

격자 변형된  $\text{SrTiO}_3$ 와  $\text{BaTiO}_3$  격자의 lattice stability와 유전특성 : First principle study

Lattice stability and dielectric properties of strained  $\text{SrTiO}_3$  and  $\text{BaTiO}_3$  lattices : First principle study

김이준, 김주호\*, 정동근, 이재찬\*†  
 성균관대학교 물리학과, \*성균관대학교 재료공학과  
 (jcleee@skku.edu)

본 연구에서는  $\text{BaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$  인공격자를 이용하여 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  $\text{SrTiO}_3$ 와  $\text{BaTiO}_3$ 의 구조적, 전기적 특성을 계산하였다. 각 산화물 격자의 안정성을 분석하기 위하여 Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) code가 사용되었다.  $\text{SrTiO}_3$ 와  $\text{BaTiO}_3$  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  $\text{SrTiO}_3$ 와  $\text{BaTiO}_3$  산화물 격자의 유전 상수가 계산되었다.  $\text{SrTiO}_3$  격자가 격자변형이 일어나지 않은 상태로부터  $c/a=0.985$ 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.  $\text{BaTiO}_3$  격자의 경우  $\text{SrTiO}_3$  격자와는 달리 격자 변형이 1.01 ~ 1.023으로 진행됨에 따라 optical phonon frequency가 증가하였으며 격자 변형이 더 진행됨에 따라 optical phonon frequency는 감소하였다. 하지만 optical phonon이 높은 주파수 대역에서 변하기 때문에 유전상수에 크게 미치는 영향을 미치지 못하였으며, 격자변형에 따른  $\text{BaTiO}_3$  격자의 유전상수 증가의 원인은 Born effective charge의 증가때문이라고 사료된다.