

[N-13]

제일원리적 계산 방법에 의한 격자 변형된 SrTiO₃ 산화물 격자의 optical phonon softening

김이준, 정동근, 김주호*, 이재찬*

성균관대학교 물리학과, *성균관대학교 재료공학과

최근 산화물 박막의 유전특성, 강유전 특성 또는 광학적 특성 등의 여러 특성 때문에 산화물 박막에 대하여 실험적으로 또는 이론적으로 많이 연구되어지고 있다. 이러한 산화물을 이용하여 인공 격자를 형성할 경우 기존의 소자에 비하여 강화된 유전성질과 같은 새로운 기능을 제공한다고 알려져 있다. 따라서 이러한 인공 격자의 격자변형과 함께 soft mode coupling의 근본적인 연구를 위해서는 미시적인 관점에서의 제일원리적 계산 방법에 의한 연구가 매우 중요하다.

본 연구에서는 BaTiO₃와 SrTiO₃를 주기적으로 적층성장시켜 인공격자를 제조하였다. 이렇게 제조된 인공 격자는 단일막에서는 얻을 수 없는 BaTiO₃와 SrTiO₃의 격자 변형도를 나타내었다. 격자 변형에 따른 유전 특성을 분석하기 위해 density functional theory (DFT)라고 불리는 범함수밀도론을 기초한 제일원리적 계산 방법을 통하여 격자 변형된 SrTiO₃의 구조적, 전기적 특성을 계산하였다. SrTiO₃ 격자의 안정성을 분석하기 위하여 Vienna *Ab-initio* Simulation Package (VASP) code가 사용되었다. SrTiO₃ 산화물 격자의 안정성 분석 후, frozen-phonon 계산 방법을 사용하여 zone-centered optical phonon mode가 계산되었으며, mode effective charge는 Berry-phase polarization으로부터 얻어졌다. 이를 통하여 제일원리적 계산에 의한 격자 변형된 SrTiO₃ 산화물 격자의 유전 상수가 계산되었다. SrTiO₃ 격자가 격자변형이 일어나지 않은 상태에서부터 $c/a=0.985$ 로 격자 변형이 일어남에 따라 optical phonon mode는 점차 softening되어 유전 상수 값을 크게 증가시켰다. 또한, 격자변형이 더 진행됨에 따라 optical phonon mode는 점차 hardening되었으며, 유전상수의 감소를 가져왔다. 이는 격자 변형에 따른 SrTiO₃ 부피의 변화와 깊은 관련이 있었으며, 미시적인 관점으로는 안정한 상태에서의 Ti와 각 O 원자간의 거리에 따라 큰 유전 상수의 변화를 가져왔다.