

Phase Transitions and Spectral Shifts: A Quantum Mechanical Exploration of Vibrational Frequency in Magnesium Ferrite

COORDINATES IN THE CRYSTALLOGRAPHIC CELL FOR ALL $(\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x)[\text{Mg}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4]$ SYSTEMS STUDIED.

FM (X=0.0)

	ATOMS	X/A	Y/B	Z/C
8	O	2.60E-01	-2.40E-01	-2.40E-01
8	O	-1.00E-02	-1.00E-02	2.60E-01
8	O	2.60E-01	-1.00E-02	-1.00E-02
8	O	-1.00E-02	2.60E-01	-1.00E-02
8	O	2.40E-01	2.40E-01	-2.60E-01
8	O	1.00E-02	1.00E-02	-2.60E-01
8	O	1.00E-02	-2.60E-01	1.00E-02
8	O	-2.60E-01	1.00E-02	1.00E-02
12	MG	1.25E-01	1.25E-01	1.25E-01
12	MG	-1.25E-01	-1.25E-01	-1.25E-01
26	FE	-5.00E-01	-5.00E-01	-5.00E-01
26	FE	2.50E-01	2.50E-01	-5.00E-01
26	FE	-5.00E-01	2.50E-01	2.50E-01
26	FE	2.50E-01	-5.00E-01	2.50E-01

AFM (X=0.0)

	ATOMS	X/A	Y/B	Z/C
8	O	2.60E-01	-2.40E-01	-2.39E-01
8	O	-1.02E-02	-1.02E-02	2.61E-01
8	O	2.60E-01	-1.02E-02	-1.11E-02
8	O	-1.02E-02	2.60E-01	-1.11E-02
8	O	2.40E-01	2.40E-01	-2.61E-01
8	O	1.02E-02	1.02E-02	-2.61E-01
8	O	1.02E-02	-2.60E-01	1.11E-02
8	O	-2.60E-01	1.02E-02	1.11E-02
12	MG	1.25E-01	1.25E-01	1.25E-01
12	MG	-1.25E-01	-1.25E-01	-1.25E-01
26	FE	-5.00E-01	-5.00E-01	-5.00E-01
26	FE	2.50E-01	2.50E-01	-5.00E-01
26	FE	-5.00E-01	2.50E-01	2.50E-01
26	FE	2.50E-01	-5.00E-01	2.50E-01

FM (X=0.5)

	ATOMS	X/A	Y/B	Z/C
8	O	2.58E-01	-2.42E-01	-2.42E-01
8	O	-1.24E-02	-1.24E-02	2.56E-01
8	O	2.56E-01	-1.24E-02	-1.24E-02
8	O	-1.24E-02	2.56E-01	-1.24E-02
8	O	2.44E-01	2.44E-01	-2.56E-01
8	O	8.01E-03	8.01E-03	-2.55E-01
8	O	8.01E-03	-2.55E-01	8.01E-03
8	O	-2.55E-01	8.01E-03	8.01E-03
12	MG	1.23E-01	1.23E-01	1.23E-01
26	FE	-1.22E-01	-1.22E-01	-1.22E-01
12	MG	5.00E-01	5.00E-01	5.00E-01
26	FE	2.53E-01	2.53E-01	4.98E-01
26	FE	4.98E-01	2.53E-01	2.53E-01
26	FE	2.53E-01	4.98E-01	2.53E-01

AFM (0.5)

	ATOMS	X/A	Y/B	Z/C
8	O	2.58E-01	-2.42E-01	-2.42E-01
8	O	-1.32E-02	-1.34E-02	2.56E-01
8	O	2.56E-01	-1.34E-02	-1.32E-02
8	O	-1.20E-02	2.56E-01	-1.20E-02
8	O	2.44E-01	2.46E-01	-2.56E-01
8	O	8.13E-03	1.05E-02	-2.54E-01
8	O	7.68E-03	-2.53E-01	7.68E-03
8	O	-2.54E-01	1.05E-02	8.13E-03
12	MG	1.23E-01	1.22E-01	1.23E-01
26	FE	-1.22E-01	-1.23E-01	-1.22E-01
12	MG	5.00E-01	4.99E-01	5.00E-01
26	FE	2.53E-01	2.51E-01	4.99E-01
26	FE	4.99E-01	2.51E-01	2.53E-01
26	FE	2.54E-01	4.97E-01	2.54E-01

FM (X=1.0)

	ATOMS	X/A	Y/B	Z/C
8	O	2.58E-01	-2.42E-01	-2.46E-01
8	O	-7.61E-03	-7.61E-03	2.54E-01
8	O	2.55E-01	-5.10E-03	-1.03E-02
8	O	-5.10E-03	2.55E-01	-1.03E-02
8	O	2.42E-01	2.42E-01	-2.54E-01
8	O	7.61E-03	7.61E-03	-2.54E-01
8	O	5.10E-03	-2.55E-01	1.03E-02
8	O	-2.55E-01	5.10E-03	1.03E-02
26	FE	1.25E-01	1.25E-01	1.19E-01
26	FE	-1.25E-01	-1.25E-01	-1.19E-01
12	MG	-5.00E-01	5.00E-01	-5.00E-01
12	MG	2.50E-01	2.50E-01	-5.00E-01
26	FE	-5.00E-01	2.50E-01	2.50E-01
26	FE	2.50E-01	-5.00E-01	2.50E-01

AFM (X=1.0)

		X/A	Y/B	Z/C
8	O	2.56E-01	-2.41E-01	-2.47E-01
8	O	-8.87E-03	-6.21E-03	2.53E-01
8	O	2.54E-01	-4.12E-03	-1.14E-02
8	O	-5.91E-03	2.56E-01	-1.05E-02
8	O	2.41E-01	2.44E-01	-2.53E-01
8	O	6.19E-03	8.89E-03	-2.53E-01
8	O	4.12E-03	-2.54E-01	1.14E-02
8	O	-2.56E-01	5.92E-03	1.06E-02
26	FE	1.25E-01	1.25E-01	1.19E-01
26	FE	-1.25E-01	-1.25E-01	-1.19E-01
12	MG	-4.99E-01	4.99E-01	-5.00E-01
12	MG	2.51E-01	2.49E-01	-5.00E-01
26	FE	-4.97E-01	2.47E-01	2.49E-01
26	FE	2.53E-01	4.97E-01	2.51E-01