2024년도 1학기

신소재공학실험(1)

신기현 (조교: 도연우)

Phone : #1269

E-mail : kihyun@hanbat.ac.kr

Schedule

9	4월 30일	보고서/발표 작성 요령 + 이론	신기현
10	5월 7일	team01 (XRD Simulation)	도연우
11	5월 14일	team02 (XRD Simulation)	도연우
12	5월 21일	team03 (XRD Simulation)	도연우
13	5월 28일	team04 (XRD Simulation)	도연우
14	6월 4일	발표평가	신기현
15	6월 11일	기말고사	X

XRD Simulation : 도연우 조교님에게 문의 (20211522@edu.hanbat.ac.kr)

강의자료 및 상세내용들은 홈페이지 참고 (themad.hanbat.ac.kr)

Team

1. team01

   박준영, 박진우, 김민하, 문채원, 권준길, 금대호

2. team02

   천재호, 박종민, 김영재, 명승주, 김태훈, 김민아

3. team03

   정인성, 임태경, 주한울, 김지환, 유지희, 박시룡

4. team04

   오성연, 황규빈, 권도의, 윤소연, 전소희, 윤건영, 김현

Evaluation

1. 보고서는 개인 제출 - 6/18일 까지 (이후 제출 0점)
   - 조교님에게 PDF로 제출 (-5)
   - 양식 (양식은 홈페이지 참고) 미활용시 감점 (-5)
   - 팀원끼리는 토의만 진행 → 보고서 내용이 동일할 경우 모두 0점
   - 보고서의 포맷 및 퀄리티 (예쁘게 깔끔하게) 가 좋을 경우 가산점 (+5) 반대의 경우 (-5)
   - 보고서 표지 만들 것 (+5)
2. 발표는 팀별로 (10분 분량 준비) - 6/4일
   - 발표자에게는 가산점 (단, 발표내용을 적어서 읽을 경우 가산점 X) (+5)
   - 발표자료의 포맷 및 퀄리티 (예쁘게, 깔끔하게) 가 좋을 경우 가산점 (+5) 반대의 경우 (-5)
   - 발표태도가 뛰어나면 가산점 (+3)
   - 질문을 할 경우에 가산점 (+5)

Importance of Appearance

보기에 좋은 떡이 먹기도 좋다

빛 좋은 개살구

여우와 신 포도 (“저 포도는 어차피 신 포도일 거야”)

뚝배기 보다 장맛이 좋다

Importance of Appearance

보기에 좋은 떡이 먹기도 좋다

빛 좋은 개살구
(먹어봐야 안다)

여우와 신 포도 (“저 포도는 어차피 신 포도일 거야”)

뚝배기 보다 장맛이 좋다
(먹어봐야 안다)

Fundamentals of XRD

X선 회절 = XRD (X-ray Diffraction)

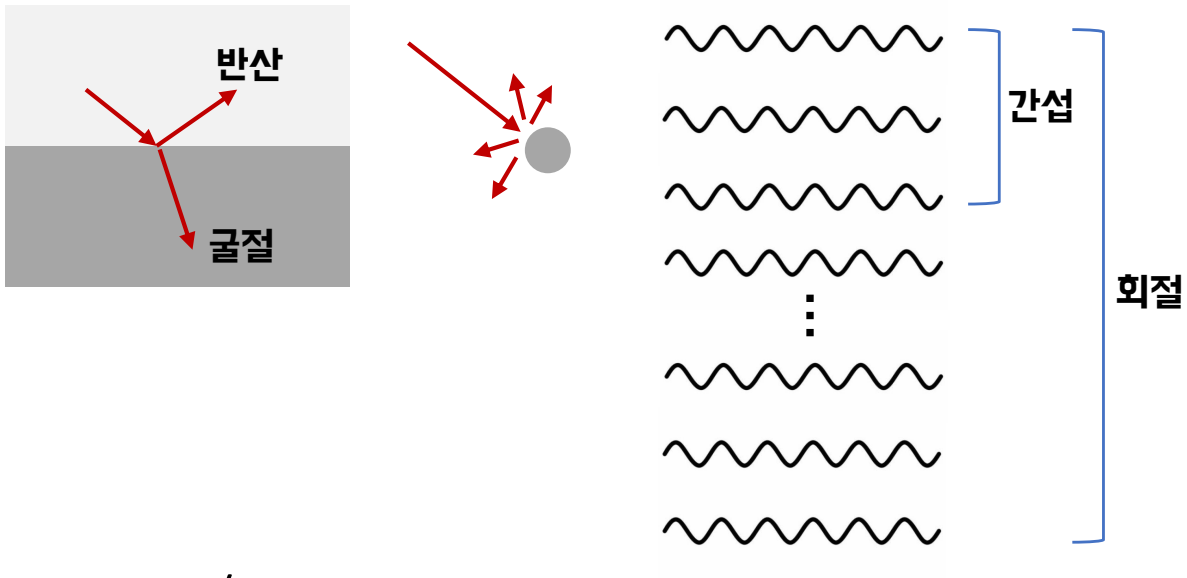
X-ray wavelength : 0.01 ~ 10 nm

Scale of atom : 1 Å = 0.1 nm

CuKα = 1.5406 Å

빛

반사, 굴절, ‘산란’, ‘회절’, 간섭



Bragg's Law

- Diffraction (회절)
  - 파동이 좁은 틈을 지날 때 진행 경로가 퍼져 나가는 현상
  - 상쇄/보강간섭에 의해 회절무늬가 나타난다.

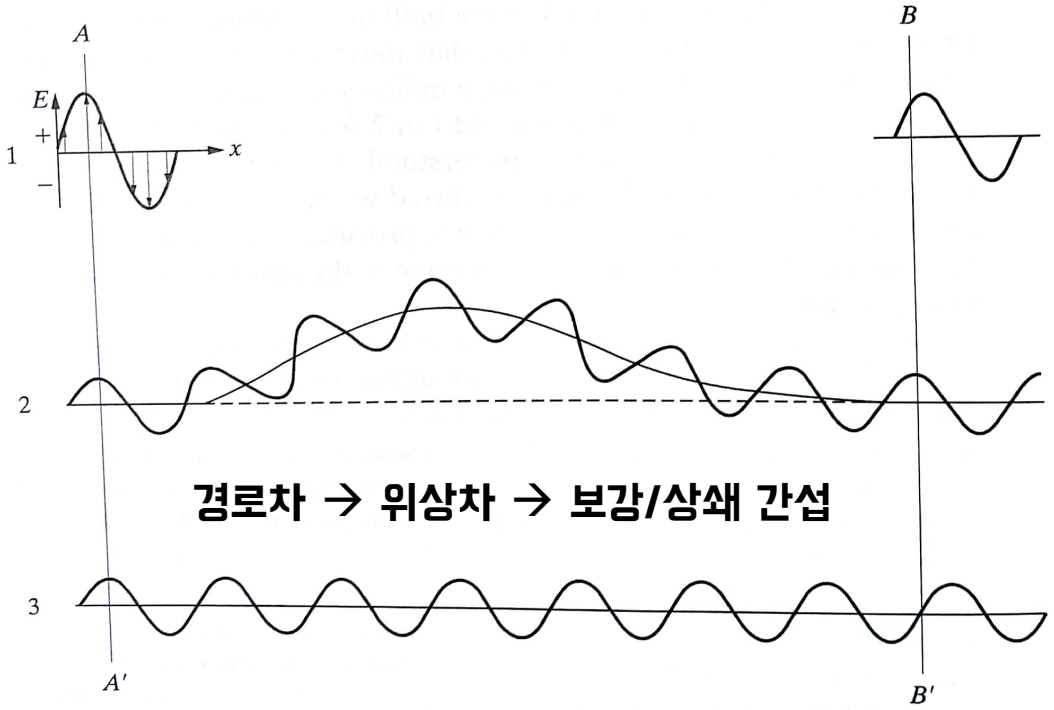
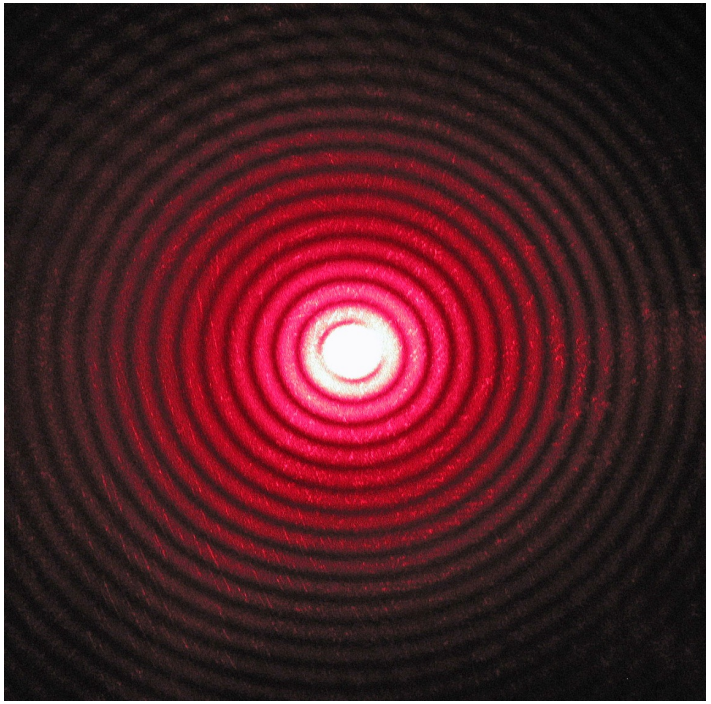
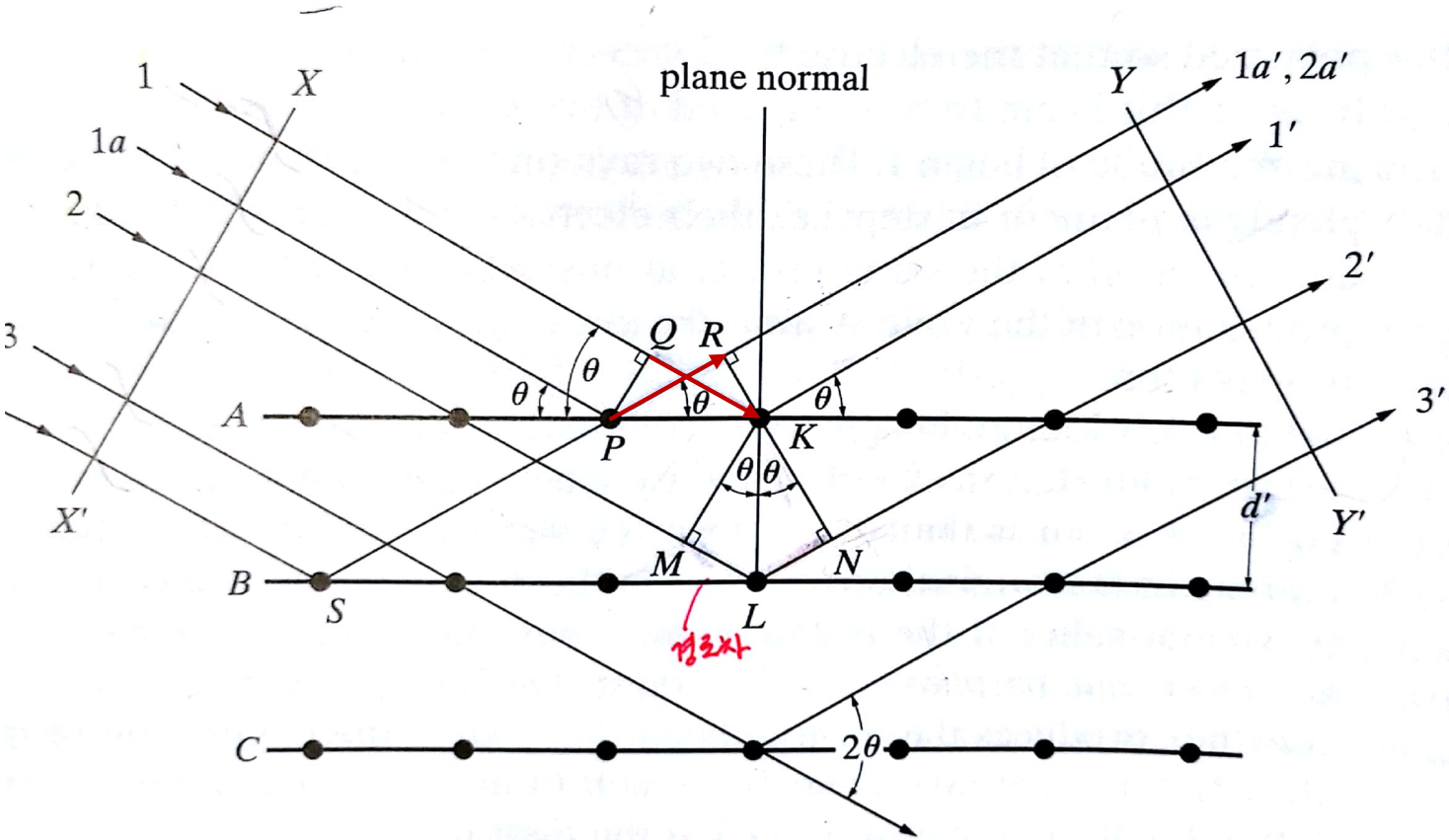


Figure 3-1 Effect of path difference on relative phase.

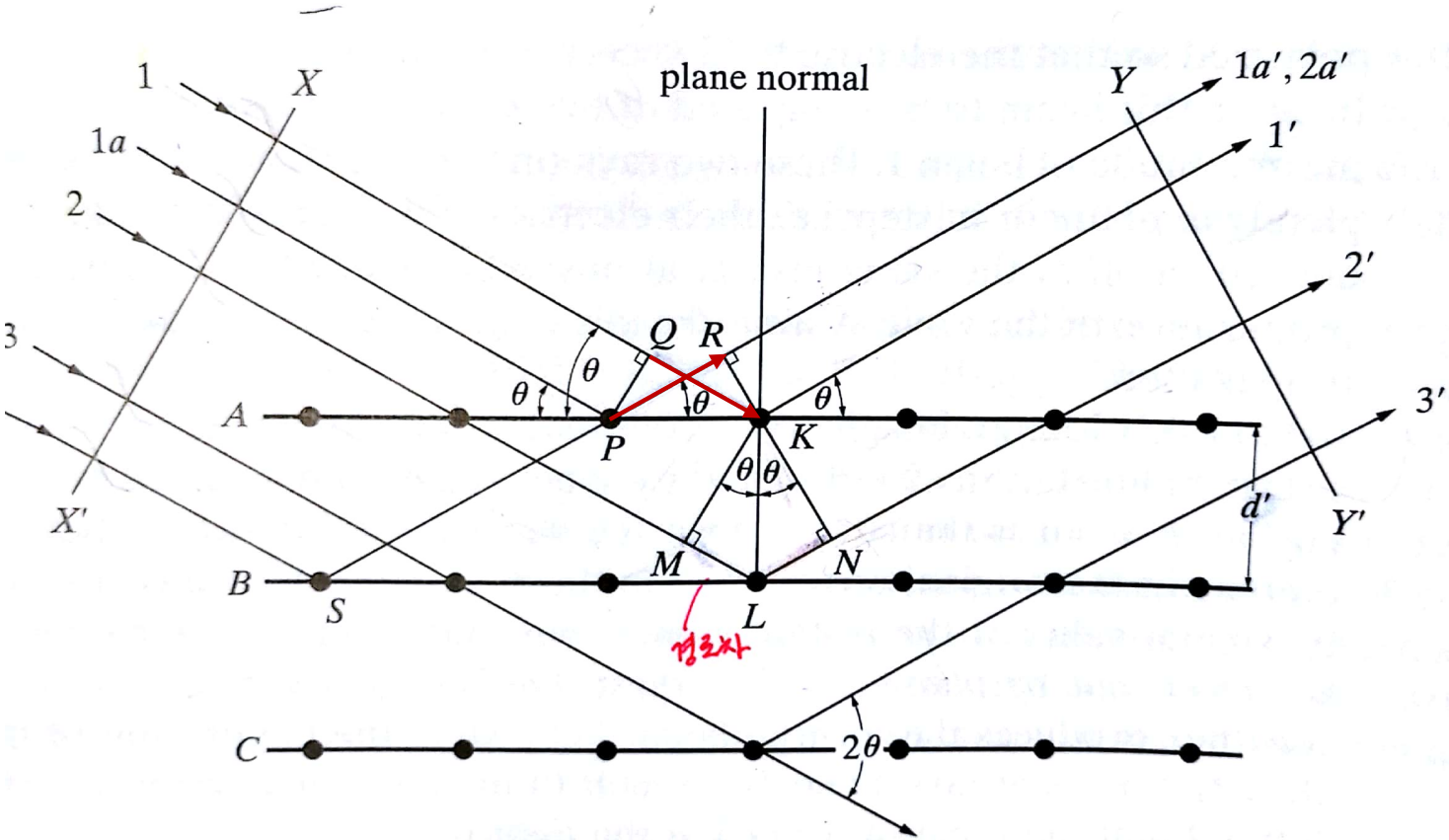


Bragg's Law



조건 : 면간거리 d' 의 결정, 파장 λ 의 X-ray 가 θ 각으로 조사되었을 때

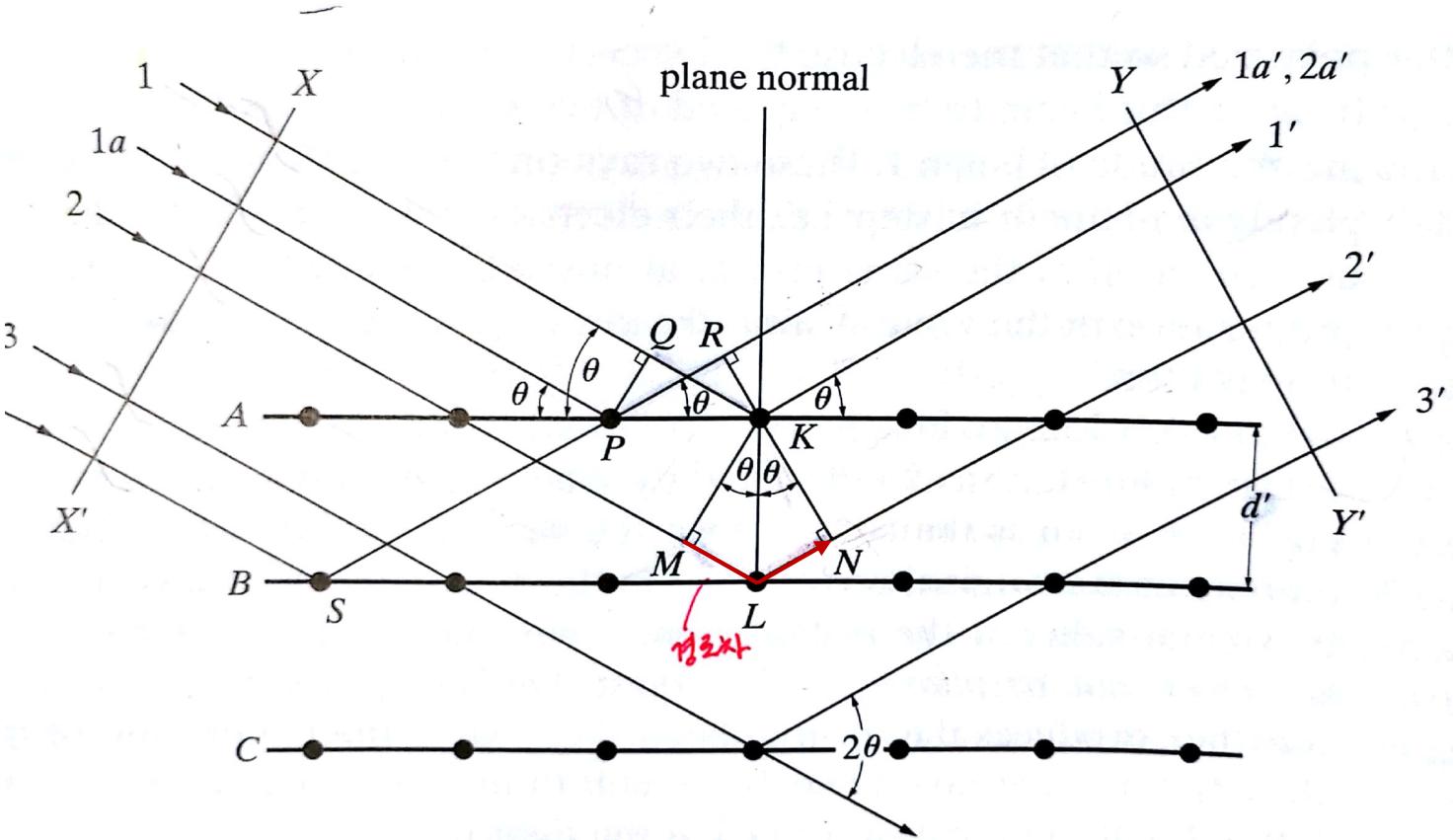
Bragg's Law



1. 같은 면에서 입사각과 산란각이 같을 때 회절 (1-1', 1a-1a'의 경우)

$QK - PR$ (경로차) $= PKcos\theta - PKcos\theta = 0$ → **경로 차가 없다. in phase**

Bragg's Law



2. 서로 다른 면에서는 경로 차가 = 파장의 정수 배 일 때 → 회절 (1-1', 2-2'의 경우)

$$LM + LN(\text{경로차}) = d'sin\theta + d'sin\theta = n\lambda$$

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

n **: order of diffraction →** **1st order 사용**

Diffraction Direction

결정격자별 (hkl) 면의 peak 의 위치 (θ)

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)}{a^2} \qquad \lambda = 2dsin\theta$$

$$sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$$

PLANE SPACINGS

The value of d, the distance between adjacent planes in the set (hkl), may be found from the following equations.

Cubic:
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Tetragonal:
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Hexagonal:
$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2}$$

Rhombohedral:
$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)\sin^2\alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2\alpha - \cos\alpha)}{a^2(1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha)}$$

Orthorhombic:
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Monoclinic:
$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2\sin^2\beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl\cos\beta}{ac}\right)$$

Triclinic:
$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2}(S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl)$$

In the equation for triclinic crystals,

V = volume of unit cell (see below),

$S_{11} = b^2c^2\sin^2\alpha$,

$S_{22} = a^2c^2\sin^2\beta$,

$S_{33} = a^2b^2\sin^2\gamma$,

$S_{12} = abc^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma)$,

$S_{23} = a^2bc(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha)$,

$S_{13} = ab^2c(\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta)$.

Intensity of Diffraction

Structure factor : 결정내 원자들에 의해 scattering 된 beam의 intensity

$$F_{hkl} = \sum_{1}^{N} f_n e^{2\pi i(hu_n + kv_n + lw_n)}$$

hkl 면에서의 uvw 위치의 원자들에 의한 scattering beam의 강도

f_n : atomic scattering factor (원자별로 다름)

Atomic Scattering Factors

$\frac{\sin\theta}{\lambda}$ (Å^{-1})	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2
H	1	0.81	0.48	0.25	0.13	0.07	0.04	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00	
He	2	1.88	1.46	1.05	0.75	0.52	0.35	0.24	0.18	0.14	0.11	0.09	
Li^+	2	1.96	1.8	1.5	1.3	1.0	0.8	0.6	0.5	0.4	0.3	0.3	
Li	3	2.2	1.8	1.5	1.3	1.0	0.8	0.6	0.5	0.4	0.3	0.3	
Be^{+2}	2	2.0	1.9	1.7	1.6	1.4	1.2	1.0	0.9	0.7	0.6	0.5	
Be	4	2.9	1.9	1.7	1.6	1.4	1.2	1.0	0.9	0.7	0.6	0.5	
B^{+3}	2	1.99	1.9	1.8	1.7	1.6	1.4	1.3	1.2	1.0	0.9	0.7	
B	5	3.5	2.4	1.9	1.7	1.5	1.4	1.2	1.2	1.0	0.9	0.7	
C	6	4.6	3.0	2.2	1.9	1.7	1.6	1.4	1.3	1.16	1.0	0.9	
N^{+5}	2	2.0	2.0	1.9	1.9	1.8	1.7	1.6	1.5	1.4	1.3	1.16	
N^{+3}	4	3.7	3.0	2.4	2.0	1.8	1.66	1.56	1.49	1.39	1.28	1.17	
N	7	5.8	4.2	3.0	2.3	1.9	1.65	1.54	1.49	1.39	1.29	1.17	
O	8	7.1	5.3	3.9	2.9	2.2	1.8	1.6	1.5	1.4	1.35	1.26	
O^{-2}	10	8.0	5.5	3.8	2.7	2.1	1.8	1.5	1.5	1.4	1.35	1.26	
F	9	7.8	6.2	4.45	3.35	2.65	2.15	1.9	1.7	1.6	1.5	1.35	
F^-	10	8.7	6.7	4.8	3.5	2.8	2.2	1.9	1.7	1.55	1.5	1.35	
Ne	10	9.3	7.5	5.8	4.4	3.4	2.65	2.2	1.9	1.65	1.55	1.5	
Na^+	10	9.5	8.2	6.7	5.25	4.05	3.2	2.65	2.25	1.95	1.75	1.6	
Na	11	9.65	8.2	6.7	5.25	4.05	3.2	2.65	2.25	1.95	1.75	1.6	
Mg^{+2}	10	9.75	8.6	7.25	5.95	4.8	3.85	3.15	2.55	2.2	2.0	1.8	
Mg	12	10.5	8.6	7.25	5.95	4.8	3.85	3.15	2.55	2.2	2.0	1.8	
Al^{+3}	10	9.7	8.9	7.8	6.65	5.5	4.45	3.65	3.1	2.65	2.3	2.0	
Al	13	11.0	8.95	7.75	6.6	5.5	4.5	3.7	3.1	2.65	2.3	2.0	
Si^{+4}	10	9.75	9.15	8.25	7.15	6.05	5.05	4.2	3.4	2.95	2.6	2.3	
Si	14	11.35	9.4	8.2	7.15	6.1	5.1	4.2	3.4	2.95	2.6	2.3	
P^{+5}	10	9.8	9.25	8.45	7.5	6.55	5.65	4.8	4.05	3.4	3.0	2.6	
P	15	12.4	10.0	8.45	7.45	6.5	5.65	4.8	4.05	3.4	3.0	2.6	
P^{-3}	18	12.7	9.8	8.4	7.45	6.5	5.65	4.85	4.05	3.4	3.0	2.6	
S^{+6}	10	9.85	9.4	8.7	7.85	6.85	6.05	5.25	4.5	3.9	3.35	2.9	
S	16	13.6	10.7	8.95	7.85	6.85	6.0	5.25	4.5	3.9	3.35	2.9	
S^{-2}	18	14.3	10.7	8.9	7.85	6.85	6.0	5.25	4.5	3.9	3.35	2.9	
Cl	17	14.6	11.3	9.25	8.05	7.25	6.5	5.75	5.05	4.4	3.85	3.35	
Cl^-	18	15.2	11.5	9.3	8.05	7.25	6.5	5.75	5.05	4.4	3.85	3.35	
A	18	15.9	12.6	10.4	8.7	7.8	7.0	6.2	5.4	4.7	4.1	3.6	
K^+	18	16.5	13.3	10.8	8.85	7.75	7.05	6.44	5.9	5.3	4.8	4.2	
K	19	16.5	13.3	10.8	9.2	7.9	6.7	5.9	5.2	4.6	4.2	3.7	3.3
Ca^{+2}	18	16.8	14.0	11.5	9.3	8.1	7.35	6.7	6.2	5.7	5.1	4.6	
Ca	20	17.5	14.1	11.4	9.7	8.4	7.3	6.3	5.6	4.9	4.5	4.0	3.6
Sc^{+3}	18	16.7	14.0	11.4	9.4	8.3	7.6	6.9	6.4	5.8	5.35	4.85	
Sc	21	18.4	14.9	12.1	10.3	8.9	7.7	6.7	5.9	5.3	4.7	4.3	3.9
Ti^{+4}	18	17.0	14.4	11.9	9.9	8.5	7.85	7.3	6.7	6.15	5.65	5.05	
Ti	22	19.3	15.7	12.8	10.9	9.5	8.2	7.2	6.3	5.6	5.0	4.6	4.2
V	23	20.2	16.6	13.5	11.5	10.1	8.7	7.6	6.7	5.9	5.3	4.9	4.4
Cr	24	21.1	17.4	14.2	12.1	10.6	9.2	8.0	7.1	6.3	5.7	5.1	4.6
Mn	25	22.1	18.2	14.9	12.7	11.1	9.7	8.4	7.5	6.6	6.0	5.4	4.9

Intensity of Diffraction

$$F_{hkl} = \sum_{1}^{N} f_n e^{2\pi i(hu_n + kv_n + lw_n)}$$

SC : 원자위치 (0.0.0)

$F_{hkl} = f e^{2\pi i(0)} = f$ → **모든 면**

BCC : 원자위치 (0.0.0), (1/2.1/2.1/2)

$$F_{hkl} = f e^{2\pi i(0)} + f e^{2\pi i(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+\frac{l}{2})} = f[1 + e^{\pi i(h+k+l)}]$$

$$e^{\pi i(h+k+l)} = \cos\pi(h+k+l) + i\sin\pi(h+k+l)$$

$h + k + l$ = **짝수** → $2f$

$h + k + l$ = **홀수** → 0 → **No diffraction**

Intensity of Diffraction

$$F_{hkl} = \sum_{1}^{N} f_n e^{2\pi i(hu_n + kv_n + lw_n)}$$

FCC : 원자위치 (0,0,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2), (1/2,1/2,0)

$$F_{hkl} = f[1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)}]$$

$h + k + l$ = **unmixed (모두 홀수/모두 짝수)** → $4f$

$h + k + l$ = **mixed** → 0 → **No diffraction**

Determination of Crystal Structure

Crystal Structure	Diffraction Pattern
Unit Cell	Line Position
Atom Position	Line Intensity
Kind of Atom	Line relative intensity

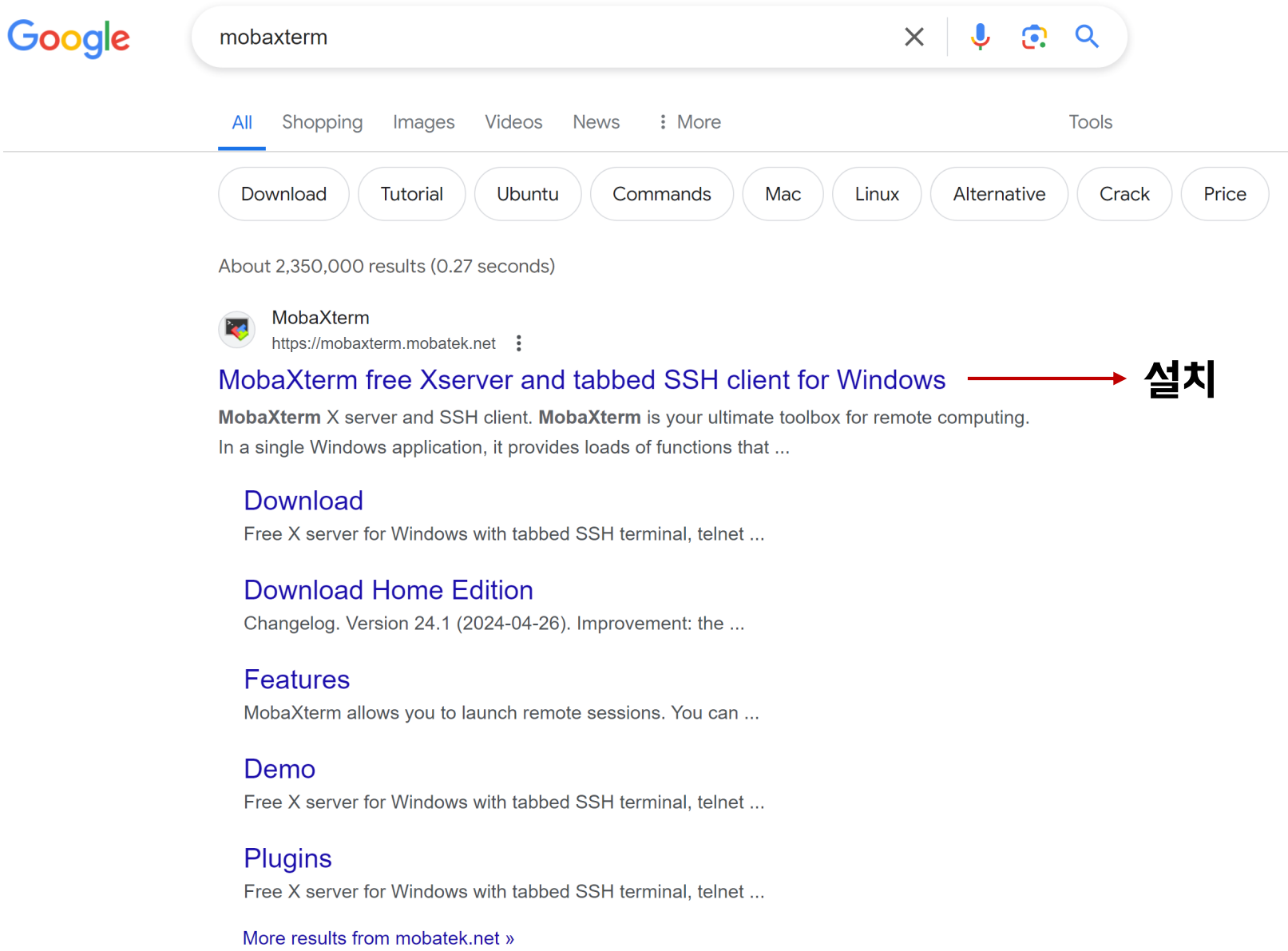
$$sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$$

Peak position by crystal structure

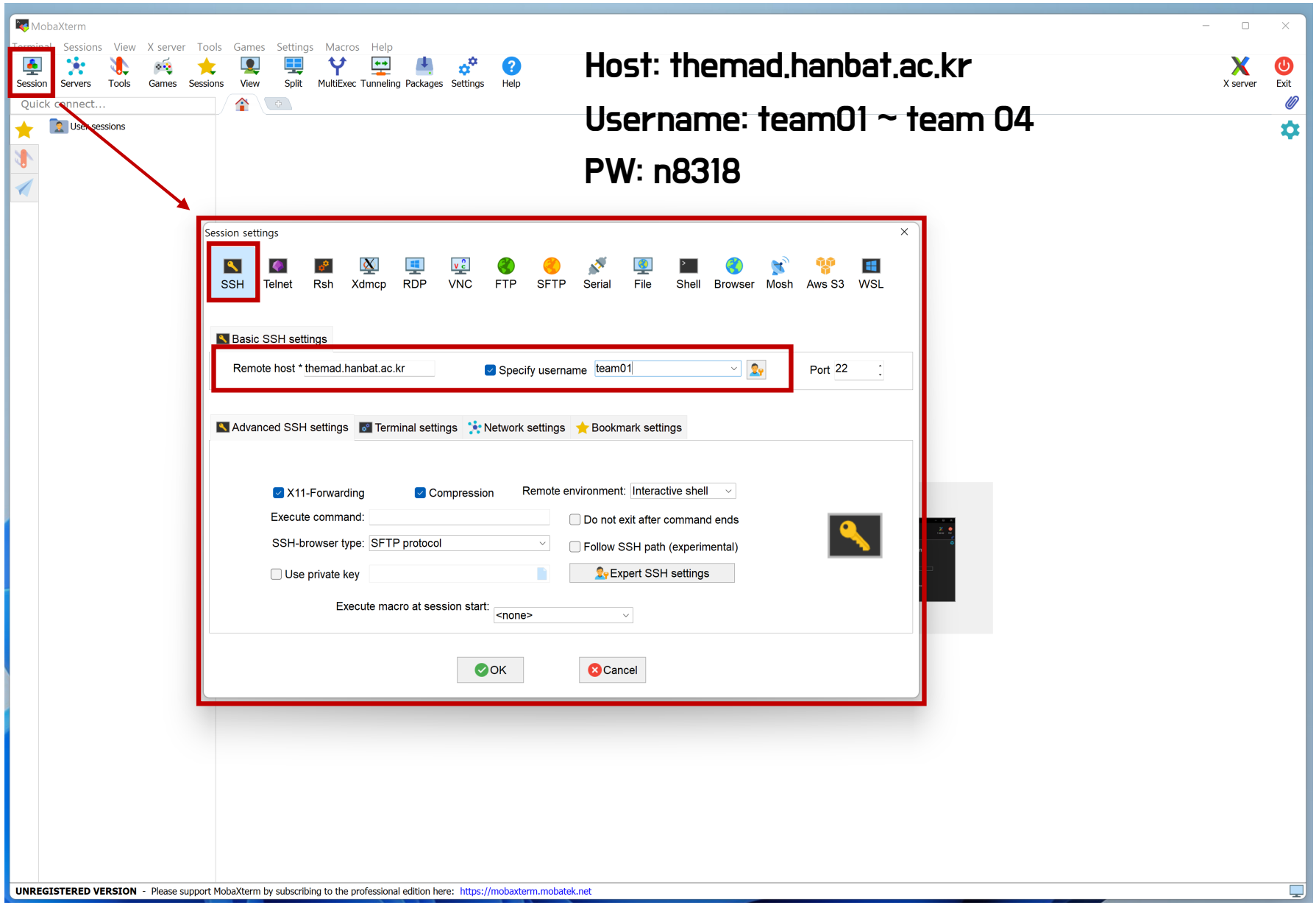
$$F_{hkl} = \sum_{1}^{N} f_n e^{2\pi i(hu_n + kV_n + lW_n)}$$

Peak intensity by atomic position in unit cell

Connecting Server



Connecting Server

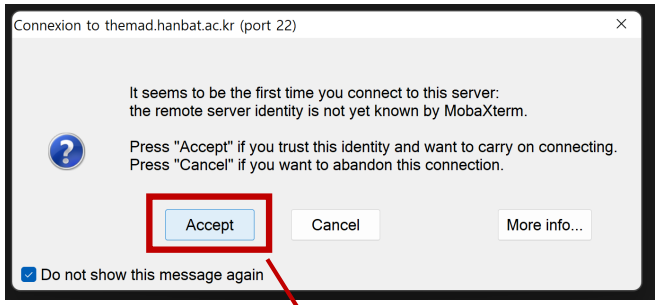


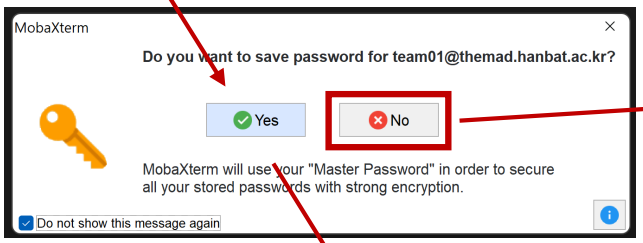
Host: themad.hanbat.ac.kr

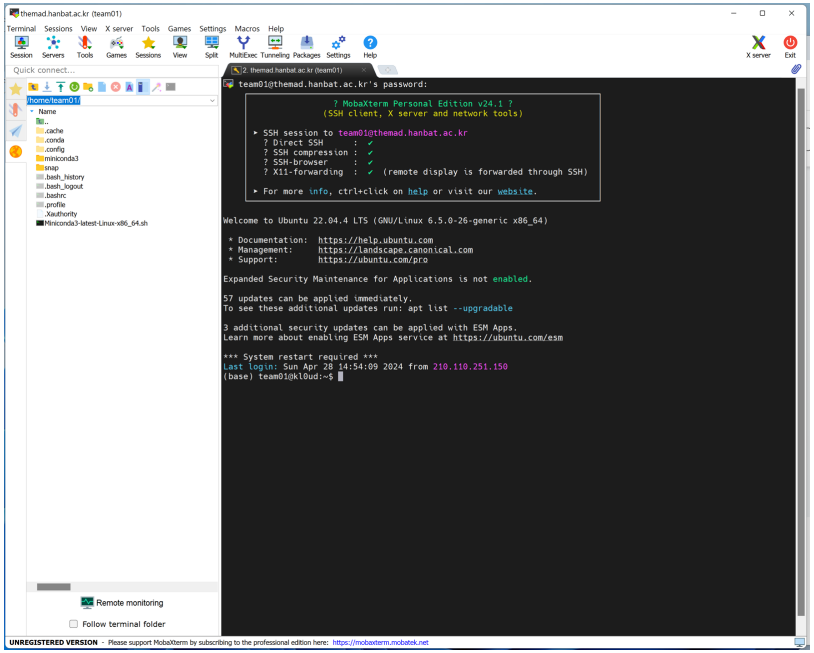
Username: team01 ~ team 04

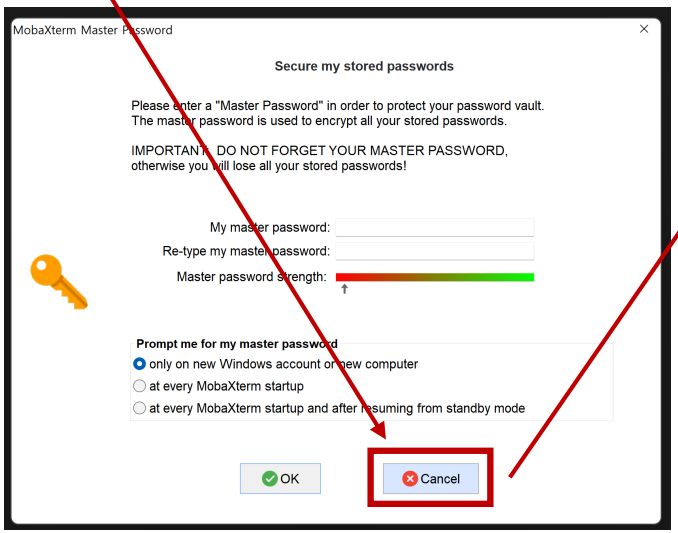
PW: n8318

Connecting Server

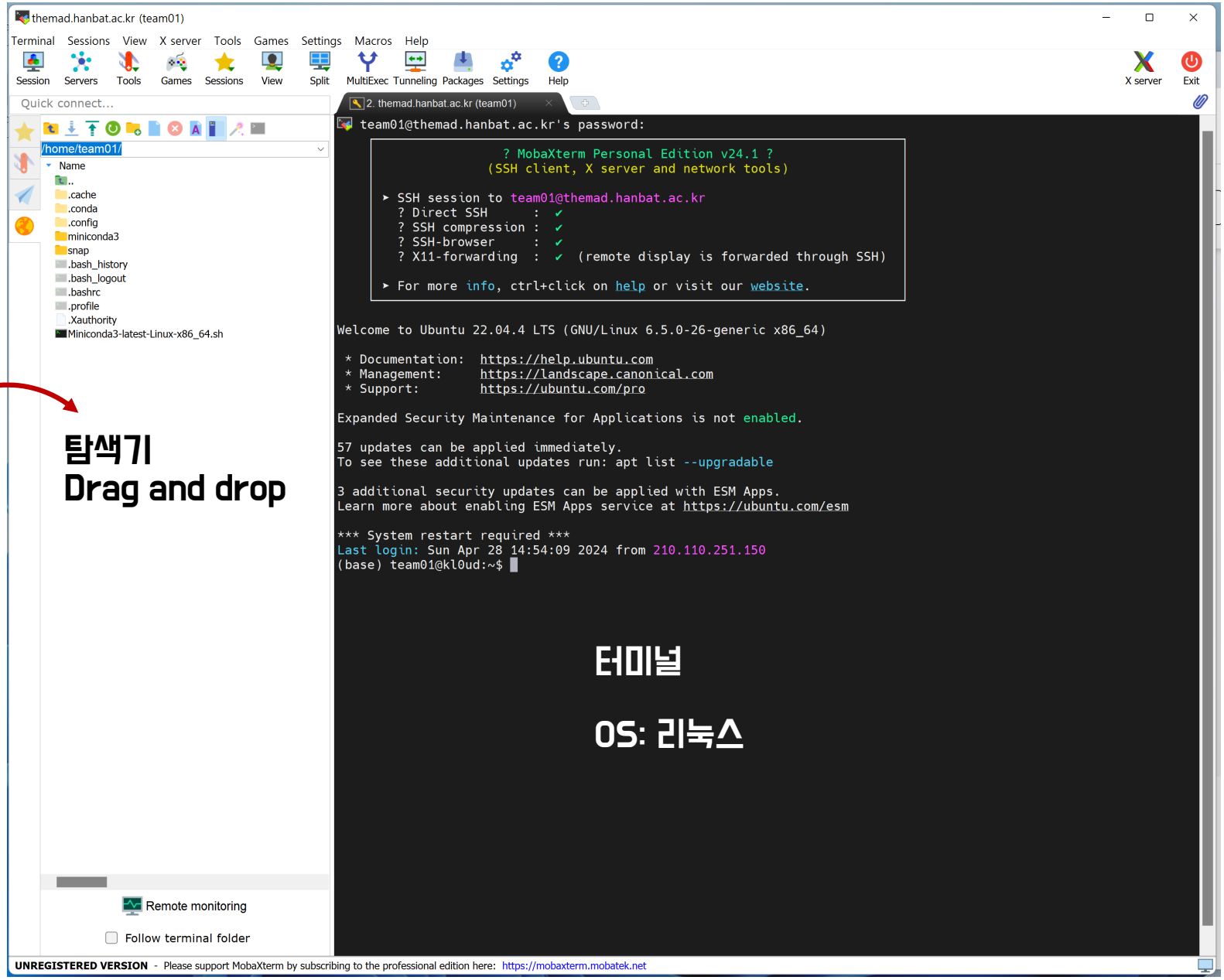








Connecting Server



Linux Command

- / : means directories
- ./ : present directories
- ../ : previous (one above) directories
- ~/ : home directories

- Linux doesn't allow 'space' (띄어쓰기 X)
- 영어이름이 기본
- Try to use 'tap' all the time (자동완성)
- 윗 화살표 (↑) : 직전사용한 명령어

- pwd = present working directory (현재위치)

- ls = list = showing the files and directories
  - ls (./)
  - ls ../
  - ls (./)name_of_directory/

- mkdir = make directory
  - mkdir (./)name_of_directory
  - mkdir ../name_of_directory
  - mkdir ../../name_of_directory

- cd = change directory
  - cd name_of_directory
  - cd ~/something/something/something/name_of_directory

기본적으로

'[명령어] [주소]/[타겟]' 의 형태
ex) cd ./test
ex) cd ~/something/something/test
ex) mkdir test
ex) mkdir ./test
ex) mkdir ~/something/something/test
ex) cp ~/d/d/d/text ~/d/e/f/g

Linux Command

- rmdir = remove directory (**only empty directory**)
  - rmdir name_of_directory
  - rmdir ../name_of_directory

- rm = remove files (**only files**)
  - rm name_of_files
  - **rm –rf name_of_directory_or_files : enforce the command**

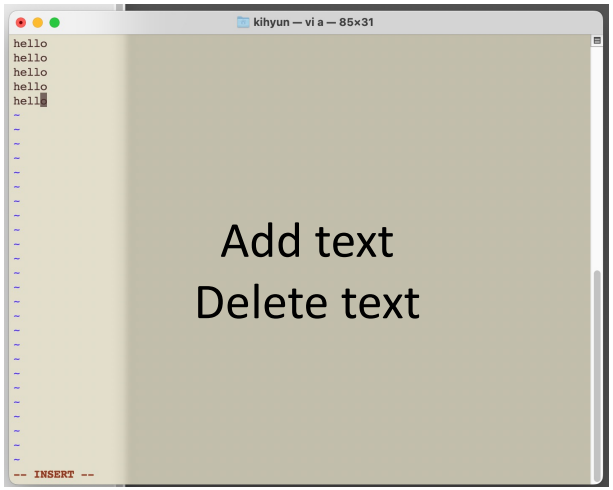
- cp = copy files (or directory) to other directory
  - cp name_of_files ../name_of_directory
  - cp test.txt example.txt : **복붙 이면서 파일이름 변경**
  - cp ../name_of_files ./name_of_directory

- mv = move files(or directory) to other directory **(오려두기 – 붙이기)**
  - Same as cp

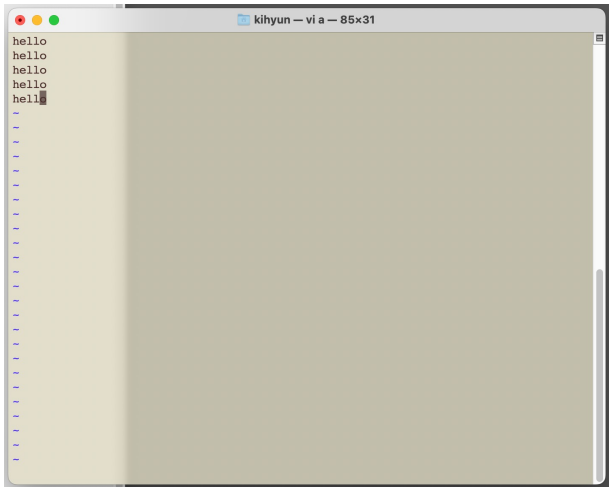
Linux Command

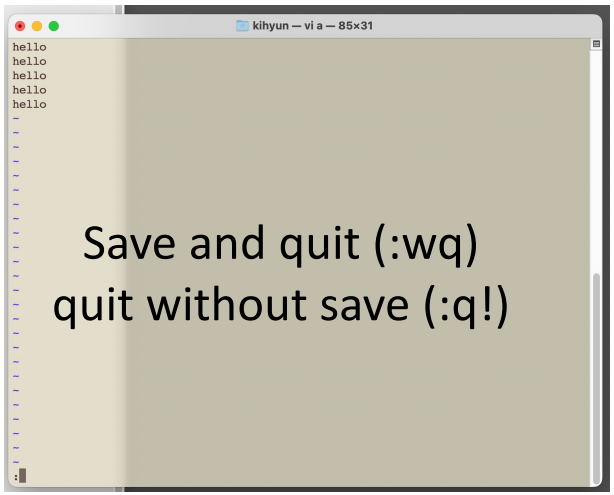
- vi editor = text editor
- vi = viewer
- Basic command : vi textfile
- If there is no file, will make file (열 파일이 없으면 생성)
- If there is file, will open file (열 파일이 있으면 오픈)

Insert mode ⇄ (esc / i (insert)) Command mode ⇄ (2*esc / : (colon)) ex-command mode



Add text
Delete text



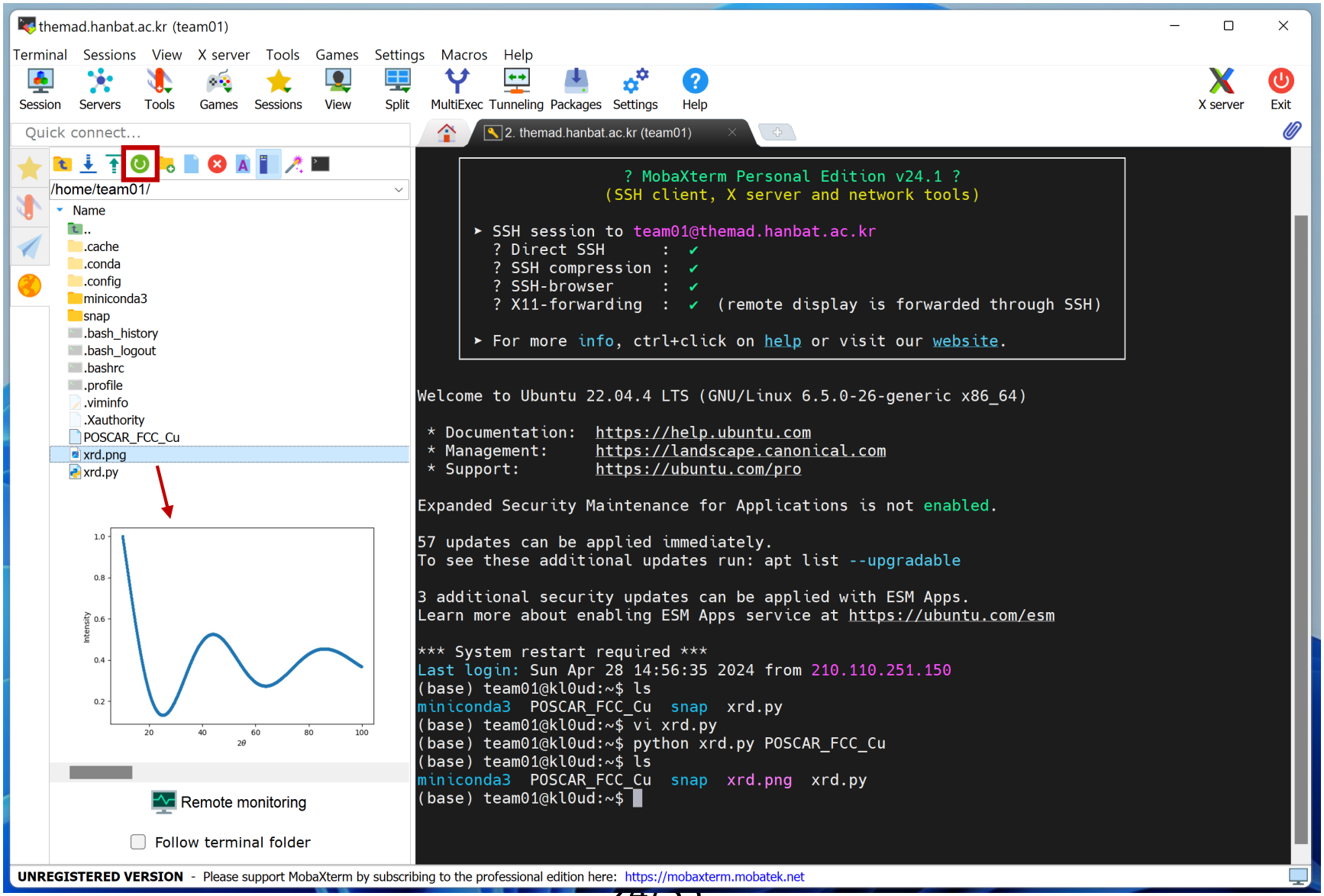


Save and quit (:wq)
quit without save (:q!)

Three different modes

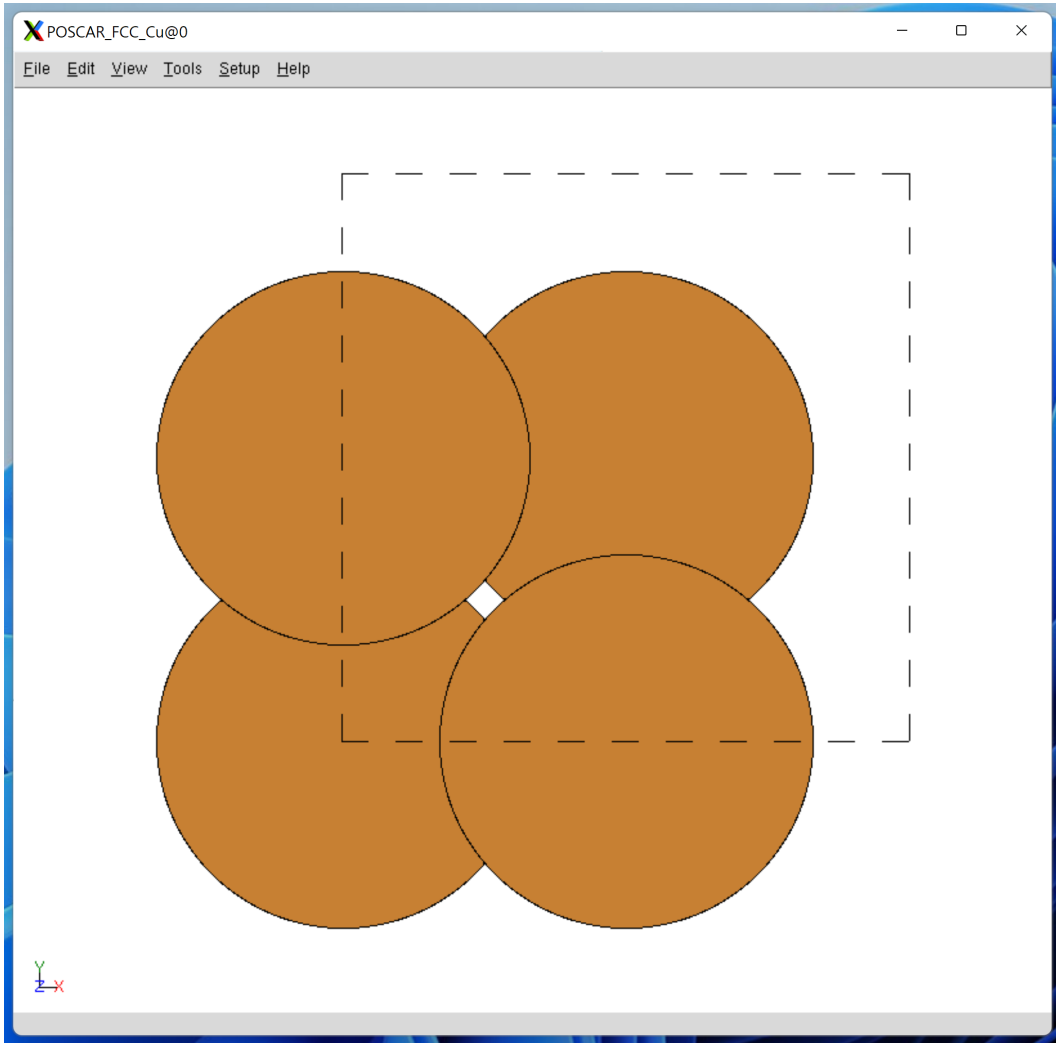
XRD Simulation

python xrd.py POSCAR_FCC_Cu



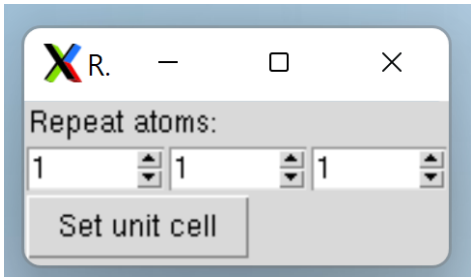
XRD Simulation

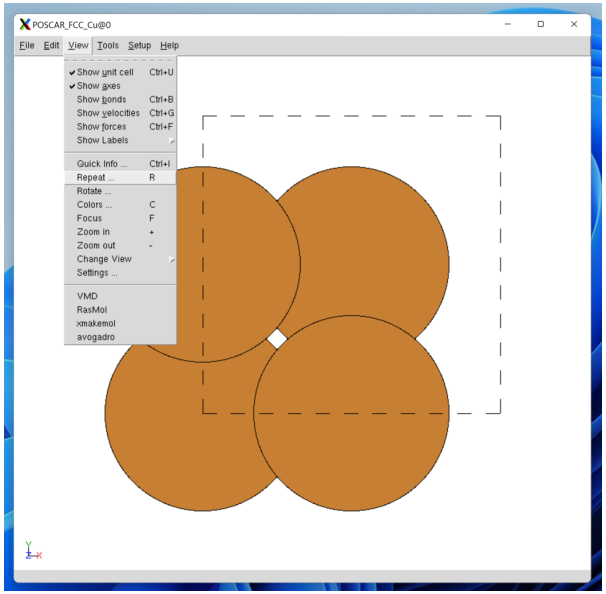
ase gui POSCAR_FCC_Cu



XRD Simulation

ase gui POSCAR_FCC_Cu

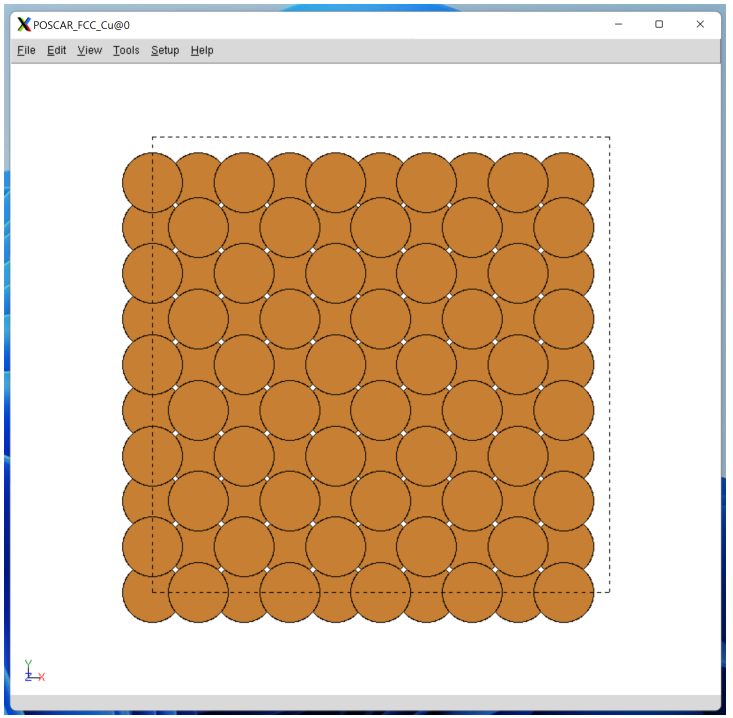




숫자 키우고
(5,5,5)

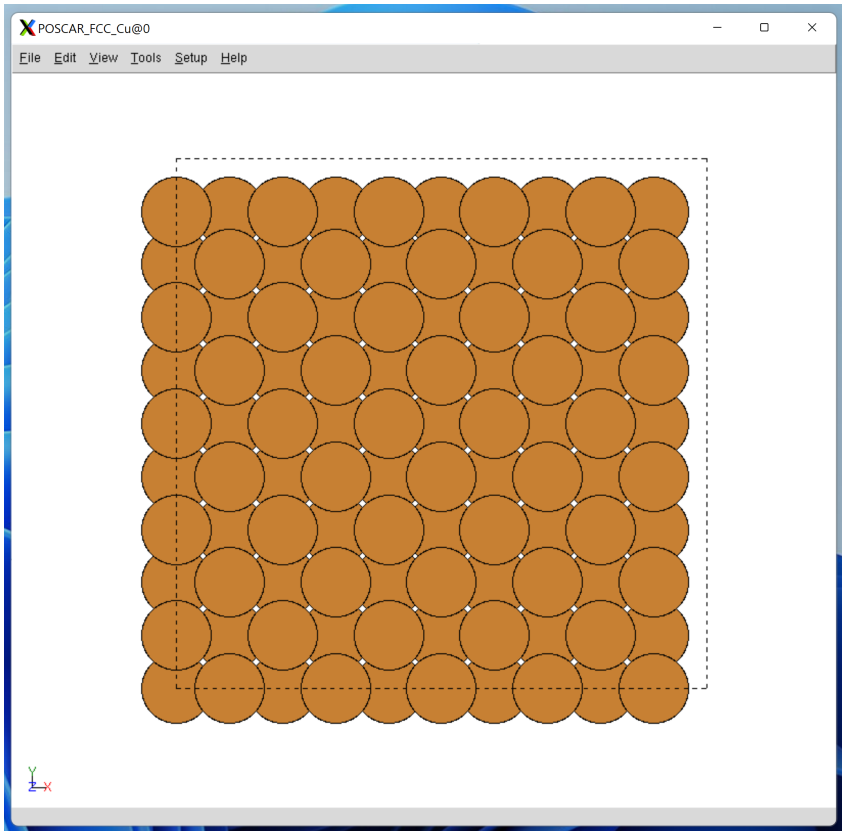
Set unit cell

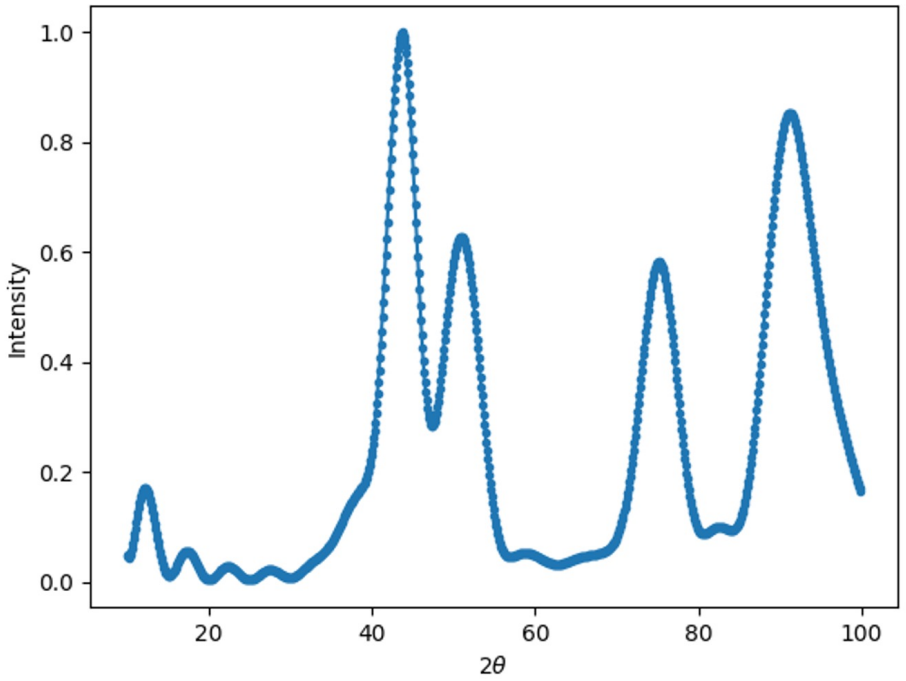
다른이름으로 저장
(POSCAR_big)



XRD Simulation

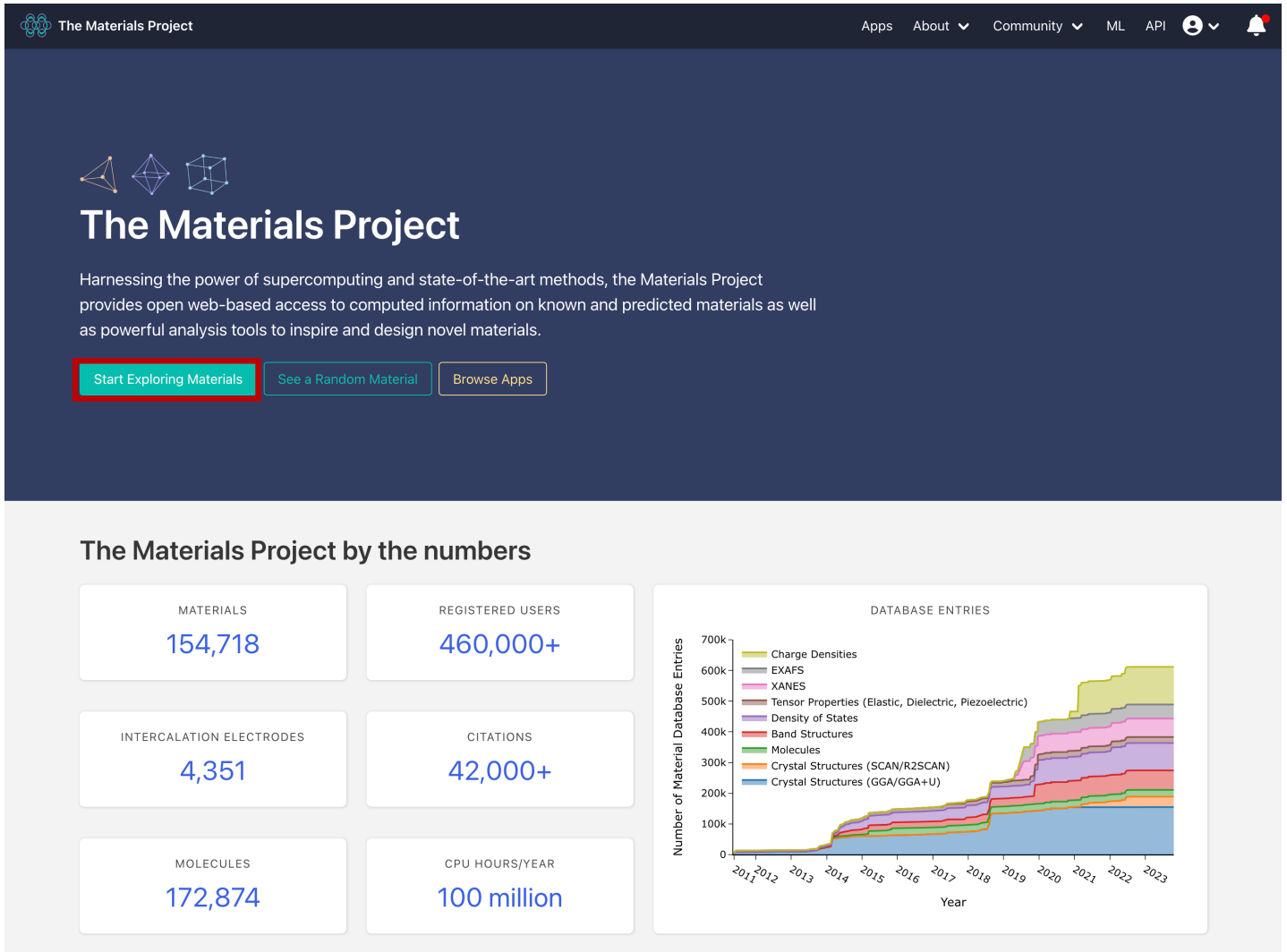
python xrd.py POSCAR_big



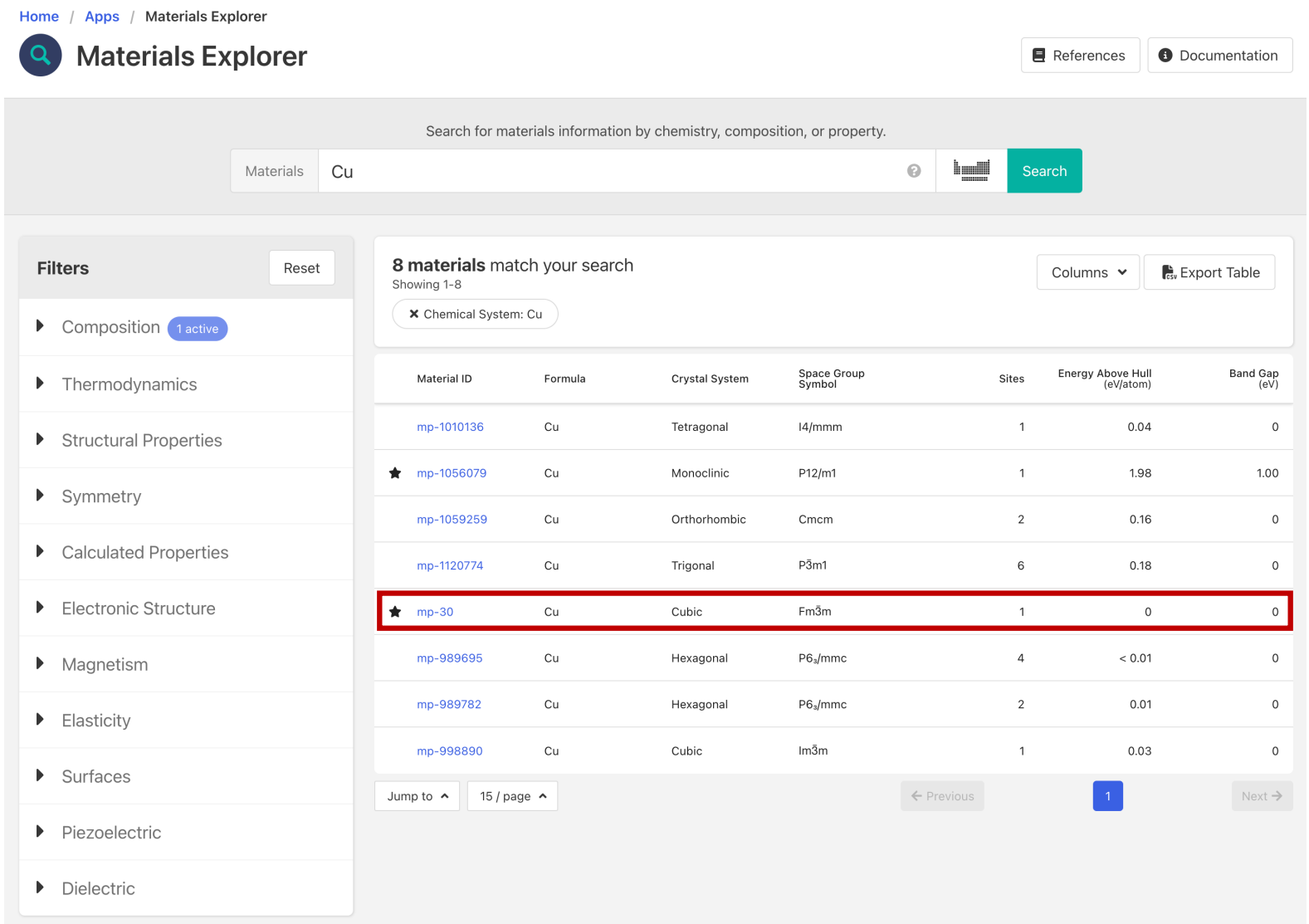


How to get POSCAR file

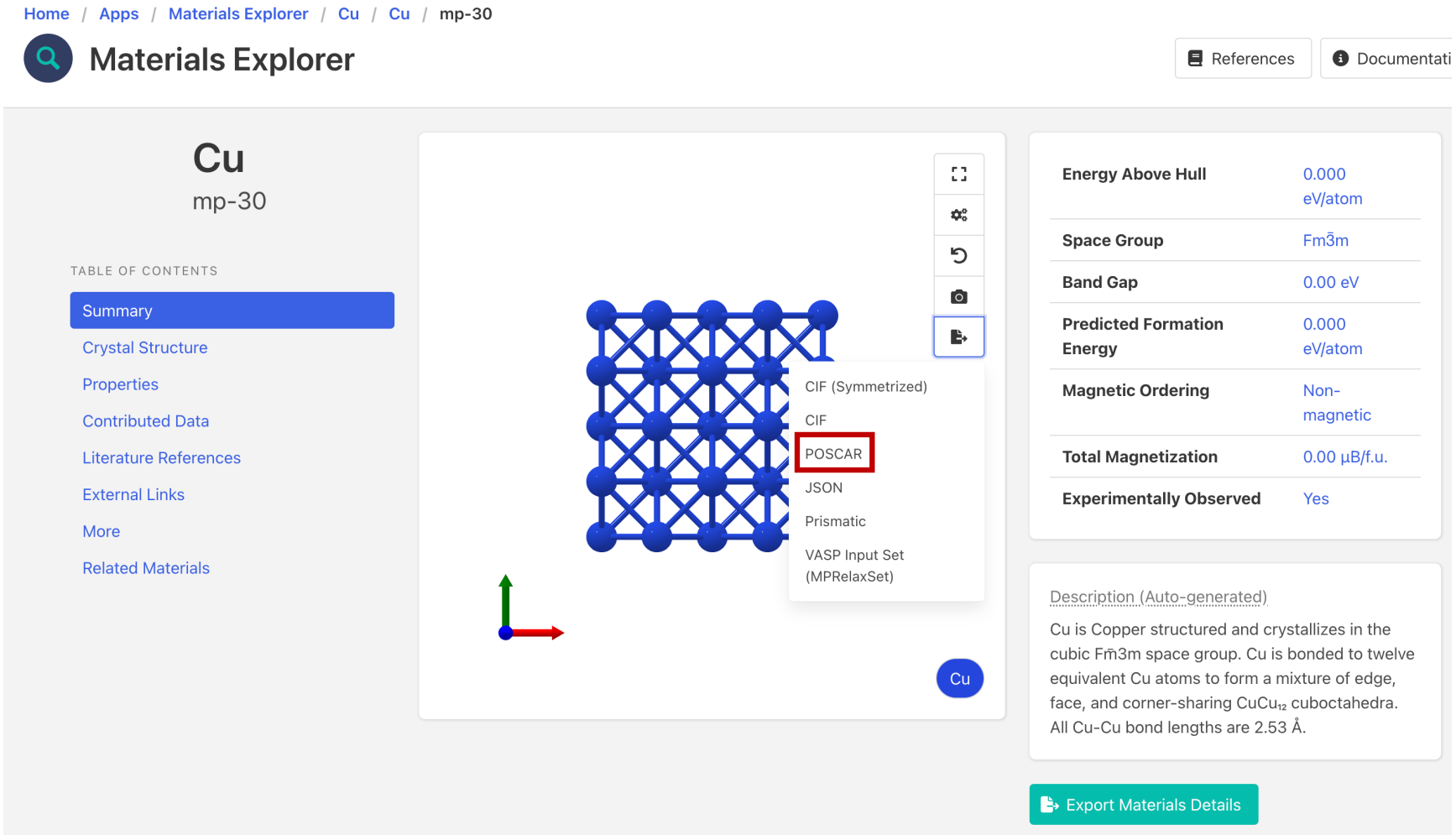
Need to register (next-gen.materialsproject.org)



How to get POSCAR file



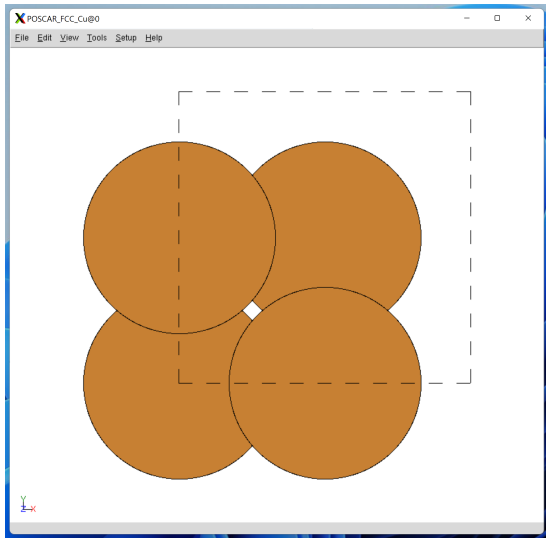
How to get POSCAR file



POSCAR

구조파일 (VASP이라는 프로그램에 사용하는)

POS (position) + CAR (fortran 에서 일반적으로 쓰는 파일명)



제목 (아무 의미 없음)

```
Cu4
1.0
  3.5774306715697510   0.0000000000000000   0.0000000000000002   a 벡터
  0.0000000000000006   3.5774306715697510   0.0000000000000002   b 벡터   박스 크기
  0.0000000000000000   0.0000000000000000   3.5774306715697510   c 벡터
Cu
4
direct
  0.0000000000000000   0.0000000000000000   0.0000000000000000 Cu
  0.0000000000000000   0.5000000000000000   0.5000000000000000 Cu
  0.5000000000000000   0.0000000000000000   0.5000000000000000 Cu
  0.5000000000000000   0.5000000000000000   0.0000000000000000 Cu
```

Scaling factor (아래 박스 사이즈 조절)

원소 종류

갯수

좌표지정방법 (direct : 박스기분 분율, cartesian : 절대좌표)

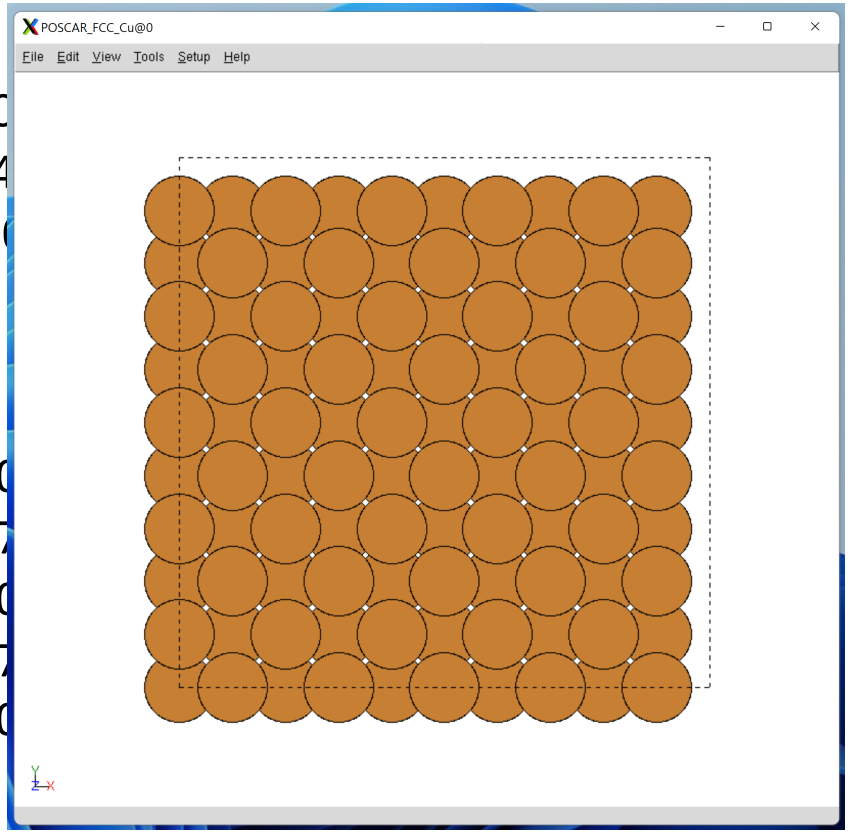
각 원자들의 좌표

요건 없어도 무관

POSCAR

vi POSCAR_big

```
Cu
 1.0000000000000000
   17.887153357848756    0.0000000000
    0.0000000000000030   17.8871533578
    0.0000000000000000    0.0000000000
 Cu
 500
Cartesian
  0.0000000000000000  0.0000000000000
  0.0000000000000003  1.7887153357848
  1.7887153357848755  0.0000000000000
  1.7887153357848757  1.7887153357848
  0.0000000000000000  0.0000000000000
...
```



Report and Presentation

Sample: SC, BCC, FCC, HCP, Diamond, ???

1. Team01

   박준영, 박진우, 김민하, 문채원, 권준길, 금대호

2. team02

   천재호, 박종민, 김영재, 명승주, 김태훈, 김민아

3. team03

   정인성, 임태경, 주한울, 김지환, 유지희, 박시룡

4. team04

   오성연, 황규빈, 권도의, 윤소연, 전소희, 윤건영, 김현

'4개씩 XRD 그림제공'

→ XRD의 이론

→ 각각이 어떤 구조인지

→ 어떤 원소가 여기에 해당되는지

→ 왜 Peak이 저렇게 나왔는지

→ 기타 등등…

→ 토의내용

Schedule

9	4월 30일	보고서/발표 작성 요령 + 이론	신기현
10	5월 7일	team01 (XRD Simulation)	도연우
11	5월 14일	team02 (XRD Simulation)	도연우
12	5월 21일	team03 (XRD Simulation)	도연우
13	5월 28일	team04 (XRD Simulation)	도연우
14	6월 4일	발표평가	신기현
15	6월 11일	기말고사	X

XRD Simulation : 도연우 조교님에게 문의 (20211522@edu.hanbat.ac.kr)

강의자료 및 상세내용들은 홈페이지 참고 (themad.hanbat.ac.kr)

Evaluation

1. 보고서는 개인 제출 - 6/18일 까지 (이후 제출 0점)
   - 조교님에게 PDF로 제출 (-5)
   - 양식 (양식은 홈페이지 참고) 미활용시 감점 (-5)
   - 팀원끼리는 토의만 진행 → 보고서 내용이 동일할 경우 모두 0점
   - 보고서의 포맷 및 퀄리티 (예쁘게 깔끔하게) 가 좋을 경우 가산점 (+5) 반대의 경우 (-5)
   - 보고서 표지 만들 것 (+5)
2. 발표는 팀별로 (10분 분량 준비) - 6/4일
   - 발표자에게는 가산점 (단, 발표내용을 적어서 읽을 경우 가산점 X) (+5)
   - 발표자료의 포맷 및 퀄리티 (예쁘게, 깔끔하게) 가 좋을 경우 가산점 (+5) 반대의 경우 (-5)
   - 발표태도가 뛰어나면 가산점 (+3)
   - 질문을 할 경우에 가산점 (+5)