبی در حالت (الف) اسپین بالا و (ب) اسپین پایین.

۳-۳- چگالی حالت‌ها

چگالی حالت‌های الکترون در یک نوار برابر با تعداد الکترون‌ها در یک بازه‌ی معین انرژی است. این تابع در فرآیندهای الکترونی به ویژه در پدیده‌های ترابردی بسیار مهم است. با استفاده از چگالی حالت‌های مربوط به الکترون می‌توان با رویکردی متفاوت به مقدار شکاف انرژی دست یافت و یا مشارکت اتم‌ها و هریک از اربیتال‌های آن‌ها را در ایجاد توزیع الکترونی مذکور مورد بررسی قرار داد [۱۴]. در شکل ۵ چگالی حالت‌های کل ترکیب Sr_2NiWO_6 برای اسپین بالا و پایین در هر دو فاز ساختاری نمایش داده شده است.



شکل ۵- نمودار چگالی حالت‌های کلی ترکیب Sr_2NiWO_6 (الف) ساختار تتراگونال و (ب) ساختار مکعبی.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

مهم‌ترین پارامتری که می‌توان ازنمودار چگالی حالت‌ها برداشت کرد شکاف انرژی است با توجه به شکاف به دست آمده در نتایج تجربی که ۳/۱ الکترون ولت است، با اعمال پارامتر هابارد، U=۶، الکترون ولت، به شکافی نزدیک به مقدار شکاف تجربی رسید. هم‌چنین لازم به توضیح است روش مورد بررسی در این جا به دلیل عدم وجود مقدار تجربی پارامتر هابارد، روشی کیفی است به همین دلیل مقادیر مختلف ۱ تا ۷ الکترون ولت را برای این پارامتر امتحان و مشاهده شد که مقدار ۶ الکترون ولت برای بررسی خواص این ترکیب در هر دو فازتتراگونال و مکعبی می‌تواند مناسب‌ترین مقدار ممکن باشد و مقدار شکاف انرژی مورد انتظار را برآورده می‌سازد. لذا محاسبات با اعمال پارامتر هابارد به بزرگی ۶ الکترون ولت در هردو فاز انجام شد. لازم به ذکر است که در محاسبات نظری با افزایش مقدار پارامتر هابارد شکاف انرژی بزرگ‌تر شده و وارد کردن تصحیح هابارد دقت محاسبه‌ی شکاف انرژی را بهبود می بخشد. چگالی حالت‌ها برای هر دو فاز ساختاری دربازهٔ ۹- تا ۱۴ الکترون ولت رسم شده است، سطح فرمی بر روی انرژی صفر قرار دارد که با خط‌چین رسم شده است. در هر دو فاز ساختاری برای کانال اسپین بالا و اسپین پایین خط فرمی نمودار چگالی حالت‌ها را قطع نمی‌کند. با توجه به شکل ۵ (الف)، در حالت اسپین بالا و پایین، در فاز تتراگونال شکاف انرژی به پهنای ۲/۸۰ الکترون ولت وجود دارد. شکل ۵ (ب)، فاز ساختاری مکعبی در حالت اسپین بالا و پایین شکاف انرژی به اندازه ی ۲/۷۶ الکترون ولت را نشان می‌دهد، نتایج به دست آمده شکاف انرژی در هردو فاز ساختاری، با نتایج تجربی موجود سازگاری خوبی دارد. این شکاف انرژی نشان دهنده‌ی رفتار عایق این ترکیب در هر دو فاز ساختاری است. از آن‌جا که تشخیص اربیتال‌هایی که در ایجاد شکاف، نقش بیشتری دارند از روی نمودار چگالی حالت‌های کلی امکان‌پذیر نیست به منظور بررسی دقیق‌تر و تفکیک اربیتال‌های ظرفیت، نمودار چگالی حالت‌های جزئی نیز با تقریب GGA+U در شکل ۶ در بازه‌ی ۷- تا ۱۳ الکترون آورده شده است. در شکل ۶ (الف) و (ب) چگالی حالت‌های جزئی اربیتال 5d اتم نیکل در حالت اسپین بالا و پایین همرا با چگالی حالت‌های کلی نشان داده شده است. هم‌چنین در شکل ۶ (پ) چگالی حالت‌های جزئی اربیتال d اتم تنگستن ودر شکل ۶ (ت) چگالی حالت‌های جزئی اربیتال p اتم اکسیژن نشان داده شده است. با توجه به این که نمودار چگالی حالت‌های جزیی در هر دو فاز ساختاری تتراگونال و مکعبی مشابه است، لذا در این‌جا تنها چگالی حالت‌های جزیی درفازمکعبی رسم شده است. هم‌چنین با توجه به بررسی فاز پایدار پادفرومغناطیس ترکیب مورد نظر، اتم Ni1 و Ni2 اتم‌های قطبیده‌ی اسپینی در راستای اسپین بالا و پایین هستند.

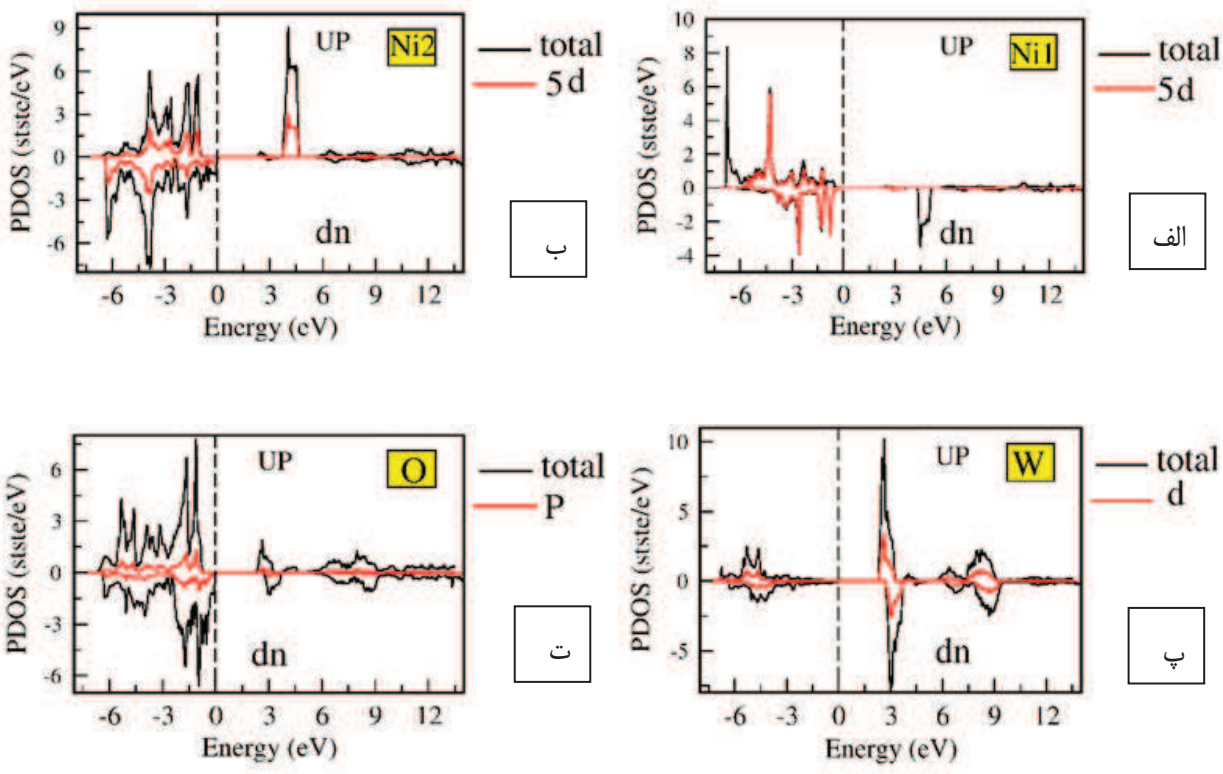
اربیتال‌های نزدیک تراز فرمی به‌دلیل نقش آن‌ها در ایجاد پیوند بین اتم‌ها و هم‌چنین ایجاد شکاف انرژی از اهمیت بیشتری برخوردار هستند. الکترون‌های اتم نیکل به دلیل گستردگی اربیتالی که اشغال می‌کنند، مسئول خواص مغناطیسی سامانه هستند. با توجه به شکل ۶ در می‌یابیم اربیتال d اتم نیکل در نوار ظرفیت در حالت اسپین بالا و پایین دارای مشارکت عمده‌ای است. اما در نوار رسانش در حالت اسپین پایین شاهد مشارکت بیش‌تر اربیتال d هستیم که با توجه به آرایش اربیتالی اتم نیکل که پنج الکترون در

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

حالت اسپین بالا و سه الکترون درحالت اسپین پایین جایگاه های اربیتال d را پر می‌کنند قابل قبول است. با توجه به قله های نزدیک خط فرمی در شکل ۵ و مقایسه با شکل ۶ مشاهده می شود اتم اکسیژن و نیکل دارای بیش‌ترین سهم در ایجاد شکاف انرژی هستند. با توجه به این که تنگستن در حالت غیرمغناطیسی در نظر گرفته شد، با اعمال پارامتر هابارد شاهد جابه‌جایی حالت‌های آن هستیم که این جابه جایی ناشی از تأثیر غیرمستقیم هیبرید شدن اربیتال 3d اتم نیکل با اربیتال 2p اتم اکسیژن است. علاوه‌بر این برای درک بهتر نقش پارامتر هابارد در افزایش شکاف انرژی، و تأثیر این پارامتر بر اربیتال d در شکل۷ (الف) و (ب) به ترتیب نمودار اربیتال d اتم نیکل با اعمال پارامتر هابارد و بدون پارامتر هابارد برای فاز تتراگونال و مکعبی رسم شده است.

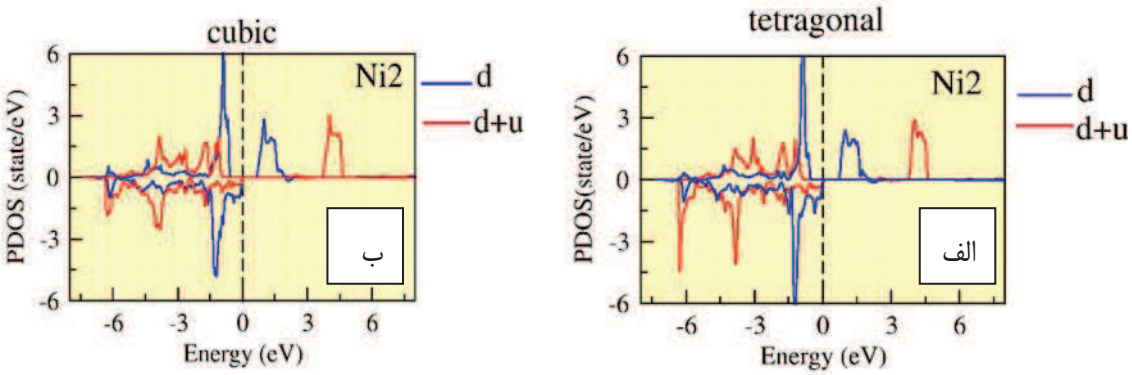
در محاسبه‌ی خواص یک ترکیب الکترون‌های غیرجایگزیده‌ی S و p به وسیله‌ی تقریب GGA و الکترون های جایگزیده‌ی d و f به وسیله‌ی پارامتر هابارد محاسبه می‌شود. باتوجه به شکل۷ مشاهده می‌شود که پارامتر هابارد نقش تأثیرگذاری در اربیتال d عناصر دارد. علاوه براین درشکل ۸ چگالی ابر الکترونی این ترکیب در فاز ساختاری تتراگونال در صفحه‌ی (۱۰۰) با استفاده از تقریب GGA+U نشان داده شده است.



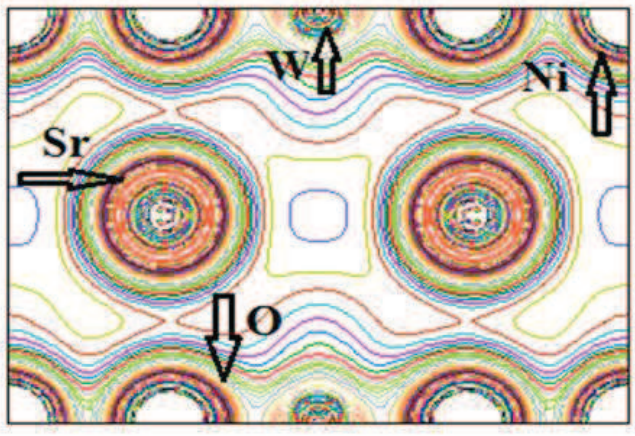
شکل ۶- چگالی حالت‌های کلی و جزیی در فاز مکعبی برای مقدار U=6 الکترون‌ولت (الف) Ni1:d، (ب) Ni2:d، (پ) W:d و (ت) O:p

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]



شکل ۷- نقش پارامتر هابارد بر اربیتال d اتم نیکل در (الف) فاز تتراگونال و (ب) فاز مکعبی



شکل ۸- نمایش دو بعدی چگالی ابر الکترونی در صفحه‌ی (۱۰۰) برای ساختار تتراگونال.

طبق مقیاس الکترونگاتیوی ارائه شده توسط پائولینگ هر چه اختلاف الکترونگاتیوی بین دو عنصر کم‌تر باشد (صفر تا ۱/۷) پیوند بیش‌تر از نوع کووالانسی است و اگر این اختلاف بزرگ باشد (۱/۷ تا ۳/۳) پیوند یونی است. تراکم زیاد الکترون بین اتم‌ها نشان‌دهنده‌ی قوی‌بودن پیوند و تراکم کم‌تر الکترون بین دو اتم نشان‌دهنده‌ی ضعیف بودن پیوند است.

با توجه به موقعیت اتم‌ها در شکل ۲ پایین‌ترین لایه انتخاب شد، که در نمایش دوبعدی صفحه‌ی رسم شده در شکل ۸ می‌باشد، در نتیجه برای ترکیب Sr_2NiWO_6 اتم‌هایی که در نمایش دوبعدی چگالی ابرالکترونی در گوشه جای گرفته‌اند، اتم نیکل و اتم‌هایی که در کنار اتم نیکل قرار دارند اتم اکسیژن می‌باشند. اتم‌هایی که در مرکز هر ضلع واقع شده‌اند اتم‌های تنگستن می‌باشند. با توجه به الکترونگاتیوی این عناصر که برای نیکل ۱/۹۱ و برای اکسیژن ۳/۴۴ است، اختلاف الکترونگاتیوی ۱/۵۳ به‌دست می‌آید که نشان دهنده‌ی پیوند کووالانسی است و در مقایسه با شکل ۸ نیز در تطابق کامل است، زیرا تراکم خطوط اطراف اتم اکسیژن بیش‌تر از نیکل است. هم‌چنین با توجه به الکترونگاتیوی استرانسیوم که ۰/۹۵ است، اختلاف

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

الکترونگاتیوی این اتم با اکسیژن ۲/۴۹ است که نشان دهنده‌ی پیوند یونی است. هم‌چنین از شکل ۸ چنین بر می آید که میان دو اتم استرانسیوم و اکسیژن تراکم بار بسیاری وجود دارد که این تراکم زیاد نشانه‌ی پیوند یونی است، و با توجه به اختلاف الکترونگاتیوی دو اتم نتیجه‌ی درستی است. از آن جا که الکترونگاتیوی اکسیژن بیش‌تر از استرانسیوم است، الکترون‌های بیش‌تری را در پیوند به خود جذب می‌کند. پیوند میان سایر اتم‌های ترکیب نیز از نوع کووالانسی است.

۳-۴- خواص اپتیکی

۳-۴-۱- تابع دی‌الکتریک

تابع دی‌الکتریک برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار می‌رود. و با استفاده از آن می‌توان ویژگی‌های اپتیکی ماده، رسانندگی الکتریکی و کاربردهای تکنولوژیکی بسیاری را تعیین کرد. یکی از مهم‌ترین کمیت های اپتیکی، تابع دی‌الکتریک مختلط است که با رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود [۱۵]:

$$\varepsilon = \varepsilon_L + \frac{4\pi i\sigma}{\omega} = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \qquad (۲)$$

در این رابطه سهم حقیقی و سهم موهومی تابع دی‌الکتریک است، که داشتن هر دو سهم برای درک دقیق سایر توابع اپتیکی مانند ضریب شکست و ضریب خاموشی ضروری است. یکی از مهم‌ترین ثابت‌های اپتیکی تابع دی‌الکتریک مختلط است. این تابع نقطه شروع مناسبی برای دست‌یابی به سایر خواص اپتیکی است .سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک ترکیب Sr_2NiWO_6 در فاز تتراگونال و مکعبی به ترتیب در شکل ۹ (الف) و (ب) نشان داده شده است.

ریشه‌ی $\varepsilon_1(\omega)$ ،یا به بیان دیگر مقدار انرژی که به ازای آن کمیت $\varepsilon_1(\omega)$ صفر می‌گردد دارای مفهوم فیزیکی می‌باشد و در واقع شرط لازم برای پلاسمون‌های حجمی در ماده هستند ولی شرط کافی برای آن‌ها، وجود اتلاف انرژی است.

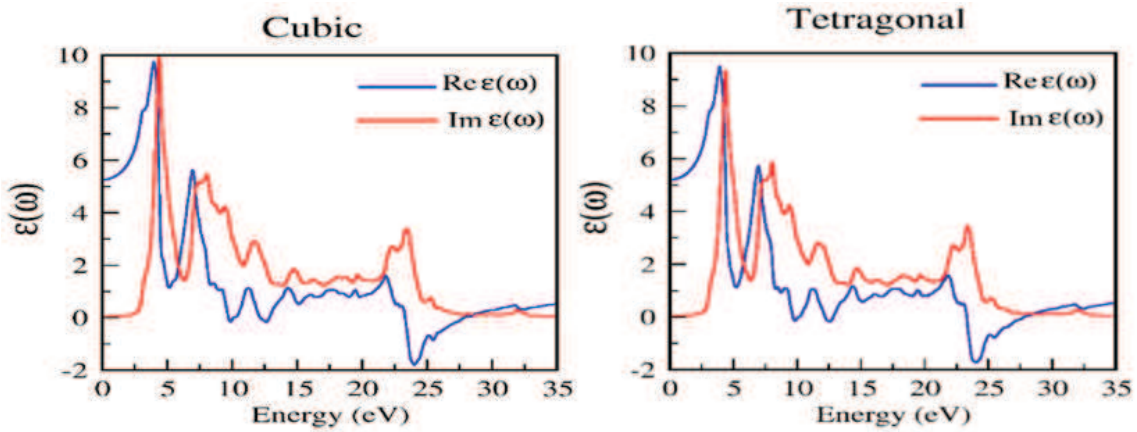
با توجه به شکل ۹ مشاهده می‌شود نمودار تابع دی‌الکتریک در هر دو فاز ساختاری کاملاً شبیه به هم است. سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب Sr_2NiWO_6 درانرژی ۵ الکترون‌ولت دارای یک کمینه است که در این انرژی باید سهم موهومی این تابع بیشینه شود، و هم‌چنین در محدوده‌ی انرژی ۲۴ الکترون‌ولت نیز سهم حقیقی تابع دی الکتریک دارای یک کمینه می‌باشد که در محدوده‌ی این نقطه سهم موهومی این تابع بیشینه شده است.

در هر دو فاز همان‌گونه که مشاهده می‌شود سهم موهومی تقریباً تا انرژی ۲/۷ الکترون‌ولت به آرامی پیش می‌رود که ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی است که منجر به گذارهای درون نواری می‌شود، اما بعد از ۲/۷ الکترون‌ولت سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان نواری رخ می‌دهد. هم‌چنین بعد از انرژی ۲۷ الکترون ولت دارای تغییرات آرام است که ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی است و منجر به گذارهای درون نواری می‌شود.

شکاف اپتیکی با استفاده از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک قابل محاسبه است، با توجه به سهم موهومی‌تابع دی الکتریک در شکل ۹ در فاز تتراگونال می توان مقدار ۲/۸ الکترون‌ولت برای شکاف انرژی اپتیکی و در فاز مکعبی نیز مقدار ۲/۷ الکترون‌ولت را تشخیص داد.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]



شکل ۹- نمودار تابع دی‌الکتریک ترکیب Sr_2NiWO_6 (الف) ساختار تتراگونال و (ب) ساختار مکعبی.

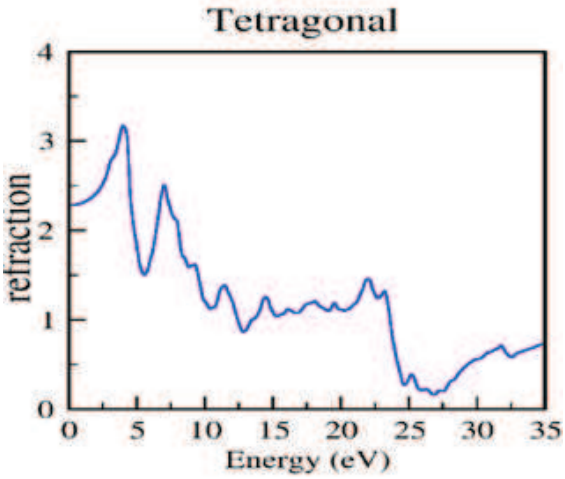
در توصیف این حالت می‌توان گفت با بررسی ویژگی اپتیکی یک ماده به دلیل این‌که حالت‌های اسپین بالا و پایین قابل تفکیک نمی‌باشند، حالت کلی ماده در نظر گرفته می‌شود. از مقایسه‌ی نمودارهای چگالی حالت‌های کلی با سهم موهومی تابع دی‌الکتریک، برای هر دو فاز ساختاری در حالت‌های اسپینی بالا و پایین برای ترکیب Sr_2NiWO_6 شکاف انرژی مشاهده شده است، و این نتیجه با نتیجه‌ی حاصل از خواص اپتیکی که در حالت کلی شکاف انرژی ۲/۷ و ۲/۸ الکترون‌ولت مشاهده شد سازگار است. هم‌چنین در ناحیه‌ای که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است، امواج منتشر نمی‌شوند و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. با توجه به شکل ۹ و با بررسی $\varepsilon_1(\omega)$، مشاهده می‌شود که در انرژی حدود ۲۲ الکترون‌ولت سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک صفر می‌شود و می‌تواند یکی از انرژی‌های لازم برای پلاسمون حجمی است و به ازای موج الکترومغناطیس با انرژی بیش‌تر از ۲۲ الکترون ولت موج در ترکیب انتشار نمی‌یابد اما با افزایش انرژی موج فرودی به ازای فوتون‌هایی با انرژی بزرگ‌تر از۲۵ الکترون‌ولت دوباره موج قادر به انتشار در ترکیب است.

۳-۴-۲- ضریب شکست و ضریب خاموشی

ضریب شکست پارامتر فیزیکی مهمی است که وابسته به اثر متقابل میکروسکوپی اتمی است، ضریب خاموشی برای یک ماده نیز سنجشی از میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. اگر پرتو الکترومغناطیسی به‌آسانی از داخل آن عبور کند، ماده ضریب خاموشی پایینی دارد. برعکس اگر پرتو به‌سختی درون ماده نفوذ کند، دارای ضریب خاموشی بالایی است. از طرف دیگر با توجه به مشابهت ضریب شکست و ضریب خاموشی در هر دو فاز، در ادامه این نمودارها برای یکی از فازها آورده شده است. نمودار ضریب شکست و ضریب خاموشی برای فاز تتراگونال در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نشان داده شده است. مقدار ضریب شکست استاتیک بر طبق شکل۱۰ برابر با مقدار ۲/۲ می باشد که در بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک نیز ذکر گردیده است. با افزایش انرژی فوتون فرودی، ضریب شکست ابتدا تا انرژی در بازه‌ی شکاف انرژی دارای تغییرات بسیار محدود است اما بعد از محدوده‌ی شکاف انرژی با توجه به این که گذار الکترون‌ها به نوار رسانش آغاز می‌گردد سرعت

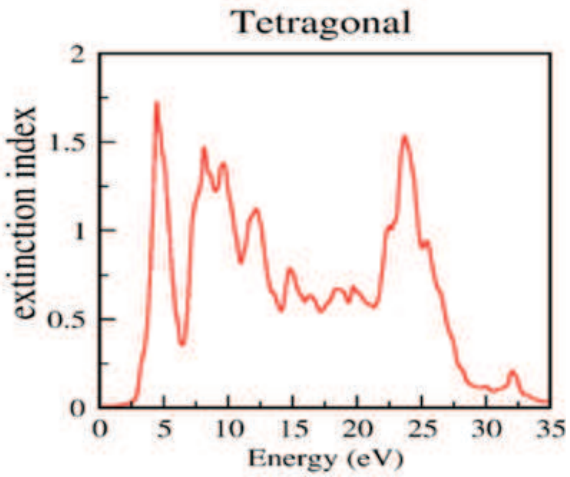
[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

نور در ترکیب کاهش می‌یابد و به دنبال آن ضریب شکست ترکیب افزایش می‌یابد. با انجام گذارهای اولیه که انرژی آن‌ها هم در ساختار نواری و هم در سهم موهومی تابع دی الکتریک نشان داده شد الکترون‌هایی که درلبه‌ی بالایی نوار ظرفیت قرار دارند گذار انجام می‌دهند و الکترون‌های بعدی که جای‌گزیدگی بیش‌تری در اتم دارند به انرژی‌های بالاتری برای گذار احتمالی خود نیاز دارند لذا میزان گذار الکترون‌ها کاهش‌یافته و سرعت نور در ترکیب افزایش می‌یابد و به دنبال آن ضریب شکست روند نزولی در پیش می‌گیرد تا این‌که در انرژی ۲۵ الکترون‌ولت سرعت نور در بلور با سرعت آن در خلأ برابری می‌کند.



شکل ۱۰- نمودار ضریب شکست ترکیب Sr_2NiWO_6 در فاز ساختاری تتراگونال.

اگر ضریب خاموشی در یک بلور پایین باشد موج الکترومغناطیس به‌آسانی از آن عبور می‌کند. درنتیجه همان‌طور که در شکل ۱۱ نشان داده شده است تا انرژی هایی در بازه‌ی شکاف انرژی که هنوز گذار الکترون‌ها آغاز نشده است موج الکترومغناطیسی قادر به عبور آسان‌تر از درون ترکیب است اما با افزایش انرژی فوتون‌های فرودی رفته‌رفته گذار آغاز می‌شود و عبور موج به سادگی قبل از آن نخواهد بود که این امر با افزایش ضریب خاموشی همراه است. تا در نهایت پس از انجام گذارهای اولیه تا قبل از انرژی حدود ۵ الکترون‌ولت، ضریب خاموشی کاهش می‌یابد.



شکل ۱۱- نمودار ضریب خاموشی ترکیب Sr_2NiWO_6 در فاز ساختاری تتراگونال.

با نگاهی گذرا به نمودارهای بالا در هر دو فاز ساختاری می توان به تشابه آن‌ها با نتایج حاصل از تابع دی‌الکتریک پی برد، که ضریب شکست رفتاری مشابه با سهم حقیقی و ضریب خاموشی رفتاری مشابه با سهم موهومی تابع دی الکتریک از خود نشان می‌دهند. با توجه به نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک برای ترکیب Sr_2NiWO_6 که در محدوده‌ی انرژی ۵ و ۲۴ الکترون‌ولت دارای کمینه بود، انتظار می‌رود که نمودار ضریب شکست در همین محدوده‌ی انرژی، دارای کمینه باشد، از طرفی نمودار مربوط به سهم موهومی تابع دی‌الکتریک در محدوده‌ی ۵ الکترون‌ولت

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

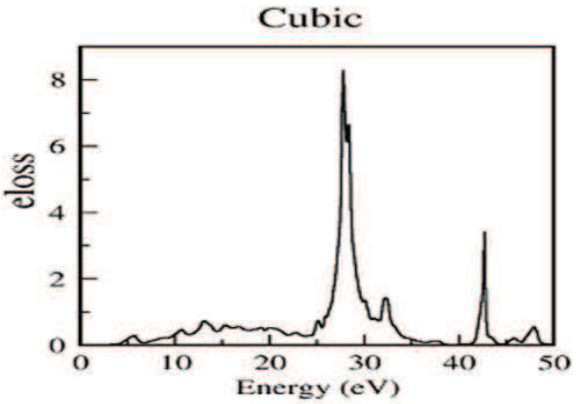
دارای یک بیشینه بود که با نمودار ضریب خاموشی در تطابق است. از طرفی در نقاطی که نمودار ضریب‌شکست دارای بیشینه است نمودار ضریب خاموشی کمینه می‌شود. جذر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر منجر به ضریب شکست استاتیک می‌شود [۱۵]، که با توجه به نمودارهای شکل ۹ در هر دو فاز ساختاری محل برخورد نمودار تابع دی‌الکتریک در سهم حقیقی با محور عمودی عدد ۵/۱ را نشان می‌دهد در نتیجه مقدار ۲/۲ برای ضریب‌شکست در هر دو فاز پیش‌بینی می‌شود که با نتیجهٔ شکل ۱۰ در تطابق کامل است.

۳-۴-۳- تابع اتلاف انرژی

تابع اتلاف (EELS) انرژی یکی از کمیت‌های مهم برای بررسی خواص میکروسکوپی و ماکروسکوپی جامدات می باشد. این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول برای الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص قله در نمودار تابع اتلاف انرژی به‌عنوان قله‌ی پلاسمونی شناخته می‌شود که بیانگر برانگیختگی‌های حجمی چگالی بار الکترون‌های در حال عبور است. در یک بلور امکان حضور چند قله‌ی پلاسمونی وجود دارد، مقدار بیشینه‌ی آن متناظر با پلاسمون حجمی است و بسامد منطبق با آن بسامد پلاسما نامیده می‌شود. وجود قله‌های پلاسمونی در این نقاط، چندان دور از انتظار نیست، زیرا در این نقاط سهم‌های موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک بسیار کوچک هستند، بنابراین در این انرژی‌ها منحنی‌های مربوط به تابع اتلاف انرژی الکترون با قله‌هایی مواجه خواهند شد. رابطه‌ی بین تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی به‌صورت زیر است [۱۶]:

$$EELS(\omega) = \mathrm{Im}\left|\frac{-1}{\varepsilon(\omega)}\right| = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \quad (3)$$

این رابطه بیان می‌کند که تابع اتلاف انرژی با سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت عکس دارد؛ به این معنا که در بازه‌هایی که تابع اتلاف دارای قله است، سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مقادیر بسیار کوچکی دارند. در شکل ۱۲ نمودار تابع اتلاف برای ترکیب Sr_2NiWO_6 در فاز ساختاری مکعبی رسم شده‌است.



شکل ۱۲- نمودارضریب اتلاف ترکیب Sr_2NiWO_6 ساختار مکعبی.

با توجه به شکل ۱۲انرژی پلاسمون حجمی برای ترکیب Sr_2NiWO_6 در هر دو فاز ساختاری ۲۷/۷۶ الکترون ولت است که این قله ی اصلی در نمودار افت، همان قله‌ی پلاسمونی است و ترکیب در بسامدهای بالاتر از آن به‌صورت شفاف رفتار می‌کند و با توجه به نمودارهای مربوط به سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک که نسبت عکس با نمودار تابع اتلاف دارند نیز در تطابق است چرا که نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب Sr_2NiWO_6 بعد از ۲۷ الکترون‌ولت تقریباً هموار شده و مقدار بسیار کمی را نشان می‌دهد.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

۴- نتیجه گیری

در ایـن مقالـه بـا اسـتفاده از نـرم افـزار Wien2kو روش FP-LAPW خـواص سـاختاری، الکترونـی و اپتیکـی پروسـکایت مضـاعف Sr_2NiWO_6 در دو فـاز سـاختاری تتراگونال و مکعبی مورد بررسی قرار گرفـت. محاسـبات بـا استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته واعمال پارامتر هابارد بـه مقدار ۶ الکترون ولت انجـام شـد. ابتـدا پارامترهـای شـبکه بهینه‌سازی و با نتایج دیگران مقایسه شـد. نتـایج حاصـل از محاسبات شکاف انرژی نشان داد که در هر دو فاز ساختاری برای اسپین بالا و پایین شکاف انرژی وجود دارد که مطابق با نتایج تجربی ترکیـب رفتـار عـایق از خـود نشـان داد. در بررسی ویژگی‌های اپتیکی ضمن محاسبه‌ی ضریب شکست استاتیک و مقایسه‌ی آن با سهم حقیقی تـابع دی‌الکتریـک نتایج قابل قبولی با چگالی حالت‌ها به دست آمـد و شـکاف اپتیکی در هر دو فاز ساختاری مشاهده شد.

مراجع

[1] T. Hashemifar. A. Mokhtari. V. Soleymanian, "Electoronic, Structural and Magnetic Properties of the Sr_2CoWO_6 Doubleperovskite Using GGA(+U)", J Supercond Nov Magn,Vol. 948, 016,pp.3793-7,2016.

[2] A.H. Johnson, "Growth and Characterization of Double Perovskite Buffer Materials for Thin Film Applications", The Ohio State University,pp. 1-287,2014.

[3] S.Vasala, "M.Carppinen, A2B'B"O6 Perovskite", Progress in Solid State Chemistry, 2014.

[۴] ط. هاشمی فروع. مختاری، بررسی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیس پروسکایت مضاعفSr_2NiWO_6 با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن، دورهٔ ۶ ویژه‌نامهٔ شماره ۲،۸۲-۷۵, ۱۳۹۵.

[5] D. Iwanaga, Y.Inaguma, M. Itoh, "Structure and Magnetic Properties of Sr_2NiAO_6 (A=W, Te)", Materials Research Bulletin, Vol.35, pp. 449-457, 2000.

[6] B.J. Manoun, M. Igartua, P. Lazor, "High Temperature Raman spectroscopy studie of the phase transitions in Sr_2NiWO_6 and Sr_2MgWO_6 double perovskiteoxides", journal of Moleculare structure, Vol. 971, pp. 18-22, 2010.

[7] F. Zhao, Z. Yue, Z. Gui, L. Li, "Preparation, Characterization and Microwave Dielectric Properties of A_2BWO_6 (A=Sr, Ba; B=Ci, Ni, Zn) Double Perovskite Ceramics", Japanese Journal if Applied physics, Vol. 11, pp. 8066-8070, 2005.

[8] S. Z. Tian, J. C. Zhao, C. D. Qiao, X. L. Ji and B. Z. Jiang, "Structure and properties of the ordered double perovskites Sr_2 MWO_6 (M=Co, Ni) by sol-gel route", Materials Letter, Vol. 60, pp. 2747-2750, 2006.

[9] 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, Vol. 421, pp. 39-44, 2015.

[10] P. Blaha, K. Schwarz, G.K. Madsen, H.D. Kvasnicka, and J. Luitz, WIEN2K, "An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties", Karlheinz Schwarz, Techn. Universit€at Wien, Vienna, Austria, 2013.

[11] F.D. Murnaghan, "Acad-sci", USA, pp. 30244-30256, 1994.

[12] Y.P. Liu, H.R. Fuh, Y.K. Wang, "Expansion research on half-metallic materials in double perovskites of Sr_2BB0O_6 (B = Co, Cu, Ni; B0 = Mo, W,

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

Tc, Re, BB0 =FeTc)", Computational Materials Science, Vol. 92, pp. 63–68, 2014.
[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, Vol. 17, pp. 2310-2316, 2005.
[14] M. A. Omar, "Elementary solid state physics: principles and applications", Addison-Wesley, 1975.
[15] G. Dresselhaus, M. Dresselhaus, "Optical properties of solids", Proceedings of the International School of Physics, 1966.
[16] M.P. Michael, "Condensed matter physics". John Wiley & Sons, 2010.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]

Iranian Journal of
Ceramic Science & Engineering
Vol. 10, No. 2, 2021

Calculation of Electronic, Structural and Optical Propreties of Sr_2NiWO_6 in Two Phase by FP-LAPW Method

Salehi Hamdollah*, Mirsalari Raziye, AmiriPeyman

Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

*salehi_h@scu.ac.ir

Abstract: In this paper, we investigate the structural, electronic and optical properties of tetragonal and cubic phase of Sr_2NiWO_6. The calculations have been performed using the FP-LAPW method in the framework of perturbation density functional theory whit GGA+U approximation by Wien2k package. In this research structural properties of Sr_2NiWO_6 such as lattice constants, bulk modulus and its derivative properties are investigated during structural calculations. The result of band structureshow that there is bandgap 2.80 eV for tetragonal and 2.73 eV for cubic phase. The calculated are in good agreement with theoretical and experimental results.

Keywords: Double perovskites, density functional theory, bulk modul, bandstructure.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-07]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.2.8.5]