

特约论文



丁守军, 博士, 安徽工业大学微电子与数据科学学院副教授、硕士生导师、微电子系副主任。先后入选马鞍山市十大杰出青年、安徽省首批双链融合专员、马鞍山市企业首批科技副总、安徽工业大学青年拔尖人才及安徽工业大学教坛新秀等。一直从事光电功能晶体生长及器件应用研究, 担任《人工晶体学报》青年编委、《安徽工业大学学报(自然科学版)》青年编委、中国感光学会非线性光功能材料与器件技术专委会委员及安徽省光学学会激光专委会委员等。主持国家自然科学基金、安徽省高校优秀青年基金、安徽省科技重大专项、安徽省高校自然科学研究重大项目、安徽省自然科学基金及重大产学研(2项, 80万元以上)等项目10多项, 以第一/通信作者在 *J Mater Chem C*, *Ceram Int*, *Cryst Growth Des*, *J Rare Earths* 等期刊上发表论文60余篇, 授权发明专利5项、软件著作权4项。获安徽省教学成果二等奖和三等奖各1项, 指导学生参加创新创业竞赛获国家级和省部级一等奖15项。

Sr₂ReNbO₆ 双钙钛矿电子结构及性质的第一性原理研究

张传成¹, 丁守军^{1,2,3}, 刘文鹏^{2,3}, 邹勇¹, 胡海棠¹, 王苗苗¹, 宿文志¹

(1. 安徽工业大学 微电子与数据科学学院, 安徽 马鞍山 243032; 2. 先进激光技术安徽省实验室, 合肥 230037; 3. 中国科学院合肥物质科学研究院 安徽光学精密机械研究所, 合肥 230026)

摘要: 基于密度泛函理论, 采用 Perdew-Burke-Ernzerhof 交换关联势的 PBEsol-GGA 泛函优化 Sr₂ReNbO₆ (Re=La, Gd, Lu) 双钙钛矿晶体的结构, 获得最低能量的稳定结构。以优化的结构为模型, 计算 Sr₂ReNbO₆ (Re=La, Gd, Lu) 晶体的能带结构和态密度(DOS)、复介电函数 $\epsilon(\omega)$ 、折射率 $n(\omega)$ 、反射率 $R(\omega)$ 及消光系数 $k(\omega)$ 等光学特性指标, 分析入射光子能量对材料光学特性的影响; 计算 Sr₂ReNbO₆ (Re=La, Gd, Lu) 晶体的弹性常数 C_{ij} , 并由 C_{ij} 进一步获得杨氏模量 (Y)、体积模量 (B)、剪切模量 (G) 和泊松比 (χ) 等机械特性指标, 分析晶体结构对材料机械特性的影响。结果表明: 优化双钙钛矿晶体结构获得的晶格常数与现有的实验值吻合较好; Sr₂ReNbO₆ (Re=La, Gd, Lu) 材料的能带结构呈现半导体特性, 其中立方结构的 Sr₂LaNbO₆ 带隙宽度为 3.12 eV, 且为直接带隙, 而单斜结构的 Sr₂GdNbO₆ 和 Sr₂LuNbO₆ 为间接带隙, 带隙宽度分别为 3.25, 3.29 eV; Sr₂ReNbO₆ (Re=La, Gd, Lu) 的最大反射率 $R(\omega)$ 分别为 32.8%, 29.3%, 33.0%, 在紫外区域存在较大的吸收系数; Sr₂ReNbO₆ (Re=La, Gd, Lu) 的泊松比 χ 分别为 0.27, 0.28, 0.27, 均位于 0.25 附近, 该系列材料的原子更倾向于以离子键的形式结合, 表现出一定的柔韧性。

关键词: 双钙钛矿; 第一性原理计算; 电子结构; 光学性质; 机械特性; 太阳能电池

中图分类号: O 731; O 733; O 734 文献标志码: A doi: 10.12415/j.issn.1671-7872.24084



收稿日期: 2024-05-08

基金项目: 国家自然科学基金项目(52202001); 安徽省科技重大专项(202203a05020002); 安徽省高校自然科学基金项目(KJ2021A0388); 先进激光技术安徽省实验室开放研究基金项目(AHL2021KF07)

作者简介: 张传成(1999—), 男, 安徽阜阳人, 硕士生, 主要研究方向为稀土光功能晶体生长与应用。

通信作者: 丁守军(1991—), 男, 安徽合肥人, 博士, 副教授, 主要研究方向为稀土光功能晶体及发光物理。

引文格式: 张传成, 丁守军, 刘文鹏, 等. Sr₂ReNbO₆ 双钙钛矿电子结构及性质的第一性原理研究[J]. 安徽工业大学学报(自然科学版), 2024, 41(6):583-593.

First-principles Study of the Electronic Structure and Properties of Double Perovskite $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$

ZHANG Chuancheng¹, DING Shoujun^{1,2,3}, LIU Wenpeng^{2,3}, ZOU Yong¹, HU Haitang¹,
WANG Miaomiao¹, SU Wenzhi¹

(1. School of Microelectronics & Data Science, Anhui University of Technology, Maanshan 243032, China; 2. Advanced Laser Technology Laboratory of Anhui Province, Hefei 230037, China; 3. Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, HFIPS, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230026, China)

Abstract: Based on the density functional theory, the Perdew–Burke–Ernzerhof exchange–correlation potential was used to optimize the geometry of double perovskite $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) crystals, and the stable structures with lowest energy were obtained. Using the optimized structure as a model, the band structure and density of states (DOS), complex dielectric function $\varepsilon(\omega)$, refractive index $n(\omega)$, reflectivity $R(\omega)$ and distinction coefficient $k(\omega)$, and other optical properties of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) crystals were calculated, and the influence of incident photon energy on the optical properties of the material was analyzed. The elastic constants C_{ij} of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) crystals were also calculated, according to the C_{ij} , the mechanical properties include Young’s modulus (Y), bulk modulus (B), shear modulus (G) and Poisson’s ratio (χ) were further obtained, and the influence of crystal structure on the mechanical properties of the material was investigated. The results show that the lattice constants obtained from optimizing double perovskite crystal structure are in agreement with the available experimental values. The band structure of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) materials exhibits the semiconductor characteristics, and the cubic $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ exhibits a direct band structure with bandgap of 3.12 eV, whereas the monoclinic $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ and $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ exhibit indirect band structure with bandgap of 3.25 eV and 3.29 eV, respectively. The maximum reflectivity $R(\omega)$ of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) are 32.8%, 29.3%, 33.0%, respectively, with a significant absorption coefficient in the ultraviolet region. The Poisson’s ratio (χ) of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) crystals are 0.27, 0.28, 0.27, respectively, all close to 0.25. The atoms in this series materials are probe to bond ionically, exhibiting a certain degree of flexibility.

Keywords: double perovskite; first-principles calculations; electronic structural; optical properties; mechanical properties; solar cell

随着人类社会的发展,能源问题已经成为最严峻的挑战之一。化石燃料是当前全球能源体系的主要组成部分,具有储量大、开采技术成熟、价格低廉等优势,是工业和交通领域的重要支柱。然而,化石燃料的储量有限与过度使用不仅导致能源短缺,还会带来严重的环境问题。为了减少化石能源使用过程中对环境的破坏,迫切需要发展清洁、可再生的能源。2020年9月,我国明确提出了2030年“碳达峰”与2060年“碳中和”的目标^[1]。在实现“双碳”目标的背景下,我国正在加速能源转型,太阳能电池的应用和发展得到了空前的关注和支持。硅基太阳能电池是目前开发最快且技术最成熟的1种太阳能电池,但是硅基太阳能电池的制造成本高,且

制造过程中存在能耗大、污染高等问题。钙钛矿(perovskite)原指1种组分为 CaTiO_3 的钛酸钙矿物,后指与 CaTiO_3 , BiFeO_3 ^[2], LaMnO_3 ^[3]等具有相似晶体构型的化合物 ABX_3 ^[4]。当A位或B位掺杂的阳离子与已存在的阳离子形成有序结构时,这种结构被称为双钙钛矿(DPO)^[5]。DPO具有独特的结构、化学灵活性以及丰富的配位数,已广泛用于制作发光器件^[6]、存储器件^[7-8]、晶体管^[9]以及白光LED(light-emitting diode)^[10-12]等。为了降低太阳能电池的制备成本和提高太阳光谱的利用率,研究人员已开始探索钙钛矿/晶硅叠层太阳能电池。因此,采用第一性原理研究双钙钛矿的电子结构及其与光学特性等性质的关系,对于推动太阳能电池技术的发展,促进可

再生能源的广泛应用具有重要意义。

$\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 材料作为 DPO 家族的重要成员, 具有稳定的物化性能与多样的稀土离子可选择性, 吸引了大批学者的关注。Wong 等^[13] 通过同步辐射 X 射线衍射 (X ray diffraction, XRD) 对合成的 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=Sm, Gd, Dy, Ho, Y, Tm 和 Lu) DPO 氧化物结构进行分析, 证实当 Re 取较小离子半径的稀土元素时, $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ 以单斜晶系成相, 且彼此是同构的; Chen 等^[14]、Zhou 等^[15] 以 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 材料为基质, 掺杂 Mn^{4+} 实现了合成材料在 640~740 nm 波段的深红色发光, 该材料可用于制作高量子效率、高显色指数的白光照明发光二极管 (light emitting diode, LED); Fu 等^[16] 合成了 Er^{3+} , Ho^{3+} 共掺杂的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 荧光粉, 利用 Er^{3+} 与 Ho^{3+} 之间的能量传递转换发光, 在 427 K 时获得了 0.168 K^{-1} 的绝对灵敏度, 有望应用于非接触式温度传感领域。以上研究证明了 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ 系列材料是 1 种优秀的基质载体, 在固态照明及温度传感领域具有较好的应用前景。然而, 这些研究主要着眼于激活离子在 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 基质材料中表现的光谱特性, 对 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 基质本身的结构与性质缺乏深入研究。

随着计算机运算能力的进步, 研究人员开始使用第一性原理计算并预测各种 DPO 材料的本质结构、特性及潜在的应用前景。如 Dar 等^[17] 分别使用广义梯度近似 (generalized-gradient approximation, GGA), GGA+U 以及 mBJ(Becke-Johnson) 泛函研究 $\text{Sr}_2\text{MnTaO}_6$ 的电子结构和热力学特性, 该材料在 1 000 K 时的功率因子达到 $1.20 \times 10^{12} \text{ W} \cdot \text{K}^{-2} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 反映了其在热电器件方面的潜在应用; Ray 等^[18] 从理论上研究了 $\text{Ba}_2\text{ScSbO}_6$ 化合物的光电特性, 计算得到其禁带宽度 (E_g) 为 4.23 eV, 表明此类材料可用于制作介电谐振器和滤波器; Dutta 等^[19] 通过实验和理论计算得到 $\text{Sr}_2\text{SmNbO}_6$ 的 E_g 分别为 3.42, 3.20 eV, 并通过态密度图揭示了 O^{2-} 与 $\text{Nb}^{5+}/\text{Sm}^{3+}$ 之间的共价作用, 预测了其在微波方面的应用; Li 等^[20] 使用第一性原理计算探究 $\text{Sr}_2\text{AlNbO}_6$ 材料的铁磁性起源, 证明只有 Al 或 Nb 空位才能诱发铁磁性。第一性原理计算是 1 种用于更深层次研究材料本质特性的有力工具, 可从理论上解释材料的本质特性并预测材料潜在的应用方向。鉴于目前对 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 材料的研究主要集中在激活离子的光谱表现与应用, 缺乏对材料本身电子结构、光学性质等本质特性的理论研究, 本文利用第一性原理计算

的方法对 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 材料的能带结构和态密度 (density of states, DOS)、光学特性 (optical properties)、弹性特性 (elastic properties) 及力学性质 (mechanical properties) 进行研究, 揭示 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ 作为优秀基质材料的内在原因, 并预测其在光电器件、太阳能电池等方面的潜在应用。

1 计算方法

采用第一性原理的赝势平面波方法对 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 系列材料的电子结构、光学性质以及弹性特性进行计算, 计算由 VASP^[21] 软件包完成, 主要过程如下:

1) 采用 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 的 GGA^[22] 分别对立方结构的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 和单斜结构的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 进行结构优化;

2) 以优化的结构为初始模型, 计算 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 系列材料的能带结构 (band structure) 和电子态密度 (DOS);

3) 以优化的结构为初始模型, 计算 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 系列材料的介电常数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 、介电常数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 、吸收系数 $\alpha(\omega)$ 、折射率 $n(\omega)$ 、反射率 $R(\omega)$ 、消光系数 $k(\omega)$ 等光学性质;

4) 以优化的结构为初始模型, 计算 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 系列材料的弹性常数 C_{ij} , 并由 C_{ij} 计算获得材料的杨氏模量 (Y)、体积模量 (B)、剪切模量 (G) 和泊松比 (ν) 等机械特性。

经过收敛性测试, 设置所有计算的平面波截断能 E_{cut} (cutoff energy) 为 550 eV。在倒易空间, 布里渊区的 k 点网格采用 Monkhorst-Pack^[23] 法计算。对于立方结构的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$, 设置 k 点网格为 $4 \times 4 \times 4$; 对于单斜结构的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$, 设置 k 点网格为 $6 \times 6 \times 4$ 。为保证计算精度, 设置原子力的收敛条件为 0.05 eV/Å, 2 个连续离子步的收敛条件为 10^{-8} eV。

2 结果与讨论

2.1 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 的结构

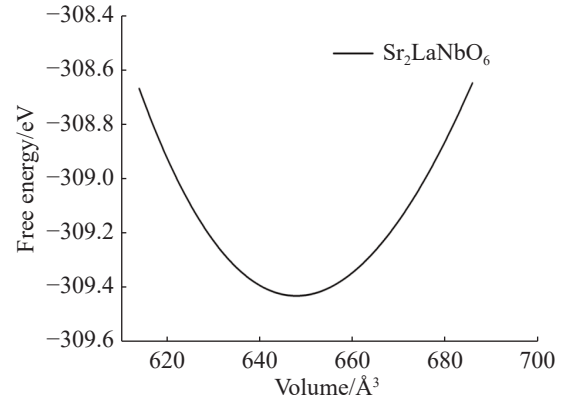
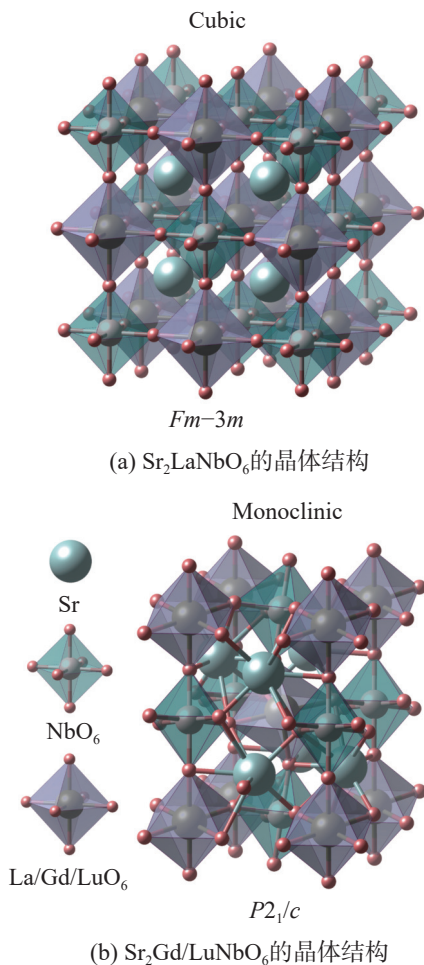
$\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 材料的结晶方式会随着稀土离子半径的不同而改变, 当 Re 为较大离子半径的稀土元素时, 如当 Re 为 La^{3+} 时, $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 晶体往往以立方结构存在; 对于较小离子半径的稀土离子, 如 Gd^{3+} 和 Lu^{3+} , $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 晶体更倾向以单斜结构存在^[13]。钙钛矿结构材料的稳定性一般采用 Goldschmidt^[24] 提出的容忍因子 (t) 来判

定,这种判定方式原本是基于单钙钛矿材料提出的,且在很多情况下不够准确。另有 Sun 等^[25]提出的 $(\mu + t)^n$, Weng 等^[26]提出的 μ/t , Bartel 等^[27]提出的新容忍因子 (τ) 等。Bartel 等^[27]在随机选取的 116 种组分中, τ 的总体准确性达到了 94%, 故文中采用 τ 评估双钙钛矿结构的稳定性, τ 的具体表达式如式 (1)。

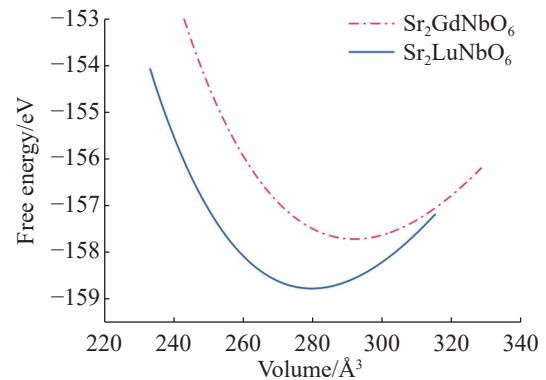
$$\tau = \frac{r_O}{r_B} - n_A \left(n_A - \frac{r_A/r_B}{\ln(r_A/r_B)} \right) \quad (1)$$

式中: r_A , n_A 分别为 A 和 A' 离子 (Sr^{2+}) 的半径和氧化态; r_B 为 B 和 B' 离子半径的算术平均值, 即稀土离子 (La^{3+} , Gd^{3+} , Lu^{3+}) 和 Nb^{5+} 的平均半径; r_O 是 O^{2-} 的半径。由式 (1) 计算得到 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$, $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 晶体的 τ 分别为 4.01, 3.81, 3.75, 小于 4.18^[27], 说明该系列晶体在常温下可稳定存在。

为获得 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) 系列材料的稳定结构, 基于 Brich-Murnaghan^[28] 状态方程对 3 种材料进行结构优化, 得到最低能量下的稳定结构。 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{Gd/LuNbO}_6$ 晶体结构示意图和结构优化中能量随体积变化曲线如图 1。



(c) $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 体系能量随体积的变化



(d) $\text{Sr}_2\text{Gd/LuNbO}_6$ 体系能量随体积的变化

图1 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) 的晶体结构和能量随体积变化的曲线

Fig. 1 Crystal structure and energy-volume curves of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$)

由图 1(a), (b) 可看出: 立方结构的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 中, La^{3+} 与 Nb^{5+} 都与临近的 6 个 O^{2-} 配位形成规则的正八面体结构; 而在单斜结构的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 中, $\text{Gd}^{3+}/\text{Lu}^{3+}-\text{O}$ 八面体与 $\text{Nb}^{5+}-\text{O}$ 八面体发生扭曲, 不再是规则的正八面体结构。

由图 1(c), (d) 可知: 当 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 晶胞体积为 648.07 \AA^3 时体系具有最低的能量, 对应的晶格常数 $a=b=c=8.65 \text{ \AA}$, 与 Hua 等^[29] 报道的 8.31 \AA 较为相近; 稳定结构状态下, $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 的晶胞体积分别为 $292.25, 280.53 \text{ \AA}^3$, $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 的体积更小。这是因为 Lu^{3+} 相较于 Gd^{3+} 具有更小的离子半径, Lu^{3+} 替换 Gd^{3+} 后导致晶胞收缩, 晶格常数减小, 进而导致体积减小。

优化后的晶胞参数与文献实验值对比如表 1。其中 Cubic 为立方晶系, Monoclinic 为单斜晶系, $Fm-3m$ 与 $P2_1/c$ 分别为 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{Gd/LuNbO}_6$ 晶体所属的空间群符号。

由表 1 可知: 对于 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$), 优化后的晶胞参数比实验值稍大, 这是因为 GGA 泛

函更倾向于高估晶格参数^[30], 但优化后晶胞参数与实验值的最大误差不超过 5%, 说明结构优化的准确性; $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 晶体中, 只存在 La—O 和 Nb—O 八面体键长, 分别为 2.312, 1.980 Å, $\text{Sr}_2\text{Gd/LuNbO}_6$ 由于晶格对称性的降低, 存在 3 种互异的 Gd/Lu—O 键长, Gd—O 键长为 2.264, 2.267, 2.273 Å, Lu—O 键长为 2.178, 2.178, 2.181 Å, Gd/Lu—O 八面体呈现出明显的扭曲结构, 这种结构会导致局部晶体场的改变。 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 对应的 Nb—O 键长分别为

1.998, 2.000, 2.008 Å 和 1.996, 1.997, 2.002 Å, $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 中的 Nb—O 键长要小于 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 中的 Nb—O 键长, 这与 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 的体积小于 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 相对应。一般而言, 掺杂的稀土激活离子, 如 Eu^{3+} , Sm^{3+} 等更倾向于取代并占据 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ 结构中同价态且离子半径相近的稀土离子 ($\text{La}^{3+}/\text{Gd}^{3+}/\text{Lu}^{3+}$) 位置。因此, 通过调控基质 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ 结构中稀土离子的种类, 有望实现局部晶体场的调控, 进而对激活离子的发光性能进行调控, 使该系列材料用于不同需求的场景。

表 1 优化 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 结构的晶胞参数与文献数据对比

Tab. 1 Comparison of the optimized cell parameters of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) with literatur data

晶体	晶系	空间群	晶格参数/Å	文献晶格参数/Å	La/Gd/Lu—O 键长/Å	Nb—O 键长/Å
$\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$	Cubic	$Fm-3m$	$a=b=c=8.65$	$a=b=c=8.31$ ^[29]	2.312	1.980
$\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$	Monoclinic	$P2_1/c$	$a=5.85, b=5.97,$ $c=8.36$	$a=5.85$ ^{[13], $b=5.97$^{[13],} $c=8.36$^[13]}	2.264, 2.267, 2.273	1.998, 2.000, 2.008
$\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$	Monoclinic	$P2_1/c$	$a=5.79, b=5.87,$ $c=8.24$	$a=5.79$ ^{[13], $b=5.87$^[13] $c=8.24$^[13]}	2.178, 2.178, 2.181	1.996, 1.997, 2.002

2.2 能带结构

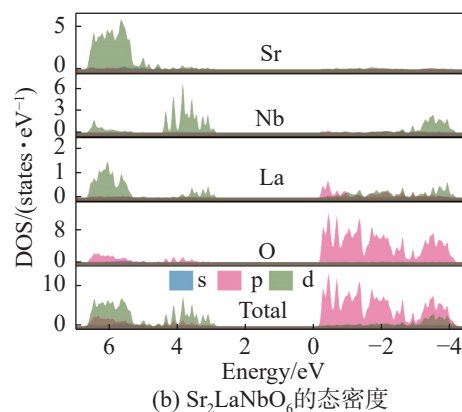
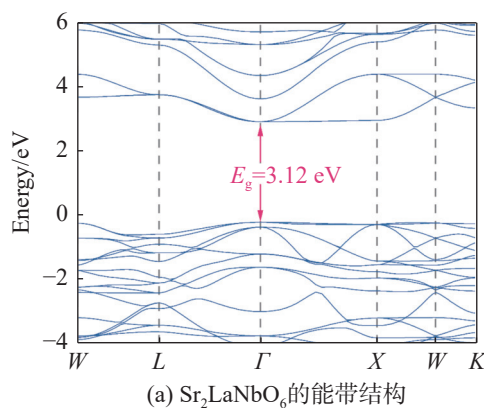
基于优化获得的结构, 进一步计算得到 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 材料的能带结构以及态密度, 结果如图 2。其中 W, L, Γ, X, K 为 K 点的生成路径; E_g 为禁带宽度; Total 为 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ 中 Sr, Re, Nb 和 O 元素态密度的总和。

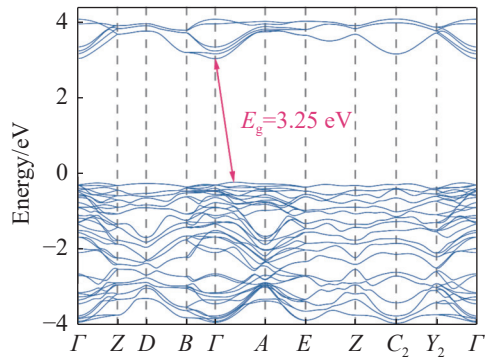
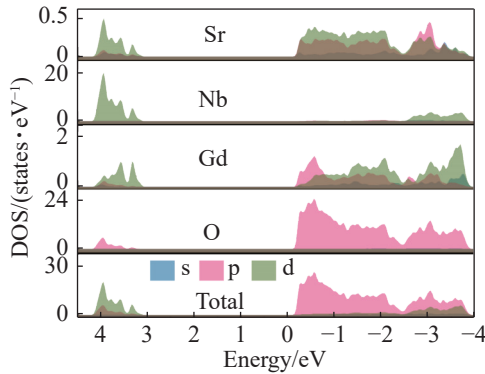
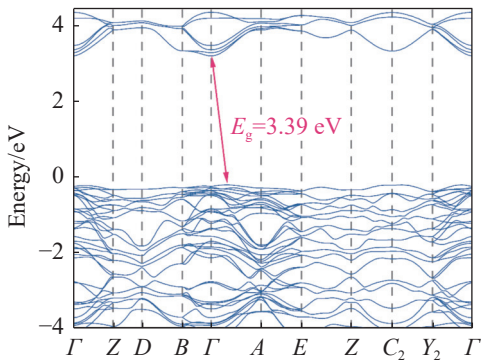
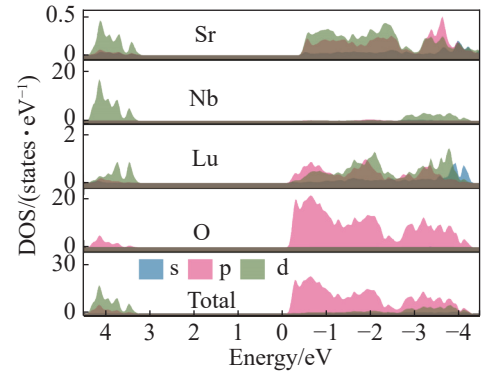
由图 2(a), (b) 可看出: 对于立方结构的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$, 导带底和价带顶均位于第一布里渊区的中心 Γ 点, 说明 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 属于直接带隙半导体, E_g 为 3.12 eV, 与 Hua 等^[29] 计算得到的 2.94 eV 较为接近; 导带底和价带顶附近的 DOS 主要由 Nb 的 d 态电子和 O 的 p 态电子贡献, 表明 Nb—d 和 O—p 轨道发生强烈的轨道杂化, 电子 DOS 反映组成元素的电子态对导带和价带的贡献。因此, $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 的电子输运性质及载流子类型主要由 Nb—3d 态和 O—2p 态电子决定。

由图 2(c), (d) 可看出: $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 晶体的导带底位于 Γ 点, 而价带顶则稍微偏离 Γ 点, 不再与 Γ 点重合, 说明 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 为间接带隙半导体; $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 结构的禁带宽度 E_g 为 3.25 eV。

由图 2(e), (f) 可知: $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 性质相似, 同为间接带隙半导体, 但禁带宽度 E_g 为 3.39 eV, 略大于 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 的 3.25 eV; $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 晶体导带底和价带顶附近的态密度主要由 Nb 的 d 态电子和 O 的 p 态电子贡献, 与 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 相类似, 但相较于 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$, 导带能量最低值被

推向了更高的能量范围, 导致更大的禁带宽度; $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 具有近乎一致的能带结构, 但因 Gd^{3+} (1.053 Å, coordination = 8) 到 Lu^{3+} (0.977 Å, coordination = 8) 半径的减小, 禁带宽度略有增大。



(c) $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 的能带结构(d) $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 的态密度(e) $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 的能带结构(f) $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 的态密度

能带结构和态密度的计算结果表明: $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) 材料具有适中的带隙宽度, 且随稀土离子 (Re) 半径的改变, 禁带宽度出现相应规律性的变化。这种特性有利于从理论上设计所需的具有特定能带结构的双钙钛矿材料, 从而使材料满足不同的应用需求。

2.3 光学性质

带间跃迁和带内跃迁是定义光学特性的最常见方法^[31]。复介电函数 $\varepsilon(\omega)$ 常用来描述电磁波与固体的相互作用, 实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 和虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 分别表征电介质能量存储和能量损失的信息, 尤其是 $\varepsilon_2(\omega)$ 与材料的吸收现象对应。通过复介电函数还可进一步得到材料的各种光谱信息, 其与折射率 $n(\omega)$ 、反射率 $R(\omega)$ 、吸收系数 $\alpha(\omega)$ 、消光系数 $k(\omega)$ 等光学特性之间的关系可由以下公式表示^[32-33]:

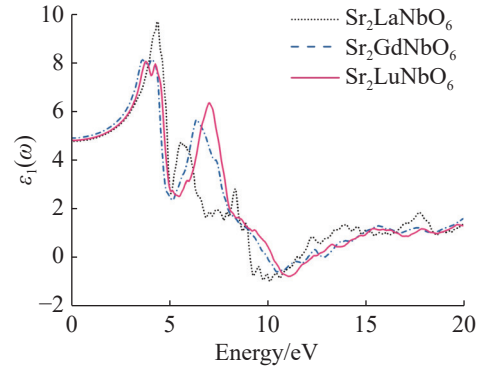
$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|^2 \quad (3)$$

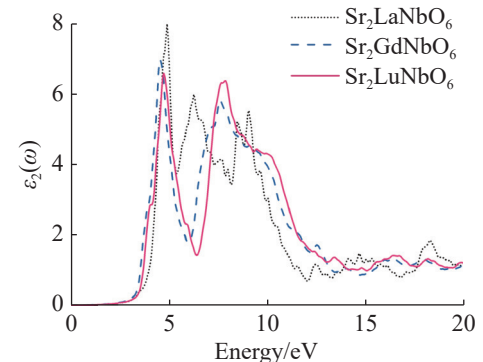
$$\alpha(\omega) = \sqrt{2\omega} \left(\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

$$k(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

计算得到 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) 材料的光学性质, 结果如图 3。

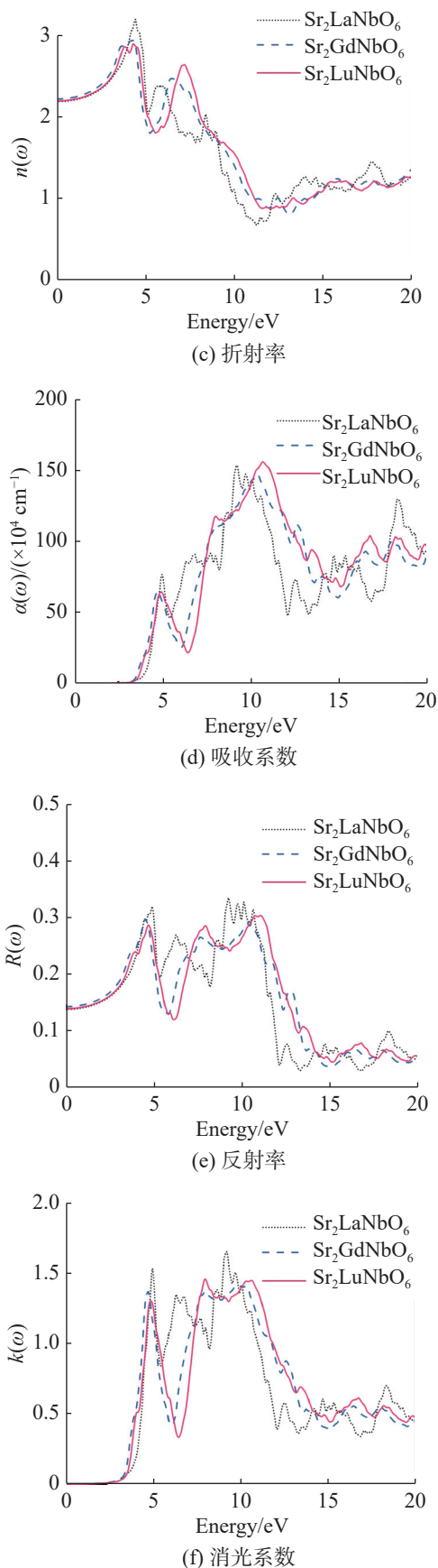


(a) 复介电函数实部



(b) 复介电函数虚部

图2 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) 晶体的能带结构和态密度
Fig. 2 Band structure and DOS of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) crystals

图3 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) 的光学性质Fig. 3 Optical properties of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$)

由图 3 可知: 立方结构的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 因其晶格

结构的高度对称性, 折射率 $n(\omega)$ 、反射率 $R(\omega)$ 等光学特性呈现出各项同性, 与单斜结构的 $\text{Sr}_2\text{Gd/LuNbO}_6$ 在光学特性方面存在较大差异; 单斜结构的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 具有较为相似的光学特性, 但由于单斜结构的低对称性而表现出一定的各向异性。 $\text{Sr}_2\text{Gd/LuNbO}_6$ 的光学特性数据是取 ε^x , ε^y 及 ε^z 3 个方向的算术平均值。

由图 3(a) 可知: $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 晶体复介电函数实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 的最大值位于光子能量的 4.38 eV 处, 即 $\varepsilon_1(0)=4.79$; 随光子能量的增加, $\varepsilon_1(\omega)$ 呈快速上升的趋势, 并在光子能量为 4.38 eV 时达最高点, 对应中波紫外光波段, 随后快速下降; 光子能量进一步增加, $\varepsilon_1(\omega)$ 在 10.01 eV 时到达最低点, 随光子能量进一步增加, 直至达 20.00 eV 时, $\varepsilon_1(\omega)$ 总体保持在 2.00 附近。对于单斜结构的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$, $\varepsilon_1(\omega)$ 分别在 3.64, 3.80 eV 处达到最大值 7.89 和 8.07, 略低于 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 的最大值 (9.69); 随光子能量的增加, $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 具有相似的变化趋势, 在 5.00 eV 附近达到第一个较小值, 两者的 $\varepsilon_1(\omega)$ 在 1.50~4.50 eV 能量区间随光子能量增加呈单调上升趋势, 覆盖整个可见光区域和近紫外波段; $\varepsilon_1(0)$ 分别为 4.93 和 4.83, 大于 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 的 4.79。此外, 在 10.00~12.00 eV 能量范围, $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) 的 $\varepsilon_1(\omega)$ 均出现负数, 意味着该晶体被能量为 10.00~12.00 eV 的电磁波穿过时表现为金属性质。

从图 3(b) 可知: 3 种材料复介电函数虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 均在 3.00 eV 左右开始快速上升, 且分别在 4.90, 4.56, 4.74 eV 处达到最大值 8.00, 6.98, 6.59, 随后沿相同趋势下降; 但 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 相较于 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$, $\varepsilon_2(\omega)$ 在 8.00~10.00 eV 能量范围出现 1 个额外的震荡峰。

折射率 $n(\omega)$ 可描述固体的光学响应信息, 光的频率发生变化, 折射率 $n(\omega)$ 也会发生改变。由图 3(c) 可知: $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ ($\text{Re}=\text{La}, \text{Gd}, \text{Lu}$) 3 种材料的折射率静态值分别为 2.18, 2.22, 2.19; 折射率随频率的变化趋势与复介电函数实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 类似。

吸收系数 $\alpha(\omega)$ 作为材料的重要光学特性, 可描述物质被光照射时表现出的特性。由图 3(d) 可知: 3 种材料的吸收系数 $\alpha(\omega)$ 从 3.50 eV 开始出现快速上升的趋势, 且在 5.00 eV 附近达到第一个峰值; 随后在经历短暂的衰减后, 出现 1 个吸收极强且范围极宽 (6.00~15.00 eV) 的吸收带, 覆盖短波紫外到真空紫外波段, 吸收系数超过 10^5 cm^{-1} , 最大吸收系数出现在 10.50 eV 附近, 达 $150 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, 说明该系列材料在光电半导体方面存在潜在应用。

反射率 $R(\omega)$ 随频率的变化如图 3(e) 所示: 3 种材料的反射率 $R(\omega)$ 最大值分别为 32.8%, 29.3%, 33.0%, 出现在光子能量为 10.00 eV 左右; 相对较高的反射率区域 (超过 20%) 覆盖 6.00~11.00 eV 范围, 静态反射率为 13.8%, 14.4%, 14.4%。

以上光学性质的计算数据表明, $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 材料有望在光电器件中获得应用。

表 2 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 晶体的弹性常数

Tab. 2 Elastic constants for $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) crystals

晶体	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{15}	C_{22}	C_{23}	C_{25}	C_{33}	C_{35}	C_{44}	C_{46}	C_{55}	C_{66}
$\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$	319.96	79.52	79.52	0	319.96	79.52	0	319.96	0	62.82	0	62.82	62.82
$\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$	286.18	135.81	107.59	0.52	292.87	101.78	-7.36	313.10	9.28	94.56	-6.97	85.28	102.43
$\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$	309.70	135.62	116.82	1.38	312.73	103.67	-4.29	334.41	4.60	104.28	-4.88	97.10	106.75

晶体的弹性常数须符合广义力学稳定性准则, 否则晶体不可能以稳定或亚稳定状态存在。此外, 从弹性常数可进一步描述晶体的各种力学特性, 如描述材料刚度的体积模量 (B)、塑性扭转的剪切模量 (G)、强度的杨氏模量 (Y), 以及反映材料横向变形的泊松比 (χ) 等。以立方晶系的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 为例, 其结构具有高对称性, 只存在 C_{11} , C_{21} 和 C_{44} 3 个弹性常数, 因此力学特性与弹性常数之间的关系可用下述公式表示^[34]:

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (6)$$

$$G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (7)$$

$$G_V = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (8)$$

$$G = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (9)$$

$$Y = \frac{9GB}{3B + G} \quad (10)$$

$$\chi = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (11)$$

其中: G_R 为按 Reuss 方法计算出的剪切模量; G_V 为按 Voigt 方法计算出的剪切模量。对于立方晶系和单斜晶系, 分别有以下稳定性判据^[35]:

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|, C_{11} - 2C_{12} > 0 \quad (12)$$

以及

$$\begin{aligned} &C_{11} > 0, C_{22} > 0, C_{33} > 0, C_{44} > 0, \\ &C_{55} > 0, C_{66} > 0, (C_{33}C_{55} - C_{35}^2) > 0 \\ &(C_{44}C_{66} - C_{46}^2) > 0, (C_{22} + C_{33} - 2C_{23}) > 0, \\ &[C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23})] > 0 \end{aligned} \quad (13)$$

2.4 弹性和机械特性

材料在制造和加工过程中会受到力的影响, 因此分析材料的弹性以及机械特性并分析原子的键合方式, 进一步明确材料机械稳定性的来源具有重要意义。计算获得 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 材料的弹性常数, 如表 2。 C_{ij} 表示刚度矩阵中第 i 行第 j 列的独立矩阵元。

将表 2 中 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 的弹性常数代入式 (12), (13), 均满足以上稳定性判据, 说明该系列材料能够以立方和单斜的稳定结构存在。基于表 2 中的弹性常数, 由式 (6)~(11) 计算获得 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 系列材料的机械特性, 结果如表 3。

表 3 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 晶体的机械性能

Tab. 3 Mechanical properties of $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) crystals

晶体	Y/GPa	B/GPa	G/GPa	χ
$\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$	218.27	159.67	85.78	0.27
$\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$	237.01	175.84	92.92	0.28
$\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$	257.90	185.46	101.68	0.27

由表 3 可知: $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 的杨氏模量 (Y) 分别为 218.27, 237.01, 257.90 GPa, 更大的杨氏模量对应更高的机械强度, 单斜结构的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 比立方结构的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 具有更高的强度, 此外 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 的强度略高于相同结构的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$; 体积模量 (B) 与剪切模量 (G) 的比值 B/G 可用于定义材料的脆性或延展性, $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re = La, Gd, Lu) 材料的 B/G 分别为 1.86, 1.89 和 1.82, 当 $B/G < 1.75$ ^[34] 时, 材料具有较大的脆性, 反之材料具有一定的延展性。3 种材料的 $B/G > 1.75$, 表明该系列材料具有天然的延展性。泊松比 (χ) 是另一种用来衡量材料脆性和延展性的标准, $\chi > 0.26$ 时, 材料表现出一定的柔韧性; $\chi < 0.26$ 时, 材料具有天然的脆性。根据材料类型的不同, 泊松比可在 0.25~0.50 范围^[36], 共价型材料、离子型材料和

金属型材料的典型泊松比分别为 0.01, 0.23, 0.33。由表 3 可知: $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 材料的 χ 分别为 0.27, 0.28, 0.27, 均位于 0.25 附近, 说明该系列材料中的原子更倾向于以离子键的形式结合。

为清晰显示立方晶系 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 与单斜晶系 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 材料机械特性的区别, 给出两者杨氏模量、剪切模量以及泊松比的三维示意图, 如图 4。

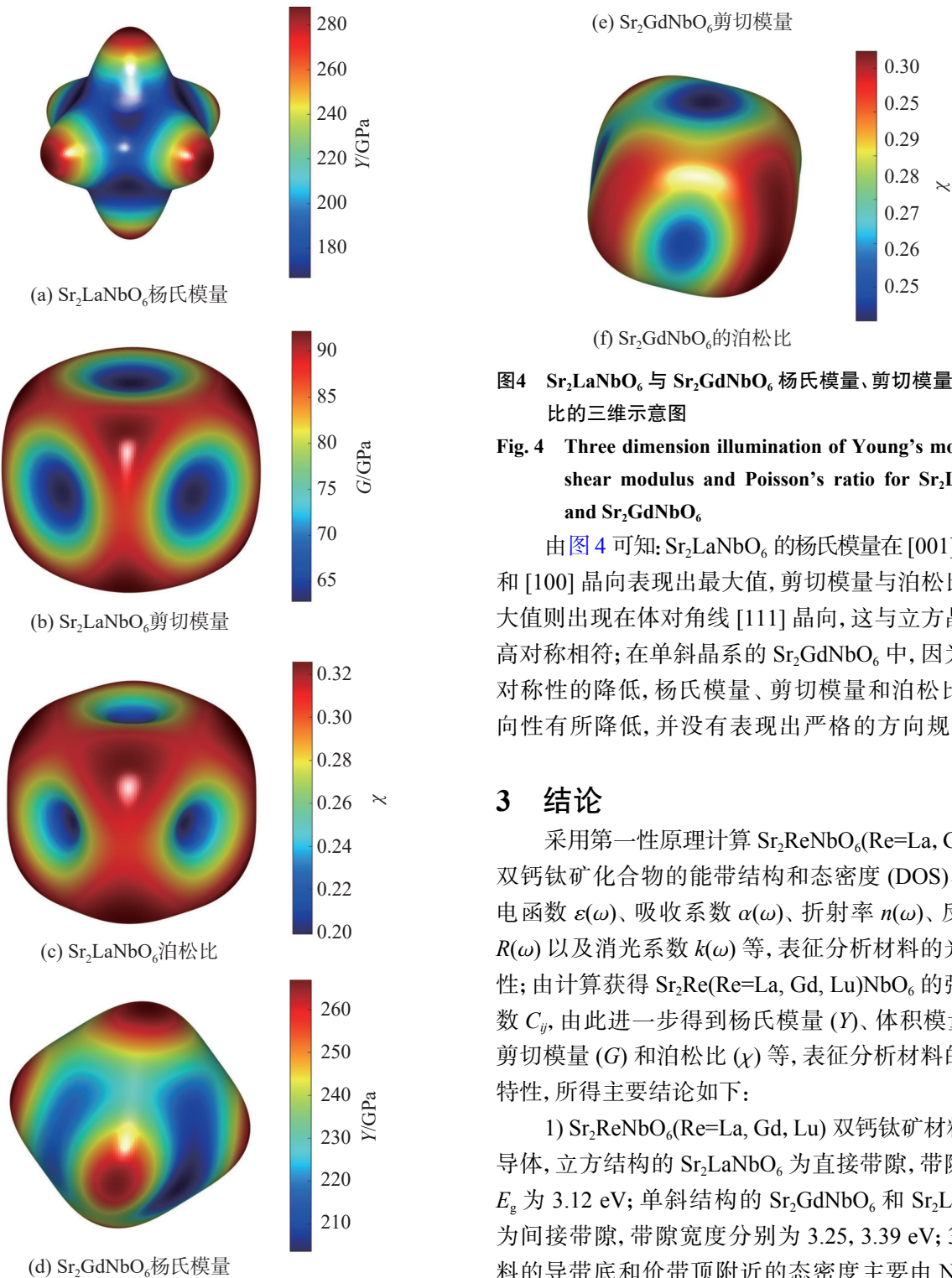


图4 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 与 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 杨氏模量、剪切模量和泊松比的三维示意图

Fig. 4 Three dimension illumination of Young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio for $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ and $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$

由图 4 可知: $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 的杨氏模量在 [001], [010] 和 [100] 晶向表现出最大值, 剪切模量与泊松比的最大值则出现在体对角线 [111] 晶向, 这与立方晶系的高对称相符; 在单斜晶系的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 中, 因为晶格对称性的降低, 杨氏模量、剪切模量和泊松比的取向性有所降低, 并没有表现出严格的方向规律性。

3 结论

采用第一性原理计算 $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 双钙钛矿化合物的能带结构和态密度 (DOS)、复介电函数 $\varepsilon(\omega)$ 、吸收系数 $\alpha(\omega)$ 、折射率 $n(\omega)$ 、反射率 $R(\omega)$ 以及消光系数 $k(\omega)$ 等, 表征分析材料的光学特性; 由计算获得 Sr_2Re (Re=La, Gd, Lu) NbO_6 的弹性常数 C_{ij} , 由此进一步得到杨氏模量 (Y)、体积模量 (B)、剪切模量 (G) 和泊松比 (χ) 等, 表征分析材料的机械特性, 所得主要结论如下:

1) $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 双钙钛矿材料为半导体, 立方结构的 $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 为直接带隙, 带隙宽度 E_g 为 3.12 eV; 单斜结构的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 和 $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ 为间接带隙, 带隙宽度分别为 3.25, 3.39 eV; 3 种材料的导带底和价带顶附近的态密度主要由 Nb 的 d

态电子和 O 的 p 态电子贡献,表明 Nb-d 和 O-p 轨道发生强烈的轨道杂化。

2) $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 3 种材料反射率 $R(\omega)$ 的最大值分别为 32.8%, 29.3%, 33%, 且均出现在光子能量为 10.00 eV 左右处, 相对较高的反射率区域(超过 20%)覆盖 6.00~11.00 eV 范围, 材料在紫外区域存在较大的吸收系数 $\alpha(\omega)$, 说明材料有望用于光学器件。

3) $\text{Sr}_2\text{ReNbO}_6$ (Re=La, Gd, Lu) 3 种材料的杨氏模量分别为 218.27, 237.01, 257.90 GPa, 材料具有较高的机械强度; 泊松比分别为 0.27, 0.28, 0.27, 均在典型离子型材料 0.25 的泊松比附近, 表明材料中的原子更倾向于以离子键的形式结合。

4) $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ 的杨氏模量在 [001], [010], [100] 3 个晶向表现出最大值, 剪切模量和泊松比在体对角线 [111] 晶向具有最大值, 这与立方晶系的高对称相符; 在单斜晶系的 $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ 中, 因为晶格对称性的降低, 杨氏模量、剪切模量和泊松比的取向性有所减低, 没有表现出严格的方向规律性。

参考文献:

- [1] MATHEW X. Solar cells and solar energy materials[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2006, 90(15):2169–2169.
- [2] KIMURA T, GOTO T, SHINTANI H, et al. Magnetic control of ferroelectric polarization[J]. *Nature*, 2003, 426(6962):55–58.
- [3] TOKURA Y, TOMIOKA Y. Colossal magnetoresistive manganites[J]. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1999, 200(1/3):1–23.
- [4] BABU R, GIRIBABU L, SINGH S P. Recent advances in halide-based perovskite crystals and their optoelectronic applications[J]. *Crystal Growth & Design*, 2018, 18(4):2645–2664.
- [5] AHMADI M, WU T, HU B. A review on organic-inorganic halide perovskite photodetectors: device engineering and fundamental physics[J]. *Advanced Materials*, 2017, 29(41):1605242.
- [6] RACHED H, BENDAOU DIA S, RACHED D. Investigation of Iron-based double perovskite oxides on the magnetic phase stability, mechanical, electronic and optical properties via first-principles calculation[J]. *Materials Chemistry and Physics*, 2017, 193:453–469.
- [7] STRANKS S D, SNAITH H J. Metal-halide perovskites for photovoltaic and light-emitting devices[J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, 10(5):391–402.
- [8] REYREN N, THIEL S, CAVIGLIA A, et al. Superconducting interfaces between insulating oxides[J]. *Science*, 2007, 317(5842):1196–1199.
- [9] WI S, SEO J, LEE Y, et al. Cation substitution induced structural phase transitions and luminescence properties of Eu^{3+} -doped A_2LaNbO_6 (A= Ba, Sr, and Ca) double perovskite[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2024, 976:173102.
- [10] XU P, MA Z, WANG P, et al. Excellent cryogenic magnetocaloric performances in ferromagnetic $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ double perovskite compound[J]. *Materials Today Physics*, 2021, 20:100470.
- [11] SREENA T S, KRISHNA G D, LALAN V, et al. Investigations on structural and optical properties of Eu^{3+} -activated $\text{Sr}_2\text{GdNbO}_6$ double-perovskite phosphors for solid-state lighting[J]. *Optical Materials*, 2024, 150:115161.
- [12] ZHANG X, XU Y, FAN H, et al. Preparation and study of luminescence properties of novel chalcogenide niobate $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6: x\text{Sm}^{3+}$ [J]. *Current Science*, 2024, 4(2):510–520.
- [13] WONG N G W, KADUK J A, LAPIDUS S, et al. Synchrotron X ray diffraction study of double perovskites Sr_2RNbO_6 (R= Sm, Gd, Dy, Ho, Y, Tm, and Lu)[J]. *Powder Diffraction*, 2018, 33(4):279–286.
- [14] CHEN Z, DU S, ZHU K, et al. Mn^{4+} -activated-double-perovskite-type $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6$ multifunctional phosphor for optical probing and lighting[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2023, 15(23):28193–28203.
- [15] ZHOU G, ZHANG D, TANG F, et al. Optical properties of $\text{Sr}_2\text{LuNbO}_6: \text{Mn}^{4+}$ deep-red phosphor: crystal-field splitting and multimode vibrational coupling[J]. *Science China Materials*, 2024, 67(3):939–945.
- [16] FU Y, WANG X, LIU S, et al. Multicolor upconversion emission and highly optical temperature sensing based on lanthanide-doped double perovskite $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ phosphors [J]. *Ceramics International*, 2023, 49(6):9574–9583.
- [17] DAR S A, SRIVASTAVA V, SAKALLE U K, et al. Structural, elastic, mechanical, electronic, magnetic, thermoelectric and thermodynamic investigation of half metallic double perovskite oxide $\text{Sr}_2\text{MnTaO}_6$ [J]. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2019, 9(15):298–306.
- [18] RAY R, HIMANSHU A, LAHIRI J, et al. Optical and electronic properties of double perovskite $\text{Ba}_2\text{ScSbO}_6$ [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2016, 1731(1):140041.
- [19] DUTTA A, MUKHOPADHYAY P, SINHA T, et al. $\text{Sr}_2\text{SmNbO}_6$ perovskite: synthesis, characterization and density functional theory calculations[J]. *Materials Chemistry and Physics*, 2016, 179:55–64.
- [20] LI Y, WANG C, CHENG R, et al. Vacancy-driven magnetism in nonmagnetic double perovskite $\text{Sr}_2\text{AlNbO}_6$: a first-principles study[J]. *Journal of Alloys and Compounds*,

- 2014, 598:1–5.
- [21] KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set[J]. *Computational Materials Science*, 1996, 6(1):15–50.
- [22] PEDROZA L S, DA SILVA A J, CAPELLE K. Gradient-dependent density functionals of the Perdew–Burke–Ernzerh of type for atoms, molecules, and solids[J]. *Physical Review B*, 2009, 79(20):201106.
- [23] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for Brillouin-zone integrations[J]. *Physical Review B*, 1976, 13(12):5188.
- [24] GOLDSCHMIDT V M. Die gesetze der krystallochemie[J]. *Naturwissenschaften*, 1926, 14(21):477–485.
- [25] SUN Q, YIN W J. Thermodynamic stability trend of cubic perovskites[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2017, 139(42):14905–14908.
- [26] WENG B, SONG Z, ZHU R, et al. Simple descriptor derived from symbolic regression accelerating the discovery of new perovskite catalysts[J]. *Nature Communications*, 2020, 11(1):3513.
- [27] BARTEL C, SUTTON C, GOLDSMITH B, et al. New tolerance factor to predict the stability of perovskite oxides and halides[J]. *Science Advance*, 2019, 5(2):0693.
- [28] BIRCH F. Finite elastic strain of cubic crystals[J]. *Physical Review*, 1947, 71(11):809–824.
- [29] HUA Y, RAN W, YU J S. Excellent photoluminescence and cathodoluminescence properties in Eu^{3+} -activated $\text{Sr}_2\text{LaNbO}_6$ materials for multifunctional applications[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2021, 406:127154.
- [30] DAR S A, SHARMA R, SRIVASTAVA V, et al. Investigation on the electronic structure, optical, elastic, mechanical, thermodynamic and thermoelectric properties of wide band gap semiconductor double perovskite $\text{Ba}_2\text{InTaO}_6$ [J]. *RSC Advances*, 2019, 9(17):9522–9532.
- [31] BEHRAM R B, IQBAL M, ABBAS S, et al. Theoretical investigation of mechanical, optoelectronic and thermoelectric properties of BiGaO_3 and BiInO_3 compounds[J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2016, 41:297–303.
- [32] MUBASHIR S, BUTT M K, YASEEN M, et al. Pressure induced electronic, optical and thermoelectric properties of cubic BaZrO_3 : a first principle calculations[J]. *Optik*, 2021, 239:166694.
- [33] GASSOUMI A. Electronic band structure and optoelectronic properties of double perovskite $\text{Sr}_2\text{MgMoO}_6$ through modified Becke–Johnson potential[J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2016, 50:14–19.
- [34] PUGH S. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals[J]. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 1954, 45(367):823–843.
- [35] BORN, M. On the stability of crystal lattices[C]// *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. England: Cambridge Philosophical Society, 1940: 160–172.
- [36] DAR S A, KHANDY S A, ISLAM I, et al. Temperature and pressure dependent electronic, mechanical and thermal properties of f-electron based ferromagnetic barium neptunate[J]. *Chinese Journal of Physics*, 2017, 55(5): 1769–1779.

责任编辑: 何莉