

## بررسی پارامترهای ساختاری $\text{KNbO}_3$ در فاز مکعبی با استفاده از روش

### امواج تخت تقویت‌شده با پتانسیل کامل

حمدا... صالحی\*، زهره جاودانی

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

#### چکیده

در این مقاله خصوصیات ساختاری  $\text{KNbO}_3$  از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم‌پذیری محاسبه شده است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت‌شده خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با نرم افزار Wien2k انجام گرفته است. در این روش برای محاسبه پتانسیل تبادل-همبستگی از تقریب‌های LDA، GGA96، GGA+U، GGA91 استفاده شده است. با توجه به ساختار نوارهای انرژی ترکیب و با استفاده از بهترین تقریب مشخص شد که گاف انرژی با مقدار ۲٫۲۱ الکترون ولت برای راستای مستقیم و ۱٫۴۲ الکترون ولت در راستای غیر مستقیم وجود دارد نتایج به‌دست‌آمده بیانگر این است که محاسبات با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته نسبت به بقیه تقریب‌ها سازگاری بهتری با نتایج تجربی و نظری به‌دست‌آمده از روش‌های دیگر دارد.

**کلیدواژگان:**  $\text{KNbO}_3$ ، ثابت شبکه، مدول حجمی، نظریه تابعی چگالی.

ایده اصلی این مقاله تأکید بر روش امواج تخت تقویت‌شده با پتانسیل کامل<sup>۴</sup> می‌باشد.

#### مقدمه

$\text{KNbO}_3$  یکی از مواد فروالکتریک است که دارای ساختار  $\text{ABO}_3$  می‌باشد. این ماده به دلیل دارا بودن رفتار فروالکتریکی و گذار فازی مطالعات گسترده‌ای از نظر تجربی و معدودی هم از نظر نظری روی آن انجام شده است [۱-۳]. ساختار الکترونی  $\text{KNbO}_3$  اولین بار به روش SCC-XHTB [۴] و سپس با استفاده از روش خودسازگار<sup>۱</sup> محاسبه شد [۵، ۳]. اخیراً ساختار الکترونی  $\text{KNbO}_3$  با استفاده از طیف فوتوالکترون اشعه X انجام گرفته است [۶]. اکثر این محاسبات با استفاده از تقریب چگالی موضعی<sup>۲</sup>، روش شبه‌پتانسیل و با روش اوربیتال‌های مافین-تین<sup>۳</sup> خطی انجام گرفته است [۷].

#### روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت‌شده با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی<sup>۵</sup> با تقریب شیب تعمیم‌یافته و نرم‌افزار Wien2k انجام گرفته است [۸-۱۰] در این نرم افزار حل معادلات بر اساس روش کوهن شم می‌باشد و محاسبات برحسب روابط سیستم‌های غیر برهم‌کنش‌گر نوشته می‌شود. حال آن‌که سیستم غیر برهم‌کنش‌گر به غیر از جملات مربوط به پتانسیل خارجی، دارای عباراتی برای بیان انرژی جنبشی غیر برهم‌کنشی ( $T_s$ ) و برهم‌کنش کولنی ( $W_c$ )

\*نویسنده مسئول: salehi\_h@scu.ac.ir

<sup>1</sup>SCF

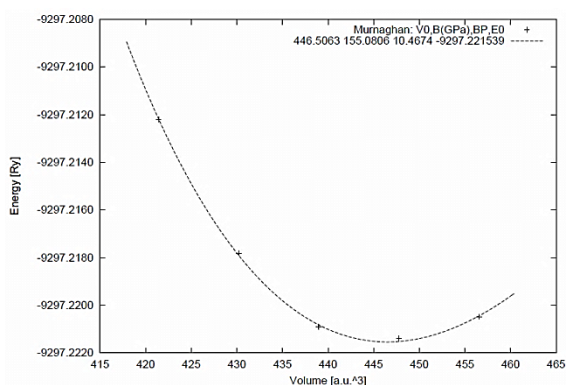
<sup>2</sup>LDA

<sup>3</sup>Muffin-tin

<sup>4</sup>FP-LAPW

<sup>5</sup>DFT

مورناگان<sup>۱</sup> به دست می‌آید [V]. در این محاسبات، ابتدا وابستگی انرژی به حجم محاسبه و سپس با به کار بردن معادله حالت مورناگان برای ساختار، ثابت‌های شبکه، مدول حجمی<sup>۲</sup>، مشتق مدول حجمی<sup>۳</sup> و تراکم‌پذیری محاسبه شده است. محاسبات را با سه نوع تقریب برای پتانسیل تبادلی-همبستگی<sup>۴</sup> انجام داده و آن‌ها را با یکدیگر و با نتایج تجربی و نظری دیگران مقایسه کرده‌ایم. نتایج حاصل در جدول ۱ آورده شده است. همان‌طور که در جدول مشاهده می‌شود، نتایج محاسبات انجام شده به کمک تقریب GGA96 برای پتانسیل تبادلی-همبستگی، به نتایج تجربی و نظری نزدیک‌تر است. در این جدول، مشاهده می‌شود که مدول حجمی و تراکم‌پذیری در تقریب شیب تعمیم‌یافته به مقادیر تجربی و نظری نزدیک‌تر می‌باشد در حالی که در تقریب چگالی موضعی، اختلاف قابل توجهی با مقادیر تجربی و نظری دارد. همان‌طور که در جدول ۱ مشاهده می‌شود، ثابت شبکه‌ای که با استفاده از روش FP-LAPW و با تقریب شیب تعمیم‌یافته به دست آوردیم به مقدار تجربی نزدیک‌تر است. شاید این تفاوت را بتوان به فشار مجازی نسبت داد. مدول حجمی در تقریب‌های شیب تعمیم‌یافته نسبت به تقریب چگالی موضعی به مقادیر تجربی نزدیک‌تر است.



شکل ۱. نمودار انرژی برحسب حجم ( $\text{a.u.}^3$ ) ساختار  $\text{KNbO}_3$  مکعبی با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته.

است علاوه بر آن در این سیستم انرژی تبادلی-همبستگی ( $E_{XC}$ ) با کمک تقریب‌هایی نظیر LDA و GGA در نظر گرفته می‌شود. پتانسیل وارد بر الکترون در داخل کره مافین-تین را می‌توان برحسب هماهنگ‌های کروی بسط داد و در خارج کره نیز به صورت بسط فوریه نوشت. هامیلتونی حل شده در این نرم افزار دارای، سهم کروی، سهم غیرکروی و سهم بین جای‌گاهی است و با وردش انرژی حاصله می‌توان به انرژی و توابع موج حالت پایه سیستم بس ذره‌ای دست یافت. ثابت شبکه تجربی برابر با  $\text{aaau} = 7/6$  می‌باشد که در محاسبات از آن استفاده می‌شود [۱۱]. تعداد ۴۰۰ نقطه  $k$  جهت محاسبات مورد استفاده قرار گرفته است که با استفاده از یک چینش شبکه‌ای به شکل  $20.7 \times 7 \times 7$  در منطقه بریلوئن کاهش یافته قرار می‌گیرد. پارامتر  $R_{kmax}$  برابر با ۷ انتخاب شده است. همگرایی را بر مبنای انرژی قرار دادیم که با ۸ تکرار و با اختلاف انرژی  $0.000241$  ریدبرگ به این همگرایی رسیدیم. برای محاسبه پارامترهای ساختاری ترکیب از سه نوع تقریب برای محاسبه پتانسیل تبادلی-همبستگی استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که روش GGA96 نسبت به سایر روش‌ها به نتایج تجربی و نظری دیگران نزدیک‌تر است.

## نتایج

### الف: ساختار الکترونی

برای محاسبه خواص ساختاری ترکیب، پس از انجام محاسبات خود-سازگار انرژی سلول واحد ترکیب را به‌ازای حجم‌های مختلف حول حجم تعادلی‌اش وردش و سپس محاسبات را انجام داده‌ایم. پس از انجام محاسبات نمودار انرژی برحسب حجم رسم شده است که یکی از این نمودارها در شکل ۱ آورده شده است. تغییرات انرژی برحسب حجم از طریق معادله حالت

<sup>3</sup>derivative of the bulk modulus

<sup>4</sup>Exchange correlation potential

<sup>1</sup>Murnaghan

<sup>2</sup>bulk modulus

نتایج مربوط به مقادیر نظری و تجربی طول پیوند بیانگر آن است که نزدیک‌ترین فاصله بین اتم‌ها به‌نوع تقریب اعمالی برای پتانسیل تبادل-همبستگی وابسته نیست و تنها به ثابت‌های شبکه بستگی دارد. محاسبات اولیه بار الکتریکی داخل کرات مافین-تین برای اتم‌های تشکیل‌دهنده  $\text{KNbO}_3$  محاسبه شد که نتایج در جداول ارائه شده‌است که با توجه به نتایج این جدول‌ها مشخص می‌گردد که در شبیه‌سازی اتم‌ها مجموع باری که در داخل و خارج کره‌های مافین تین برای اتم‌های  $\text{N}$ ,  $\text{Kb}$  و  $\text{O}$  در نظر گرفته شده است بسیار نزدیک به بار واقعی اتم‌هاست که این امر تأییدی بر صحت سایر نتایج حاصل از این محاسبات است.

آنچه از جدول ۵ برمی‌آید این است که بار مؤثر برای پتاسیم به مقدار یونی آن نزدیک است و در تمام

تقریب‌ها تقریباً یکسان است و همین‌طور در مورد بار مؤثر اتم‌های  $\text{Nb}$  و  $\text{O}$ . بنابراین با در نظر گرفتن محاسبات خود-سازگار، بارهای ظرفیت در محدوده کره‌های اتمی مختلف، فرمول شیمیایی برای این سیستم را می‌توان به صورت  $\text{K}^{1.92}\text{Nb}^{2.04}\text{O}_3^{-1.72}$  نوشت بنابراین ما یک انحراف از فرمول یونی آن،  $\text{A}^{+2}\text{B}^{+4}\text{O}_3^{-6}$  پیدا کردیم که این می‌تواند ناشی از هیبریداسیون بین اربیتال‌های  $p$  اتم اکسیژن و  $d$  اتم  $\text{Nb}$  باشد که مقداری از بارهای ظرفیت  $\text{Nb}$  را گرفته و بار ظرفیت  $\text{Nb}$  کمتر از ۴ می‌گردد. بر اساس محاسبات انجام شده در این بخش می‌توان نتیجه گرفت که در بیشتر موارد، روش FP-LAPW با تقریب‌های شیب تعمیم‌یافته در مقایسه با روش‌های شبه‌پتانسیل، چگالی موضعی، Neumann روش تنگ بست<sup>۱</sup> می‌تواند به نتایج بهتری منجر شود.

جدول ۱. پارامترهای ساختاری محاسبه شده در کار حاضر و مقایسه آن با نتایج دیگران برای  $\text{KNbO}_3$ .

	a (au)	B(Gpa)	$B'$	$k(\text{m}^2/\text{N})$	$E_0(\text{Ry})$
FP-LAPW,GGA96	۷,۶۴	۱۵۵,۰۸۰۶	۱۰,۴۶۷۴	$۶,۵ \times 10^{-14}$	-۹۲۹۷,۲۲۱۵۳۹
FP-LAPW,GGA91	۷,۵	۱۵۱,۱۳۰۶	۱۰,۰۷	$۶,۶ \times 10^{-14}$	-
FP-LAPW,LDA	۷,۴۴	۱۴۷,۱۸۰۶	۹,۹۵	$۶,۹ \times 10^{-14}$	-
SCC - XHTB [۳] نظری	۷,۵۷۲	۱۵۳,۷۱۱۶	-	$۶,۷ \times 10^{-14}$	-
نظری [۱۲]	۷,۶	۱۵۴,۲۸		$۶,۵۱ \times 10^{-14}$	-
تجربی [۷]	۷,۵۷				-
درصد خطا	۰,۰۰۴				-

جدول ۲. تجزیه بار اتم K در تقریب‌های مختلف برای  $\text{KNbO}_3$ .

K	بار کل	بار داخل کره مافین-تین	بار مغزه	بار ظرفیت	بار خارج از کره مافین-تین	مجموع بار داخل و خارج کره مافین-تین
روش FP-LAPWGGA96 با استفاده از ثابت نظری	۱۹	۱۷,۲۹۲۲	۱۰	۷,۱۵۳	۱,۷۰۷۹۲	۱۹,۰۰۰۱۳
روش FP-LAPWGGA96 با استفاده از ثابت تجربی	۱۹	۱۷,۲۹۳۲	۱۰,۱۰۷	۷,۱۴۴	۱,۷۰۶۹۱۷	۱۹,۰۰۰۱۳
روش FP-LAPWGGA91 با استفاده از ثابت نظری	۱۹	۱۷,۱۲۳۴	۱۰,۱۸۵	۷,۱۵۴	۱,۸۷۶۷	۱۹,۰۰۰۱۳
روش FP-LAPWGGA91 با استفاده از ثابت تجربی	۱۹	۱۷,۱۳۳۴	۱۰,۲۷۳	۷,۱۳۰	۱,۸۶۶۷	۱۹,۰۰۰۱۳
روش FP-LAPWLDA با استفاده از ثابت نظری	۱۹	۱۶,۹۹۸۰	۱۰,۳۶۰	۷,۱۳۴	۲,۰۰۲۲	۱۹,۰۰۰۱۳
روش FP-LAPW LDA با استفاده از ثابت تجربی	۱۹	۱۶,۹۹۸۰	۱۰,۴۸۰	۷,۱۱۴	۲,۰۰۲۳	۱۹,۰۰۰۱۳

جدول ۳: تجزیه بار اتم Nb در تقریب‌های مختلف برای  $\text{KNbO}_3$ .

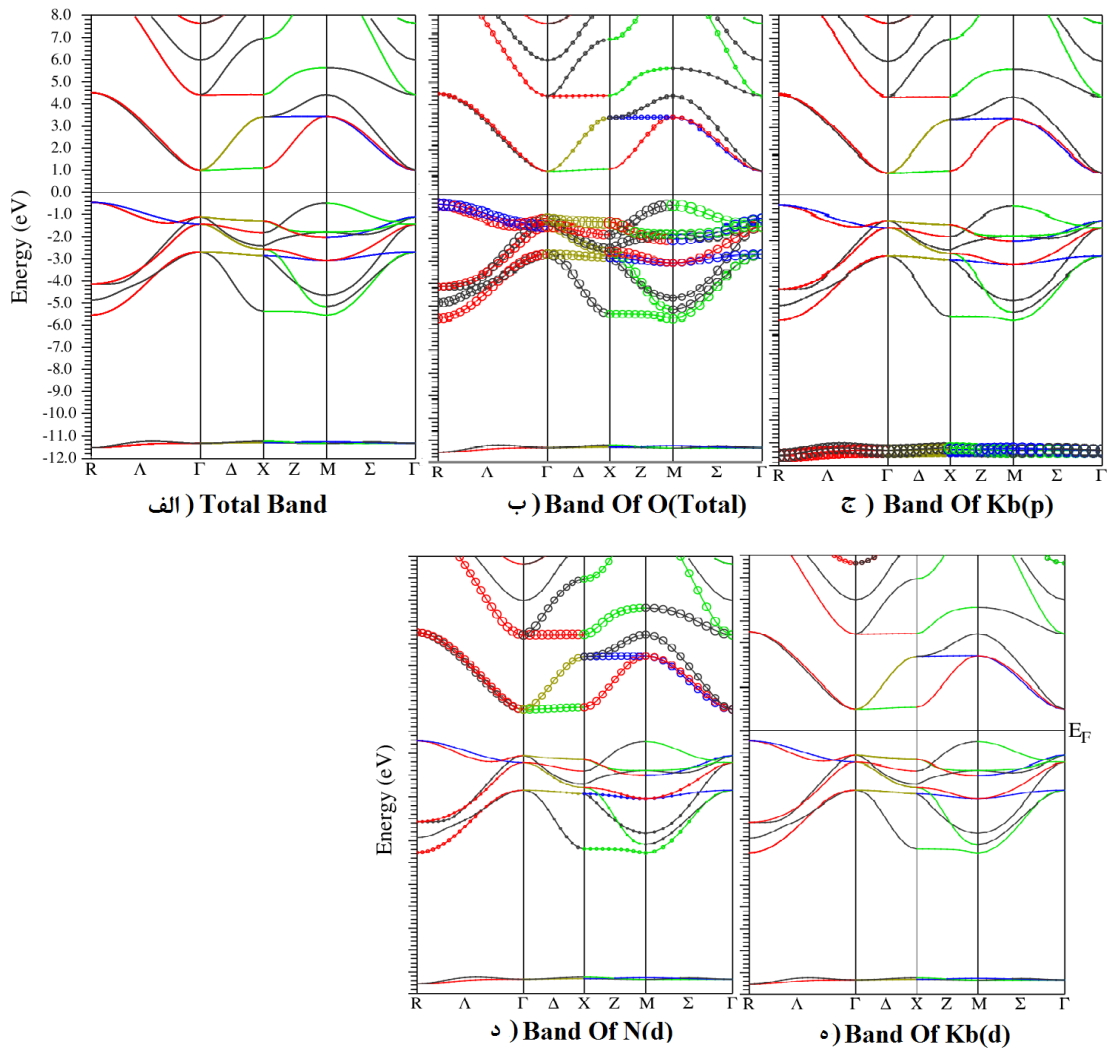
Nb	بار کل	بار داخل کره مافین- تین	بار مغزه	بار ظرفیت	بار خارج از کره مافین- تین	مجموع بار داخل و خارج کره مافین-تین
روش FP-LAPW GGA96 با استفاده از ثابت نظری	۴۱	۳۷,۲۰۳۰۲	۲۷,۹۹۹۹۳	۸,۸۱۸۶۴۰	۳,۷۹۷۲۹	۴۱,۰۰۰۳۱
روش FP-LAPW GGA96 با استفاده از ثابت تجربی	۴۱	۳۷,۲۲۱۱۱	۲۷,۹۹۹۹۵	۸,۸۱۸۶۴۵	۳,۷۷۹۲	۴۱,۰۰۰۳۱
روش FP-LAPW GGA91 با استفاده از ثابت نظری	۴۱	۳۷,۲۲۲۷۹	۲۷,۹۹۹۹۸	۸,۸۱۷۶۴۳	۳,۷۷۷۵۲	۴۱,۰۰۰۳۱
روش FP-LAPW GGA91 با استفاده از ثابت تجربی	۴۱	۳۷,۲۲۲۷۹	۲۷,۹۹۹۹۸	۸,۷۸۵۲۳۴	۳,۷۷۷۵۲	۴۱,۰۰۰۳۱
روش FP-LAPW LDA با استفاده از ثابت نظری	۴۱	۳۷,۲۱۶۷۱	۲۷,۹۹۹۹۸	۸,۱۲۷۵۶۹	۳,۷۸۳۶	۴۱,۰۰۰۳۱
روش FP-LAPW LDA با استفاده از ثابت تجربی	۴۱	۳۷,۲۱۶۷۳	۲۷,۹۹۹۹۹	۸,۰۹۷۵۶۹	۳,۷۸۳۵۸	۴۱,۰۰۰۳۱

جدول ۴: تجزیه بار اتم O در تقریب‌های مختلف برای  $\text{KNbO}_3$ .

O	بار کل	بار داخل کره مافین- تین	بار مغزه	بار ظرفیت	بار خارج از کره مافین- تین	مجموع بار داخل و خارج کره مافین-تین
روش FP-LAPW GGA96 با استفاده از ثابت نظری	۸	۷,۰۳۷۲۸	۱,۲۹۰۷۳۳	۵,۷۴۶۵۴۷	۰,۹۶۲۷۴	۸,۰۰۰۰۲
روش FP-LAPW GGA96 با استفاده از ثابت تجربی	۸	۷,۰۳۷۲۸	۱,۳۰۹۹۴۳	۵,۷۲۷۳۳۷	۰,۹۶۲۷۴	۸,۰۰۰۰۲
روش FP-LAPW GGA91 با استفاده از ثابت نظری	۸	۷,۰۳۹۶۰	۱,۲۹۰۸۷۹	۵,۷۴۸۷۲۱	۰,۹۶۰۴۲	۸,۰۰۰۰۲
روش FP-LAPW GGA91 با استفاده از ثابت تجربی	۸	۷,۰۳۹۶	۱,۳۳۸۵۸۳	۵,۷۰۱۰۱۷	۰,۹۶۰۴۲	۸,۰۰۰۰۲
روش FP-LAPW LDA با استفاده از ثابت نظری	۸	۷,۰۲۶۰۵	۱,۳۱۳۵۰۱	۵,۷۱۲۵۴۹	۰,۹۷۳۹۷	۸,۰۰۰۰۲
روش FP-LAPW LDA با استفاده از ثابت تجربی	۸	۷,۰۲۶۰۵	۱,۳۱۱۲۰۵	۵,۶۶۴۸۴۵	۰,۹۷۳۹۷	۸,۰۰۰۰۲

جدول ۵: بار مؤثر محاسبه شده در کار حاضر و مقایسه آن با نتایج دیگران برای  $\text{KNbO}_3$ .

	بار مؤثر K	بار مؤثر Nb	بار مؤثر O
روش FP-LAPW GGA96 با استفاده از ثابت نظری	۱,۹۲۲۱	۲,۰۴۰۸	۱,۷۲۴۶
روش FP-LAPW GGA96 با استفاده از ثابت تجربی	۱,۹۲۱۱	۲,۰۳۷۸	۱,۷۲۴۶
روش FP-LAPW GGA91 با استفاده از ثابت نظری	۱,۹۲۱۴	۲,۰۴۰۷	۱,۷۲۳۸
روش FP-LAPW GGA91 با استفاده از ثابت تجربی	۱,۹۲۱۰	۲,۰۳۴۱	۱,۷۲۱۳
روش FP-LAPW LDA با استفاده از ثابت نظری	۱,۹۲۰۰	۲,۰۴۱۱	۱,۷۱۴۱
روش FP-LAPW LDA با استفاده از ثابت تجربی	۱,۹۲۰۱	۲,۰۳۴۵	۱,۷۱۱۶
Neumann method[6]	-۰,۸۳	۰,۶۳	۰,۲
T.B method[12]	۰,۵۴۳	۲,۰۱۹	-۰,۸۵۴
اسمی	+۲	+۴	-۲



شکل ۲. الف) ساختار نواری کامل ترکیب  $\text{KNbO}_3$  نشان داده شده است. در قسمت ب) ترازهای مربوط به اتم اکسیژن. ج) ترازهای اوربیتال  $p$  اتم  $\text{Kb}$ . د) اوربیتال  $d$  اتم  $\text{N}$ . ه) اوربیتال  $d$  اتم  $\text{Kb}$

خواصی نظیر رسانا، نیم‌رسانا و یا عایق بودن ترکیب پرداخت و یا حتی به نوع گاف از لحاظ مستقیم یا غیرمستقیم بودن پی‌برد. علاوه بر آن می‌توان اتم‌ها و اربیتال‌هایی را که نقش اساسی‌تری در گذارهای احتمالی سیستم دارند، شناسایی نمود.

در شکل ۲ بخش الف) ساختار نواری ترکیب  $\text{KNbO}_3$  نشان داده شده است در سایر بخش‌ها نیز برخی اربیتال‌های خاص اتم‌ها به صورتی مشخص و متمایز نمایش داده شده است. سهم عمده ساختار

### ب. ساختار نواری

در بلورها ترازهای انرژی به صورت ساختار نواری شکل می‌گیرند. البته باید توجه داشت که نواحی ممنوعه‌ای نیز وجود دارند که در آن‌ها هیچ نوار انرژی تشکیل نمی‌گردد. این نوار ممنوعه گاف نواری نامیده می‌شود. گاف انرژی تفاوت انرژی میان نوار ظرفیت و نوار رسانش است. اهمیت محاسبه ساختار نواری در نتایج حاصل از آن نهفته است. با کمک این ساختار می‌توان به محاسبه گاف نواری بلورها و پیش‌بینی

انحراف از فرمول یونی وجود دارد که این می‌تواند ناشی از هیبریداسیون بین اربیتال‌های  $p$  اتم اکسیژن و  $d$  اتم  $\text{Nb}$  باشد که مقداری از بارهای ظرفیت  $\text{Nb}$  را گرفته و بار ظرفیت  $\text{Nb}$  را کاهش می‌دهد. نتایج به دست آمده از ترکیب خواص نیم‌رسانایی و گاف نواری غیرمستقیم را برای ترکیب پیش‌بینی می‌کنند.

### مراجع

- [1] L.F. Matthes, Energy Bands for  $\text{KNiF}_3$ ,  $\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{KMoO}_3$ , and  $\text{KTaO}_3$ , *Physical Review B6* Issue 12 (1972) 4718-4740.
- [2] R.E. Cohen, H. Krakauer, Electronic structure studies of the differences in ferroelectric behavior of  $\text{BaTiO}_3$  and  $\text{PbTiO}_3$ , *Ferroelectrics* 136 (1992) 65.
- [3] K. Michihide and C. Haydn, Electronic structures and the phase stability of perovskite-type oxides  $\text{KNbO}_3$  and  $\text{KTaO}_3$ , *Ferroelectrics* 55 (1998) 206-207.
- [4] M. Kitamura, S. Muramatsu, Electronic structure of perovskite-type compounds, *Physical Review B41* (1990) 1158
- [5] K. Schwarz, Optimization of the statistical exchange parameter  $\alpha$  for the free atoms H through Nb, *Physical Review B5* (1972) 2466.
- [6] T. Neumann, Electronic structure of  $\text{KNbO}_3$  and  $\text{KTaO}_3$ , *Physical Review B46* (1992) 10623.
- [7] R. Eglitis, et al. Computer simulations of defects in perovskite  $\text{KNbO}_3$  crystals. *Ferroelectrics* 229 (1999). 69-75.
- [8] P. Blaha, K. Schwarz, WIEN2k, Vienna university of Technology, Austria (2002).
- [9] D. Bagayoko, G.L. Zhao, J.D. Fan, J.T. Wang, Ab initio calculations of the electronic structure and optical properties of ferroelectric tetragonal, *Journal of Physics Condensed Matter* 10 (1998) 5645-5655.
- [10] F.M. Michel-Calendini, G. Mesnard, Band structure and optical properties of tetragonal  $\text{BaTiO}_3$ , *Journal of Physics C Solid State Physics* 6 (1973) 1709.

نواری این ترکیب در بازه انرژی ۵- تا ۰ الکترون ولت به اربیتال‌های  $2p$  اتم اکسیژن اختصاص دارد. گاف نواری به دست آمده که در جدول ۶ ذکر گردیده است بیان‌گر این است که؛ گاف نواری ترکیب  $\text{KNbO}_3$  با استفاده از تقریب GGA96 مقدار ۲٫۲۱ الکترون‌ولت برای راستای مستقیم و ۱٫۴۲ الکترون‌ولت در راستای غیر مستقیم به دست می‌آید. در بررسی جهت گاف نواری همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود ترکیب  $\text{KNbO}_3$  دارای گاف نواری غیرمستقیم در راستای  $R-\Gamma$  است. لازم به ذکر است که نقطه  $\Gamma$  به نقطه‌ای در مرکز منطقه اشاره دارد. با تابش موج الکترومغناطیس الکترون با جذب فوتون‌هایی با انرژی مناسب می‌تواند از نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار انجام دهد. انرژی فوتون‌ها برای انجام اولین گذار باید حداقل برابر با انرژی گاف نواری ترکیب باشد اما با افزایش انرژی فوتون‌های فرودی گذار در راستاهای دیگر نظیر  $M-\Gamma$ ،  $X-M$  که در شکل ۲ نشان داده شده است.

جدول ۶. جهت و بزرگی گاف نواری ترکیب  $\text{KNbO}_3$ .

جهت گاف نواری	بزرگی گاف نواری
گاف نواری مستقیم $\Gamma-\Gamma$ در این پژوهش	۲٫۲۱
گاف نواری مستقیم در مرجع [۱۳]	۲٫۲۳
گاف نواری غیرمستقیم $\Gamma-R$	۱٫۴۲
گاف نواری غیرمستقیم در مرجع [۶]	۱٫۴۰
گاف نواری غیرمستقیم در مرجع [۱۳]	۱٫۵۸
گاف نواری غیرمستقیم در مرجع [۱۴]	۱٫۴۳

### نتیجه‌گیری

محاسبات انجام شده از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی، تراکم‌پذیری و بار مؤثر بیانگر این است که محاسبات با استفاده از تقریب شیب‌تعمیم‌یافته نسبت به بقیه تقریب‌ها سازگاری بهتری با نتایج تجربی و نظری به دست آمده از روش‌های دیگر دارد. نتایج مربوط به مقادیر نظری و تجربی طول پیوند بیانگر آن است که نزدیک‌ترین فاصله بین اتم‌ها به نوع تقریب اعمالی برای پتانسیل تبادل-همبستگی وابسته نیست و تنها به ثابت‌های شبکه بستگی دارد. یک

[11] R. Wyckoff, Crystal Structure, Inter science New York, (1960).

[12] L. Douillard, The electronic structure of  $\text{KNbO}_3$ : an XPS and XAS study, *Journal of Physics, Condensed Matter* 6 (1994) 5039

[13] C. Okoye., Theoretical study of the electronic structure, chemical bonding and optical properties of  $\text{KNbO}_3$  in the paraelectric cubic phase, *Journal of Physics Condensed Matter* 15 (2003) 5945.

[14] E. Krasovskii, O. Krasovska, W. Schattke, Ab initio calculation of the optical and photoelectron spectra of  $\text{KNbO}_3$  and  $\text{KTaO}_3$ , *Journal of electron spectroscopy and related phenomena* 83(1997) 121-127.

# **Investigation the electronic structure of KNbO<sub>3</sub> in cubic phase by using full potential-linearized augmented plan wave method**

**\*Hamdollah Salehi, Zohre Javdani**

Physics Department, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Iran

## **Abstract**

In this paper, the electronic structure of KNbO<sub>3</sub> such as lattice constant, bulk modulus, the first pressure derivative of the bulk modulus and Compressibility have been studied. The calculations have been performed using a Full Potential-Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method in the framework of Density Functional Theory (DFT) by WIEN2k package with LDA, GGA96, GGA91 approximations for the exchange and correlation potential terms. The Calculated band gap for KNbO<sub>3</sub> in the best approximation is equal to 2.21 eV for direct and 1.42 eV for indirect. The results show that the calculation using by GGA approximation has the better agreements with the other theoretical and experimental approximations.

**Keywords:** KNbO<sub>3</sub>, Lattice constant, Bulk modulus, Density functional theory