

Streszczenie

Podwójne związki perowskitowe należą do najczęściej badanych materiałów ze względu na ich intrygujące właściwości fizyczne i chemiczne, a także różnorodność zastosowań wynikającą z adaptacyjnej kompozycji ich struktur. Pomimo wielu wysiłków, struktura magnetyczna Ba_2MnWO_6 (BMW) i niektóre zniekształcenia w strukturze krystalicznej $\text{Ba}_2\text{TiMnO}_6$ (BTM) pozostają niespójne z teoretycznymi i empirycznymi wnioskami. Poprzez dokładne ustalenie stabilności fazy magnetycznej oraz wyjaśnienie struktury elektronowej i właściwości optycznych

tych podwójnych perowskitów, mamy nadzieję odkryć dodatkowe szczegóły dotyczące mechanizmów stojących za ich aktywnością półprzewodnikową. Wykorzystując zaawansowane

możliwości teorii DFT, zbadaliśmy właściwości struktury elektronowej (gęstość stanów (DOS), struktury pasm elektronowych (EBS) i funkcji lokalizacji elektronów (ELF)) oraz właściwości optyczne (funkcja dielektryczna, współczynnik załamania światła, współczynnik ekstynkcji, refleksyjność, funkcja strat energii, spektrum absorpcji i przewodnictwo optyczne) stosując metody pełnego potencjału liniowo zaugumentowanej płaszczyzny falowej (FP-LAPW) i zaugumentowanej fali płaszczyznowej z pseudopotencjałem (PP-PAW).

Przy kolinearnych spinach Mn skierowanych w kierunku [001] i uporządkowanym momencie

μ_{ord} wynoszącym około $4,42 \mu_B$ dla BMW i $2,56 \mu_B$ dla BTM, nasze wyniki wskazują, że

najstabilniejszą strukturą magnetyczną jest struktura antyferromagnetyczna. Po dokładnym

zbadaniu struktury pasm elektronowych (EBS) i gęstości stanów (DOS) można stwierdzić,

że BMW jest półprzewodnikiem z pośrednią wąską przerwą energetyczną o wartości około

$E_g = 0,36 \text{ eV}$, podczas gdy BTM jest półprzewodnikiem z bezpośrednią przerwą pasmową

o wartości E_g wynoszącej $0,98 \text{ eV}$. Ponadto zbadano wpływ korekty Hubbarda U_{eff} na

przerwę energetyczną E_g półprzewodników. W przeciwieństwie do μ_{ord} , E_g rośnie wraz z

U_{eff} , osiągając $1,76 \text{ eV}$ dla BMW i $1,27 \text{ eV}$ dla BTM przy $U_{\text{eff}} = 3 \text{ eV}$. Wyniki te sugerują

również, że atomy metali przejściowych odgrywają kluczową rolę w definiowaniu stałych

sieciowych w związkach podwójnych perowskitów. Ponadto, różnica między stanami spin-up

a spin-down w strukturach DOS wskazuje na uporządkowanie magnetyczne momentów Mn^{2+} .

Uporządkowanie magnetyczne w BTM powstaje na skutek interakcji superwymiany, która

obejmuje przeskok elektronów między orbitalami Mn-3d i O-2p. Oba podwójne perowskity

charakteryzują się wysokim przewodnictwem optycznym, stałymi dielektrycznymi oraz silnym

współczynnikiem absorpcji światła ultrafioletowego, co czyni je doskonałymi kandydatami

na wysoko wydajne perowskitowe ogniwa słoneczne w zastosowaniach optoelektronicznych.

Wykorzystując podejście Projektowanego Augmentowanego Fali (PAW), zbadaliśmy, jak

ciśnienie wpływa na strukturę krystaliczną i DOS $\text{Ba}_2\text{TiMnO}_6$. Nasze wyniki wskazują, że

pod wpływem naprężeń ściskających przy ciśnieniach wynoszących 8 GPa może dojść do

zniekształcenia struktury, jak również do znacznego zwiększenia przerwy półprzewodnikowej.