

강유전성 상전이를 갖는 LiTaO_3 의 상온 및 고온 구조 연구

김신애, 성기훈, 이창희

한국원자력연구소 하나로이용기술개발팀 (sakim@kaeri.re.kr)

LiTaO_3 (LTO)는 강유전성 물질로 약 600°C 에서 상전이를 보인다. 상온에서 LTO는 삼방정계이며 공간군은 $R\bar{3}c$ 이며, $a=b=5.154\text{\AA}$, $c=13.783\text{\AA}$, $\gamma=120^\circ$ 이다. 고온상은 공간군 $R\bar{3}c$ 를 가지며, 격자상수는 $a=b=5.214\text{\AA}$, $c=13.769\text{\AA}$, $\gamma=120^\circ$ 이다. 한국원자력연구소의 연구용 원자로인 하나로에 설치되어 있는 4축 단결정 회절장치(Neutron Four-Circle Diffractometer; FCD)와 Euler Cradle 부착형 고온시료환경장치를 이용하여 $3\times 3\times 5\text{ mm}$ 크기의 LTO 단결정을 시료로 상온 및 고온실험을 수행하였다.

상온에서는 산소원자 3개로 이루어진 층이 c 축을 따라 삼각형의 꼭지점이 엇갈리게 쌓인 형태를 보이며, 그 사이에 Ta과 Li 양이온이 위치한다. 양이온 자리의 순서는 Ta...vacancy...Li...Ta...vacancy...Li의 순이다. Ta은 6개의 산소원자와 결합하여 TaO_6 -8면체의 배위다면체를 갖는다. 고온상은 상온에서의 구조와 크게 다르지는 않으나, Ta이 inversion center에 위치하며 Li이 무질서 상태로 존재한다.

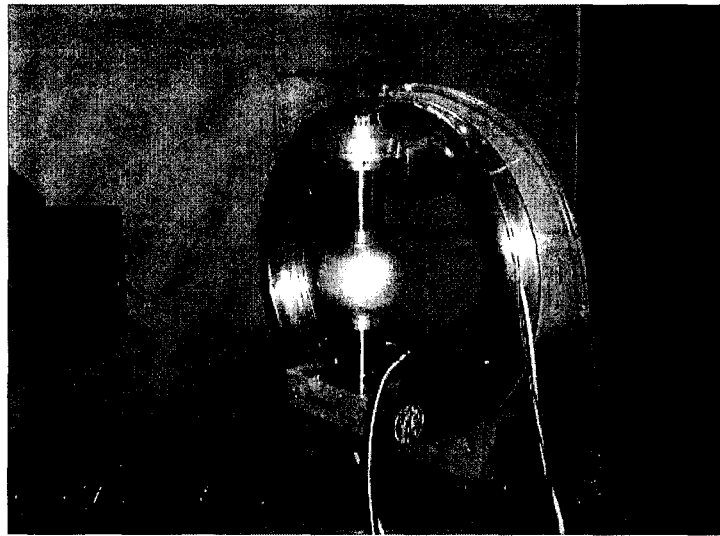


Fig. 1 Furnace installed in FCD at HANARO

* 본 연구는 과학기술부 원자력연구개발 사업의 일환으로 수행되었으며, 과학재단 지원에 의한 유전체단결정은행에서 육성된 시료를 사용하였음