

Research Paper

# Investigation and Calculation of Structural and Electronic Properties of LaGaO<sub>3</sub> in Cubic Phase<sup>1</sup>

Hamdollah Salehi<sup>\*2</sup> and Fatemeh Sadat Hejaz<sup>3</sup>

Received: 2020.12.04

Revised: 2021.03.07

Accepted: 2021.04.24

## Abstract

In this paper, structural properties such as structure parameters, energy band structure, the density of state, and charge density of LaGaO<sub>3</sub> are calculated from the cubic phase. The calculations have been performed using the pseudopotential and a plane wave method in the framework of density functional theory (DFT) with generalized gradient approximation (GGA) by the Quantum Espresso package. The results are in good agreement with the results of others.

**Keywords:** *Structure Parameters, Energy Band Structure, Density of States, LaGaO<sub>3</sub>, Density Functional Theory.*

---

<sup>1</sup> DOI: 10.22051/ijap.2022.34221.1182

<sup>2</sup> Associate Professor, Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. (Corresponding Author). Email: Salehi\_h@scu.ac.ir

<sup>3</sup> M. Sc. Graduated, Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: negarii881480303@gmail.com



# بررسی و محاسبه ویژگی‌های ساختاری و الکترونی $LaGaO_3$ در فاز مکعبی<sup>۱</sup>

حمداله صالحی\*<sup>۲</sup> و فاطمه سادات حجاز<sup>۳</sup>

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۹/۱۴

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۱۲/۱۷

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۲/۰۴

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک شیمی، دانشگاه الزهرا

سال دوازدهم، پیاپی ۲۸، بهار ۱۴۰۱

صص ۷-۱۶

## چکیده:

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری از جمله؛ پارامترهای ساختاری، ساختار نوارهای انرژی، چگالی حالت‌ها و چگالی ابر الکترونی برای فاز مکعبی  $LaGaO_3$  محاسبه شده‌اند. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل و موج تخت در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) به کمک بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. نتایج به دست آمده در توافق خوبی با نتایج دیگران است.

**واژگان کلیدی:** پارامترهای ساختاری، ساختار نوارهای انرژی، چگالی حالت‌ها،  $LaGaO_3$ ، نظریه تابعی چگالی.

<sup>۱</sup> DOI: 10.22051/ijap.2022.34221.1182

<sup>۲</sup> دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول). Email: Salehi\_h@scu.ac.ir.

<sup>۳</sup> دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. Email: negarii881480303@gmail.com



## ۱. مقدمه

پروسکایت‌ها از ترکیبات مهم به شمار می‌روند چرا که دارای محدوده وسیعی از ویژگی‌های مفید به منظور تحقیق و بررسی فناوری هستند [۱]. ساختار بلوری  $\text{LaGaO}_3$  با استفاده از طیف‌سنجی پراش پرتو ایکس مورد بررسی قرار گرفته است و نتایج نشان می‌دهد که  $\text{LaGaO}_3$  ساختاری مشابه با  $\text{GdFeO}_3$  دارد [۲]. آلاییدن لانتانیم گالات، با جانشینی جزئی اتم‌های  $\text{La}$  یا  $\text{Ga}$  و یا هردو آن‌ها، امکان پایش ویژگی‌های مغناطیسی، الکتروفیزیکی و دیگر ویژگی‌های پروسکایت محلول‌های جامد را در طیف وسیعی فراهم می‌کند [۳]. این ماده دارای سه فاز ارتورومبیک<sup>۱</sup> ( $pm3m$ )، مکعبی ( $pm3m$ ) و رومبوهدرال<sup>۲</sup> ( $R3C$ ) است و در دمای  $143/5$  درجه سانتی‌گراد یک انتقال فاز مرتبه اول از ارتورومبیک به رومبوهدرال دارد [۴]. پژوهش‌های تجربی بسیاری بر روی  $\text{LaGaO}_3$  و نوع آلاییده شده آن انجام شده است. درحالی که پژوهش‌های نظری چندانی بر روی آن صورت نگرفته است.

سرامیک‌های لانتانیم گالات گزینه‌های خوبی به منظور استفاده به عنوان مواد زیرلایه برای ابررساناهای دماهای بالا و لایه همبسته مقاومت مغناطیسی هستند. از این رو سعی بر آن است تا ویژگی‌های ساختاری و الکترونی این ترکیب در فاز مکعبی محاسبه شود. نتایج اولیه داده‌های پروسکایت  $\text{LaGaO}_3$  و ساختار مکعبی آن توسط مولر و کینگ در سال ۱۹۵۳ گزارش شدند [۵]. علاوه بر این در سال ۲۰۲۰، زیتونی و همکاران با استفاده از کد محاسباتی Wien2k ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی این ترکیب را محاسبه و بررسی نمودند [۹]. از این رو در این کار ویژگی‌های ساختاری و الکترونی لانتانیم گالات در فاز مکعبی با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام می‌گیرد.

همچنین لازم به توضیح است که نرم افزارهای محاسباتی بسیاری بر پایه نظریه تابعی چگالی و با روش‌های متفاوت وجود دارند، در این میان بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو با استفاده از توابع موج تخت و روش شبه‌پتانسیل، محاسبات را انجام می‌دهد. این بسته محاسباتی شامل سه نرم‌افزار جدا از هم می‌باشد که هر سه آن‌ها در محیط لینوکس کار می‌کنند. این نرم‌افزارها، هر کدام توانایی‌های ویژه خود را داشته و قادر به بررسی ویژگی‌های مختلف یک سامانه هستند. از جمله توانایی‌های نرم‌افزار PWscf می‌توان به محاسبه ویژگی‌های حالت پایه، محاسبه بسامدهای فونونی با استفاده از نظریه اختلالی تابعی چگالی، محاسبه توابع پاسخ خطی و غیرخطی (تانسور دی‌الکتریک،

<sup>1</sup> Orthorhombic

<sup>2</sup> Rhombohedral



پذیرفتاری و غیره)، محاسبه ضرایب برهمکنش الکترون - فونون در فلزات، محاسبه سطح مقطع رامان و فروسرخ و بسیاری ویژگی‌های دیگر اشاره کرد. در حالت کلی این نرم‌افزار شامل برنامه‌های محاسباتی متعددی است که برای محاسبات ویژگی‌های متفاوت مواد طراحی شده‌اند.

## ۲. روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل با امواج تخت در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از تقریب GGA و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسوانجام شده است [۱۰]. به این دلیل که استفاده از امواج تخت در روش تابعی چگالی حجم محاسبات را بالا می‌برد، ما باید به دنبال شبه پتانسیلی باشیم که علاوه بر کاهش حجم محاسبات، ویژگی‌های بلور را به خوبی توصیف کند. بدین منظور از شبه پتانسیل‌های فوق نرم استفاده می‌شود که تمام ویژگی‌های بیان شده را داراست. اوربیتال‌هایی که از آن‌ها به عنوان شبه پتانسیل استفاده شده است، برای اتم‌های لانتانیم، گالیم و اکسیژن در جدول (۱) درستون الکترون‌های ظرفیت آمده است.

جدول ۱ جداسازی الکترون‌های ظرفیت و مغزه برای اتم‌های La، Ga و O [۱۰].

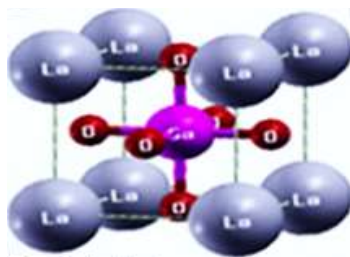
ترکیب LaGaO <sub>3</sub>		
اتم	الکترون‌های مغزه	الکترون‌های ظرفیت
La	1s <sup>2</sup> , 2s <sup>2</sup> , 2p <sup>6</sup> , 3s <sup>2</sup> , 3p <sup>6</sup> , 3d <sup>10</sup> , 4s <sup>2</sup> , 4p <sup>6</sup> , 4d <sup>10</sup>	5s <sup>2</sup> , 5p <sup>6</sup> , 6s <sup>2</sup> , 5d <sup>1</sup>
Ga	1s <sup>2</sup> , 2s <sup>2</sup> , 2p <sup>6</sup> , 3s <sup>2</sup> , 3p <sup>6</sup>	3d <sup>10</sup> , 4s <sup>2</sup> , 4p <sup>1</sup>
O	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup> , 2p <sup>4</sup>

در انجام محاسبات همگرایی بر مبنای انرژی قرار داده شد که با ۶ چرخه، ۱۷۲۱ موج تخت به دست آمد و بادقتی برابر با  $10^{-5} \times 2$  ریدبرگ به همگرایی رسید. تعیین نقاط k برای مش بندی منطقه اول بریلوئن در دقت و سرعت محاسبات تأثیر بسزایی دارد. در نظریه تابعی چگالی برای استخراج ویژگی‌های یک بلور، باید معادلات کوهن - شم<sup>۱</sup> با توجه به تقارن انتقالی بلور به صورت خودسازگار حل شوند. به دلیل تناوبی بودن سامان بلور، ویژه حالت‌های کوهن - شم از قضیه بلاخ تبعیت می‌کنند، بنابراین وابسته به عدد کوانتومی k می‌شوند. نقاط k مجموعه اعداد کوانتومی

<sup>1</sup> Kohn-Sham equations



مجاز در منطقه اول بریلوئن تعریف می‌شوند. تعداد ۱۱۰ نقطه برای ساختار مکعبی با استفاده از روش مونخورست- پک<sup>۱</sup> تولید شده است [۱۱]. انرژی قطع را برای حد بالای انرژی توابع موج پایه ۲۵ ریذبرگ در نظر گرفته شد. منطقه اول بریلوئن با مش بندی و ابعاد  $10 \times 10 \times 10$  به دست آمد. شکل (۱) یاخته قراردادی ترکیب  $LaGaO_3$  را که با استفاده از برنامه Xcrysden رسم شده؛ نشان می‌دهد.



شکل ۱ شماتیک یاخته قراردادی فاز مکعبی.

### ۳. نتایج و بحث

#### ۳-۱ پارامترهای ساختاری

برای به دست آوردن ثابت‌های شبکه در فاز مکعبی ابتدا محاسبات خودسازگار را انجام داده و سپس مقدار ثابت شبکه  $a$  را حول مقدار تجربی اش وردش می‌دهیم. تغییرات انرژی کل بر حسب حجم با استفاده از معادله حالت مورناگون<sup>۲</sup> بدست می‌آید [۱۲]:

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V_0}{\tilde{B}} \left[ \frac{V}{V_0} + \frac{\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1-\tilde{B}} - \tilde{B}}{1-\tilde{B}} \right] \quad (1)$$

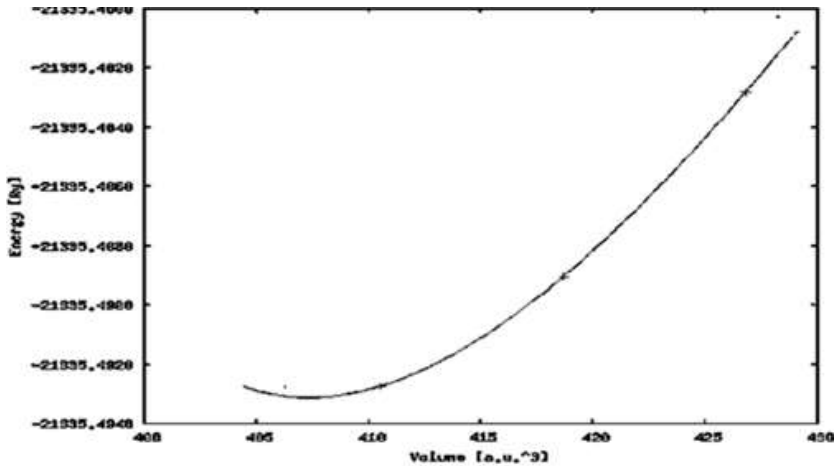
که در آن  $V_0$  و  $E_0$  به ترتیب حجم بهینه و کمینه انرژی کل در دمای صفر کلوین هستند،  $B_0$  و  $\tilde{B}$  به ترتیب مدول حجمی و مشتق آن هستند. در شکل (۲) حجم بهینه  $V_0$  متناظر با کمینه انرژی  $E_0$  می‌باشد. از حجم بهینه می‌توان ثابت شبکه بهینه را بدست آورد. از برازش مقادیر حجم و انرژی، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم پذیری بدست می‌آید. در جدول (۲) مقادیر بدست آمده از محاسبات با نتایج دیگران مقایسه شده است. همان طور که از جدول مشاهده می‌شود، نتایج

<sup>1</sup> Monkhorst- Pack

<sup>2</sup> Murnaghan equation of state



محاسبات انجام شده سازگاری کمابیش خوبی با نتایج نظری و تجربی را بیان می‌کند و در مواردی که نتایج تجربی وجود ندارد با مفاهیم اولیه سازگاری دارد.



شکل ۲ نمودار انرژی بر حسب حجم برای فاز مکعبی ترکیب LaGaO<sub>3</sub>.

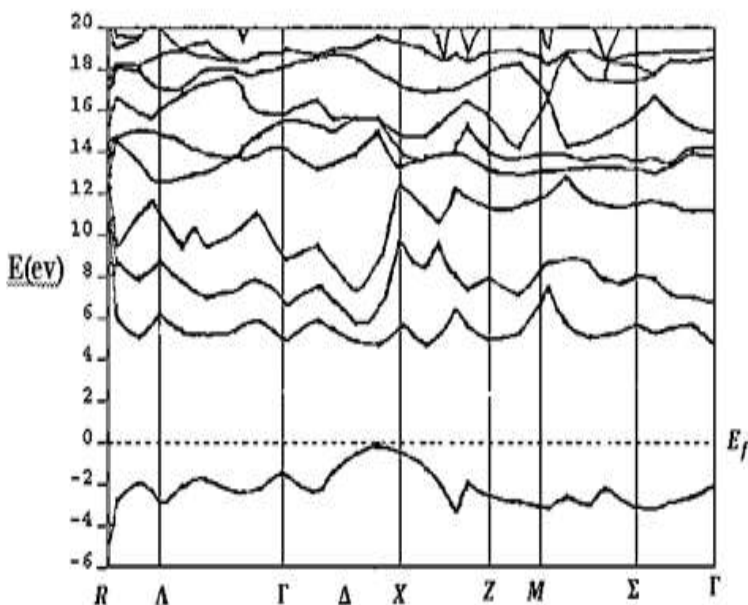
جدول ۲ پارامترهای ساختاری محاسبه شده در کار حاضر و مقایسه آن با کار دیگران برای فاز مکعبی.

کمیت محاسبه شده	کار حاضر	کار دیگران	
		کار تجربی [۹،۱۳]	کار نظری [۹،۱۳]
$a(\text{\AA})$	۳/۹۲۱۴	۳/۸۸۶	۳/۹۲۸
درصدخطا نسبت به مقدار تجربی	۰/۹۱	-	۱/۰۸
$B(GPa)$	۴۸۴/۲۶۵۷	-	-
$\dot{B}$	۷۲/۰۱۳۱	-	-
$E_0(Ry)$	-۲۱۳۳۵/۴۹	-	-
$V_0(\text{\AA}^3)$	۶۰/۳۰۲۰	۵۸/۶۸	۶۰/۷۰
$K(GPa)^{-1}$	۰/۰۰۲۰۶	-	-

### ۳-۲ ساختار نوارهای انرژی

بعد از انجام محاسبات  $nscf$ ، می‌توان ساختار نوارهای انرژی ترکیب مورد نظر را رسم کرد. برای رسم نوارهای انرژی بلور لازم است که معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم را در نقاط فضای وارون برای تمام نوارهای اشغال شده و نشده حل کنیم و به دلیل ویژگی دوره‌ای بلور محاسبات فقط در

منطقه اول در راستای خطوط تقارنی مختلف انجام می‌شود. ساختار نوارهای انرژی  $\text{LaGaO}_3$  در راستای خطوط تقارنی مختلف در شکل (۳) رسم شده است. در این جا انرژی فرمی به عنوان مبدأ مقیاس انتخاب و مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت است. با توجه به شکل (۳) می‌بینیم که نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع نمی‌کنند، این نشان دهنده آن است که ترکیب  $\text{LaGaO}_3$  دارای شکاف مستقیمی به اندازه  $4.9\text{eV}$  می‌باشد. از شکل متوجه می‌شویم که در نوار رسانش تبهگنی دو گانه و سه گانه داریم و این به دلیل در نظر نگرفتن قطبش اسپینی است. از مقایسه شکل‌های (۳) و (۴) به این نتیجه می‌رسیم که محاسبات به درستی انجام شده‌اند و این با نتایج دیگران سازگاری دارد [۱۴].



شکل ۳ نمودار ساختار نوارهای انرژی ترکیب  $\text{LaGaO}_3$  در فاز مکعبی.

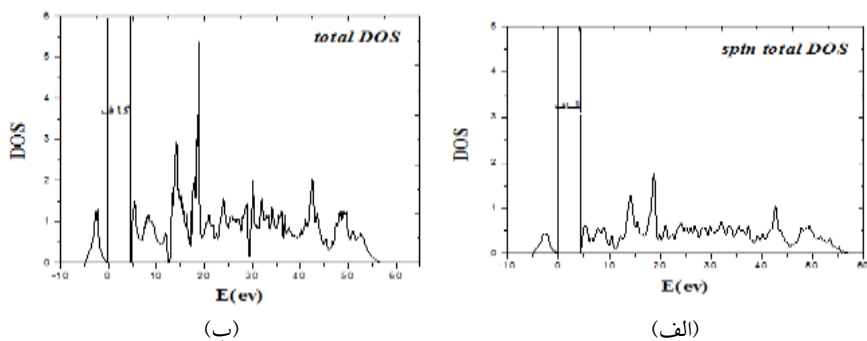
### ۳-۳ چگالی حالت‌ها

همان طور که می‌دانیم توزیع الکترون در طیف انرژی با چگالی حالت‌ها توصیف می‌شود و می‌توان با آن روش توزیع مشارکت اوربیتال‌های مختلف را در ترکیب مشاهده نمود. نمودار چگالی حالت‌های ترکیب  $\text{LaGaO}_3$  در فاز مکعبی بر حسب انرژی در گستره ۱۰- تا ۵۵ الکترون‌ولت، در شکل (۴الف) با قطبش اسپینی رسم شده است. در نمودار چگالی حالت‌ها، مقیاس انرژی صفر



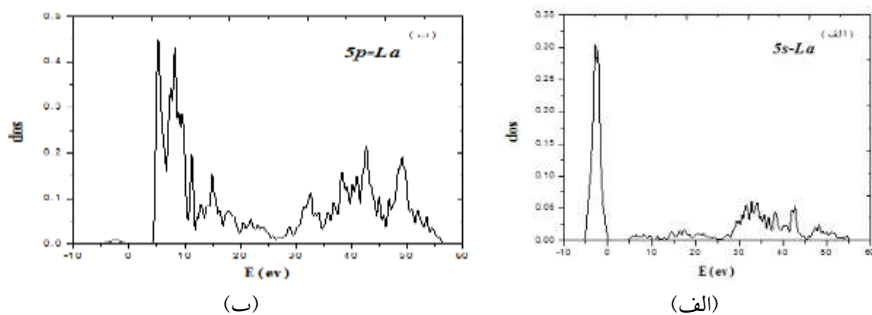
نشان دهنده مکان تراز فرمی است. همان‌طور که مشاهده می‌شود فاز مکعبی شکافی به اندازه حدود  $4.9 \text{ eV}$  دارد که با نتایج نظری دیگران سازگاری دارد و نتیجه بدست آمده از محاسبات نوارهای انرژی را تأیید می‌کند [۳،۱۴]. همچنین در این شکل (۴الف)، قله‌هایی در بازه صفر؛ ۵ و  $20 \text{ eV}$  الکترون ولت مشاهده می‌شود که بیانگر مشارکت اوربیتال‌های مختلف می‌باشد. اما متأسفانه شکاف نواری در فاز مکعبی به صورت تجربی محاسبه نشده است. بیشینه این نمودار در انرژی  $18 \text{ eV}$  و نزدیک به  $5.5$  حالت بر الکترون ولت در هر یاخته قراردادی است که همان چگالی حالت‌های آن می‌باشد. چگالی حالت‌های کلی با در عدم در نظر گرفتن قطبش اسپینی هم انجام شد که نمودار آن در شکل (۴ب) آورده شده است. مقایسه این دو حالت نشان می‌دهد که وارد کردن اسپین در محاسبات تنها قله‌های چگالی حالت‌های آن به دلیل برهم‌کنش تبدلی نصف شده‌اند اما در محور انرژی هیچ تغییری صورت نگرفته است.

به منظور بررسی روش مشارکت اوربیتال‌های مختلف، بایستی چگالی حالت‌های جزئی آن رسم شود که تعدادی از نمودارهای آن در شکل (۵) و (۶) نشان داده شده است. با توجه به شکل متوجه می‌شویم که مشارکت عمده اوربیتال  $5s$  اتم لانتانیم در بازه  $-5$  تا صفر الکترون ولت است و گستردگی مشارکت آن بیشتر در بالای نوار ظرفیت و میانه نوار رسانش می‌باشد. این اوربیتال قله‌ای در حدود  $0.30$  حالت بر الکترون ولت و انرژی  $2.5 \text{ eV}$  در یاخته قراردادی می‌باشد. همچنین محاسبات بیانگر این است که مشارکت عمده اوربیتال  $2p$  ترکیب در انتهای نوار رسانش و بالای نوار ظرفیت می‌باشد. علاوه بر این از شکل (۶) پیداست که اوربیتال‌های  $4s$  و  $3d$  اتم گالیوم بیشتر مشارکت خود را در نوار رسانش دارند.

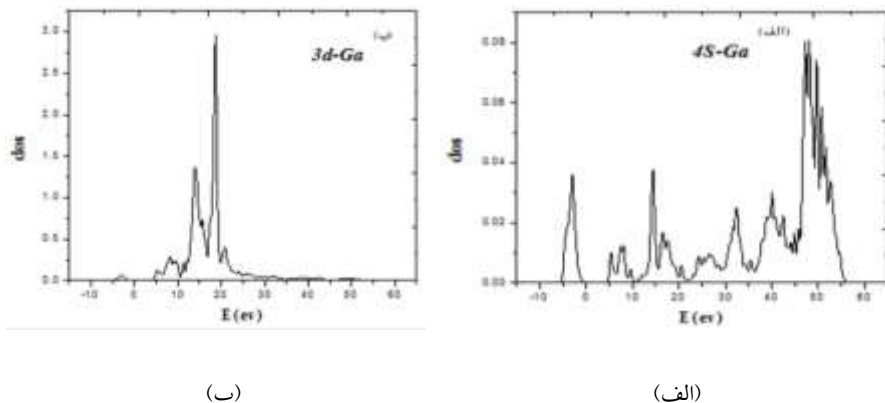


شکل ۴ نمودار چگالی حالت‌های کلی لانتانیم گالات در فاز مکعبی (الف) با قطبش اسپینی و (ب) بدون قطبش اسپینی.





شکل ۵ چگالی حالت‌های جزئی (الف) اوربیتال  $5s$  و (ب) اوربیتال  $5p$  اتم لانتانوم.



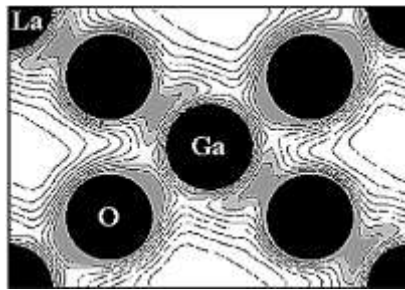
شکل ۶ چگالی حالت‌های جزئی (الف) اوربیتال  $4s$  و (ب) اوربیتال  $3d$  اتم گالیوم.

### ۳-۴ چگالی ابرالکترونی

چگالی ابرالکترونی که همان چگالی بار است، در حقیقت چگونگی توزیع بار در اطراف اتم‌ها را نشان می‌دهد و با توجه به میزان توزیع بار در اطراف اتم‌ها می‌توان نوع پیوند بین آن‌ها را تشخیص داد. تراکم زیاد الکترون بین دو اتم نشان دهنده قوی بودن پیوند بین آن‌ها است و تراکم کمتر الکترون بین دو اتم، پیوند ضعیف‌تری را بین آن‌ها نشان می‌دهد. چگالی ابرالکترونی ترکیب  $\text{LaGaO}_3$  در فاز مکعبی در صفحه (۱۱۰) در شکل (۷) رسم شده است. همان‌طور که از شکل پیدا است، بیشترین تراکم بار در اطراف اتم‌های اکسیژن به چشم می‌خورد که دلالت بر الکترون



دوستی بالای این اتم در ترکیب دارد. بعد از اکسیژن بیشترین تراکم در اطراف اتم گالیم دیده می‌شود و در اطراف اتم‌های لانتانیم چگالی بار اندکی وجود دارد که نشان می‌دهد اتم‌های لانتانیم الکترون‌های خود را از دست داده‌اند. توزیع همگن بار در اطراف اتم‌های لانتانیم و اتم‌های گالیم نشان دهنده این است که بین اتم‌های  $La - La$  و  $Ga - Ga$  پیوند فلزی وجود دارد. وجود آنیون  $O^{-2}$ ، این مطلب را خاطر نشان می‌کند که بین اتم‌های اکسیژن پیوند قوی کووالانسی برقرار است.



شکل ۲ نمودار چگالی ابر الکترونی ترکیب  $LaGaO_3$  در فاز مکعبی برای صفحه (۱۱۰).

#### ۴. نتیجه‌گیری

در کار حاضر محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل و بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شد. نتایج بدست آمده از بررسی ترکیب  $LaGaO_3$  در فاز مکعبی بیانگر این است که این ترکیب در فاز مکعبی شکاف نواری به اندازه ۴٫۹ eV دارد. همچنین چگالی حالت‌ها نتایج محاسبات ساختار نواری را تایید می‌کنند. در نظر گرفتن قطبش اسپینی تنها قلّه‌های چگالی حالت‌ها را به دلیل اندرکنش تبدیلی کم کرده است درحالی که در محور انرژی تغییری صورت نگرفته است. علاوه بر این در نمودار چگالی ابر الکترونی، بیشترین تراکم بار در اطراف اتم‌های اکسیژن به چشم می‌خورد که دلیلی بر الکترون دوستی بالای این عنصر می‌باشد. توزیع همگن بار در اطراف اتم‌های لانتانیم نشان دهنده این است که بین اتم‌های  $La - La$  پیوند فلزی وجود دارد. همچنین وجود کاتیون  $O^{-2}$  دلیلی بر وجود پیوند قوی کووالانسی بین اتم‌های اکسیژن است. نتایج بدست آمده با دیگر داده‌های تجربی و نظری موجود سازگاری خوبی دارند.

#### ۵. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران [SCU.SP99.490] پشتیبانی شد.

## منابع

- [1] Watts B. E., Dabkowska. H and Wanklyn. B. M, "The flux growth of perovskite", *Journal of crystal growth*, 94, 125-130, 1989.
- [2] Vasylechko. L, Matkovski. A, Suchocki. A, Savytskii. D, and Syvorotka. I, "Crystal structure of  $\text{LaGaO}_3$  and  $(\text{La,Gd})\text{GaO}_3$  solid solutions", *Journal of alloys and compounds*, 28, 213-218, 1999.
- [3] Chezhina, N. V., et al. "Magnetic properties and electronic structure of the  $\text{LaGaO}_3$  perovskite doped with nickel." *Physics of the Solid State* 50.11, 2121-2126, 2008.
- [4] Tamblyn. I, "Bucky ball with isosurface of ground state electron density", 2008.
- [5] Xia, Xinhui, et al., "Perovskite solar cell powered electrochromic batteries for smart windows.", *Materials Horizons* 3.6, 588-595, 2016.
- [6] Ma, Chunqing, et al. "2D Perovskites with Short Interlayer Distance for High-Performance Solar Cell Application." *Advanced Materials* 30.22, 1800710, 2018.
- [7] Emery, Antoine A., and Chris Wolverton. "High-throughput dft calculations of formation energy, stability and oxygen vacancy formation energy of abo 3 perovskites." *Scientific data* 4.1, 1-10, 2017.
- [8] Zheng, Chao, and Oleg Rubel. "Aziridinium lead iodide: a stable, low-band-gap hybrid halide perovskite for photovoltaics." *The journal of physical chemistry letters* 9.4, 874-880, 2018.
- [9] Zitouni, H., et al. "Electronic, transport and optical properties in perovskite compound  $\text{LaGaO}_3$ ." *Materials Research Express* 7.3, 035501, 2020.
- [10] <http://www.quantum-espresso.org>.
- [11] Monkhorst, Hendrik J., and James D. Pack. "Special points for Brillouin-zone integrations." *Physical review B* 13.12, 5188, 1976.
- [12] Salehi, H. "Sr-Doping Effect on the Electronic Structure of  $\text{BaTiO}_3$  Ceramic." *Indian Journal of Physics* 80, 1195-1200, 2006.
- [13] Ruggiero. A, and Ferro. R, "Ortogalliti di element idelleterre rare", *Atidella Accademia Nazionale deilncei, classe di scienze Fisione, Matematiche e Naturali, Rendiconti*, 17, 48-50, 1954.
- [14] Singh. N and Yul Rhee. J, "Electronic and Magneto- Optical Properties of Rare-Earth Orthoferrites", *Journal of the Korean Physical Society*, 53, 806-811, 2008.

© 2020 Alzahra University, Tehran, Iran. This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

