

Optimización estructural de la perovskita de zirconato de estroncio: un estudio a primeros principios

Structural optimization of the perovskite of strontium zirconate: a study from first principles

M. Arteaga-Varela^a, A. J. Herrera-Carbajal^a, M. I. Reyes-Valderrama^a, V Rodríguez-Lugo^{a,*}

^a Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

Resumen

Se realizó un estudio teórico del zirconato de estroncio (SrZrO_3) tipo perovskita, que cristaliza en una celda cúbica con 5 átomos: 1 átomo de Sr distribuido en los vértices, 3 átomos de O en las caras y 1 átomo de Zr en el centro. Se optimizaron los parámetros para un pseudopotencial Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) de tipo ultrasuave en el código de Quantum Espresso[®], sustentada en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés). Se realizaron cálculos de tipo autoconsistente, variando el tamaño de la función de onda y el número de puntos de alta simetría, definidos mediante una red Monkhorst-Pack. Se realizó la optimización estructural variando posiciones atómicas y el parámetro de red de la estructura de SrZrO_3 ; se obtuvieron la gráfica de bandas y la densidad de estados electrónica para una ruta Γ -X-R-M- Γ . Se muestra que a partir de simulaciones moleculares a primeros principios se pueden obtener propiedades estructurales con una precisión de 98.4%.

Palabras Clave:

Perovskita, Pseudopotencial, DFT.

Abstract

A theoretical study of strontium zirconate (SrZrO_3) type perovskite, which crystallizes in a cubic cell with 5 atoms: 1 Sr atom distributed in the vertices, 3 O atoms in the faces and 1 Zr atom in the center was done. The parameters optimization for an ultra-soft pseudopotential Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) type in Quantum Espresso[®] code based on Density Functional Theory (DFT) was done. A serie of self-consistent calculations were performed varying the size of the wave function and as the number of high symmetry points in a Monkhorst-Pack grid. A structural optimization was carried out by varying atomic positions and the lattice parameter of the SrZrO_3 structure; the band plot and the electronic state density for a Γ , X, R, M, Γ path were obtained. Results shown that by molecular simulations by means of ab initio study, the structural properties can be obtained with an accuracy of 98.4%.

Keywords:

Perovskite, Pseudopotential, DFT.

1. Introducción

Como consecuencia de las diversas necesidades de la sociedad moderna, el uso de materiales avanzados con mejores propiedades y características específicas se ha incrementado, así mismo, permitiendo el desarrollo de nuevos métodos computacionales basados en diferentes teorías que permiten tratar con precisión la interacción electrónica en átomos, iones, moléculas y algunos sólidos (Carvajal, 2017).

La teoría del funcional de la densidad es uno de los métodos más empleados en la realización de cálculos para determinar la estructura electrónica de sólidos. Esta teoría provee de un método alternativo y riguroso que permite calcular el estado fundamental de estructuras complejas tipo ABO_3 (Martínez Velásquez & Rodríguez Martínez, 2018).

Los sólidos tipo ABO_3 comúnmente llamados perovskitas son muy versátiles en cuanto a propiedades y aplicaciones, debido a la amplia gama de materiales que cristalizan en este tipo de

*Autor para la correspondencia: autcorres@uaeh.edu.mx

Correo electrónico: miguelnano1@gmail.com (M. Arteaga-Varela), alejandro_herrera@uaeh.edu.mx (A. J. Herrera-Carbajal), isareyv@hotmail.com (M. I. Reyes-Valderrama), ventura.rl65@gmail.com (V Rodríguez-Lugo)

estructura (González Olaya, 2013); es por esto que en la actualidad las perovskitas se han convertido en un objeto de estudio entre la comunidad científica destacando como un material avanzado.

Por otra parte, una de las perovskitas potencialmente atractivas es la de SrZrO₃, a pesar de tener relativamente pocos resultados publicados, posee propiedades interesantes como una alta constante dieléctrica, alta resistencia mecánica y una temperatura de fusión cercana a 2650 °C lo que la hace ideal para aplicaciones de alto voltaje entre otras (Lin, Lin, Wu, Lin, & Tseng, 2008; Souptel, Behr, & Balbashov, 2002; Yu, Zhu, Chen, Chen, & Krishnan, 2004), sin embargo, estudios previos sobre esta perovskita se han centrado en sus propiedades estructurales y eléctricas desde un enfoque experimental y pocos trabajos abordaron el estudio desde una perspectiva teórica utilizando simulación molecular (Galicka-Fau et al., 2008; Terki, Feraoun, Bertrand, & Aourag, 2005; Vali, 2008a).

Los estudios teóricos en los materiales son de gran importancia debido a que permiten el entendimiento de los fenómenos que permiten explicar el comportamiento de los materiales a diferentes estímulos, de igual forma permite el modelado de estructuras nuevas que son de difícil acceso de forma experimental, permitiendo obtener datos previos que permitan la optimización de tiempo y materiales empleados en la fabricación de estructuras complejas, así mismo ayudan a complementar los estudios realizados experimentalmente, mediante la comparación con los datos obtenidos por ambas metodologías.

Particularmente en este trabajo se realizó un estudio teórico mediante simulación molecular a primeros principios, donde se busca encontrar la estructura más estable (de mínima energía) para la perovskita de SrZrO₃, así mismo, determinar la energía de Fermi, la estructura de bandas y densidad de estados que permita conocer el comportamiento electrónico del material in bulto. (Évarestov, 2005; Nazir, Ahmad, Khan, & Tariq, 2015)

2. Metodología

En física cuántica el estado físico de mínima energía de una partícula o un sistema de partículas se representa mediante la función de onda independiente del tiempo $\Psi(\mathbf{r})$ a través de la solución de la ecuación de Schrödinger (David j. Griffiths, 2004); para una sola partícula esta ecuación se formula como se aprecia en la ecuación 1:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

para un sistema multielectrónico la ecuación se representa como se presenta en la ecuación 2:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (2)$$

donde \hat{H} es el operador hamiltoniano que es la contribución de energía cinética y potencial del sistema. Para un sistema multielectrónico la resolución de la ecuación de Schrödinger resulta inasequible. Es por eso que se intenta resolver esta ecuación mediante aproximaciones siendo una de las más usadas la teoría del funcional de la densidad.

La base teórica de DFT se sustenta en la aproximación adiabática* y los postulados de Hohenberg y Kohn en 1964 (Hohenberg & W. Kohn, 1964), en particular, mostraron que la energía de un sistema multielectrónico es funcional de su densidad electrónica (véase ecuación 3) y que a partir de esta se puede minimizar el funcional de energía del sistema.

$$E[n(\mathbf{r})] = F[n(\mathbf{r})] + \int n(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (3)$$

donde $\int n(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ es un potencial externo y $F[n(\mathbf{r})]$ este dado por la ecuación 4:

$$F[n(\mathbf{r})] = T_s[n(\mathbf{r})] + E_{e-e}[n(\mathbf{r})] + V_{xc}[n(\mathbf{r})] \quad (4)$$

en particular la energía cinética ($T_s[n(\mathbf{r})]$) y la energía de intercambio y correlación ($V_{xc}[n(\mathbf{r})]$) son dos términos claves.

La energía cinética total es la contribución de energía cinética de cada electrón en el sistema como se muestra en la ecuación 5:

$$T_s = \sum_{i=1}^N \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2}\nabla^2\right) \phi_i(\mathbf{r}) \quad (5)$$

donde $\phi_i(\mathbf{r})$ son funciones que representan a los orbitales del sistema que satisfacen las ecuaciones integro-diferenciales de Kohn y Sham (Kohn & Sham, 1965) ver ecuación 6:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})\right) \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (6)$$

Por último el funcional de intercambio y correlación $V_{xc}[n(\mathbf{r})]$ es un parámetro que no se ha logrado calcular de manera exacta por lo que es necesario aproximarlos; en general existen varios tipos de pseudopotenciales (Perdew et al., 2005) en este trabajo se utilizó un pseudopotencial Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) de aproximación de gradiente generalizado (GGA) (Perdew, Burke, & Ernzerhof, 1996).

En este trabajo se utilizó el código de Quantum Espresso® que se sustenta en DFT y construye la densidad electrónica de prueba como una combinación lineal de funciones de onda plana $e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$ (Giannozzi et al., 2009).

Básicamente Quantum Espresso® emplea un método (figura 1) donde se elige una función de onda base, en este caso son funciones de onda plana $e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$, esto permite determinar la densidad electrónica de prueba $[n(\mathbf{r})]$, una vez obtenida se calcula el potencial de intercambio y correlación V_{xc} , posteriormente se construye el hamiltoniano, se resuelven las ecuaciones integro-diferenciales de Kohn y Sham y se determinan los números de ocupación n_i de los orbitales Ψ_i que permiten la determinación de la densidad electrónica, una vez hecho lo anterior se construye la nueva densidad electrónica $n(\mathbf{r}) = \sum n_i \Psi_i^* \Psi$ esta densidad se evalúa con el criterio de convergencia, si se ha cumplido, termina el cálculo y si no, se toma la densidad electrónica calculada como la densidad de prueba para llevar a cabo el cálculo autoconsistente de nuevo.

* En la aproximación adiabática también conocida como aproximación de Born-Oppenheimer debido a que la masa del núcleo es mucho mayor que la masa del electrón, la diferencia en su velocidad también será grande por lo que bajo esta aproximación los núcleos ven a los electrones como una nube de

carga y los electrones ven a los núcleos como si estuvieran estáticos, de esta forma los electrones se adaptan a cualquier posición de los núcleos instantáneamente.

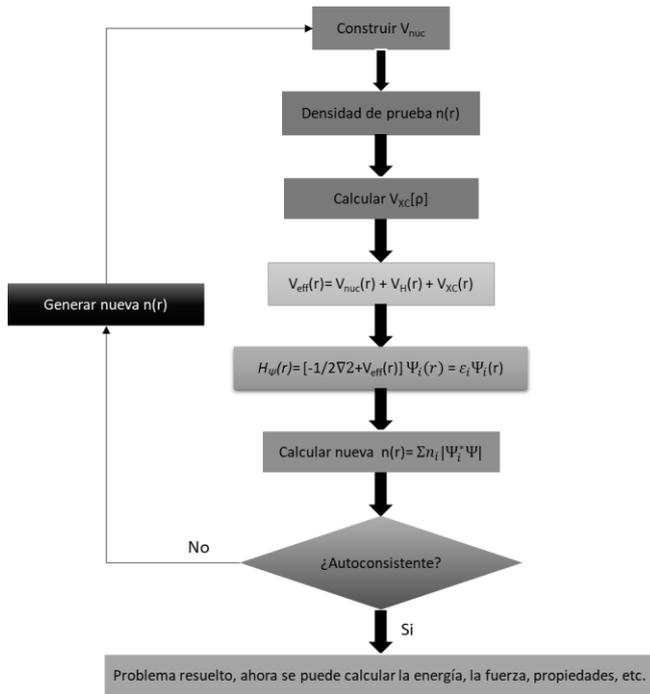


Figura 1. Diagrama de flujo de código PWscf

En este estudio mediante el código de Quantum Espresso® basado en la teoría del funcional de la densidad con una base de ondas planas y utilizando un pseudopotencial de gradiente generalizado se llevó a cabo la optimización geométrica de la estructura tipo SrZrO₃. En la primera parte del estudio se ajustaron el tamaño de la función de onda de prueba y el número de puntos de alta simetría, con el propósito de optimizar la estructura con la mejor precisión posible en el menor tiempo. Para el primer parámetro se corrieron 10 cálculos modificando la magnitud de la función de onda que genera la densidad electrónica de prueba (ecutwfc) dentro del código, los datos se presentan en la tabla 1.

Tabla 1. Optimización de la función de onda de prueba con respecto a la energía total del sistema.

Energía total (eV)	Ecutwfc (Ry)	Tiempo (s)
-268.6671323	20	3.70
-270.0979094	40	7.63
-270.1113083	60	14.10
-270.1147251	80	20.23
-270.1151332	100	27.60
-270.1154845	120	37.89
-270.115643	140	50.07
-270.1156826	160	61.32
-270.1157601	180	75.45
-270.1158025	200	88.28

Como se puede ver en la tabla 1 se cambió la variable ecutwfc desde 20 Ry hasta 200 Ry y se tomó como parámetro de convergencia la energía total del sistema, por lo que el parámetro óptimo para la variable ecutwfc se ajustó a 100 Ry debido a que a partir de este valor la variación de la energía total del sistema es despreciable y se ha alcanzado una convergencia, como se observa en la figura 2.

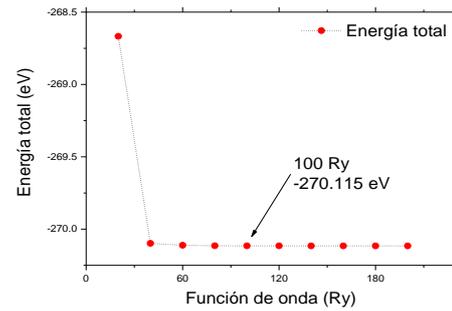


Figura 2. Gráfica de convergencia del tamaño de la función de onda de prueba en función de la energía total del sistema

Se realiza un procedimiento similar al anterior para ajustar el número de puntos de alta simetría (puntos k) (Kittel, 2003). En particular, en este estudio se varió el número de puntos k en la primera zona de Brillouin en el espacio recíproco utilizando el método de mallas de Monkhorst-Pack (Monkhorst & Pack, 1976) el cual utiliza los vectores primitivos en el espacio recíproco ($\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$) que se definen a partir de los vectores primitivos en el espacio real ($\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$) como se muestra en la ecuación 7:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (7a)$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (7b)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (7c)$$

Particularmente usando el método de Monkhorst-Pack (MP) se toma el número de puntos k dentro de un espacio que está definido por la malla $n_1 \vec{b}_1 \times n_2 \vec{b}_2 \times n_3 \vec{b}_3$ donde n_1, n_2, n_3 son enteros. En este trabajo se varió la malla desde 3x3x3 con 4 puntos k hasta una malla 9x9x9 con 35 puntos k. Los resultados obtenidos se reportan en la tabla 2.

Tabla 2. Ajuste de puntos de alta simetría en la primera zona de Brillouin en función de la energía total del sistema para zirconato de estroncio.

Energía total (eV)	Ecutwfc (Ry)	No. de puntos k	Red MP	Tiempo (s)
-271.3917566	100	4	3x3x3	67.14
-271.3971438	100	10	5x5x5	122.68
-271.3971739	100	20	7x7x7	216.53
-271.3971785	100	35	9x9x9	356.98

De los valores obtenidos se tomó como óptimo la malla de 5x5x5 en la cual hay 10 puntos k ya que la variación de la energía total del sistema para las mallas consecutivas es despreciable y se ha alcanzado una convergencia como se muestra en la figura 3.

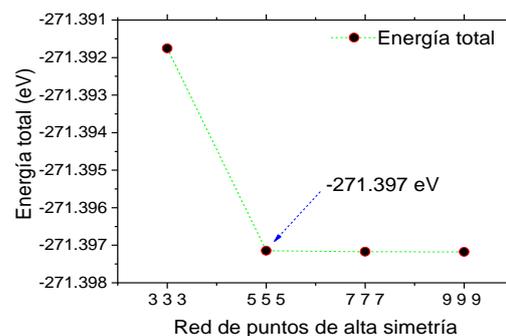


Figura 3. Gráfica de energía total en función de los puntos de alta simetría.

En la segunda parte del estudio se busca calcular la densidad electrónica $[n(r)]$ de la estructura basal. Por lo cual, mediante un algoritmo BFGS (Broyden – Fletcher – Goldfarb – Shanno) (Gilbert, 1989), se realizó la optimización estructural de las posiciones atómicas (coordenadas atómicas) y los parámetros de red con el objetivo de encontrar la configuración estructural de menor energía; posteriormente con los resultados obtenidos se calcularon la estructura de bandas y densidad de estados electrónica (Kittel, 2003).

En particular, se definió la siguiente ruta Γ -X-R-M- Γ en la primera zona de Brillouin dentro del espacio recíproco para calcular la estructura de bandas y la densidad de estados. En la tabla 3 se muestran las coordenadas de los puntos de alta simetría correspondientes a la ruta mencionada anteriormente.

Tabla 3. Puntos de alta simetría en la red recíproca.

Punto	Coordenadas en el espacio recíproco
Γ	0.000 0.000 0.000
X	0.000 0.500 0.000
R	0.500 0.500 0.500
M	0.500 0.000 0.500
Γ	0.0 .000 0.000

3. Resultados y Discusión

En el presente trabajo se realizó un estudio a primeros principios mediante el código de Quantum Espresso®, para calcular la estructura de estado basal de un cristal tipo perovskita de zirconato de estroncio (figura 4) empleando la teoría del funcional de la densidad (DFT), obteniendo la estructura más estable para un tamaño de función de onda de 100 Ry y una red de puntos k de $5 \times 5 \times 5$.

En particular, se obtuvo un parámetro de red (a_0) de 4.174 Å bastante cercano a lo reportado (Vali, 2008b) (Mete, Shaltaf, & Ellialtıođlu, 2003). Asimismo, se alcanzó una precisión de 98.4% con respecto al valor experimental reportado de a_0 de 4.109 Å (Smith & Welch, 1960).

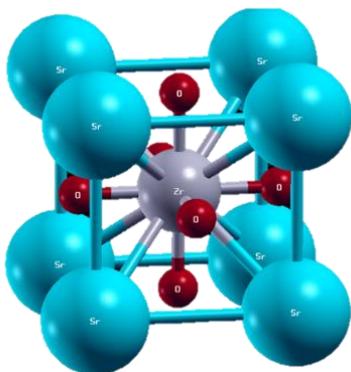


Figura 4. Estructura cristalina de la perovskita de SrZrO₃, imagen generada por XcrysDen (Kokalj, 1999).

Se obtuvieron la estructura de bandas y la densidad de estados electrónicos que se representan en la figura 5.

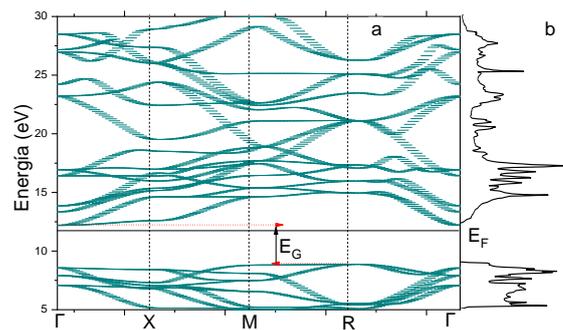


Figura 5. En la figura se muestra (a) la gráfica de estructura de bandas electrónicas acompañada respectivamente por (b) su densidad de estados.

En la figura 5a se observa que el material es de brecha indirecta dado que el punto de transición en la banda de valencia* se encuentra en R, y el punto de transición en la banda de conducción† se encuentra en Γ , asimismo, en este estudio se obtuvo una magnitud de brecha de 2.5 eV lo cual concuerda con estudios similares reportados en la literatura que utilizan un potencial de aproximación local (LDA) (Mete et al., 2003).

Por otro lado, el valor de la magnitud de brecha se subestima con respecto al valor experimental reportado de 5.9 eV (Smith & Welch, 1960) este comportamiento no afectó en el cálculo de otras propiedades y se atribuye al tipo de pseudopotencial con que se trabajó (Sham & Schlüter, 1983).

4. Conclusión

Se observó que la energía total del sistema converge con respecto al número de puntos k en la primera zona de Brillouin en el espacio recíproco, así como, con respecto al tamaño de la función de onda de prueba. Se obtuvo un parámetro de red que reproduce el valor experimental con un error relativo de 1.6%. Asimismo, la morfología de la estructura de bandas y su respectiva densidad de estados electrónica coincide con estudios previos reportados con un pseudopotencial distinto las cuales muestran un comportamiento similar. Por lo tanto, se puede inferir que el pseudopotencial que se utilizó en este estudio reproduce bien las propiedades estructurales y algunas propiedades electrónicas para este material.

En conclusión, el uso de este tipo de técnicas es útil para calcular propiedades de materiales como su estructura cristalina o la estabilidad con respecto a su fase, estructura de bandas (valor del bandgap y tipo de banda), entre otras, información que se puede utilizar como herramienta para el diseño de materiales. (Hafner & Wolverton, 2006).

Agradecimientos

Al CONACyT por el soporte económico e intelectual a través del programa de Maestría en Ciencia de los Materiales y el programa de Doctorado en Ciencia de los Materiales en el Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del Instituto de Ciencias Básicas e Ingenierías perteneciente a la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo.

* El punto de transición en la banda de valencia se ubica en el punto con mayor energía, siendo el punto más alto que se encuentra ubicado por debajo de la energía de Fermi.

† El punto de transición en la banda de conducción es el punto de menor energía, siendo el punto más cercano ubicado por encima de la energía de Fermi

Referencias

- Carvajal, M. A. (2017). *Tesis Implementación de la funcional de intercambio exacto con la aproximación de KLI en el Quantum Espresso. Tesis Carrera de Maestría en Física*. Universidad Nacional de Cuyo Argentina.
- David j. Griffiths. (2004). *Introduction to quantum mechanics*. (R. Henderson, Ed.) (Hall, Pret). New Jersey: Introduction to quantum mechanics.
- Évarestov, R. A. (2005). Calculations of the Electronic Structure of Crystalline SrZrO₃ in the Framework of the Density-Functional Theory in the LCAO Approximation. *Physics of the Solid State*, 47(12), 2248–2256. <https://doi.org/10.1134/1.2142886>
- Galicka-Fau, K., Legros, C., Andrieux, M., Herbst-Ghysel, M., Gallet, I., Condat, M., ... Servet, B. (2008). Thickness determination of SrZrO₃ thin films using both X-ray reflectometry and SIMS techniques. *Thin Solid Films*, 516(22), 7967–7973. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2008.04.005>
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics Condensed Matter*, 21(39), 20. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- Gilbert, J. C. (1989). VARIABLE-STORAGE QUASI-NEWTON ALGORITHMS. *Mathematical Programming*, 45, 407–435.
- González Olaya, W. L. (2013). *Uso de la teoría del funcional densidad (DFT) en la caracterización estructural y electrónica de la perovskita triple Sr₃CoSb₂O₉ sintetizada en el laboratorio*. Universidad Nacional de Colombia.
- Hafner, J., & Wolverton, C. (2006). Toward Computational Materials Design : The Impact of Density Functional Theory on Materials Research. *Mrs Bulletin*, 31(September), 659–668.
- Hohenberg, P., & W. Kohn. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 136(3B), B864–B871. <https://doi.org/10.1007/BF01198136>
- Kittel, C. (2003). *Introducción a la Física del Estado Sólido*. (S. . 1997 - Editorial Reverté, Ed.) (3ra Edición). Barcelona-Bogotá-Buenos Aires-Caracas-México.
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review A*, 140(4A), A1133–A1138. <https://doi.org/10.1046/j.1365-4362.2002.01376.x>
- Kokalj, A. (1999). XCrySDen-a new program for displaying crystalline structures and electron densities. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 17(3–4), 176–179. [https://doi.org/10.1016/S1093-3263\(99\)00028-5](https://doi.org/10.1016/S1093-3263(99)00028-5).
- Lin, C.-Y., Lin, M.-H., Wu, M.-C., Lin, C.-H., & Tseng, T.-Y. (2008). Improvement of Resistive Switching Characteristics in SrZrO₃ Thin Films With Embedded Cr Layer. *Ieee Electron Device Letters*, 29(10), 1108–1111. <https://doi.org/10.1109/led.2008.2002879>
- Martínez Velásquez, N. Y., & Rodríguez Martínez, J. A. (2018). Propiedades electrónicas y estructurales del Ga_{1-x}Cr_xAs. *Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, 42(162), 26–31. <https://doi.org/10.18257/raccefyfyn.516>
- Metzner, S., Shaltaf, R., & Ellialtıođlu. (2003). Electronic and structural properties of a 4d perovskite: Cubic phase of SrZrO₃. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 68(11), 3–6. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.035119>
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Theoretical study on the low-lying excited states of the phosphorus moniodide (PI) including the spin-orbit coupling. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 13(12), 5188–5192. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2015.09.006>
- Nazir, G., Ahmad, A., Khan, M. F., & Tariq, S. (2015). Putting DFT to the trial: First principles pressure dependent analysis on optical properties of cubic perovskite SrZrO₃. *Computational Condensed Matter*, 4, 32–39. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2015.07.002>
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Perdew, J. P., Ruzsinszky, A., Tao, J., Staroverov, V. N., Scuseria, G. E., & Csonka, G. I. (2005). Prescription for the design and selection of density functional approximations: More constraint satisfaction with fewer fits. *Journal of Chemical Physics*, 123(6), 062201-2-062201-062209. <https://doi.org/10.1063/1.1904565>
- Sham, L. J., & Schlüter, M. (1983). Density-Functional Theory of the Energy Gap. *Physical review letters*, 51(20), 1888–1891.
- Smith, A. J., & Welch, A. J. E. (1960). Some Mixed Metal Oxides of Perovskite Structure BY. *Acta Cryst*, 13(653), 2–5. <https://doi.org/10.1107/S0365110X60001540>
- Souptel, D., Behr, G., & Balbashov, A. M. (2002). SrZrO₃ single crystal growth by floating zone technique with radiation heating. *Journal of Crystal Growth*, 236(4), 583–588. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(01\)02393-4](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(01)02393-4)
- Terki, R., Feraoun, H., Bertrand, G., & Aourag, H. (2005). Full potential calculation of structural, elastic and electronic properties of BaZrO₃ and SrZrO₃. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 242(5), 1054–1062. <https://doi.org/10.1002/pssb.200402142>
- Vali, R. (2008a). Band structure and dielectric properties of orthorhombic SrZrO₃. *Solid State Communications*, 145(9–10), 497–501. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2007.12.009>
- Vali, R. (2008b). Lattice dynamics of cubic SrZrO₃. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 69(4), 876–879. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2007.09.022>
- Yu, T., Zhu, W. G., Chen, C. H., Chen, X. F., & Krishnan, R. G. (2004). Preparation and characterization of sol-gel derived CaZrO₃ dielectric thin films for high-k applications. *Physica B: Condensed Matter*, 348(1–4), 440–445. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2004.01.147>