

# Appendix E

## Atomic positions

The different atomic positions computed through the thesis are reported here.

Table E.1: Atomic positions in  $\text{LaCrO}_3$  computed using GGA+ $U$ .

	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>
La <sub>1</sub>	0.032	0.993	0.250
La <sub>2</sub>	0.468	0.493	0.750
La <sub>3</sub>	0.532	0.507	0.250
La <sub>4</sub>	0.968	0.007	0.750
Cr <sub>1</sub>	0.000	0.500	0.500
Cr <sub>2</sub>	0.000	0.500	0.000
Cr <sub>3</sub>	0.500	0.000	0.000
Cr <sub>4</sub>	0.500	0.000	0.500
O <sub>1</sub>	0.014	0.573	0.750
O <sub>2</sub>	0.217	0.217	0.961
O <sub>3</sub>	0.217	0.217	0.539
O <sub>4</sub>	0.283	0.717	0.039
O <sub>5</sub>	0.283	0.717	0.461
O <sub>6</sub>	0.486	0.072	0.250
O <sub>7</sub>	0.514	0.927	0.750
O <sub>8</sub>	0.717	0.283	0.539
O <sub>9</sub>	0.717	0.283	0.961
O <sub>10</sub>	0.783	0.783	0.461
O <sub>11</sub>	0.783	0.783	0.039
O <sub>12</sub>	0.986	0.427	0.250

Table E.2: Atomic positions in  $\text{La}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{CrO}_3$  computed using GGA+ $U$ .

	Without polarons			With a polaron		
	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>
Sr <sub>1</sub>	0.020	0.994	0.250	0.027	0.992	0.248
La <sub>1</sub>	0.477	0.499	0.750	0.471	0.498	0.752
La <sub>2</sub>	0.525	0.505	0.250	0.532	0.506	0.247
La <sub>3</sub>	0.976	0.005	0.750	0.966	0.008	0.755
Cr <sub>1</sub>	0.000	0.501	0.499	0.001	0.501	0.498
Cr <sub>2</sub>	0.000	0.501	0.002	0.000	0.501	0.001
Cr <sub>3</sub>	0.499	0.000	0.001	0.498	0.000	0.001
Cr <sub>4</sub>	0.499	0.000	0.499	0.498	0.001	0.499
O <sub>1</sub>	0.013	0.565	0.750	0.016	0.573	0.745
O <sub>2</sub>	0.225	0.226	0.963	0.215	0.217	0.956
O <sub>3</sub>	0.225	0.226	0.537	0.217	0.229	0.543
O <sub>4</sub>	0.282	0.718	0.031	0.292	0.706	0.033
O <sub>5</sub>	0.282	0.718	0.469	0.283	0.708	0.466
O <sub>6</sub>	0.497	0.065	0.250	0.491	0.078	0.251
O <sub>7</sub>	0.504	0.939	0.750	0.512	0.930	0.749
O <sub>8</sub>	0.724	0.276	0.538	0.724	0.283	0.542
O <sub>9</sub>	0.724	0.276	0.962	0.716	0.285	0.959
O <sub>10</sub>	0.772	0.772	0.474	0.779	0.768	0.468
O <sub>11</sub>	0.772	0.772	0.026	0.782	0.781	0.030
O <sub>12</sub>	0.985	0.445	0.250	0.981	0.437	0.257

Table E.3: Atomic positions in  $\text{La}_{0.50}\text{Cr}_{0.50}\text{O}_3$  computed using GGA+ $U$ .

	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>
Sr <sub>1</sub>	0.011	0.995	0.249
La <sub>1</sub>	0.488	0.503	0.750
La <sub>2</sub>	0.512	0.497	0.250
Sr <sub>2</sub>	0.989	0.005	0.751
Cr <sub>1</sub>	0.000	0.500	0.500
Cr <sub>2</sub>	0.000	0.500	0.000
Cr <sub>3</sub>	0.500	0.000	0.000
Cr <sub>4</sub>	0.500	0.000	0.500
O <sub>1</sub>	0.013	0.545	0.745
O <sub>2</sub>	0.247	0.245	0.978
O <sub>3</sub>	0.228	0.240	0.521
O <sub>4</sub>	0.267	0.736	0.027
O <sub>5</sub>	0.279	0.720	0.472
O <sub>6</sub>	0.503	0.053	0.251
O <sub>7</sub>	0.497	0.947	0.749
O <sub>8</sub>	0.721	0.280	0.528
O <sub>9</sub>	0.733	0.264	0.973
O <sub>10</sub>	0.772	0.760	0.479
O <sub>11</sub>	0.753	0.755	0.022
O <sub>12</sub>	0.987	0.455	0.255

Table E.4: Atomic positions in  $\text{La}_{0.25}\text{Sr}_{0.75}\text{CrO}_3$  computed using GGA+ $U$ .

	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>
La <sub>1</sub>	0.005	1.003	0.253
Sr <sub>1</sub>	0.497	0.496	0.750
Sr <sub>2</sub>	0.502	0.502	0.251
Sr <sub>3</sub>	0.998	0.000	0.750
Cr <sub>1</sub>	0.000	0.500	0.503
Cr <sub>2</sub>	0.000	0.500	0.000
Cr <sub>3</sub>	0.500	0.000	0.000
Cr <sub>4</sub>	0.501	0.000	0.503
O <sub>1</sub>	-0.008	0.531	0.743
O <sub>2</sub>	0.254	0.245	0.981
O <sub>3</sub>	0.232	0.242	0.518
O <sub>4</sub>	0.250	0.760	0.017
O <sub>5</sub>	0.261	0.749	0.483
O <sub>6</sub>	0.485	0.034	0.255
O <sub>7</sub>	0.511	0.965	0.744
O <sub>8</sub>	0.737	0.252	0.508
O <sub>9</sub>	0.748	0.241	0.991
O <sub>10</sub>	0.771	0.760	0.472
O <sub>11</sub>	0.749	0.758	0.026
O <sub>12</sub>	1.007	0.461	0.255

Table E.5: Atomic positions in  $\text{SrCrO}_3$  computed using GGA+ $U$ .

	$T_{\text{smearing}} = 0.01$ Ha			$T_{\text{smearing}} = 0.04$ Ha		
	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>
Sr <sub>1</sub>	0.000	1.000	0.250	0.000	1.000	0.250
Sr <sub>2</sub>	0.500	0.500	0.750	0.500	0.500	0.750
Sr <sub>3</sub>	0.500	0.500	0.250	0.500	0.500	0.250
Sr <sub>4</sub>	1.000	0.000	0.750	1.000	0.000	0.750
Cr <sub>1</sub>	0.000	0.500	0.500	0.000	0.500	0.500
Cr <sub>2</sub>	0.000	0.500	0.000	0.000	0.500	0.000
Cr <sub>3</sub>	0.500	0.000	0.000	0.500	0.000	0.000
Cr <sub>4</sub>	0.500	0.000	0.500	0.500	0.000	0.500
O <sub>1</sub>	0.000	0.500	0.750	0.000	0.500	0.750
O <sub>2</sub>	0.243	0.257	1.000	0.250	0.250	1.000
O <sub>3</sub>	0.243	0.257	0.500	0.250	0.250	0.500
O <sub>4</sub>	0.257	0.757	0.000	0.250	0.750	0.000
O <sub>5</sub>	0.257	0.757	0.500	0.250	0.750	0.500
O <sub>6</sub>	0.500	0.000	0.250	0.500	0.000	0.250
O <sub>7</sub>	0.500	1.000	0.750	0.500	1.000	0.750
O <sub>8</sub>	0.743	0.243	0.500	0.750	0.250	0.500
O <sub>9</sub>	0.743	0.243	1.000	0.750	0.250	1.000
O <sub>10</sub>	0.757	0.743	0.500	0.750	0.750	0.500
O <sub>11</sub>	0.757	0.743	0.000	0.750	0.750	0.000
O <sub>12</sub>	1.000	0.500	0.250	1.000	0.500	0.250