

The Strain Effect on the Band Gap of NaOsO₃: First-Principles Study

Xiaoxuan Ma, Jun Hu*

College of Physics, Optoelectronics and Energy, Soochow University, Suzhou Jiangsu
Email: *jhu@suda.edu.cn

Received: May 8th, 2017; accepted: May 28th, 2017; published: May 31st, 2017

Abstract

Exploring the physical properties of materials under external strain is crucial for the development of their potential applications. Through first-principles calculations, we studied the effect of external strain on the electronic and magnetic properties of NaOsO₃. We found that the band gap of NaOsO₃ shows abnormal behavior under compressive strain. The band gap decreases as the compressive strain increases. Analysis of the electronic structures reveals that different regions in the Brillouin zone have different responses to the external strain, because of the corresponding different wavefunctions. For the places contributed from the bonding states of the hybridization between Os-dxy and O-p orbitals, the band gap decreases as the external strain increases; while for the places contributed from the antibonding states of the hybridization between Os-dxz/yz and O-p orbitals, the band gap increases as the external strain increases. This intriguing feature of the band gap is of potential applications in the future electronic devices.

Keywords

First-Principles, Strain effect, Band Gap, Slater Antiferromagnetic Insulator, NaOsO₃

应力对5d过渡金属氧化物NaOsO₃的电子结构的 影响的理论研究

马晓轩, 胡 军*

苏州大学, 物理与光电·能源学部, 江苏 苏州
Email: *jhu@suda.edu.cn

收稿日期: 2017年5月8日; 录用日期: 2017年5月28日; 发布日期: 2017年5月31日

*通讯作者。

文章引用: 马晓轩, 胡军. 应力对 5d 过渡金属氧化物 NaOsO₃ 的电子结构的影响的理论研究[J]. 凝聚态物理学进展, 2017, 6(2): 43-50. <https://doi.org/10.12677/cmp.2017.62006>

摘要

研究应力作用下材料的物理性质特别是电子结构性质对发掘材料的应用价值具有重要的指导作用。我们通过第一性原理计算方法,研究了应力作用下5d过渡金属氧化物 NaOsO_3 的电子结构和磁学性质。我们发现对 NaOsO_3 施加压缩应力时, NaOsO_3 的带隙出现反常的变化趋势,即随着压缩应力的增加,其带隙减小。分析不同应力下的电子结构发现,布里渊区不同区域对应力的响应不同。这种不同的响应是因为其不同的波函数构成所导致。当波函数为 Os-d_{xy} 与 O-p 杂化的成键态时,其决定的能隙随应力增加而减小;反之,当波函数为 $\text{Os-d}_{xz/yz}$ 与 O-p 杂化的反键态,其决定的能隙随应力增加而增加。这种电子结构对应力的奇特的响应可能在将来的电子器件中有应用前景。

关键词

第一性原理, 应力作用, 带隙, Slater反铁磁绝缘体, NaOsO_3

Copyright © 2017 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

众所周知,在含有3d和4d过渡金属元素的体系中,电子关联作用对它们的电子结构和物理性质有着非常重要的作用[1]。这些体系也常常表现出丰富而特别的物理性质,例如金属-绝缘体转变[2]、铁电性、巨磁电阻[3][4][5]、高温超导等[6]。相比于这些体系,5d过渡金属不但有较强的自旋轨道耦合(spin-orbital coupling, SOC)相互作用,同时电子关联作用也不可忽略。因此,在二者的相互竞争、相互作用影响下,5d体系往往具有许多奇异的量子特性。

钷是研究最为广泛的5d氧化物之一。七价钷(Os^{7+} , 电子组态 d^1)系统中双钙钛矿结构的 $\text{Ba}_2\text{NaOsO}_6$ 具有铁磁性,其磁矩较小同时能保持立方体结构[7];三角晶系的 Na_3OsO_5 , Li_5OsO_6 和双钙钛矿结构的 $\text{Ba}_2\text{LiOsO}_6$ 具有反铁磁性[8][9][10];六价钷(Os^{6+} , 电子组态 d^2)系统中,双钙钛矿结构的 $\text{Ba}_2\text{CaOsO}_6$ 具有反铁磁性[11]。五价钷(Os^{5+} , 电子组态 d^3)体系中,有微小扭曲的双钙钛矿结构的 $\text{Sr}_2\text{CrOsO}_6$ 有半金属铁磁性,且SOC对结构的磁矩影响很大,会使Os原子的自旋磁矩减小 $0.27 \mu_B$,轨道磁矩减小 $0.17 \mu_B$,二者使 $\text{Sr}_2\text{CrOsO}_6$ 的总磁矩整体减小[12]-[15]。

早在1951年,Slater提出反铁磁序的形成会使体系发生金属-绝缘体转变[16]。这是因为,当体系形成反铁磁序时,原来的晶胞扩大为两倍,因此布里渊区缩小为原来的一半,在布里渊区边界发生能带劈裂,从而使体系转变为绝缘体。这种由于磁序列变化导致的金属-绝缘体转变叫做Slater绝缘体转变,有这一特征的体系也叫作Slater绝缘体。在一维和二维等低维体系中,金属-绝缘体的转变可以用这一理论解释,但是三维体系的Slater绝缘体却十分罕见。这是因为三维材料的费米面比一维、二维材料的费米面要复杂很多,仅仅通过磁序列的改变,很难完全消除费米面产生绝缘体。第一个被确认的三维Slater绝缘体是 $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ [17][18][19]。

随后,2009年Shi[20]等人用高压技术合成了 NaOsO_3 。根据X-射线衍射测量结果, NaOsO_3 为正交钙钛矿结构,Os原子与其周围的六个O原子构成 OsO_6 八面体。 NaOsO_3 在高温时表现金属性质,但在410 K时,发生了金属-绝缘体转变。此外,Calder[21]等人通过中子散射结果证实了 NaOsO_3 的磁基态是G-型反铁磁,而且他们发现自旋轨道耦合在这个体系中不重要,Os上的磁矩为 $1.01 \mu_B$ 。相比于被发

现的第一个三维 Slater 绝缘体 $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$, NaOsO_3 具有更简单的晶体结构和基态磁结构, 为进一步研究三维 Slater 绝缘体的性质提供了良好的平台。另一方面, OsO_6 八面体的倾角和 Os-O 键长对外部应力比较敏感, 因此对 NaOsO_3 施加应力可以改变其电子结构性质。寻找 NaOsO_3 的电子结构性质(如能隙宽度)对外部应力的响应行为, 有助于将来开发与外部应力有关的实际应用。

基于以上研究基础, 我们通过第一性原理计算研究了应力作用下的 5d 过渡金属氧化物 NaOsO_3 的电子结构和磁学性质。发现对 NaOsO_3 施加压缩应力时, NaOsO_3 的带隙出现反常的变化趋势。通过电子结构分析, 我们揭示了 Os 原子的 t_{2g} 和 e_g 轨道的杂化在应力下受到不同的影响, 从而导致带隙的反常变化。

2. 结构模型与计算方法

5d 过渡金属氧化物 NaOsO_3 是正交钙钛矿结构, 空间群是 $Pnma$ 。每个原胞中有 20 个原子, 分别有 4 个 Na, 12 个 O, 4 个 Os。晶格常数为 $a = 5.3842 \text{ \AA}$, $b = 7.5804 \text{ \AA}$, and $c = 5.3282 \text{ \AA}$ 。Na 离子和 O 离子的位移使晶格产生畸变, 导致 Os 与 O 有三种不同的键长, 但都接近 1.94 \AA [22]。 NaOsO_3 的结构模型如图 1 所示。

我们用赝势和平面波基组的软件包 VASP [23] [24] 探究 NaOsO_3 的微观机理, 同时通过比对已有文献成果检验计算方法的正确性。因 Os 是重金属, 故采用局域密度近似 LDA, K 点设置为 $5 \times 3 \times 5$, 平面波截断能为 400 eV。结构优化时原子坐标全部自由优化, 同时考虑自旋轨道耦合和电子关联作用。 NaOsO_3 是一个三维体系, 比二维体系的电子屏蔽大, 所以其电子关联 U 比二维体系 Sr_2IrO_4 或者 Ba_2IrO_4 要小。Jung M C [25] 等人也证实有 G 型反铁磁构型的 NaOsO_3 , 在 SOC 作用的影响, $U = 2.2 \text{ eV}$ 时会打开一个能隙。直接带隙和间接带隙都会因 U 的变化而变化, 为避免精度影响不便于观察, 我们采用稍大一些的电子关联值 $U = 2.5 \text{ eV}$, 在整个计算过程中也不再改变 U 的值。

3. 结果讨论

首先, 为验证 NaOsO_3 的基态磁结构, 我们分别计算了铁磁与几种不同的反铁磁构型。计算结果显示, G-型反铁磁结构的 NaOsO_3 有最低的能量值, 因此相较于铁磁结构更为稳定, 为基态磁构型, 与已有的研究一致。然后, 考虑 SOC 对体系的影响, 我们采用 LDA + U 和 LDA + U + SOC 分别进行态密度和能带计算。我们计算了 $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$, $\langle 001 \rangle$, 和 $\langle 111 \rangle$ 四个不同自旋方向的能量来确定易磁化轴取向。计算结果表明 $\langle 001 \rangle$ 方向能量最低, 是易磁化方向。因此, 在此后的计算中 SOC 方向均设定为 $\langle 001 \rangle$ 方向。

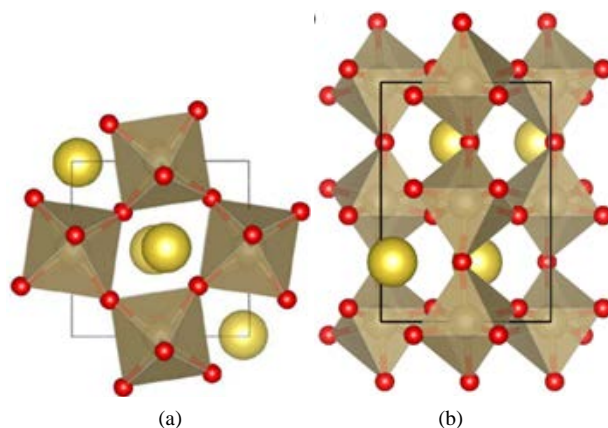


Figure 1. Distorted $Pnma$ crystal structure of NaOsO_3 (a): top view and (b): side view. The red (small) and the yellow (large) spheres indicate oxygen and sodium atoms, respectively

图 1. 畸变的 NaOsO_3 结构示意图: (a) 俯视图; (b) 侧视图。其中黄色, 红色和灰色(八面体中心)分别表示 O 原子和 Os 原子

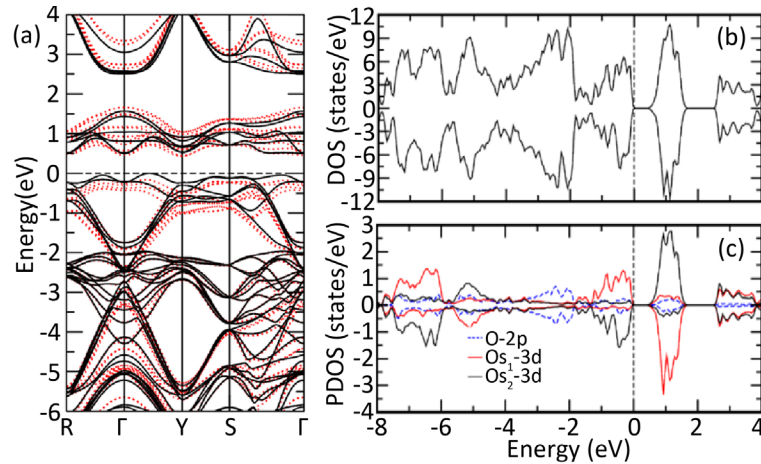


Figure 2. Distorted Pnma crystal structure of NaOsO₃ top view (a) and side view (b). The red (small) and the yellow (large) spheres indicate oxygen and sodium atoms, respectively

图 2. 畸变的 NaOsO₃ 结构示意图: (a) 俯视图; (b) 侧视图。其中黄色, 红色和灰色(八面体中心)分别表示 O 原子和 Os 原子

图 2(a)画出了 NaOsO₃ 的能带图。为便于观察,我们选取价带顶为能量原点。高对称点设置为 R = (1,1,0), $\Gamma = (0,0,0)$, Y = (0,1,1), 和 S = (1,1,1)。图中黑色实线为 LDA + U 计算结果, 红色虚线为 LDA + U + SOC 计算结果。从图中可以看出, 在 G-型反铁磁构型下, 电子关联作用使体系打开能隙变为绝缘体。NaOsO₃ 为间接带隙的 Slater 绝缘体, 其价带顶位于 Γ 点附近, 而导带底位于 Γ 点, 间接带隙宽度约 0.5 eV。另外可以看出, 考虑 SOC 与不考虑 SOC 的能带结构差异很小, 这是由于 NaOsO₃ 中 Os 是 +5 价的(Os⁵⁺), 即 5d¹ 排布, t_{2g} 是半填充的, 表现为轨道单态, 此时自旋轨道耦合作用的一级效应为零, 需要通过二阶微扰才能影响能带结构。因此自旋轨道耦合作用对该体系的电子结构影响很小。另外, 计算结果表明, SOC 作用对 NaOsO₃ 的磁矩几乎没有影响。NaOsO₃ 的自旋磁矩主要来自 Os 的局域磁矩(约为 1.7 μ_B)。尽管 Os 的 5d 轨道和 O 的 2p 轨道杂化, O 几乎没有局域磁矩(约为 0.003 μ_B), 对总自旋磁矩没贡献。自旋磁矩在考虑 SOC 作用时几乎没有变化。另一方, 来自于 SOC 作用的轨道磁矩比自旋磁矩小得多。因此, NaOsO₃ 的总磁矩主要由自旋磁矩贡献, 且几乎与 SOC 作用无关。这点与 5d⁵ 电子系统(如 BaIrO₃, Sr₂IrO₄ 以及烧绿石铌氧化物等)相差很大, 因为 5d⁵ 电子系统的轨道磁矩大约为自旋磁矩的两倍[26] [27] [28]。

图 2(b)和图 2(c)给出了 NaOsO₃ 的总态密度及 Os-5d 和 O-2p 轨道的投影态密度图。相对于正八面体, OsO₆ 为有微小畸变的八面体, 可理解为一个氧共享团簇[29], 这也是 NaOsO₃ 在稳定反铁磁序下有绝缘性转变的原因之一。在 -4~-2eV 能量区间, O 的 2p 轨道做主要贡献, Os 的 5d 轨道只有很小的一部分; 而在 -2~+2 eV, Os 的 5d 轨道占据主导地位。Os 和周围的六个 O 形成八面体结构, 晶体场的作用使 Os 的 5d 轨道劈裂形成 t_{2g} 和 e_g 轨道。其中 e_g 轨道未占据, 位于 +3 eV 以上。而 t_{2g} 是半占据的, 两个自旋通道的态密度进一步受到交换作用而形成约 1 eV 的劈裂, 分别位于价带顶附近和导带底附近。另外占据的 t_{2g} 态因为 OsO₆ 八面体畸变分裂成两部分, 分别位于 -7 eV 和 -1 eV 附近。综上所述, 费米面附近分布的主要是 Os 的 t_{2g} 轨道。

众所周知, 应力作用会使结构由于晶格震动产生的声子振动模式软化而使变形, 从而影响体系的微观物理性能。实际上, 外部应力会改变原子间的键长, 从而改变它们之间的杂化作用, 进而改变对态密度的宽度。另一方面, OsO₆ 为有微小畸变的八面体, 对外部应力比较敏感, 其性质的变化对整个体系的物理性质起着决定性作用。因此为了探索 NaOsO₃ 的电子结构对外部应力的响应及寻找调节电子结构的方法, 我们对 NaOsO₃ 分别施加压缩和拉伸应变, 然后计算其能带结构。应变通过连续改变结构晶格常数实现, 即令 NaOsO₃ 晶格常数相对于原始值从 -5% (压应变)变化到 +5% (拉应变), 变化间隔为 1%。

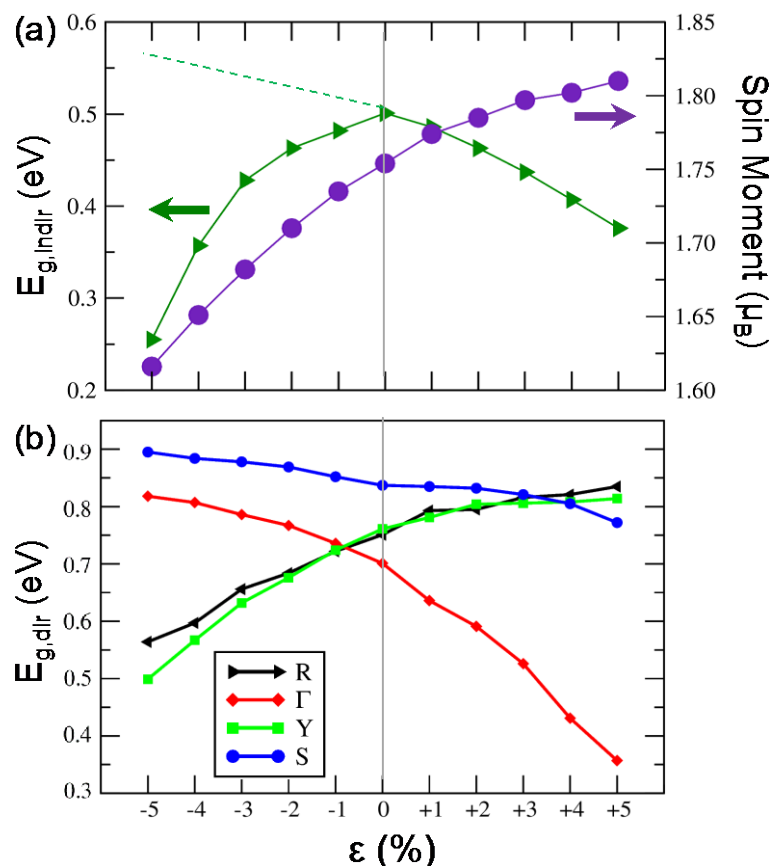


Figure 3. (a) Indirect band gap and total spin moment of NaOsO_3 under external strain from -5% - $+5\%$; (b) Direct band gaps at high symmetric points in the Brillouin zone. Here only the results from LDA+U calculations are shown

图 3. (a) NaOsO_3 的间接带隙和总自旋磁矩随外应力的变化。外部应力从 -5% 变化到 $+5\%$; (b) 布里渊区各高对称点直接带隙随外应力的变化。这里所列结果均来自于 LDA+U 计算

在应力作用下, 电子磁矩随拉伸应变而增加, 同时随压缩应变而减小, 整体表现为应力从 -5% ~ $+5\%$ 变化时, 磁矩也是由小变大, 如图 3(a)中所示。这是因为应力改变了 Os-O 键长, 从而改变了 Os 离子和 O 离子间的杂化作用的强度。Os-O 键长越长, 即在拉伸应变时, Os 离子和 O 离子间的杂化作用越弱, 所以 Os 离子中的电子局域性越强, 导致 Os 离子的局域磁矩增大。根据价态($+5$ 价)和电子排布($5d^3$), NaOsO_3 中 Os 离子的局域磁矩上限为 $3 \mu_B$ 。反之, 在压缩应变时, Os 离子的局域磁矩减小。这是因为在压缩应变时, Os-O 键长变短, Os 离子和 O 离子间的杂化作用增强, 因此 Os 离子中的电子离域性增加, 导致 Os 离子的局域磁矩减小。

图 3(a)也给出了带隙随应力的变化趋势。在压缩应变下, 带隙随着应变的减小(即 ϵ 值增加)而增加; 在拉伸应变下, 带隙随着应变的增加(即 ϵ 值增加)而减小。带隙在压缩应变区间的响应行为, 与我们的常规认识相反。通常情况下, 带隙随压缩应力的增加(即 ϵ 值减小)而逐渐减小, 如图 3(a)中的虚线所示, 从而总体上为带隙从压缩应变到拉伸应变呈现单调下降的趋势。这是因为应变从压缩区间变化到拉伸区间过程中, 晶体的体积增大, 原子间的间距增加, 因而成键态和反键态间的劈裂减小, 导致带隙减小。

为了揭示带隙对压缩应变的反常响应, 我们画出了在应变为 $\pm 2\%$ 和 $\pm 4\%$ 时的能带结构, 如图 4 所示。首先可以看出, 在应变情形下, SOC 对能带结构影响很小, 这与没有应变时的情况一样。为了说明通常

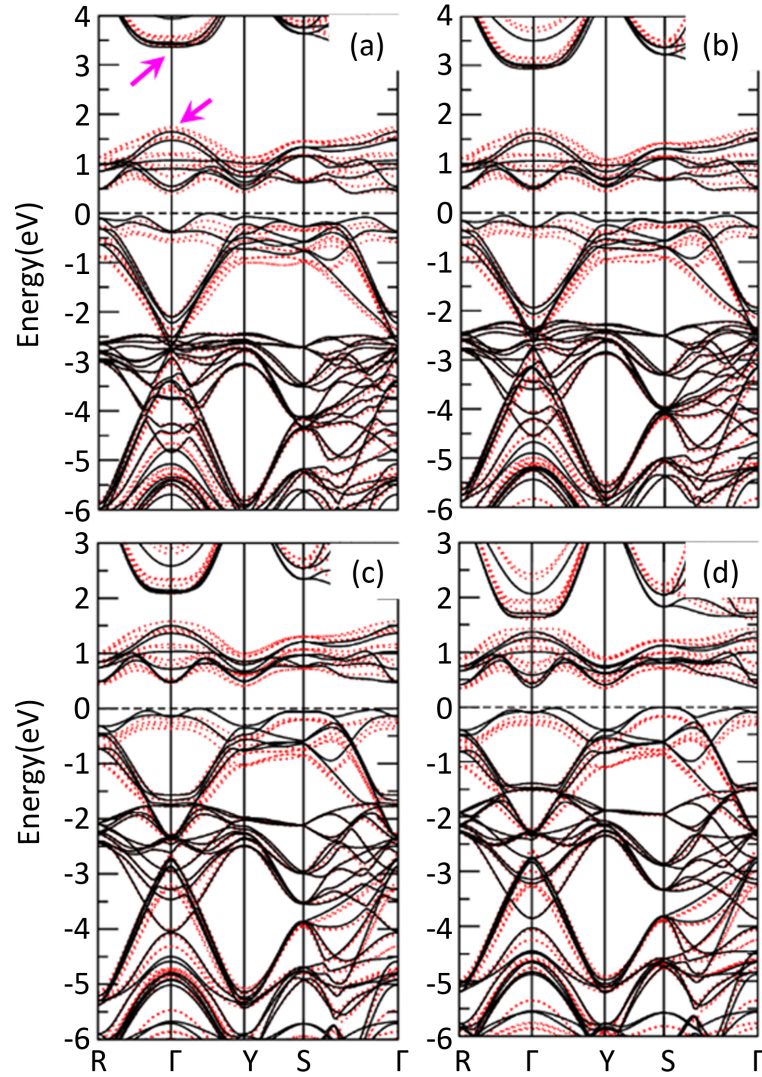


Figure 4. Band structure of NaOsO₃ with different strains from LDA + U (black solid lines) and LDA + U + SOC (red dashed lines) calculations. The strains ϵ in (a), (b), (c) and (d) are -4%, -2%, +2% and +4%, respectively. The valence band maximum is set as zero point of energy

图 4. LDA + U (黑色实线)和 LDA + U + SOC (红色虚线)计算的不同应变时的能带结构。图(a)、(b)、(c)和(d)对应的应变分别为-4%、-2%、+2%和+4%。价带最高点设置为能量原点

情况下带隙随应变的响应, 我们选择位于+2 eV 附近的带隙(图中箭头所示)加以考察。可以看出, 在应变从压缩区间变化到拉伸区间过程中, 该带隙逐渐减小, 符合常规情况所具有的性质。然而, 费米面附近的带隙却没有这种简单的趋势。因此, 我们挑选出布里渊区高对称点处最高占据能级和最低空能级之间的直接能隙, 作出它们随应变的响应行为, 如图 3(b)所示。可以看出, Γ 和 S 点处的能隙随应变的变化趋势与普通情形一致, 且 Γ 点处的能隙变化更为剧烈。有趣的是, R 和 Y 点处的能隙, 在整个应变区间的变化趋势都与常规情形相反。因此, 在一定的应变下, 间接带隙由布里渊区中直接能隙较小的点决定, 从而出现了 NaOsO₃ 的带隙在应变从压缩变化到拉伸过程中先增加再减小的反常行为。

进一步观察图 4 中的能带结构可以看出, 高对称点处的最低空能级在不同应变时变化不大, 而相应的最高占据能级变化显著。因此, 高对称点处最高占据能级和最低空能级之间的直接能隙的变化主要由

最高占据能级的变化引起。 Γ 和 S 点处的最高占据能级在应变从压缩变化到拉伸过程中越来越靠近价带顶, 而 R 和 Y 点处的最高占据能级则越来越远离价带顶。这种不同的变化行为, 导致了各对称点处最高占据能级和最低空能级之间的直接能隙对应变不同的响应行为。而这种复杂的能级变化行为与 NaOsO_3 中复杂的杂化有关。我们分析了这些高对称点处的最高占据能级的波函数, 发现 Γ 和 S 点处的波函数主要来自 Os-d_{xy} 与 O-p 杂化的成键态, 因此其能级在压缩应变时降低而在拉伸应变时升高; 反之, R 和 Y 点处的波函数主要来自 $\text{Os-d}_{xz/yz}$ 与 O-p 杂化的反键态, 因而其能级在压缩应变时升高而在拉伸应变时降低。这就解释了为什么布里渊区不同区域对应变的响应不同。

4. 总结

本文通过第一性原理计算, 研究了应力作用下的 $5d$ 过渡金属氧化物 NaOsO_3 的电子结构和磁学性质。发现对 NaOsO_3 施加压缩应力时, NaOsO_3 的带隙出现反常的变化趋势。分析不同应力下的电子结构发现, 布里渊区不同区域对外应力的响应行为相反, 最高占据能级和最低空能级之间的直接能隙在有的区域随应力增加而增加, 而在有的区域却减小。这种相反的反应是因为其不同的波函数构成所导致。当波函数为 Os-d_{xy} 与 O-p 杂化的成键态时, 其决定的能隙随应力增加而减小; 反之, 当波函数为 $\text{Os-d}_{xz/yz}$ 与 O-p 杂化的反键态, 其决定的能隙随应力增加而增加。这种电子结构对应力的奇特的响应可能在将来的电子器件中有应用前景。

基金项目

本课题受国家自然科学基金面上项目(11574223)及江苏省自然科学基金青年项目(BK20150303)的资助。

参考文献 (References)

- [1] Imada, M., Fujimori, A. and Tokura, Y. (1998) Metal-Insulator Transitions. *Reviews of Modern Physics*, **70**, 1039. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.70.1039>
- [2] Kotliar, G., Savrasov, S.Y., Haule, K., *et al.* (2006) Electronic Structure Calculations with Dynamical Mean-Field Theory. *Reviews of Modern Physics*, **78**, 865.
- [3] Cohen, R.E. (1992) Origin of Ferroelectricity in Perovskite Oxides. *Nature*, **358**, 136-138. <https://doi.org/10.1038/358136a0>
- [4] Schiffer, P., Ramirez, A.P., Bao, W., *et al.* (1995) Low Temperature Magnetoresistance and the Magnetic Phase Diagram of $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$. *Physical Review Letters*, **75**, 3336.
- [5] Tokura, Y. and Nagaosa, N. (2000) Orbital Physics in Transition-Metal Oxides. *Science*, **288**, 462-468. <https://doi.org/10.1126/science.288.5465.462>
- [6] Pickett, W.E. (1989) Electronic Structure of the High-Temperature Oxide Superconductors. *Reviews of Modern Physics*, **61**, 433.
- [7] Lee, K.W. and Pickett, W.E. (2007) Orbital-Quenching-Induced Magnetism in $\text{Ba}_2\text{NaOsO}_6$. *Euro Physics Letters*, **80**, Article ID: 37008.
- [8] Mogare, K.M., Klein, W., Schilder, H., *et al.* (2006) Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Properties of Na_3OsO_5 . *Zeitschrift für anorganische und Allgemeine Chemie*, **632**, 2389-2394. <https://doi.org/10.1002/zaac.200600216>
- [9] Derakhshan, S., Greedan, J.E. and Cranswick, L.M.D. (2008) Long-Range Antiferromagnetic Ordering in the $S = 0$ ordered Rocksalt oxide Li_5OsO_6 : Comparison with the Isoelectronic and Isostructural Spin Glass $\text{Li}_4\text{MgReO}_6$. *Physical Review B*, **77**, Article ID: 014408. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.014408>
- [10] Stitzer, K.E., Smith, M.D. and Zur Loye, H.C. (2002) Crystal Growth of Ba_2MOsO_6 ($M = \text{Li, Na}$) from Reactive Hydroxide Fluxes. *Solid State Sciences*, **4**, 311-316.
- [11] Yamamura, K., Wakeshima, M. and Hinatsu, Y. (2006) Structural Phase Transition and Magnetic Properties of Double Perovskites Ba_2CaMO_6 ($M = \text{W, Re, Os}$). *Journal of Solid State Chemistry*, **179**, 605-612.
- [12] Yonezawa, S., Muraoka, Y., Matsushita, Y., *et al.* (2004) Superconductivity in a Pyrochlore-Related Oxide KO_2O_6 . *Journal of Physics: Condensed Matter*, **16**, L9.
- [13] Stitzer, K.E., Abed, A.E., Smith, M.D., *et al.* (2003) Crystal Growth of Novel Osmium-Containing Triple Perovskites.

Inorganic Chemistry, **42**, 947-949.

- [14] Krockenberger, Y., Mogare, K., Reehuis, M., *et al.* (2007) Sr₂CrOsO₆: End Point of a Spin-Polarized Metal-Insulator Transition by 5d Band Filling. *Physical Review B*, **75**, Article ID: 020404. <https://doi.org/10.1103/physrevb.75.020404>
- [15] Lee, K.W. and Pickett, W.E. (2008) Half Semimetallic Antiferromagnetism in the Sr₂CrTO₆ system (T= Os, Ru). *Physical Review B*, **77**, Article ID: 115101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.115101>
- [16] Slater, J.C. (1951) Magnetic Effects and the Hartree-Fock Equation. *Physical Review*, **82**, 538.
- [17] Mandrus, D., Thompson, J.R., Gaal, R., *et al.* (2001) Continuous Metal-Insulator Transition in the Pyrochlore Cd₂Os₂O₇. *Physical Review B*, **63**, Article ID: 195104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.195104>
- [18] Shinaoka, H., Miyake, T. and Ishibashi, S. (2012) Noncollinear Magnetism and Spin-Orbit Coupling in 5d Pyrochlore Oxide Cd₂Os₂O₇. *Physical Review Letters*, **108**, Article ID: 247204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.247204>
- [19] Padilla, W.J., Mandrus, D. and Basov, D.N. (2002) Searching for the Slater Transition in the Pyrochlore Cd₂Os₂O₇ with Infrared Spectroscopy. *Physical Review B*, **66**, Article ID: 035120. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.035120>
- [20] Shi, Y.G., Guo, Y.F., Yu, S., *et al.* (2009) Continuous Metal-Insulator Transition of the Antiferromagnetic Perovskite NaOsO₃. *Physical Review B*, **80**, Article ID: 161104.
- [21] Calder, S., Garlea, V.O., McMorro, D.F., *et al.* (2012) Magnetically Driven Metal-Insulator Transition in NaOsO₃. *Physical Review Letters*, **108**, Article ID: 257209. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.257209>
- [22] Pickett, W.E. and Singh, D.J. (1996) Electronic Structure and Half-Metallic Transport in the La_{1-x}Ca_xMnO₃ System. *Physical Review B*, **53**, 1146.
- [23] Kresse, G. and Hafner, J. (1993) *Ab Initio* Molecular Dynamics for Liquid Metals. *Physical Review B*, **47**, 558.
- [24] Kresse, G., Furthmüller, J. and Hafner, J. (1995) *Ab Initio* Force Constant Approach to Phonon Dispersion Relations of Diamond and Graphite. *Euro Physics Letters*, **32**, 729.
- [25] Jung, M.C., Song, Y.J., Lee, K.W., *et al.* (2013) Structural and Correlation Effects in the Itinerant Insulating Antiferromagnetic Perovskite NaOsO₃. *Physical Review B*, **87**, Article ID: 115119. <https://doi.org/10.1103/physrevb.87.115119>
- [26] Kim, B.J., Jin, H., Moon, S.J., *et al.* (2008) Novel Jeff = 1/2 Mott State Induced by Relativistic Spin-Orbit Coupling in Sr₂IrO₄. *Physical Review Letters*, **101**, Article ID: 076402.
- [27] Jin, H., Jeong, H., Ozaki, T., *et al.* (2009) Anisotropic Exchange Interactions of Spin-Orbit-Integrated States in Sr₂IrO₄. *Physical Review B*, **80**, Article ID: 075112.
- [28] Laguna-Marco, M.A., Haskel, D., Souza-Neto, N., *et al.* (2010) Orbital Magnetism and Spin-Orbit Effects in the Electronic Structure of BaIrO₃. *Physical Review Letters*, **105**, Article ID: 216407. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.216407>
- [29] Mazin, I.I. and Singh, D.J. (1997) Electronic Structure and Magnetism in Ru-Based Perovskites. *Physical Review B*, **56**, Article ID: 2556. <https://doi.org/10.1103/physrevb.56.2556>

期刊投稿者将享受如下服务:

1. 投稿前咨询服务 (QQ、微信、邮箱皆可)
2. 为您匹配最合适的期刊
3. 24 小时以内解答您的所有疑问
4. 友好的在线投稿界面
5. 专业的同行评审
6. 知网检索
7. 全网络覆盖式推广您的研究

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: cmp@hanspub.org