

Pb(Sc_{1/2}Ta_{1/2})O₃의 질서화도에 따른 전자구조 해석
(Electronic Energy Levels in Disordered Pb(Sc_{1/2}Ta_{1/2})O₃)

군산대학교 재료공학과 김명철

Pb(B_IB_{II})O₃형 복합 페로프스카이트 구조를 갖는 Pb(Sc_{1/2}Ta_{1/2})O₃ [약칭 PST]는 합성시 열처리 온도 및 소성스케줄에 따라 B위치원소인 Sc 및 Ta가 무질서하게 배열하게 되고 이는 그 유전적 성질에 큰 영향을 미친다. 충분히 서냉하는 경우에는 B위치 양이온이 제자리를 찾아 들어가 질서화된 구조를 가지며 빠르게 냉각하는 경우에는 B위치 원소가 무질서하게 배열하게 된다. 무질서도가 높은 경우에는 완화형 강유전체 (Relaxor)의 성질을 나타내고 질서도가 높으면 일반적인 1차 상전이를 하게 된다. 원자배열의 질서-무질서 배열에 따른 PST의 이같은 독특한 성질은 완화형 강유전체와 일반 강유전체와의 관계를 연구하는 데 매우 유용한 정보를 제공하고 있다.

본 연구에서는 B위치 원소의 배열방법에 따른 전자에너지 준위의 변화를 살펴기 위하여 제일근사원리를 이용한 분자궤도에너지를 계산하였다. DV-X α 법에 의한 전용프로그램과 SUN UltraSPARK II 워크스테이션을 사용하여 계산하였다. 원자배열은 PST 단위포의 1/8 부격자를 모델로 삼았고 부격자 내부의 B_I 및 B_{II} 위치 양이온이 이루는 정사면체에서 B_I 및 B_{II} 위치를 임의로 바꾸면서 무질서한 구조모델을 삼았다.

계산결과 무질서 정도가 증가함에 따라 밴드갭 에너지가 감소하였고 Pb-O결합의 결합차수가 증가하고 Ta-O 결합의 결합차수는 감소하는 경향을 보여주었다. 한편, 이온화도는 Pb의 경우 무질서도에 비례해 감소하였고 산소이온의 경우 증가하는 경향을 보였다.