

KTa_{(0.5)Nb_{(0.5)O₃}电子结构的第一性原理研究}

王渊旭,赵明磊,王春雷

山东大学物理学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用全电势线性缀加平面波法 (FLAPW) 计算了KTa_{(0.5)Nb_{(0.5)O₃}铁电相和 顺电相的态密度、能带结构。通过对两相态密度的对比分析我们发现在铁电相, 钽 原子的d电子和氧原子的2p电子以及铌原子d电子与氧原子的2p电子之间存在强烈的 轨道杂化, 对能带的分析也得出同样的结论。这种轨道杂化对KTa_{(0.5)Nb_{(0.5)O₃}铁电性的稳定有着重要的意义。钽原子在四方铁电体KTa_{(1-x)Nb_xO₃}中的作用与在纯钽酸钾中的作用有明显的差别。}}

关键词 [电子结构](#) [铁电材料](#) [氧化钽](#) [氧化铌](#) [氧化钾](#) [能带结构](#)

分类号 [0621](#)

First Principles Study on Electronic Structure of KTa_{(0.5)Nb_{(0.5)O₃}}

Wang Yuanxu,Zhao Minglei,Wang Chunlei

Department of Physics, Shandong University

Abstract The full potential linearized augmented plane wave method within the generalized gradient approximation was used to calculate electronic structure of ferroelectric and paraelectric KTa_{(0.5)Nb_{(0.5)O₃}. We calculated the density of states and band structure. From the density of states analysis, it is shown that the hybridization between B(Ta, Nb) d and O p is very important to the ferroelectric stability of KTa_{(0.5)Nb_{(0.5)O₃}. This is consistent with the analysis of band structure.}}

Key words [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [FERROELECTRIC MATERIALS](#) [TANTALUM OXIDE](#) [NIOBIUM OXIDE](#) [POTASSIUM OXIDE](#) [BAND STRUCTURES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“电子结构” 的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [王渊旭](#)
- [赵明磊](#)
- [王春雷](#)