

研究论文

PbMg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>O<sub>3</sub> (PMN)和PbMg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>-PbTiO<sub>3</sub> (PMNT)中几种局域结构与晶格形变的从头算研究

徐红兰<sup>a,b</sup> 缪强<sup>\*</sup>,<sup>a</sup> 罗豪甦<sup>b</sup>

(<sup>a</sup>南京大学化学化工学院 南京 210093)

(<sup>b</sup>中国科学院上海硅酸盐研究所 上海 201800)

收稿日期 2008-5-15 修回日期 2008-8-18 网络版发布日期 2009-1-14 接受日期 2008-9-12

摘要

建立了钙钛矿结构铌镁酸铅PbMg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>O<sub>3</sub>(PMN)的2×2×3复晶胞模型;采用ab initio方法讨论了PMN晶体各种可能构型的稳定性;选取了PMN三种高、中、低稳定性的代表构型,并对Ti替换B位离子后的结构进行了结构优化.计算结果表明复晶胞刚性模型的最低和最高能量差约0.74 a.u. (1940 kJ);Pb<sup>2+</sup>离子结构框架的形变是PMN晶格发生形变的主要因素;在不考虑被替换离子电荷差异的情况下,MgO<sub>6</sub>含量越少越有利于Ti离子替换Nb与晶胞的形变.PMNT材料中构型的分布和局域形变取决于生长PMNT材料的工艺过程.

关键词

[PbMg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>O<sub>3</sub>\(PMN\)](#) [PbMg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>O<sub>3</sub>-PbTiO<sub>3</sub>\(PMNT\)](#) [ab initio](#) [局域结构](#) [晶格形变](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

缪强 [cheminfo@nju.edu.cn](mailto:cheminfo@nju.edu.cn)

作者个人主页:

徐红兰<sup>a</sup>;b 缪强<sup>\*</sup>;<sup>a</sup> 罗豪甦<sup>b</sup>

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(673KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[PbMg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>O<sub>3</sub>\(PMN\)”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [徐红兰,缪强,罗豪甦](#)