

A-5

Titanium을 첨가한 $0.4\text{Pb}(\text{Yb}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3-0.6\text{PbZrO}_3$ 고용계에서의 압전, 유전, 구조적 특성과 상전이 거동에 관한 연구

Piezoelectric, Dielectric, Structural and Phase Transition Behavior of Ti-substituted $0.4\text{Pb}(\text{Yb}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3-0.6\text{PbZrO}_3$ Solid Solution System

김종우, 김휘산, 김재현, 주응길
한국과학기술원 재료공학과

$\text{Pb}(\text{B}'\text{B}'')\text{O}_3$ 로 표기되는 complex perovskite 산화물들은 특이한 상전이 거동과 압전, 유전 등 다양한 물리적 특성으로 인해 많은 연구가 진행 중이다. 특히, 두개 이상의 complex perovskite 상(相)의 고용체는 훌륭한 물리적 특성을 보이기 때문에 이에 대한 연구가 활발히 진행 중이다. 본 연구에서는 두 개의 Pb-based complex perovskite 반강유전체 고용체인 $0.4\text{Pb}(\text{Yb}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3-0.6\text{PbZrO}_3$ 에 Ti 를 치환함에 따라 변화하는 유전, 압전 및 상전이 거동을 연구하고자 하였다.

본 실험에서는 X-ray 회절 패턴분석, 온도에 따른 유전상수, P-E 이력곡선 측정에 의해 $(1-x)$ $(\text{Pb}(\text{Yb}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3)_{0.4}(\text{PbZrO}_3)_{0.6}-x\text{PbTiO}_3$ ($(\text{PYN}_{0.4}\text{PZ}_{0.6})_{1-x}\text{PT}_x$) ($0 \leq x \leq 0.6$)의 상전이 거동과 유전, 압전, 구조적 특성을 연구하였다. X-ray 회절실험 결과에 의하면 PT의 함량이 증가함에 따라 'pseudocubic'의 결정구조($x < 0.2$)가 'tetragonal' 결정구조($x > 0.2$)로 변화하였으며, 온도에 따른 유전상수 곡선에서는 PT가 증가함에 따라 상전이 온도가 증가하였다. 상온의 P-E 곡선에서는 PT의 치환량이 증가함에 따라서 점차 잔류분극이 증가하며, 압전상수(d_{33})도 증가하였다.

A-6

제일원리적 계산에 의한 격자 변형된 SrTiO_3 와 BaTiO_3 격자의 Optical Phonon Mode와 Born Effective Charge

First-principle Study : Optical Phonon Mode and Born Effective Charge of Strained SrTiO_3 and BaTiO_3 Lattices

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

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. 이러한 페로브스카이트 물질의 유전특성을 근본적으로 이해하기 위해서는 제일원리적 계산 방법에 의한 미시적인 관점에서의 연구가 매우 중요하다.

BaTiO_3 (BTO)/ SrTiO_3 (STO) 산화물 인공격자를 Pulsed Laser Deposition (PLD)법으로 $(\text{La,Sr})\text{CoO}_3$ 전극이 코팅된 MgO (100) 단결정 기판위에 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_3 의 구조적, 전기적 특성을 계산하였다. SrTiO_3 와 BaTiO_3 격자의 안정성을 분석하기 위하여 Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) code가 사용되었다. SrTiO_3 와 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. SrTiO_3 격자가 격자변형이 일어나지 않은 상태에서 $c/a=0.985$ 로 격자 변형이 일어남에 따라 optical phonon mode는 점차 softening되었으며, 격자변형이 더 진행됨에 따라 optical phonon mode는 점차 hardening되었다. BaTiO_3 격자의 경우 SrTiO_3 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_3 와 BaTiO_3 산화물 격자의 optical phonon mode와 born effective charge에 크게 영향을 미쳤다.