

**제일원리적 계산 방법에 의한 격자 변형된 SrTiO₃ 산화물 격자의
구조적, 유전적 특성**
(First-principle study of structure and lattice dielectric response
of the strained SrTiO₃ oxide lattice)

성균관대학교 물리학과 김이준, 정동근
성균관대학교 재료공학과 김주호, 이재찬
성균관대학교 정보통신융 신기능성 소재 및 공정연구센터 김용성

페로브스카이트 구조의 산화물은 결정구조의 변형을 수반하는 상전이를 통해 여러 가지 결정구조로 변해가며 이에 따라 다양한 물리적 성질 즉 강유전성, 압전성, 전기광학 성질 및 초전도 성질, 강자성 성질 등을 나타낸다. 따라서 페로브스카이트 구조를 갖는 산화물의 응용 분야는 강유전성을 이용한 반도체 메모리, 고유전율을 이용한 게이트절연막, 유전특성의 비선형성을 이용한 튜너블 무선통신부품, 고주파에서의 비선형성을 이용한 양자컴퓨터에의 응용, 초전도 소재, 강상관계의 자기적 성질의 응용소재 등에 매우 활발하게 연구되고 있다. 이러한 페로브스카이트 물질의 유전특성을 근본적으로 이해하기 위해서는 제일원리적 계산 방법에 의한 미시적인 관점에서의 연구가 매우 중요하다.

본 연구에서는 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. 이를 바탕으로 격자 변형된 SrTiO₃의 구조적, 유전적 특성이 논의될 것이다.