

双钙钛矿 $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CrReO}_6$ 的电子结构和磁性

苗月; 袁宏宽; 陈洪

西南大学物理科学与技术学院, 重庆 400715

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)在广义梯度近似(GGA)下的平面波超软赝势法, 研究了 $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CrReO}_6$ ($x=0, 0.25, 0.5, 1$)的晶体结构、电子结构和磁性. 通过几何结构优化, 得到了材料的晶格常数、电子和自旋分布以及磁矩的大小. 分析了La电子掺杂对 $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ 材料结构的影响, 发现当La掺杂浓度较小($x<1$)时, $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CrReO}_6$ 仍保持半金属特性, 但刚好在费米面以下自旋向上的电子密度逐渐增大, 自旋向下能带的带隙增加, 总磁矩减小; 当掺杂浓度较大($x=1$)时, $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CrReO}_6$ 从具有亚铁磁半金属性转化为铁磁金属性.

关键词: 双钙钛矿 密度泛函理论 电子结构 半金属性

收稿日期 2007-10-22 修回日期 2007-12-07 网络版发布日期 2008-01-21

通讯作者: 陈洪 Email: chenh@swu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(412KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

- ▶ [双钙钛矿](#)
- ▶ [密度泛函理论](#)
- ▶ [电子结构](#)
- ▶ [半金属性](#)

本文作者相关文章

- ▶ [苗月](#)
- ▶ [袁宏宽](#)
- ▶ [陈洪](#)