

## First-principle에 의한 격자 변형된 SrTiO<sub>3</sub>와 BaTiO<sub>3</sub> 격자의 유전특성 분석

김이준\*, 김주호, 정동근\*, 이재찬  
성균관대학교 재료공학과, \*성균관대학교 물리학과

Ferroelectric 물질은 고유전성, 자발분극과 전기장에 따른 유전상수의 변화 등의 특성을 가지고 있으므로 많은 연구가 진행 중이다. 이러한 ferroelectric 물질의 유전 특성에 미치는 요소로는 물질의 조성비, 박막의 스트레스, 결정성 등이 있다. 특히 스트레스에 대한 연구가 활발히 진행 중이다.

본 연구에서 산화물 인공격자를 이용하여 단일박막에서는 얻을 수 없는 격자 변형도를 얻어 격자 변형이 박막의 유전특성에 미치는 영향을 연구하였다. BaTiO<sub>3</sub> (BTO)/SrTiO<sub>3</sub> (STO) 산화물 인공 격자를 Pulsed laser deposition (PLD)법으로 (La,Sr)CoO<sub>3</sub> 전극이 코팅된 MgO (100) 단결정 기판 위에 증착시켰다. 적층 주기에 변화를 주어 BTO와 STO 각각 1.01 ~ 1.095와 0.925 ~ 1.003의 단일막에서는 얻을 수 없는 격자 변형도를 얻었다. 이 실험적 데이터를 기초로 하여 density functional theory (DFT)라고 불리는 범함수밀도론을 기초한 제일원리적 계산 방법을 통하여 격자 변형된 SrTiO<sub>3</sub>와 BaTiO<sub>3</sub>의 구조적, 유전적 특성을 계산하였다. SrTiO<sub>3</sub>와 BaTiO<sub>3</sub> 격자의 안정성을 분석하기 위하여 Vienna *Ab-initio* Simulation Package (VASP) code가 사용되었다. 격자 변형된 SrTiO<sub>3</sub>와 BaTiO<sub>3</sub> 산화물 격자의 안정성 분석 후, frozen-phonon 계산 방법을 사용하여 zone-centered optical phonon mode가 계산되었으며, mode effective charge는 Berry-phase polarization으로부터 얻어졌다. SrTiO<sub>3</sub> 격자가 격자 변형이 일어나지 않은 상태로부터  $c/a = 0.985$ 로 격자 변형이 일어남에 따라 optical phonon mode는 점차 softening되었으며, 격자 변형이 더 진행됨에 따라 optical phonon mode는 점차 hardening되었다. BaTiO<sub>3</sub> 격자의 경우 SrTiO<sub>3</sub> 격자와는 달리 격자 변형이 1.01 ~ 1.023으로 진행됨에 따라 optical phonon mode의 증가를 가져왔으나 Born effective charge의 증가하였으며, 더 이상 격자 변형이 진행됨에 따라 optical phonon mode의 감소를 가져왔으나 Born effective charge의 증가 유전상수는 증가했다. 격자 변형이 SrTiO<sub>3</sub>와 BaTiO<sub>3</sub> 산화물 격자의 optical phonon mode와 Born effective charge에 크게 영향을 미쳤다.