

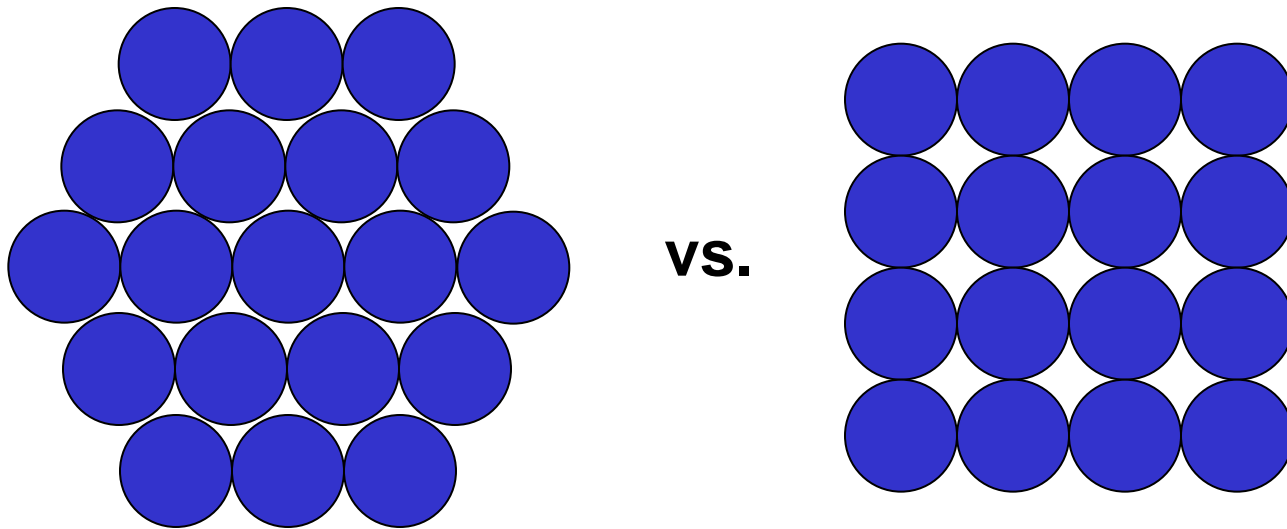
Chapter 4: 결정질 고체의 구조 (The Structure of Crystalline Solids)

학습 목표

- 면심입방격자, 체심입방격자, 육방조밀격자
- 면심입방 및 체심입방의 격자 구조에서 모서리길이, 원자반지름, 금속의 밀도 계산
- 염화나트륨(NaCl), 염화세슘(CeCl), 페로브스카이트 등의 단위격자와 원자구조의 설명
- 세라믹의 성분과 이온반경을 이용한 결정구조 예측
- 조밀충진면이 생기는 과정. 폴리머의 결정상태

금속의 결정구조 (Metallic Crystal Structures)

- 결정 격자 안에 어떤 방식으로 빈 공간을 최소화하며 금속 원자를 쌓을 수 있을까요?
2-차원



그리고 2차원 구조를 겹겹이 쌓으면 3 차원 구조를 만들수 있다.

금속의 결정구조 (Metallic Crystal Structures)

- 일반적으로 조밀한 구조를 가진다.
- 조밀 구조 (dense packing)에 대한 이유:
 - 일반적으로 오직 하나의 원소가 존재하므로 모든 원자 반경은 동일 해야 한다.
 - 금속 결합은 방향성이 없다.
 - 결합에너지를 낮추기 위해 원자들 간의 최근 접 거리를 유지한다.
 - 전자 구름은 서로간의 코어(원자핵)를 둘러싼다.
- 금속은 단순한 구조를 가진다.
 - 체심입방구조 (BCC)
 - 면심입방구조 (FCC)
 - 육방조밀구조 (HCP)
- 배위수(최인점 원자수), 원자 충전율 (단위정 내의 원자밀도)

단순 입방 구조 (Simple Cubic Structure)

- 낮은 원자밀도, 드물다. (Po, 플로늄 원자번호 84)
- 최밀 충전 방향 (Close-packed directions): 모서리
- 배위수 (Coordination No.) = 6
최인접 원자수 (nearest neighbors No.)

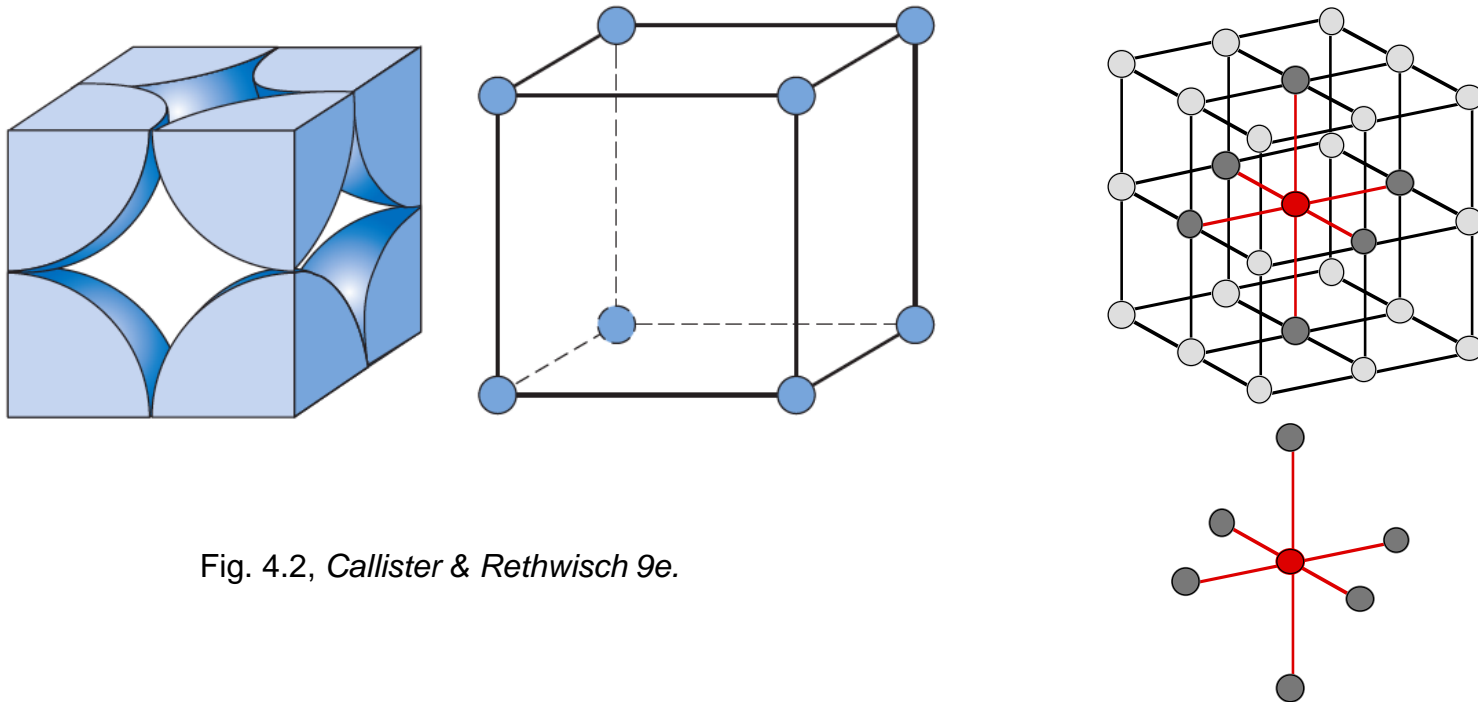


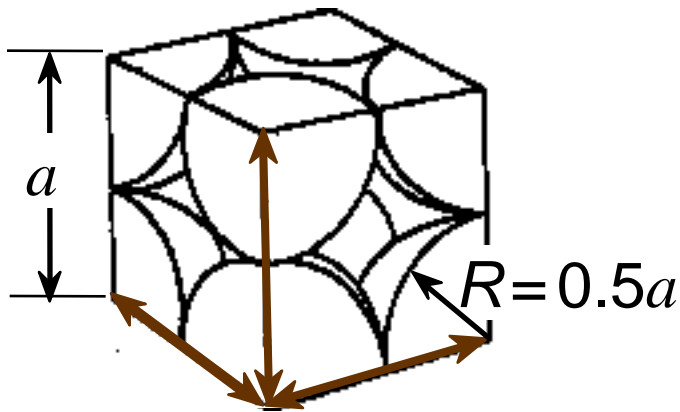
Fig. 4.2, Callister & Rethwisch 9e.

원자 충전율 (Atomic Packing Factor)

$$APF = \frac{\text{단위정의 원자의 체적}^*}{\text{단위정의 체적}}$$

*완전 구형으로 가정

- 단순 입방구조의 APF = 0.52



최밀 방향

8개의 구성물 x 1/8 =

1 atom/unit cell

Adapted from Fig. 4.2 (a),
Callister & Rethwisch 9e.

$$APF = \frac{\text{원자수} \times \frac{\text{원자당 체적}}{\text{단위정}}}{\frac{\text{단위정 체적}}{\text{단위정}}}$$

$1 \times \frac{4}{3} \pi (0.5a)^3$ (Numerator)

 a^3 (Denominator)

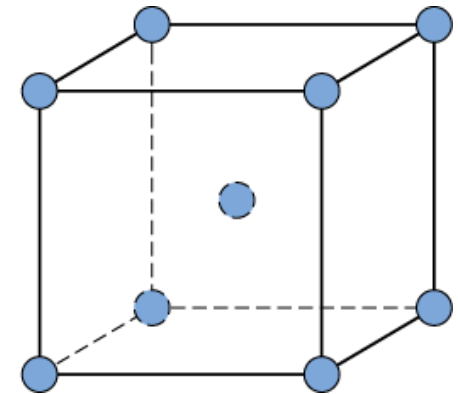
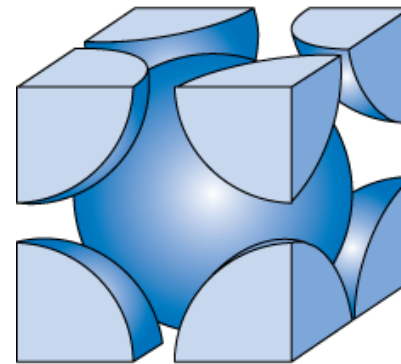
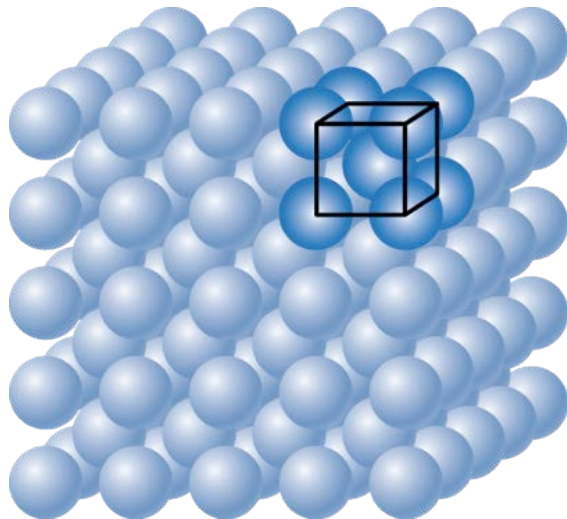
체심 입방 구조

(Body Centered Cubic Structure, BCC)

- 단위정 내의 대각선을 따라 원자들이 서로 접촉하고 있다.
--Note: 모든 원자는 구형이고 체심 원자는 각 모서리의 원자들과 접촉하고 있다.

ex: Cr, W, Fe (α), Tantalum, Molybdenum

- 배위수 = 8



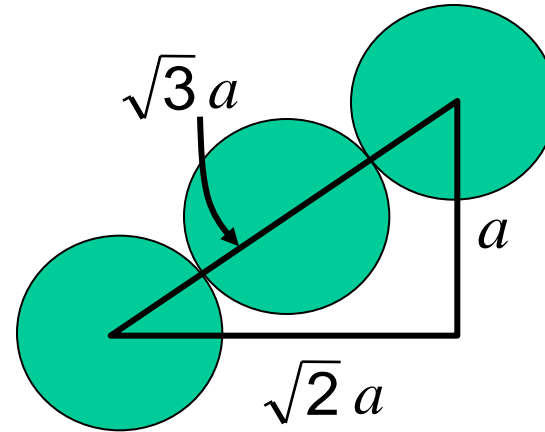
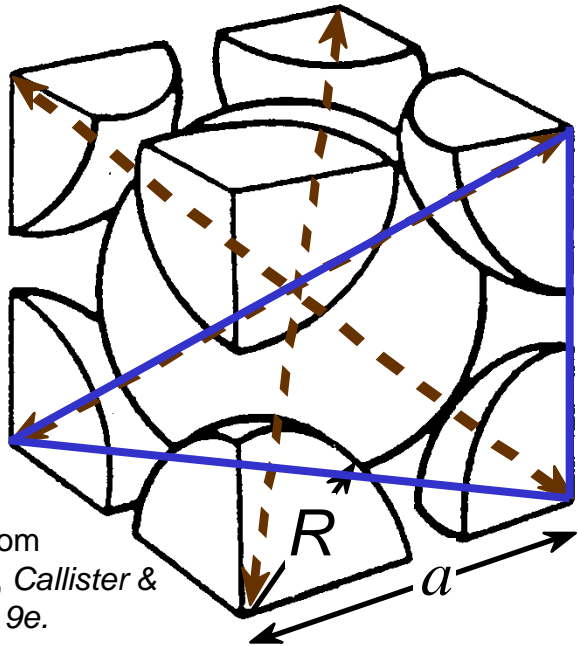
Adapted from Fig. 4.1,
Callister & Rethwisch 9e.

$$2 \text{ 원자수} / \text{단위정} = 1 \text{ center} + 8 \text{ corners} \times 1/8$$

원자 충전율

(Atomic Packing Factor, BCC)

- APF for a body-centered cubic structure = 0.68



최밀 충전 방향: 대각선
length = $4R = \sqrt{3} a$

Adapted from
Fig. 4.1(a), Callister &
Rethwisch 9e.

$$\text{APF} = \frac{\text{atoms unit cell} \times \text{volume atom}}{\text{volume unit cell}}$$

$$\text{APF} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi (\sqrt{3}a/4)^3}{a^3}$$

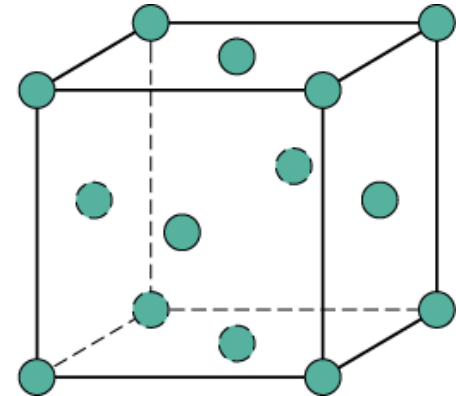
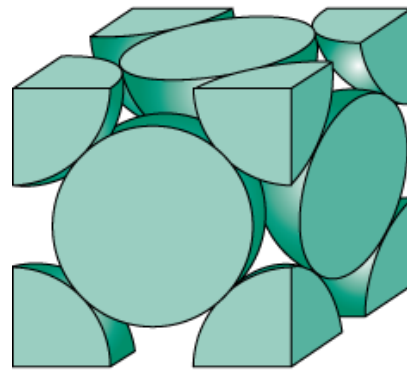
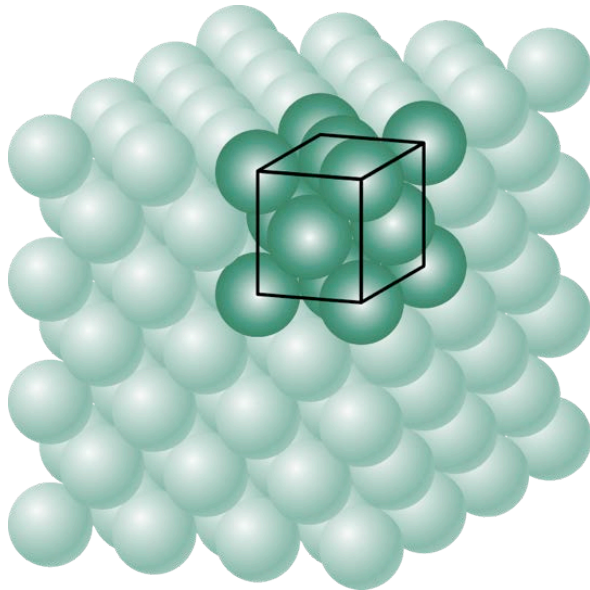
면심 입방 구조

(Face Centered Cubic Structure FCC)

- 면의 대각선을 따라 원자들이 서로 접촉하고 있다.
--Note: 모든 원자는 구형; 면 중심의 원자는 각 모서리의 원자들과 접촉하고 있다.

ex: Al, Cu, Au, Pb, Ni, Pt, Ag

- Coordination # = 12

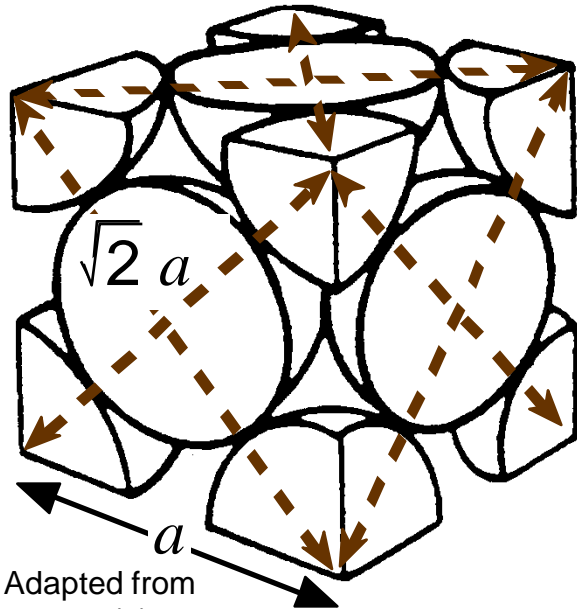


Adapted from Fig. 3.1, *Callister & Rethwisch 9e*.

4 atoms/unit cell: $6 \text{ face} \times 1/2 + 8 \text{ corners} \times 1/8$

원자 충전율(Atomic Packing Factor): FCC

- APF for FCC = 0.74



Adapted from
Fig. 3.1(a),
Callister &
Rethwisch 9e.

최대 원자 충전율

최밀 방향 (Close-packed directions):

$$\text{면의 대각선} = 4R = \sqrt{2} a$$

단위정 내의 원자수:

$$6 \times 1/2 + 8 \times 1/8 = 4 \text{ atoms/unit cell}$$

$$\text{APF} = \frac{\text{atoms unit cell} \times \text{volume atom}}{\text{volume unit cell}}$$

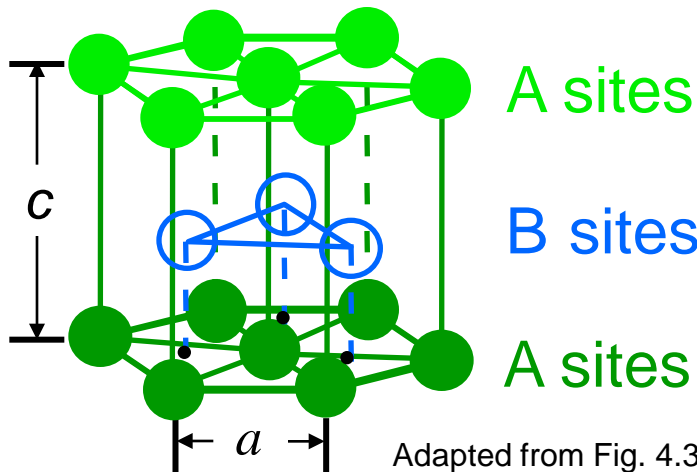
$$= \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi (\sqrt{2}a/4)^3}{a^3}$$

육방조밀 구조

(Hexagonal Close-Packed Structure- HCP)

- 적층 순서 : ABAB...

- 3D Projection



Adapted from Fig. 4.3(a),
Callister & Rethwisch 9e.

- 2D Projection



- 배위수 = 12

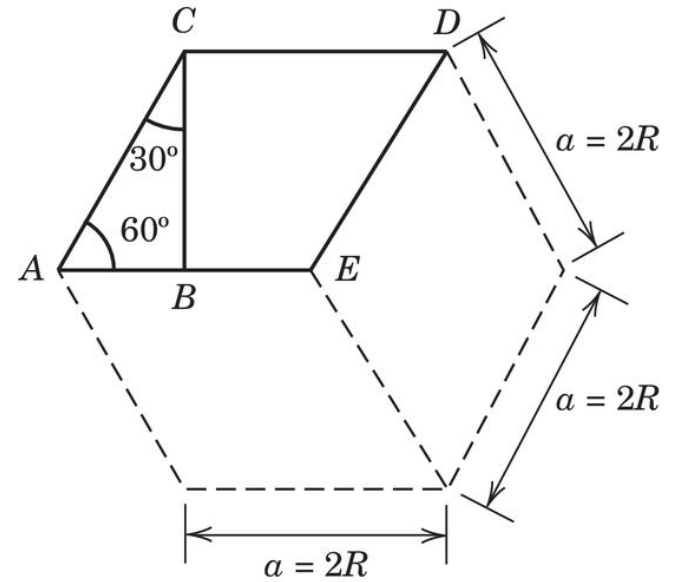
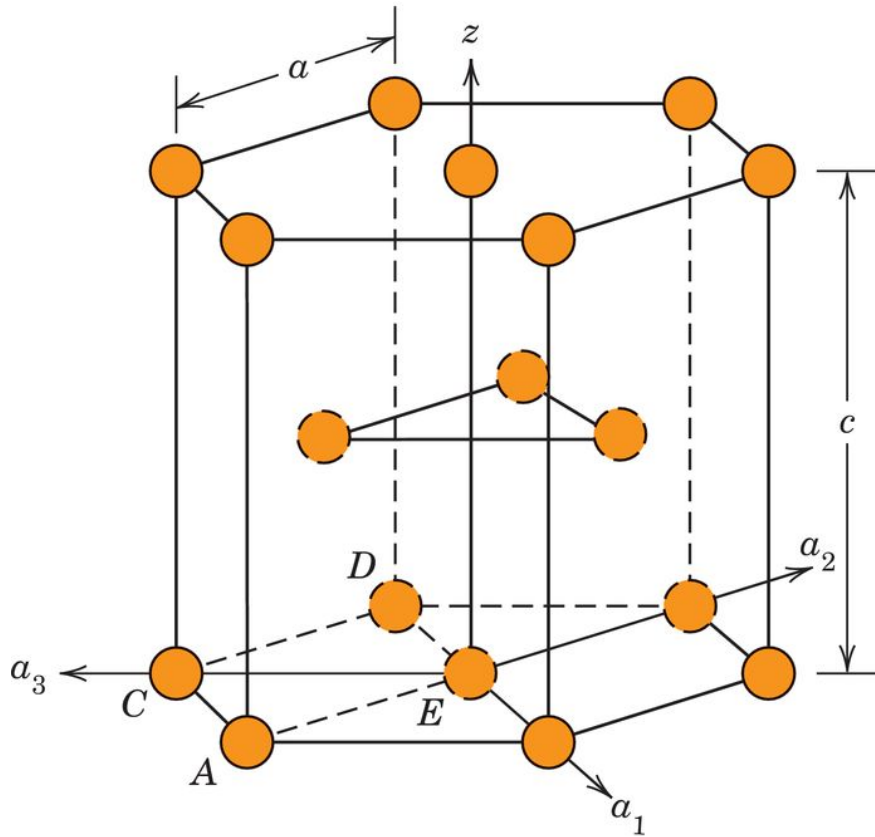
- APF = 0.74

- $c/a = 1.633$

6 원자수/단위정

ex: Cd, Mg, Ti, Zn

예제 4.3 HCP의 단위정의 부피를 a 와 c , 또는 c 와 R 로 표현하기



(2) HCP의 부피 구하기

$$\text{바닥면적} \times \text{높이} = 3a^2 \frac{\sqrt{3}}{2} \times c = 3a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$a = 2R \text{ 을 대입} \rightarrow 3a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2} = 3(2R)^2 c \frac{\sqrt{3}}{2} = 6R^2 c \sqrt{3}$$

(1) 평행사변형 ACDE의 넓이 구하기

$$\overline{BC} = a \cos 30^\circ = a \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\text{ACDE의 면적} = \overline{CD} \times \overline{BC} = a \times a \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\text{HCP의 전체바닥면적} = 3 \times a^2 \frac{\sqrt{3}}{2}$$

이론적 밀도 (Theoretical Density, ρ)

$$\text{Density} = \rho = \frac{\text{단위정 내의 원자 질량}}{\text{단위정 전체의 체적}}$$

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

where

n = 원자수/ 단위정

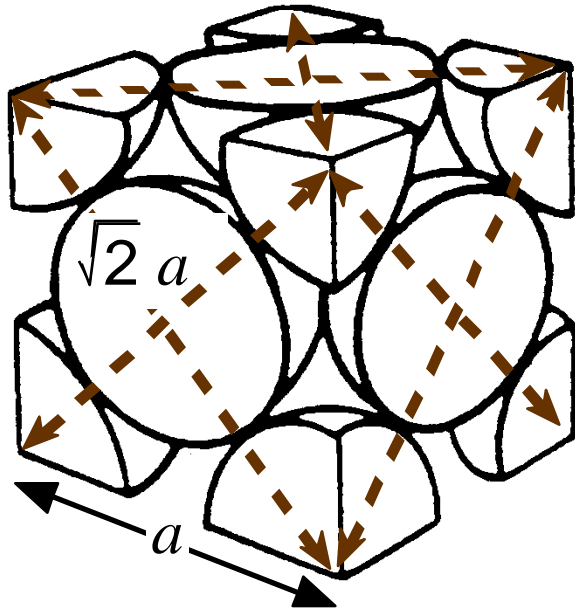
A = 원자 질량

V_C = 단위정의 체적 = a^3 *(입방)

N_A = 아보가드로 수

= 6.022×10^{23} atoms/mol

이론적 밀도 (Theoretical Density, ρ)



- 예제 4.4: Cu (FCC)

$$A = 63.5 \text{ g/mol}$$

$$R = 0.128 \text{ nm}$$

$$n = 4 \text{ atoms/unit cell}$$

$$a = 4R\sqrt{2} = 0.362 \text{ nm } (\sqrt{2} = 1.414)$$

$$= 3.62 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\rho = \frac{\text{atoms/unit cell} \times A}{\text{volume unit cell} \times N_A}$$

atoms
unit cell → 4 63.5 ← g/mol

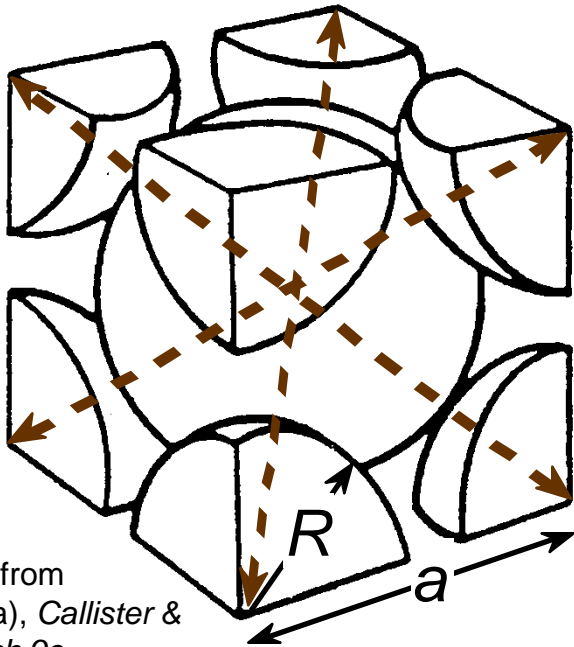
$\rho =$
 a^3
 6.022×10^{23}

volume
unit cell → a^3
 6.022×10^{23} ← atoms
mol

$$\rho_{\text{theoretical}} = 8.89 \text{ g/cm}^3$$

$$\rho_{\text{actual}} = 8.94 \text{ g/cm}^3$$

이론적 밀도(Theoretical Density, ρ)



Adapted from Fig. 4.1(a), Callister & Rethwisch 9e.

- Ex: Cr (BCC)

$$A = 52.00 \text{ g/mol}$$

$$R = 0.125 \text{ nm}$$

$$n = 2 \text{ atoms/unit cell}$$

$$a = 4R/\sqrt{3} = 0.2887 \text{ nm}$$

$$\rho = \frac{\text{atoms/unit cell} \times A}{\text{volume unit cell} \times N_A}$$

atoms
unit cell → 2 52.00 ← g/mol

$\rho =$
 a^3
 6.022×10^{23}

volume unit cell → atoms/mol

$\rho_{\text{theoretical}}$	$= 7.18 \text{ g/cm}^3$
ρ_{actual}	$= 7.19 \text{ g/cm}^3$

세라믹의 원자 결합

- 결합의 특징:
 - 특정상 이온 결합 또는 공유결합을 가짐
 - 원소의 전기 음성도에 따라 이온 결합 또는 공유결합을 결정함.
- 전기 음성도가 크거나 작을 경우:

IA																	0				
H 2.1																	He -				
Li 1.0	Be 1.5															B 2.0	C 2.5	N 3.1	O 3.5	F 4.1	Ne -
Na 1.0	Mg 1.3	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.4	Cl 2.9	Ar -														
K 0.9	Ca 1.1	Sc 1.2	Ti 1.3	V 1.5	Cr 1.6	Mn 1.6	Fe 1.7	Co 1.7	Ni 1.8	Cu 1.8	Zn 1.7	Ga 1.8	Ge 2.0	As 2.2	Se 2.5	Br 2.8	Kr -				
Rb 0.9	Sr 1.0	Y 1.1	Zr 1.2	Nb 1.3	Mo 1.3	Tc 1.4	Ru 1.4	Rh 1.5	Pd 1.4	Ag 1.4	Cd 1.5	In 1.5	Sn 1.7	Sb 1.8	Te 2.0	I 2.2	Xe -				
Cs 0.9	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.2	Ta 1.4	W 1.4	Re 1.5	Os 1.5	Ir 1.6	Pt 1.5	Au 1.4	Hg 1.5	Tl 1.5	Pb 1.6	Bi 1.7	Po 1.8	At 2.0	Rn -				
Fr 0.9	Ra 0.9	Ac 1.0																			

CaF₂: large
 SiC: small

Lanthanides: 1.0-1.2
 Actinides: 1.0-1.2

세라믹 결정 구조 (Ceramic Crystal Structures)

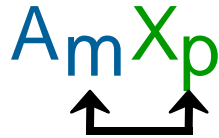
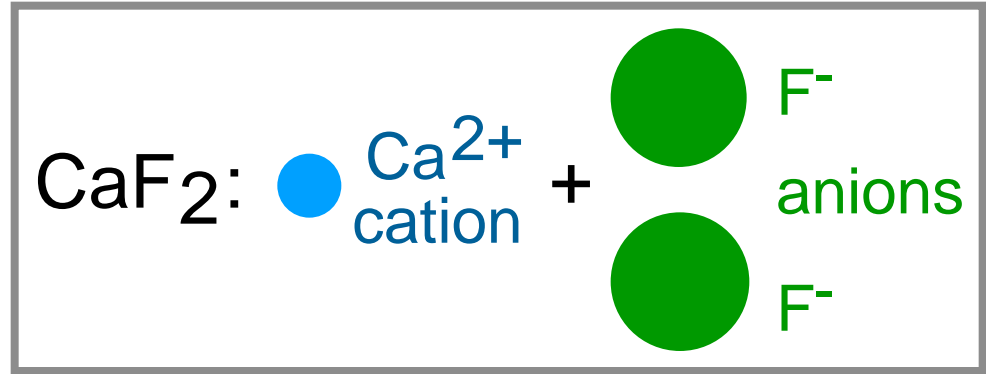
산화물 구조 (Oxide structures)

- 산소 음이온은 메탈의 양이온보다 크다.
- 격자 안의 산소 원자들이 최밀 충전 되어 있다
(일반적으로 FCC 를 구성)
- 산소 이온간의 메탈의 이온들이 공극에 존재한다.

세라믹 결정 구조를 정하는 요소

1. 전기적 중성도를 만족:

- 세라믹 내의 구성 이온의 전하량은 제로가 되어야 함.
- 화학식에 반영되어야 함.



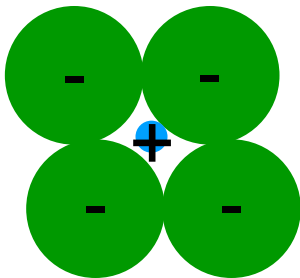
$m, p \rightarrow$ 전기적 중성도가 맞도록 조절

Ex) $\text{Al}_2\text{O}_3 \rightarrow (\text{Al}^{3+}) \times 2 = 6+$

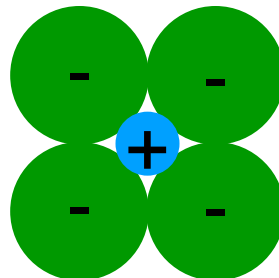
$(\text{O}^{2-}) \times 3 = 6-$

2. 이온들의 상대적인 크기 - 안정적 구조를 형성:

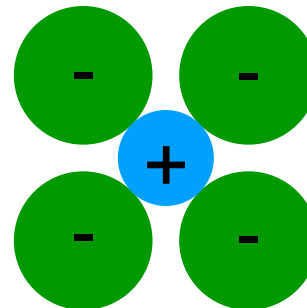
--각 이온들간에 서로 접촉해 있어야 안정한 결정구조를 가진다.



불안정



안정



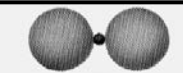
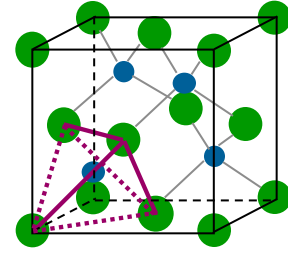

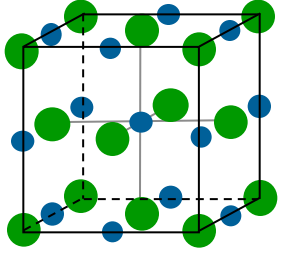


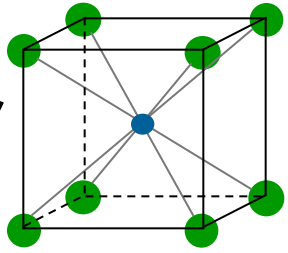

안정

Adapted from Fig. 4.4,
Callister & Rethwisch 9e.

배위수 및 이온 반경 (Coordination Number and Ionic Radii)

- 배위수는 양이온/음이온 반경의 비에 영향을 받는다. $\frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}}$

안정된 구조를 형성하기 위해, 양이온 1개의 주위에 몇 개의 음이온이 존재하는가?

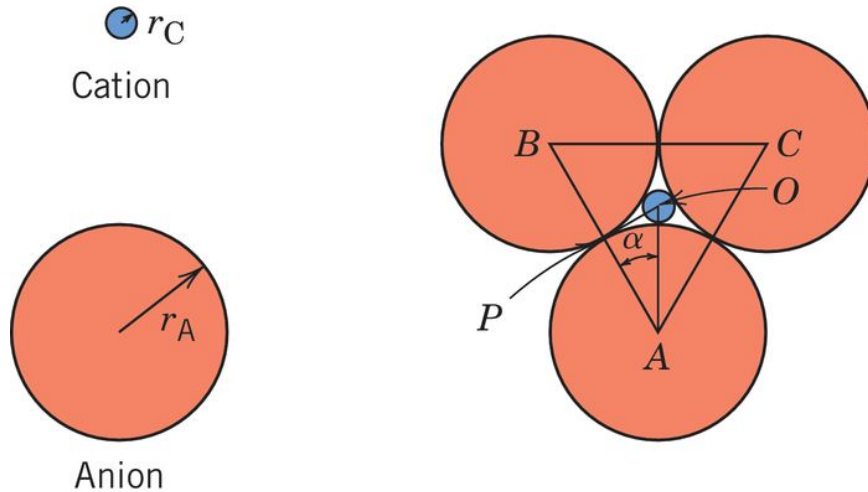
$\frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}}$	배위수				
< 0.155	2	linear			ZnS (zinc blende) Adapted from Fig. 4.7, Callister & Rethwisch 9e.
0.155 - 0.225	3	triangular			NaCl (sodium chloride) Adapted from Fig. 4.5, Callister & Rethwisch 9e.
0.225 - 0.414	4	tetrahedral			
0.414 - 0.732	6	octahedral			CsCl (cesium chloride) Adapted from Fig. 4.6, Callister & Rethwisch 9e.
0.732 - 1.0	8	cubic			

Adapted from Table 4.3,
Callister & Rethwisch 9e.

양이온/ 음이온 간의 최소 반경비의 계산

- 예제 4.5 평면삼각형 (triangular) 최소 이온 반지름 비의 결정 (배위수= 3)

$$r_{\text{cation}}/r_{\text{anion}}$$



삼각형 ABC는 정삼각형
 $\alpha = 30^\circ$

$$\frac{\overline{AP}}{\overline{AO}} = r_A$$

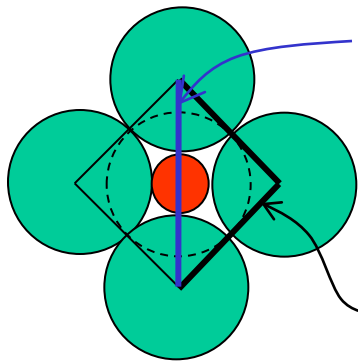
$$\overline{AO} = r_A + r_C$$

$$\frac{\overline{AP}}{\overline{AO}} = \cos \alpha = \frac{\sqrt{3}}{2} = 0.866$$

$$\frac{r_A}{r_A + r_C} = 0.866 \rightarrow \frac{r_C}{r_A} = \frac{1 - 0.866}{0.866} \approx 0.155$$

양이온/ 음이온 간의 최소 반경비의 계산

- 8면체 (octahedral site) 최소 이온 반지름 비의 결정
(배위수가 6일 때) $r_{\text{cation}}/r_{\text{anion}}$



$$2r_{\text{anion}} + 2r_{\text{cation}} = \sqrt{2}a$$

$$a = 2r_{\text{anion}}$$

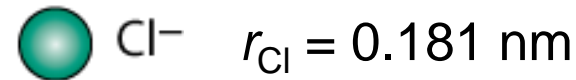
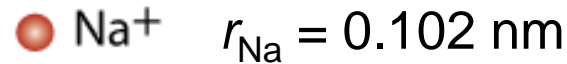
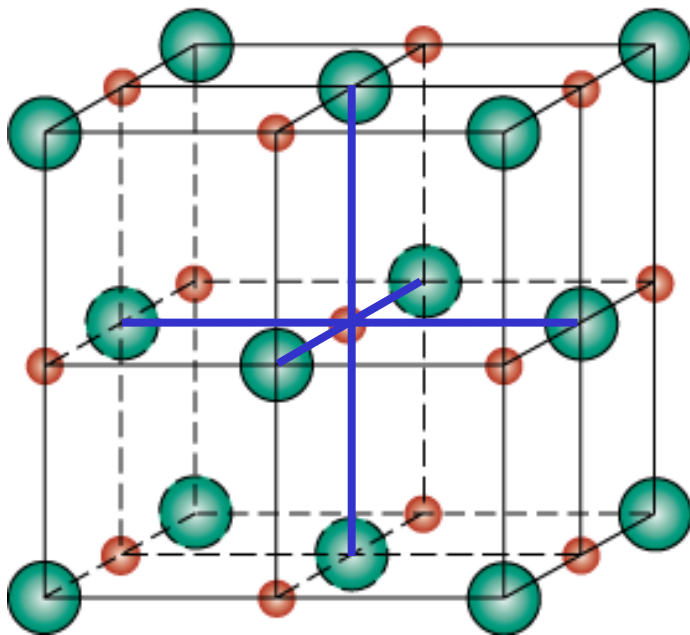
$$2r_{\text{anion}} + 2r_{\text{cation}} = 2\sqrt{2}r_{\text{anion}}$$

$$r_{\text{anion}} + r_{\text{cation}} = \sqrt{2}r_{\text{anion}} \quad r_{\text{cation}} = (\sqrt{2} - 1)r_{\text{anion}}$$

$$\frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}} = \sqrt{2} - 1 = 0.414$$

AX형 결정1: 암염 구조 (Rock Salt Structure)

가장 보편적인 구조로, 음이온과 양이온수가 동일한 구조.
대표적인 재료: 소금 NaCl (rock salt)

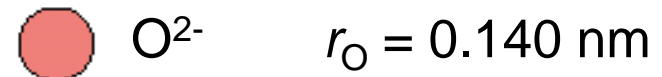
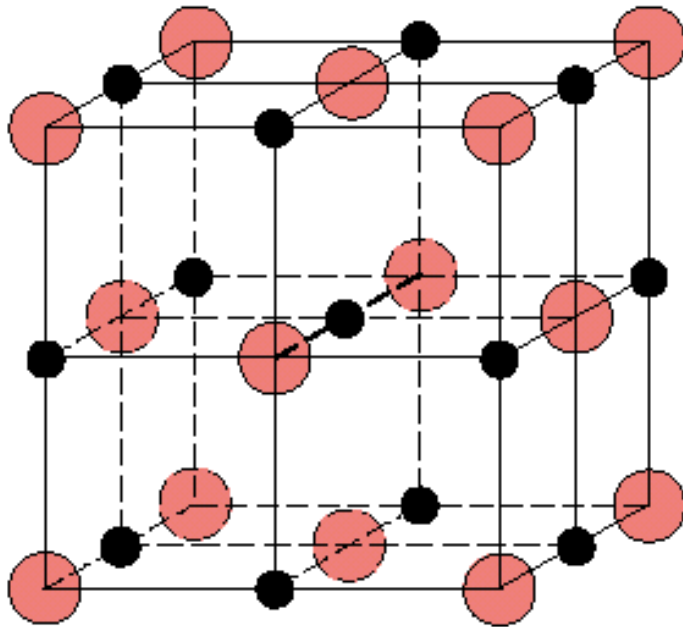


- $r_{\text{Na}}/r_{\text{Cl}} = 0.564$
- 배위수는 6 이고,
- (Na⁺) 양이온
8면체 구조(octahedral sites)

Adapted from Fig. 4.5,
Callister & Rethwisch 9e.

AX 형 결정구조 1: MgO and FeO

MgO 와 FeO 도 암염구조를 가진다.



$$r_{Mg}/r_O = 0.514$$

∴ 배위수가 6이고 8면체 구조(octahedral sites)

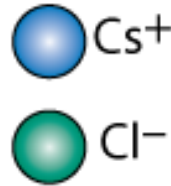
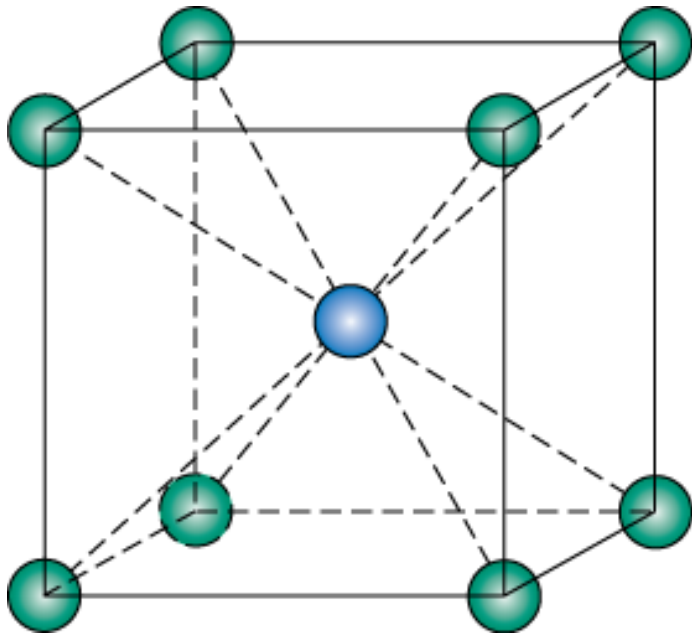
Adapted from Fig. 4.5,
Callister & Rethwisch 9e.

각각의 양이온 Mg^{2+} (또는 Fe^{2+})는 6개의 산소원자가 위치한다.

AX 결정 구조 2

AX형 결정구조에는 NaCl 이외에도, CsCl 형과 첨아연광(ZnS)형의 결정구조가 있다.

Cesium Chloride (CsCl 형)



$$\frac{r_{\text{Cs}^+}}{r_{\text{Cl}^-}} = \frac{0.170}{0.181} = 0.939$$

- $0.732 < 0.939 < 1.0$,
- 배위수가 8이고,
- 입방체구조를 가진다.

양이온 Cs⁺ 을 중심으로 8개의 Cl⁻ 음이온이 각 모서리에 위치한다.

Fig. 4.6, Callister & Rethwisch 9e.

예제 4.6: FeO의 결정 구조는 ?

- 이온 반경을 바탕으로, FeO의 결정 구조를 예상해보자?

양이온
(Cation) 이온 반경
Ionic radius (nm)

Al³⁺ 0.053

Fe²⁺ 0.077

Fe³⁺ 0.069

Ca²⁺ 0.100

음이온
(Anion)

O²⁻ 0.140

Cl⁻ 0.181

F⁻ 0.133

- Answer:

$$\frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}} = \frac{0.077}{0.140} = 0.550$$

이 반경을 기준으로,
-- 배위수 = 6 이다.

$$0.414 < 0.550 < 0.732$$

-- 결정 구조는 NaCl이다.

Data from Table 4.4,
Callister & Rethwisch 9e.

AX₂ 결정구조

형석 (Fluorite) 의 구조

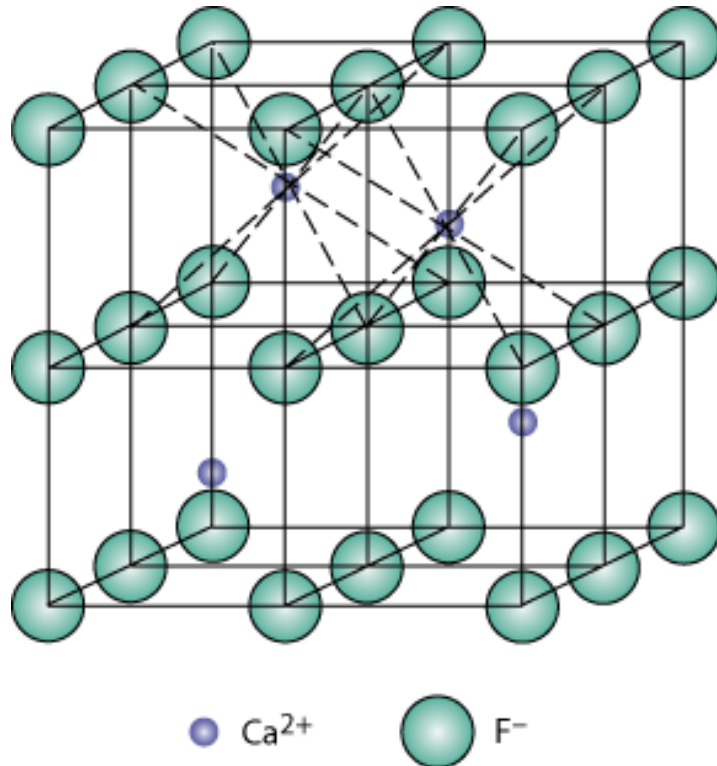


Fig. 4.8, Callister & Rethwisch 9e.

- Calcium Fluorite (CaF₂)
 - 철강 제련에서 탈인, 탈황에 사용됨, 광학렌즈로도 사용.
 - 양이온이 입방정 내에 존재
 - MgF₂, UO₂, ThO₂, ZrO₂, CeO₂ 등등
 - 한 개의 단위정: 8개의 입방체
 - 배위수: 양이온은 8, 음이온은 4
-
- 역형석 (Antifluorite structure – A₂X)
 - Na₂O, Li₂O 등등
- 형석 구조의 음이온과 양이온의 위치가 바뀜

ABX₃ 결정구조

- 페로브스카이트 (Perovskite) 구조

하나 이상의 양이온을 가진 산화물

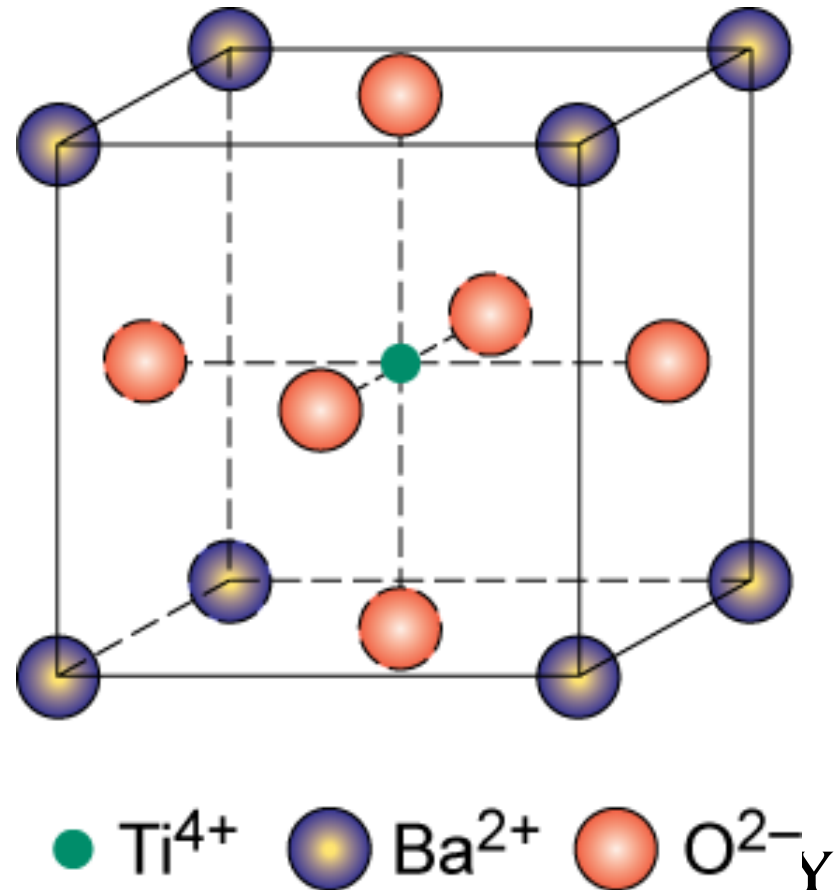
Ex: 티탄산바륨(BaTiO₃)

6개의 면중심에 O²⁻

입방체의 꼭지점에 Ba²⁺

입방체의 중심에 Ti⁴⁺

Fig. 4.9, Callister &
Rethwisch 9e.



세라믹 이론적 밀도 계산

단위격자 내의 성분단위(formula unit)의 수

$$\rho = \frac{n'(\Sigma A_C + \Sigma A_A)}{V_C N_A}$$

아보가드로의 수

단위정의 체적 (부피)

ΣA_C = 성분 단위내의 모든 양이온 원자량의 합

ΣA_A = 성분 단위내의 모든 음이온 원자량의 합

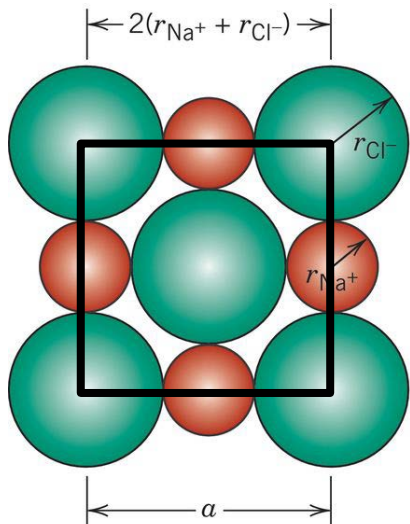
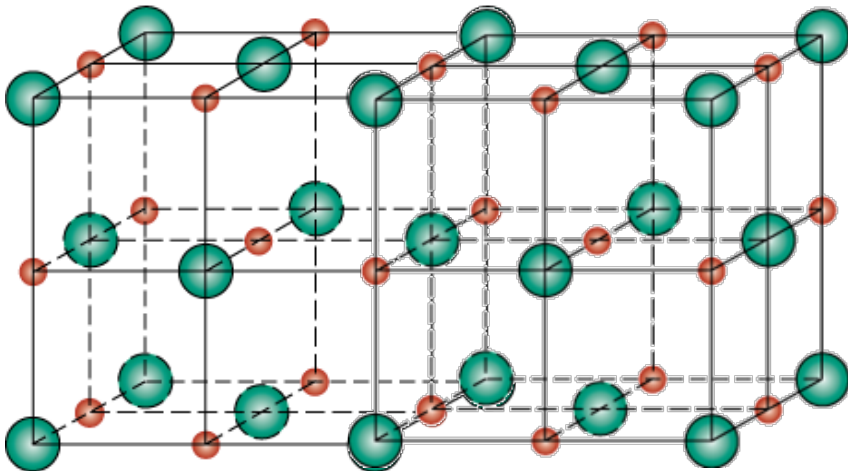
$$\rho \left(= \frac{g}{cm^3} \right) = \frac{n'(\Sigma A_C + \Sigma A_A)}{V_C N_A} = \frac{\left(num. \times \frac{g}{mol} \right)}{\left(cm^3 \times \frac{num.}{mol} \right)}$$

예제 NaCl의 이론적 밀도 계산

● Na⁺ $r_{Na^+} = 0.102\text{nm} = 0.102 \times 10^{-7}\text{cm}$

● Cl⁻ $r_{Cl^-} = 0.181\text{nm} = 0.181 \times 10^{-7}\text{cm}$

단위격자 내의 성분단위(formula unit)의 수



$$\rho = \frac{n'(\sum A_C + \sum A_A)}{V_C N_A}$$

(1) 성분단위의 수 (NaCl)= 4개
Na⁺:(FCC) 4개 // Cl⁻:(FCC)4개

(2) 양이온 및 음이온 원자량의 합

$$\sum A_C = A_{Na} = 22.99 \text{ g/mol}$$

$$\sum A_A = A_{Cl} = 35.42 \text{ g/mol}$$

(3) 입방 단위격자의 모서리 구하기 ($V_C=a^3$)

$$a = 2r_{Na^+} + 2r_{Cl^-} = 2 \times (0.102 + 0.181) \times 10^{-7}$$

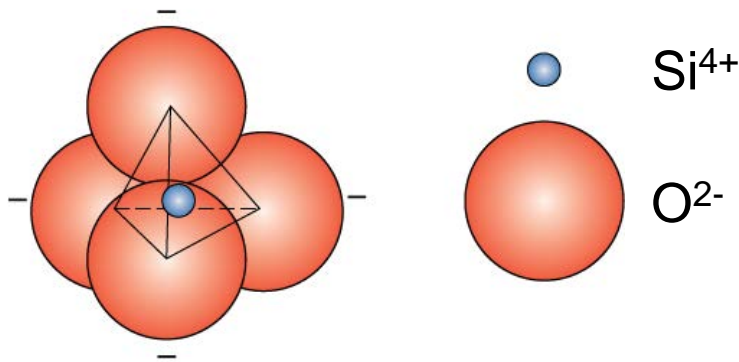
(4) 밀도 계산

$$\rho = \frac{4(22.99 + 35.43)}{(0.566 \times 10^{-7})^3 (6.022 \times 10^{23})} = 2.14 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

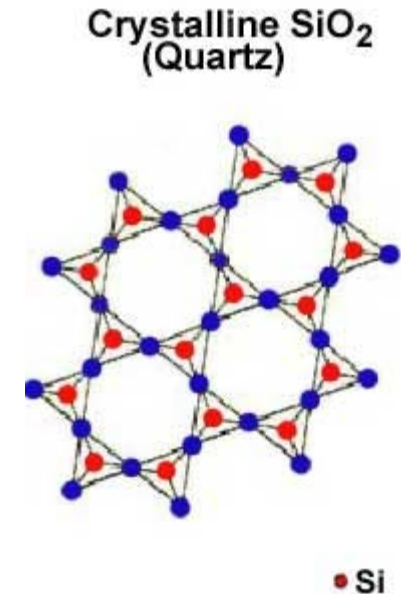
규산염 세라믹 (Silicate Ceramics)

지각에 가장 많이 존재하는 Si & O를 중심으로 이루어짐

- 결정질과 비결정질



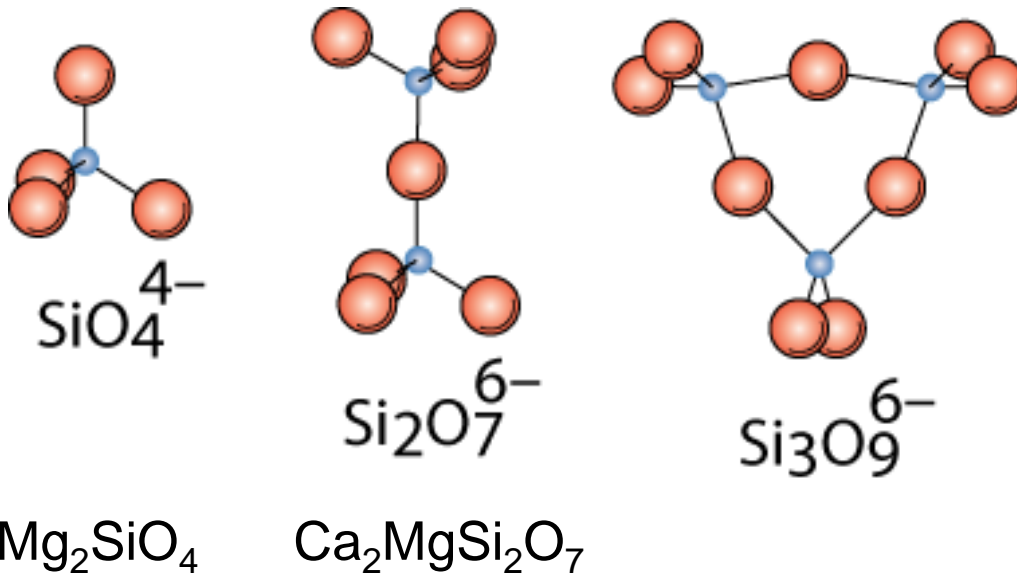
Figs. 4.10 & 4.11, Callister & Rethwisch
9e



- SiO_4^{4-} 의 사면체로 강한 공유결합성을 지닌다. www.nde-ed.org
- 산소 이온이 인접 사면체로부터 모두 공유되고 규칙적인 구조를 가짐
- SiO_2 (silica)의 동질이상체(**polymorphic**): 석영(quartz), **crystobalite**, & **tridymite**
- Si-O 결합은 결합력이 강하여 순수한 석영의 경우 용융점(melting points)이 매우 높다. (1710°C)

규산염 (Silicates)

- SiO_4^{4-} 사면체 모서리에 존재하는 산소이온들을 공유한다.
- 공유하는 사면체의 개수에 따라 다양한 구조가 결정된다.



Adapted from Fig. 4.13, Callister & Rethwisch 9e.

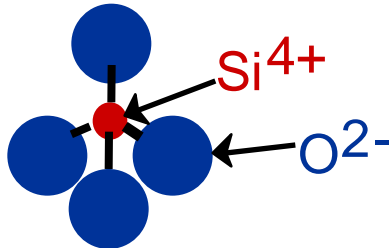
Ca^{2+} , Mg^{2+} , & Al^{3+} 등의 양이온이 동시에 존재한다.

1. 전기적 중성도를 만족하기 위해
2. 사면체들간의 정전기적으로 상호 결합

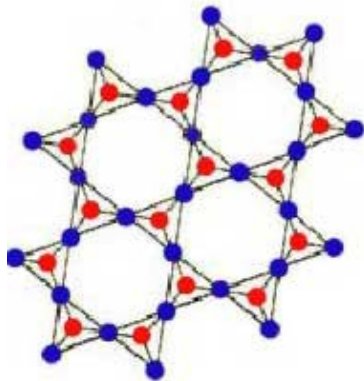
실리카 유리 (Glass Structure)

- 기본 단위:

4-
SiO₄ tetrahedron



- 석영은 결정질 실리카의 한 종류이며, 규칙적 배열을 가짐

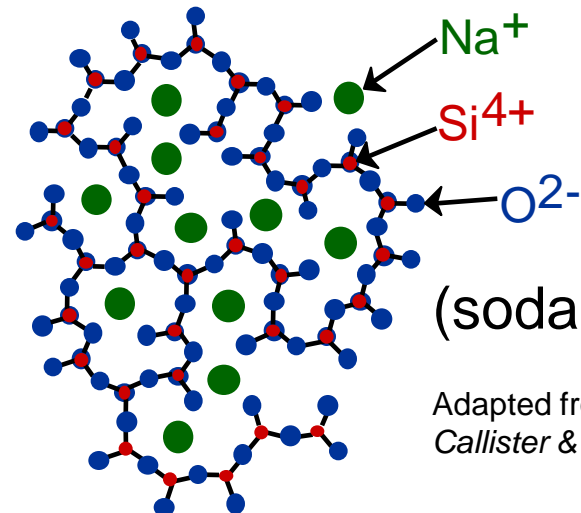


• Si • O

유리는 비결정질 실리카이다 (amorphous).

- 상온에서 불규칙적 원자 배열, 액체상의 특성
- 용융 실리카 (Fused silica)- 불순물 X
- 일반 실리카 유리는 Na⁺, Ca²⁺, Al³⁺, B³⁺ 등의 불순물을 포함한다.
- 망상 구조 (network structure)

network former- SiO₂ (SiO₄⁴⁻), B₂O₃, P₂O₅, GeO₂,
former(다성분계일때)- Al₂O₃(AlO₂⁻, Al₂O₄²⁻), V₂O₅ 등
network modifier- Ca²⁺, Mg²⁺, Na⁺, Al³⁺



(soda glass)

Adapted from Fig. 4.12,
Callister & Rethwisch 9e.

탄소의 다양한 형태

Diamond

- SP^3 (tetrahedral bonding)
 - 강한 공유 결합
 - 가장 단단한 재료
 - 매우 높은 열전도율
- 보석, 연마제 또는 절삭제

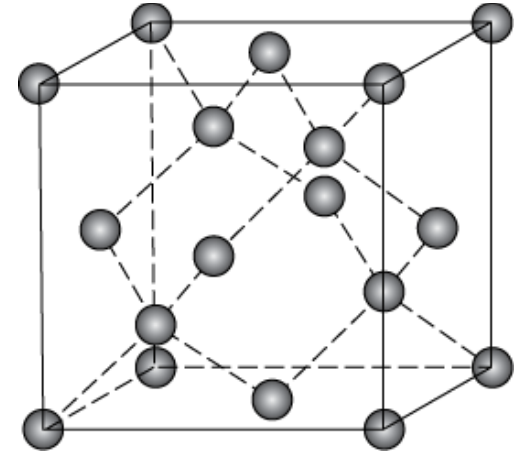
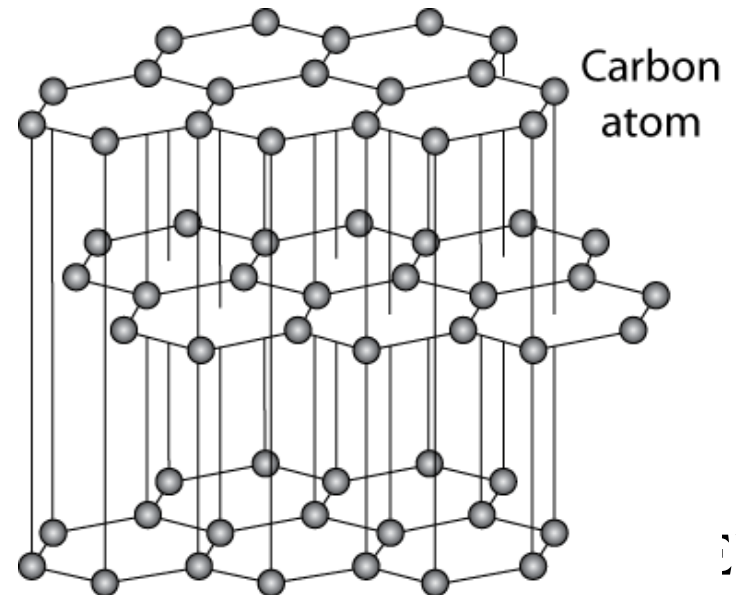


Fig. 4.17, Callister & Rethwisch 9e.

Graphite

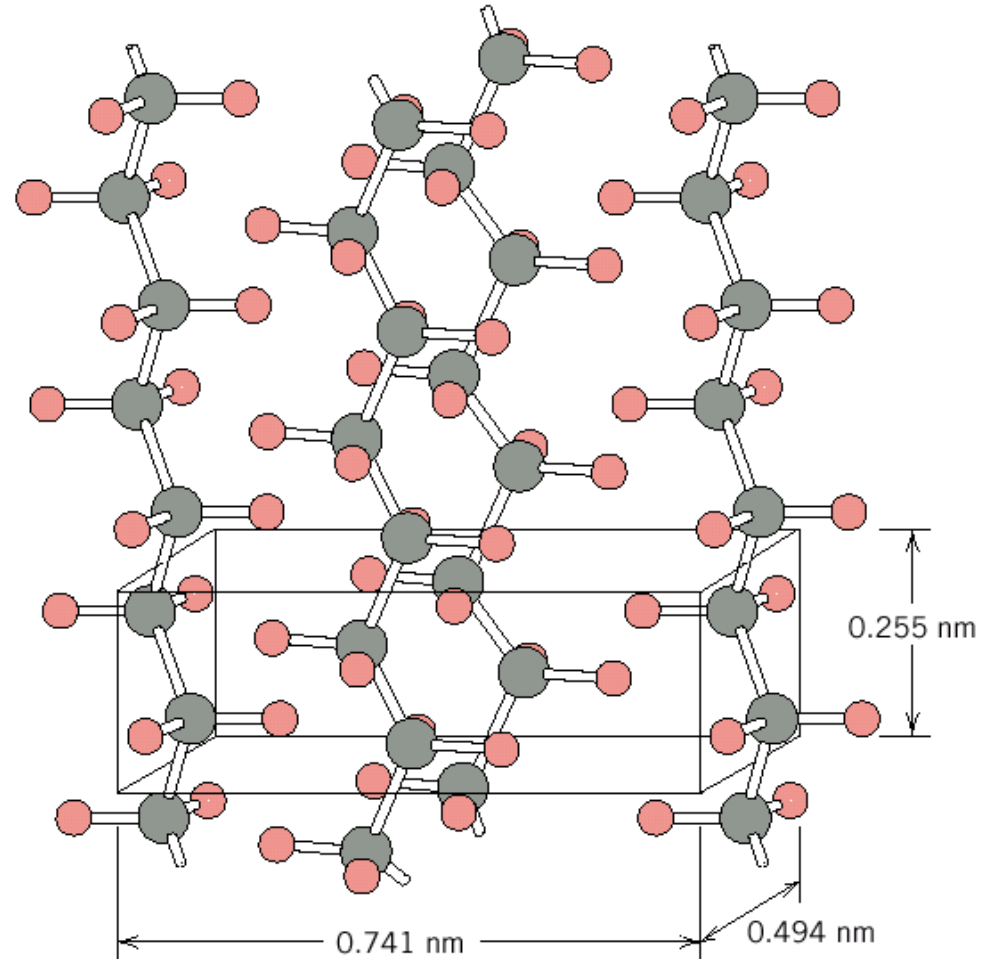
- 층상구조로 육각형의 탄소원자들이 평행한 면으로 배열
- 각 층은 van der Waal's 힘으로 결합됨.
- 면들은 서로간에 쉽게 미끄러짐.



폴리머 결정성 (Crystallinity in Polymers)

Fig. 4.19, Callister & Rethwisch 9e.

- 분자사슬이 규칙적으로 적층되어 원자배열이 규칙적인 상태
- 셀 단위로부터의 결정 구조
- 예를 들어
 - Polyethylene의 단위셀



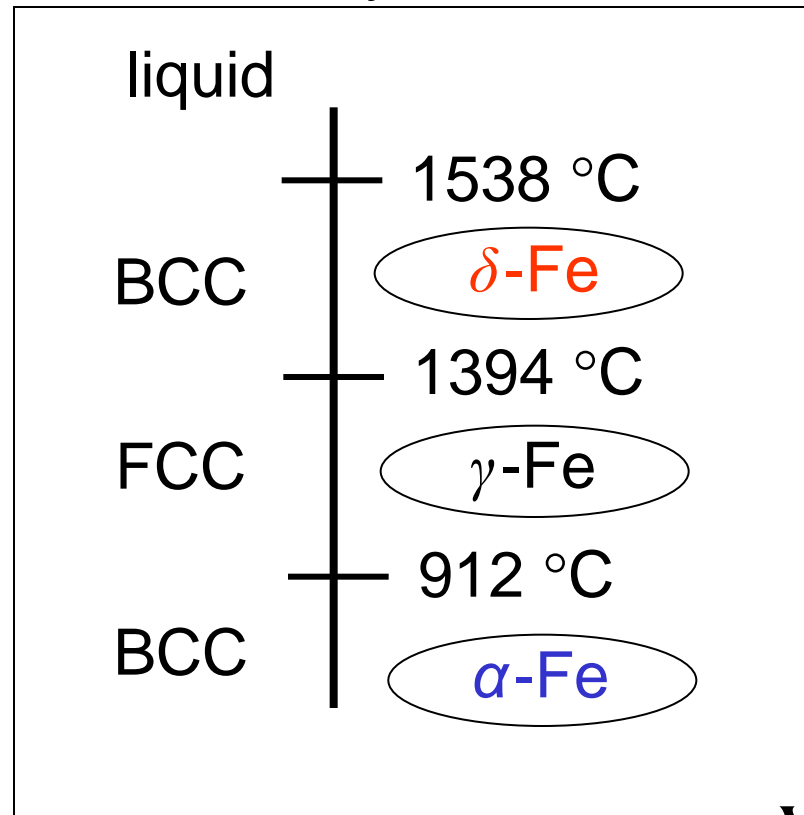
동질 이상 (Polymorphism)

- 동일한 재료에서 2 개 이상의 전혀 다른 결정 구조를 가지는 현상 (단일 고체에서 동소체 (allotropy))

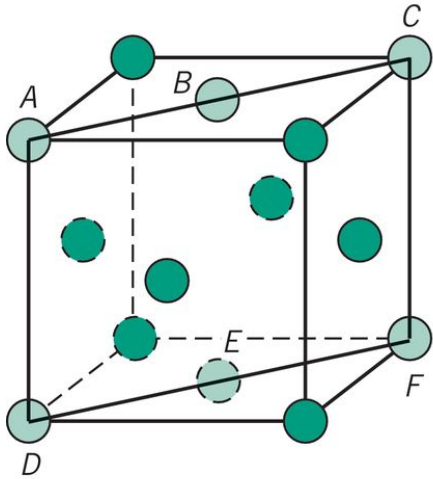
titanium
 α, β -Ti at 882 °C

carbon
diamond, graphite

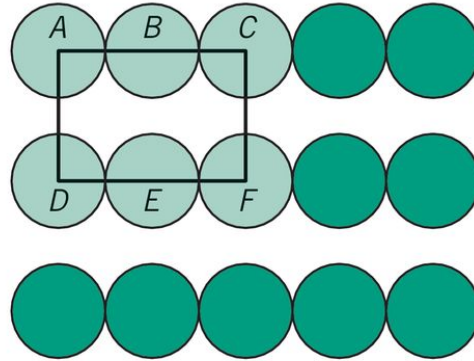
iron system



원자배열 (atomic arrangement)



(a)

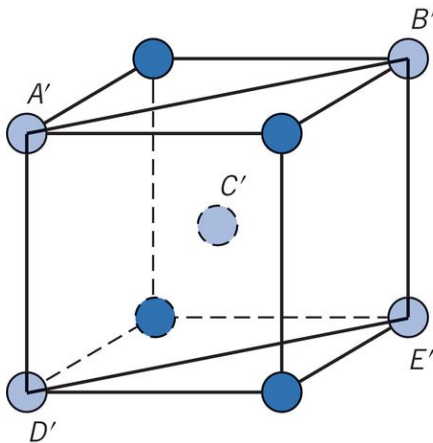


(b)

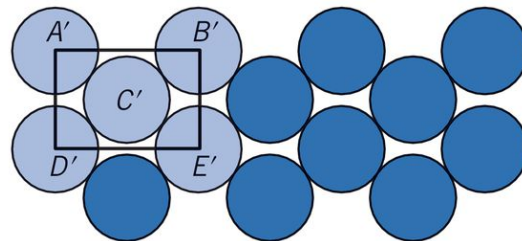
FCC의 (110) 면

결정 구조에 따라
동일한 격자면 일지라도
원자의 조밀도가 다를
수 있다.

면 또는 방향들의
동등성은 무엇으로
표현이 가능할까?



(a)

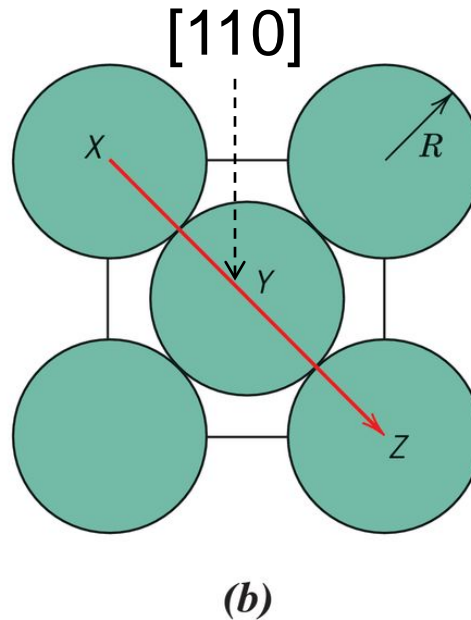
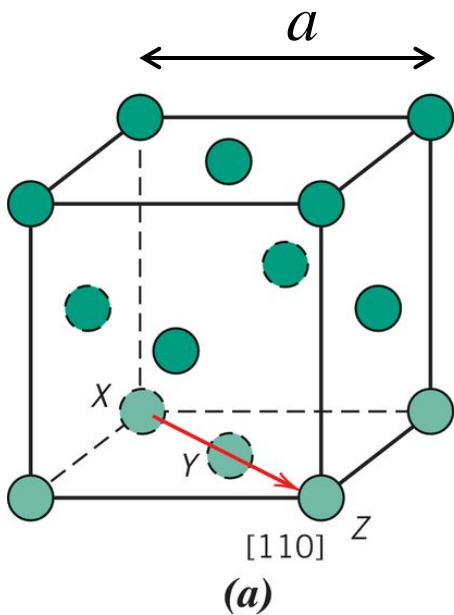


(b)

BCC의 (110) 면

선밀도 (Linear Density)

- 원자의 선밀도 $\equiv LD = \frac{\text{원자의 수}}{\text{방향 벡터의 단위 길이}}$



ex: [110]에서 Al의 선밀도는?
* $a = 0.405 \text{ nm}$

원자수 \rightarrow 2

단위길이 $\rightarrow \sqrt{2}a$

$$LD = \frac{2}{\sqrt{2}a} = 3.5 \text{ nm}^{-1}$$

(100) Iron의 면밀도(Planar Density)

온도가 912°C 이하일 때 철(Iron)은 BCC 구조를 가진다.

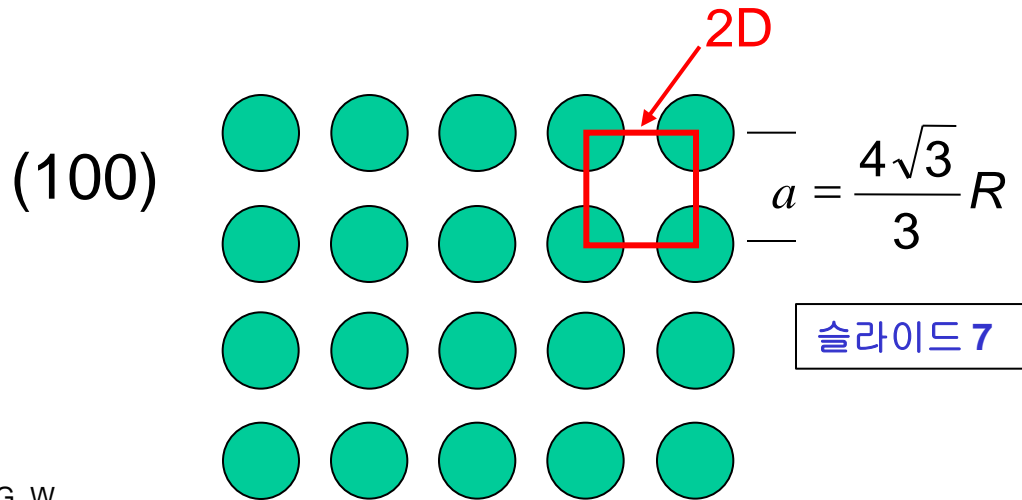
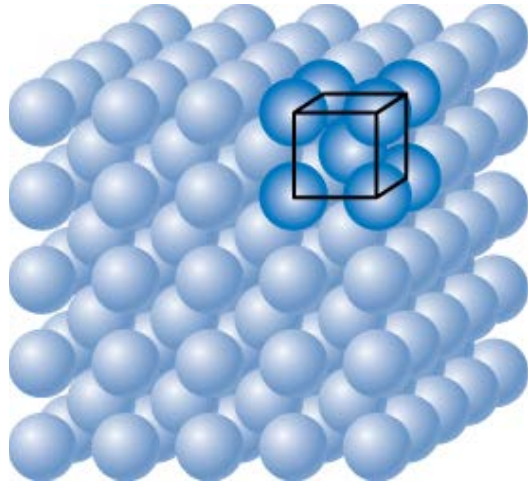
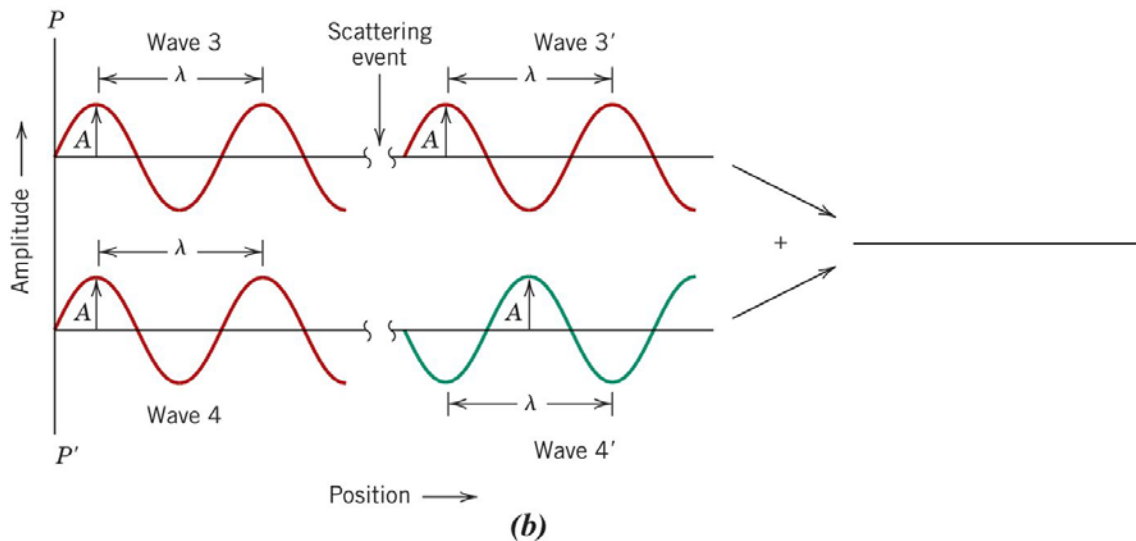
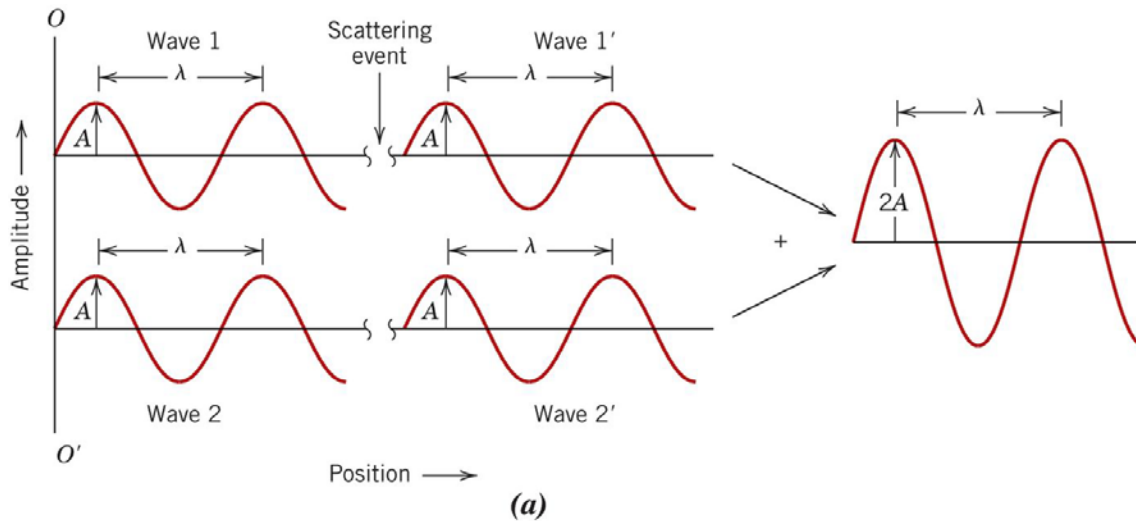


Fig. 4.2(c), Callister & Rethwisch 9e [from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.]

Fe의 원자 반경은 $R = 0.1241 \text{ nm}$

$$\begin{aligned}
 \text{면밀도} &= \frac{\text{원자수}}{\text{2D 면}} \div \frac{\text{2면의 면적}}{a^2} = \frac{1}{\left(\frac{4\sqrt{3}}{3} R\right)^2} = 12.1 \frac{\text{atoms}}{\text{nm}^2} = 1.2 \times 10^{19} \frac{\text{atoms}}{\text{m}^2}
 \end{aligned}$$

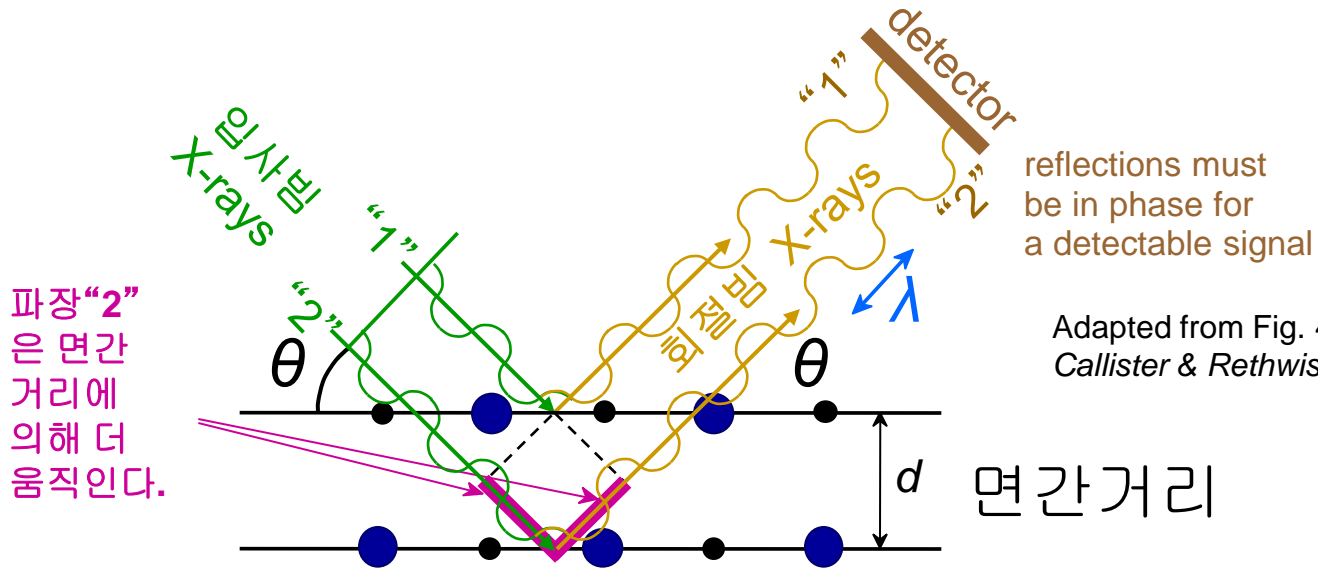
X선 회절 (X-Ray Diffraction)



- 고체 내의 원자나 분자의 배열을 분석하는 대표적인 방법
- 회절은 파장을 산란(Scattering event)시킬 수 있고, 간격이 파장과 비슷한 대상물이 규칙적으로 배열돼 있을 때 일어난다.
- 산란파동간의 위상관계는 경로의 차를 만든다.
- 경로의 차가 정수배일 때 위상차가 동일하고, 보강간섭이 일어나고 회절이라고 한다.
- 위상차가 다를 경우 소멸간섭이 일어남.

결정구조를 정하는 X-Rays

- 입사 X-선 빔은 결정면으로부터 **회절** 된다.



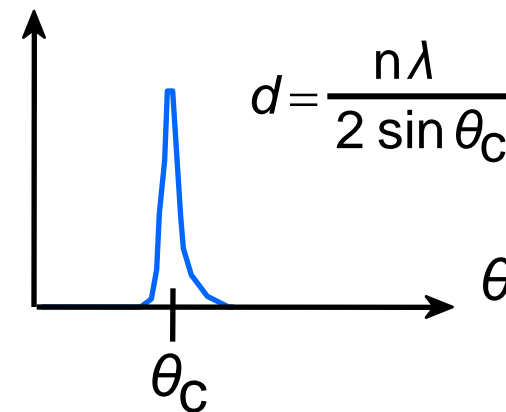
Adapted from Fig. 4.29, Callister & Rethwisch 9e.

입사각 θ_c 를 측정함으로써 면간 거리 d 를 계산할 수 있다.

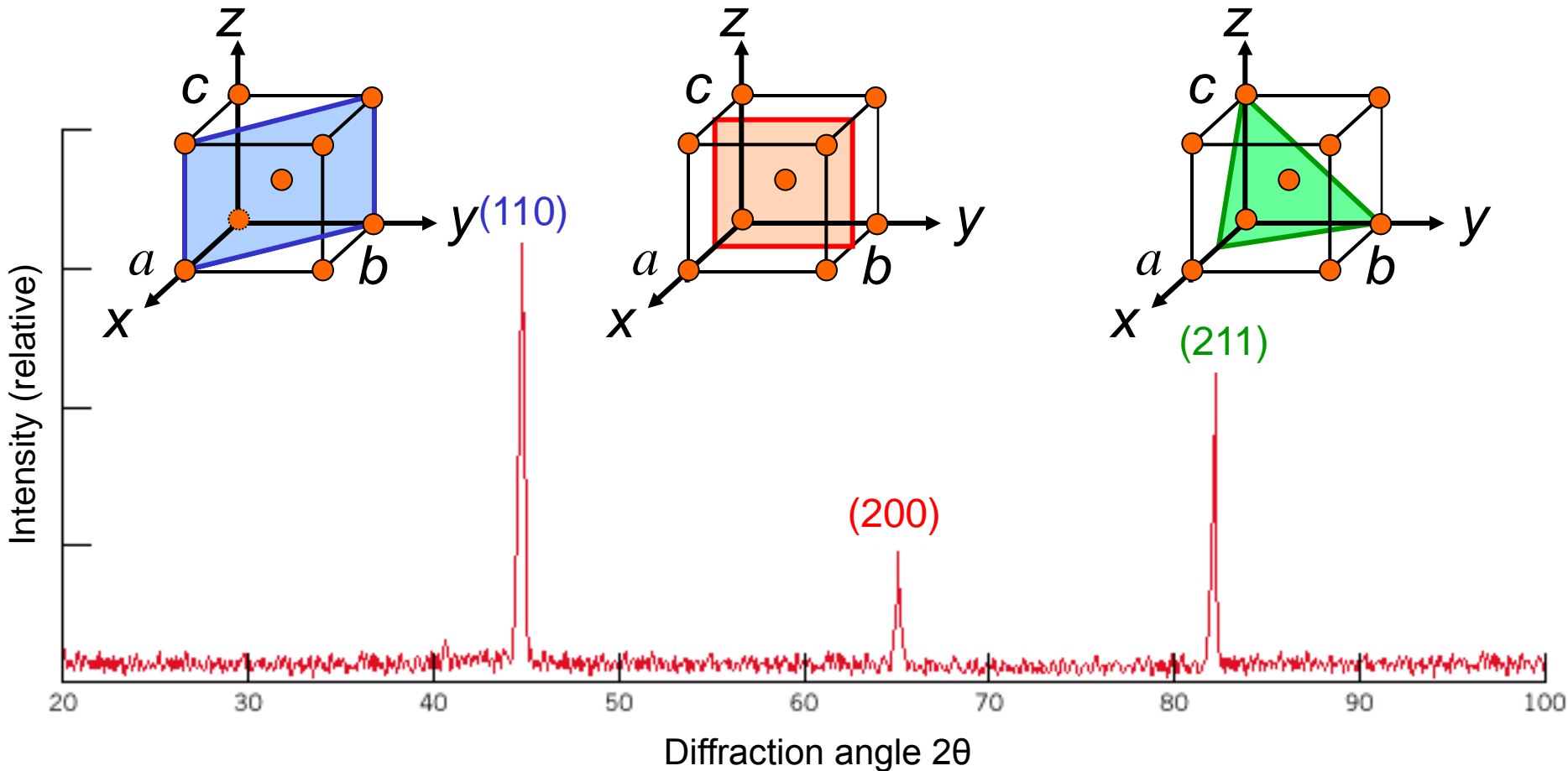
Bragg의 법칙

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

X-ray intensity (from detector)



X-Ray 회절패턴



Diffraction pattern for polycrystalline α -iron (BCC)

Adapted from Fig. 3.22, *Callister 8e*.

Summary

- 일반적인 금속의 결정구조는 FCC, BCC, HCP. FCC와 HCP의 경우 배위수와 원자 충전도는 동일하다..
- 원자량 (atomic weight), 원자 반지름(atomic radius), 결정구조(e.g., FCC, BCC, HCP)를 이용하여 결정의 이론적 밀도를 구할 수 있었다.
- 세라믹 결정 구조에 대해서 알아 보았다.
전기적 중성 과 양이온-음이온의 반지름 비
- 일부 물질은 하나 이상의 결정 구조를 가질 수 있다. 이것을 동질이상 (그리고 동소체)로 지칭한다.
- X 선 회절 은 결정 구조 및 격자면 간격 결정에 사용된다.