2026년도 1학기

에너지소자실험

신기현 (조교: 오장현)

Phone : #1269

E-mail : kihyun@hanbat.ac.kr

Schedule

1	5월 12일	보고서/발표 작성 요령 + 이론	신기현
2	5월 19일	실습 (1조, 2조)	오장현
3	5월 26일	실습 (3조, 4조)	오장현
4	6월 2일	휴강	-
5	6월 9일	발표평가	신기현

XRD Simulation : 오장현 조교에게 문의 (wkdgus0313@gmail.com)

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

Team

1. Team01 (5/19)

   방병조, 전진영, 최성민, 최은서, 민유빈

2. Team02 (5/19)

   이찬복, 방현우, 남선미, 정소영, 박서연

3. Team03 (5/26)

   임종범, 심태준, 오예원, 서지혜, 전영은

4. Team04 (5/26)

   한준희, 명건우, 최현주, 길지수

Evaluation

1. 보고서는 개인 제출 - 6/16일 까지 (이후 제출 0점)
   - 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) - 6/9일
   - 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)

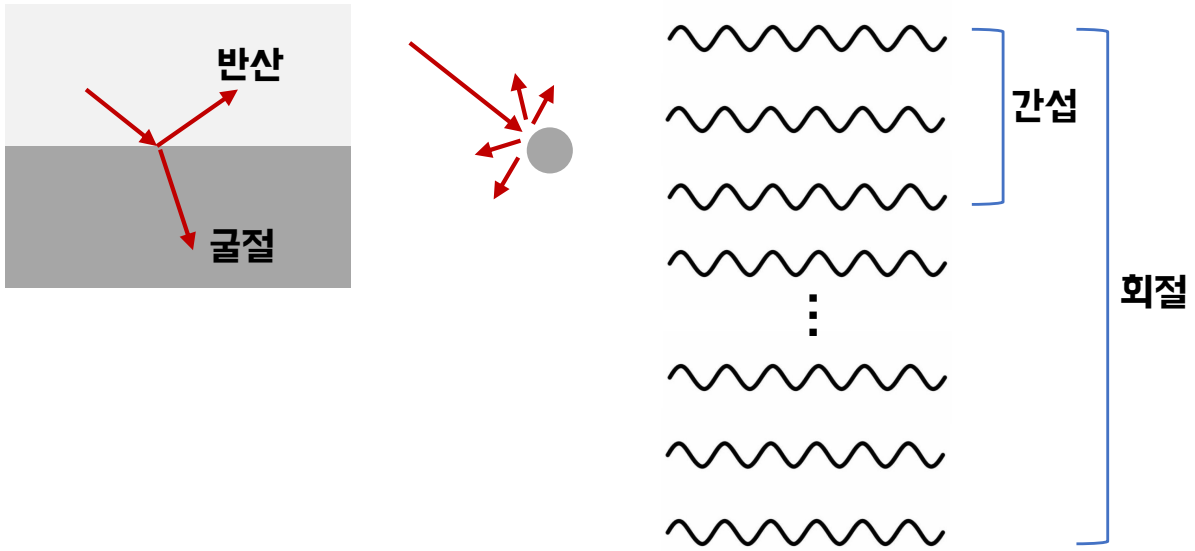
X-ray wavelength : 0.01 ~ 10 nm

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.

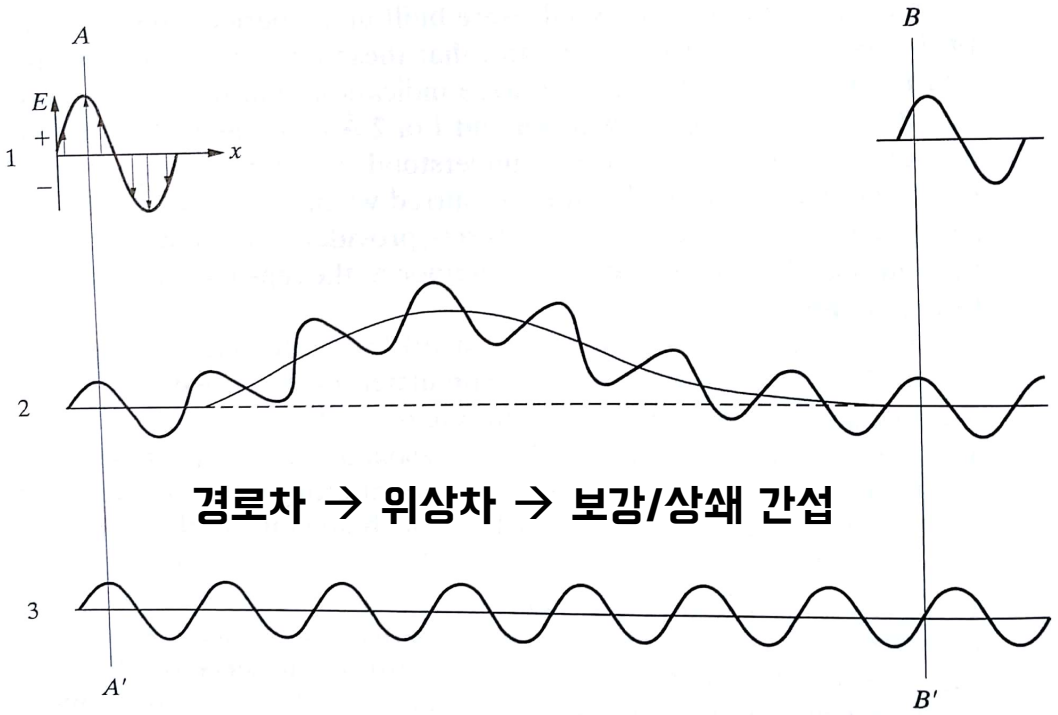
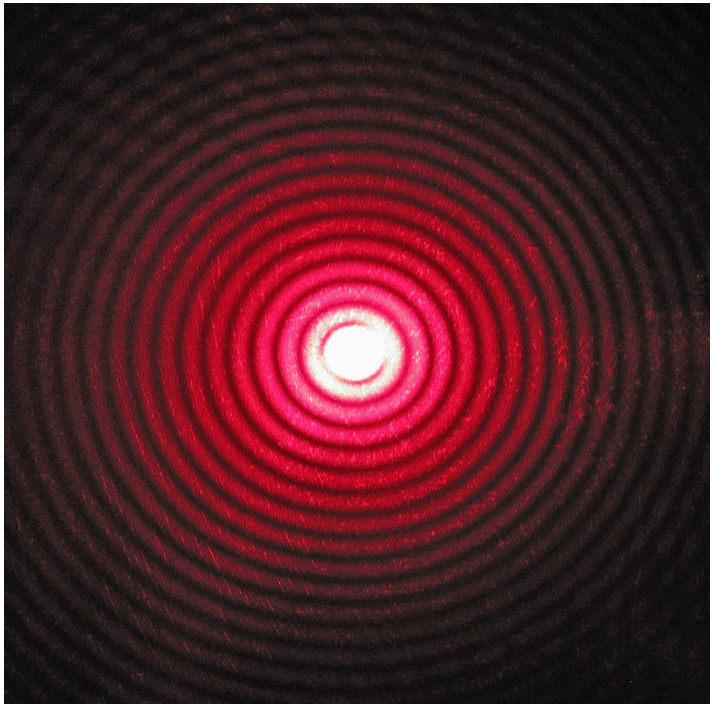
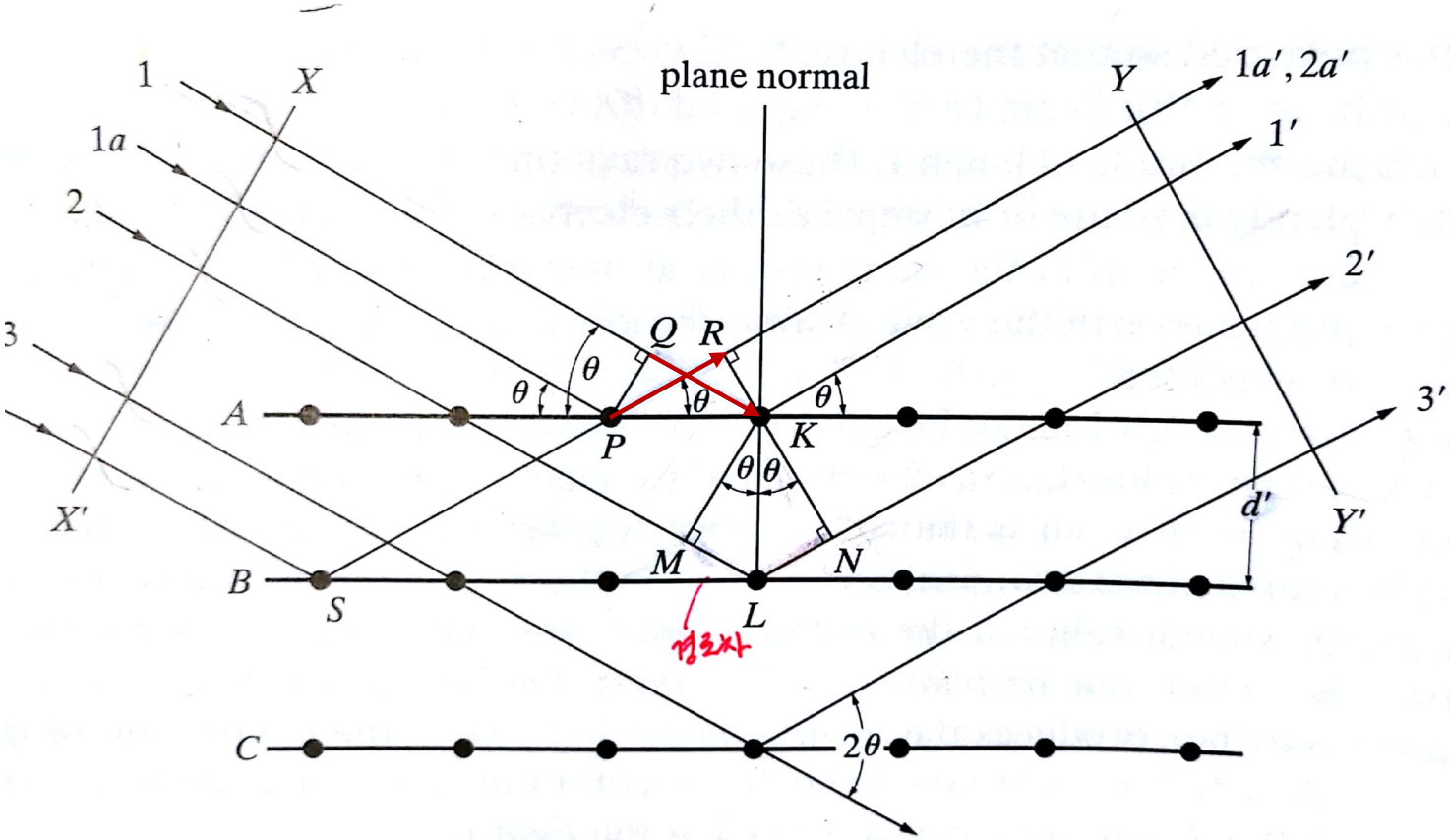


Figure 3-1 Effect of path difference on relative phase.

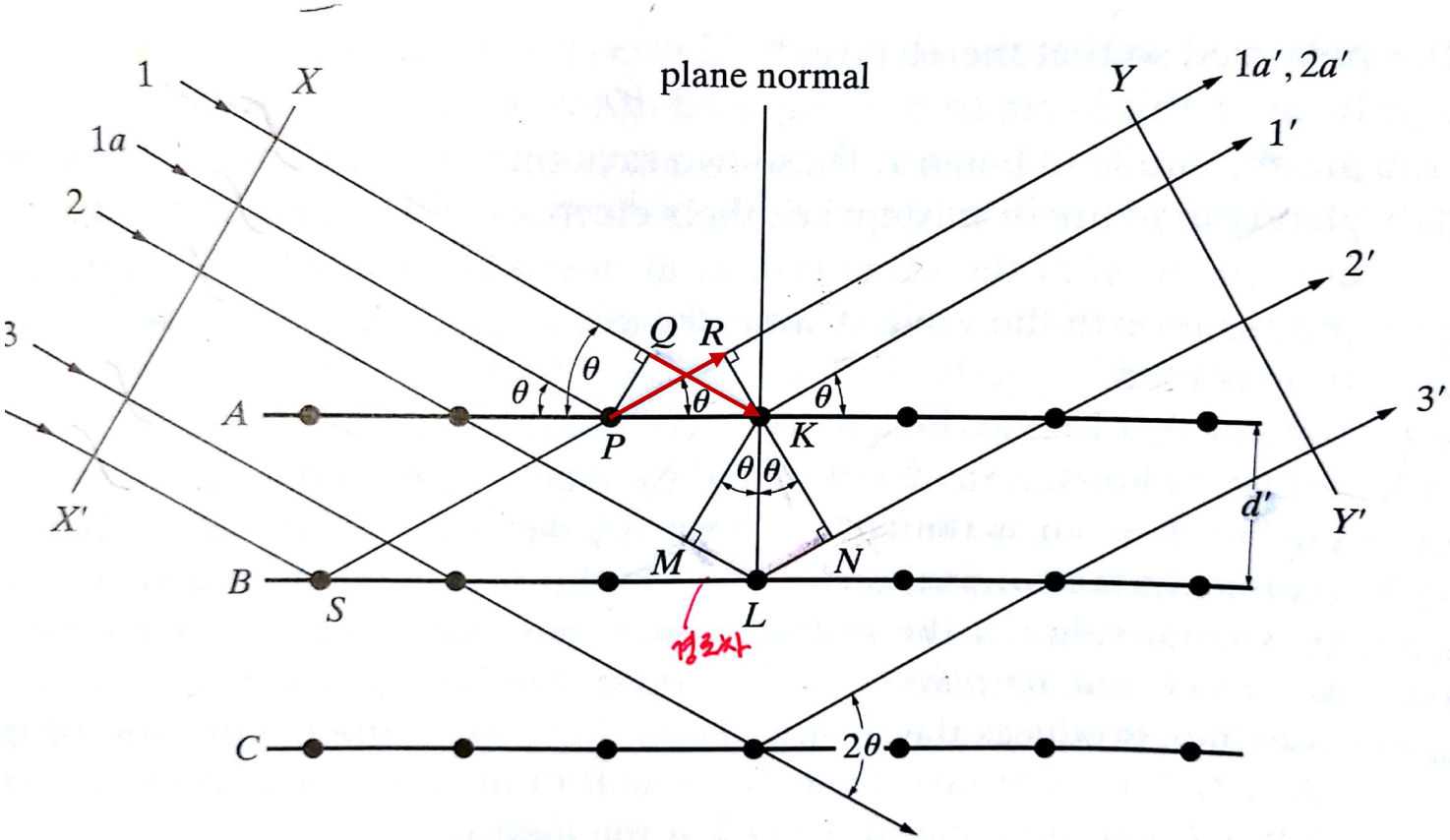


Bragg's Law



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

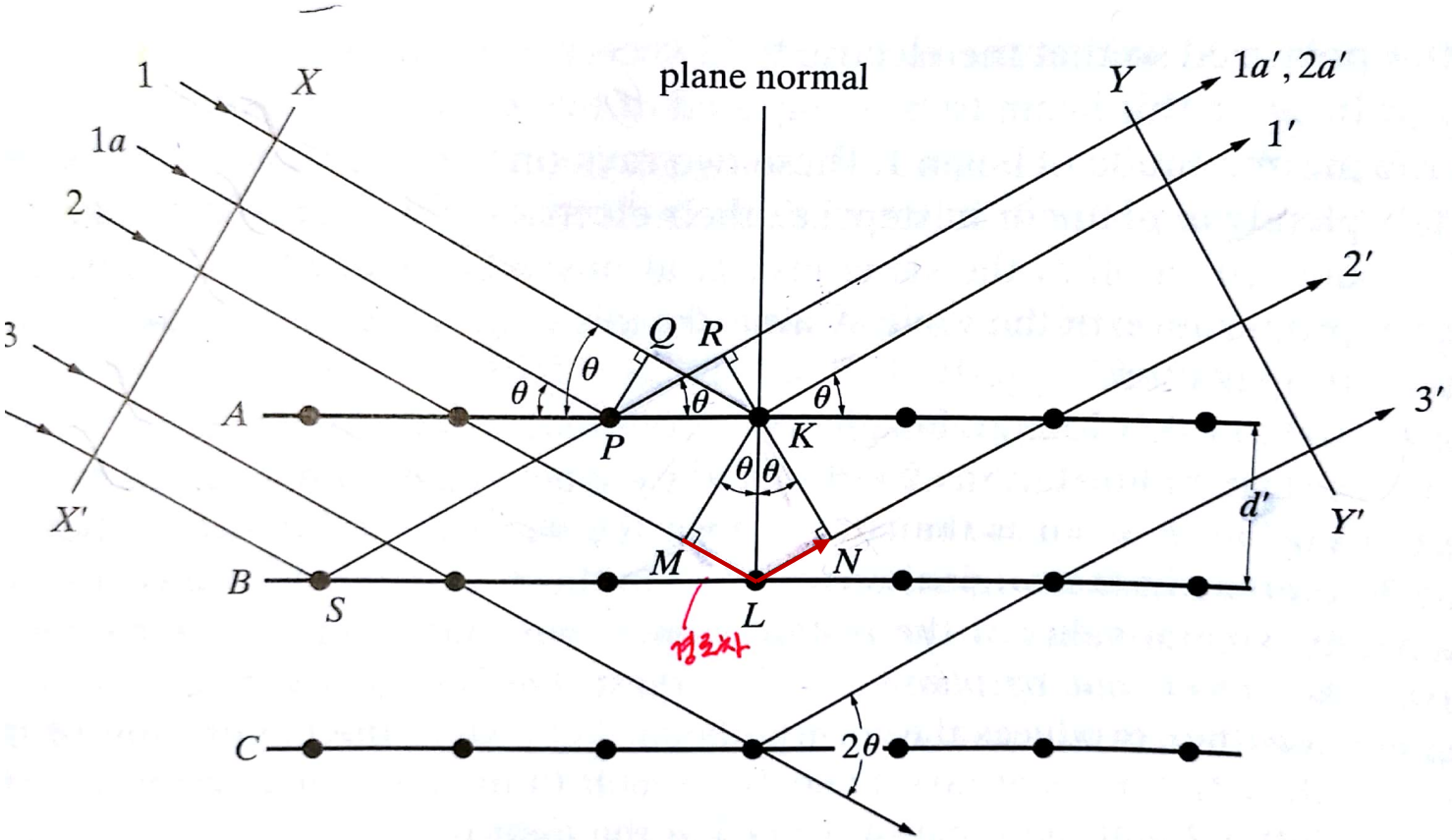
Bragg's Law



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

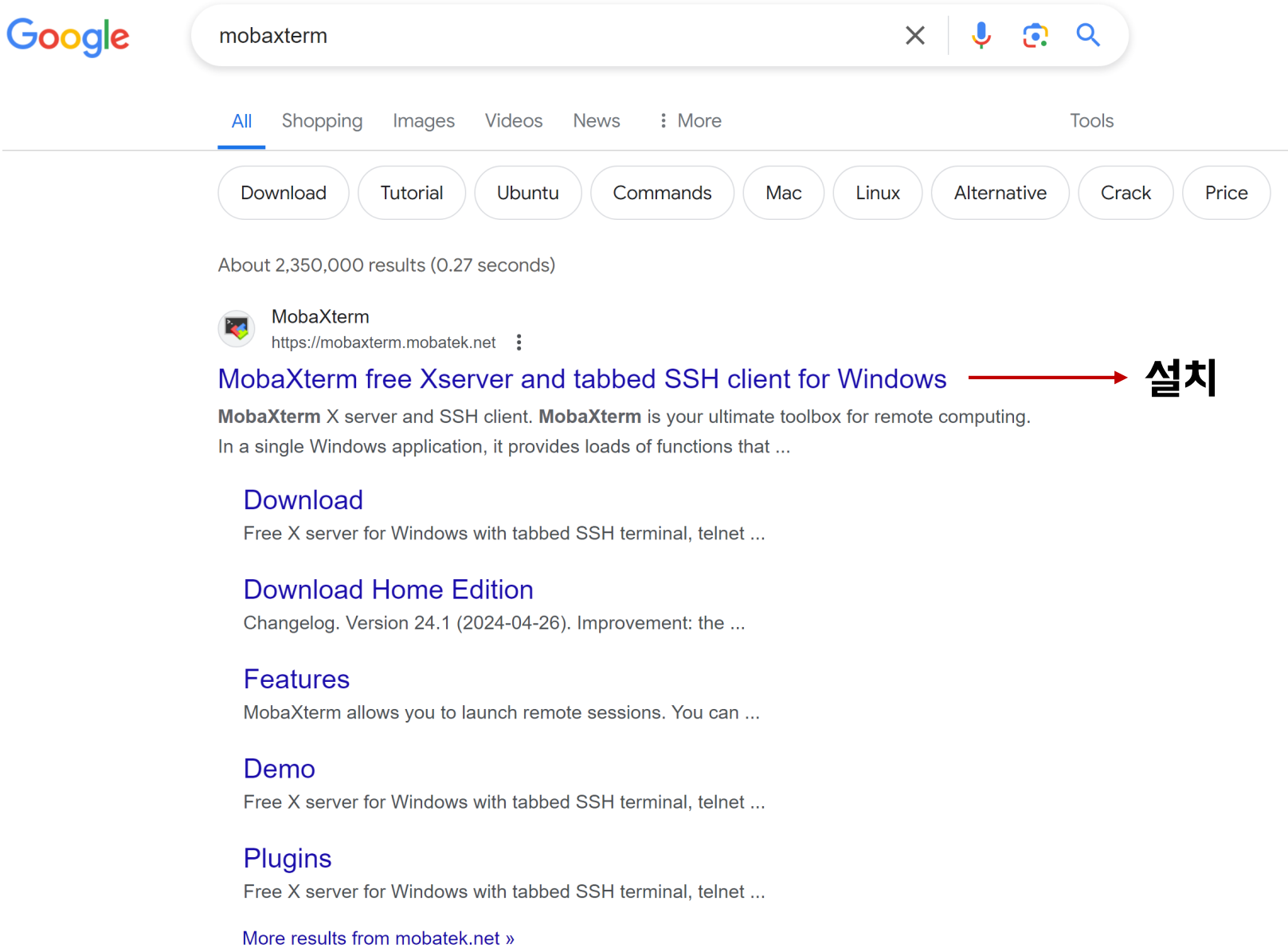
$$sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$$

Peak position by crystal structure

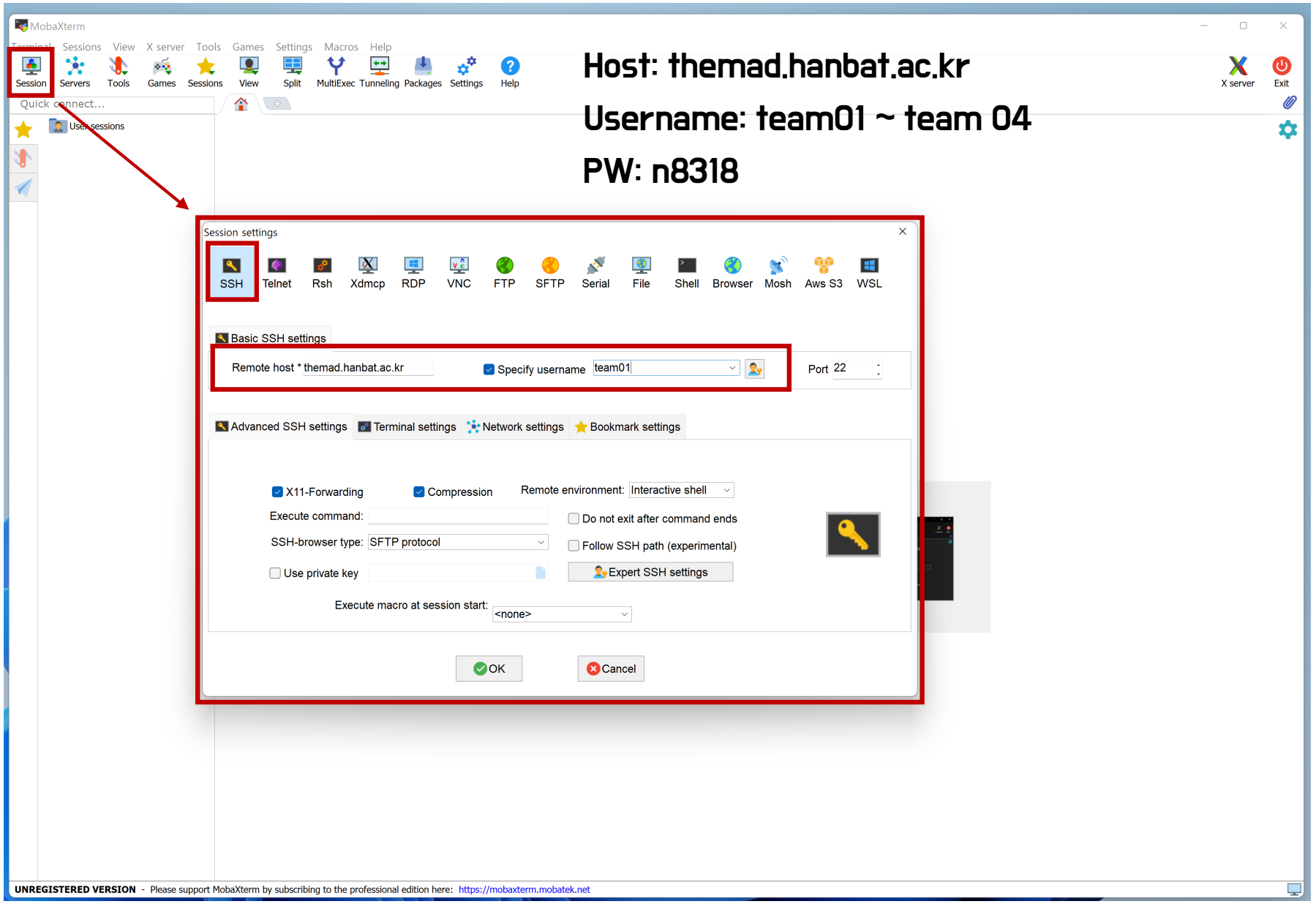
$$F_{hkl} = \sum_{1}^{N} f_n e^{2\pi i(hu_n + kV_n + lW_n)}$$

Peak intensity by atomic position in unit cell

Connecting Server



Connecting Server

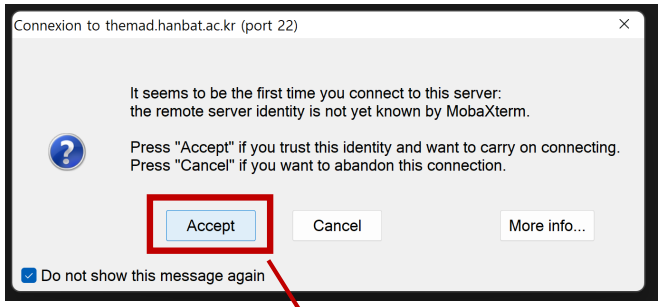


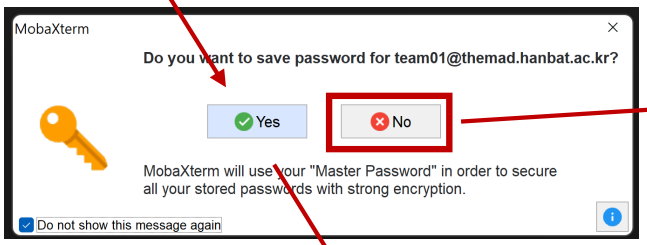
Host: themad.hanbat.ac.kr

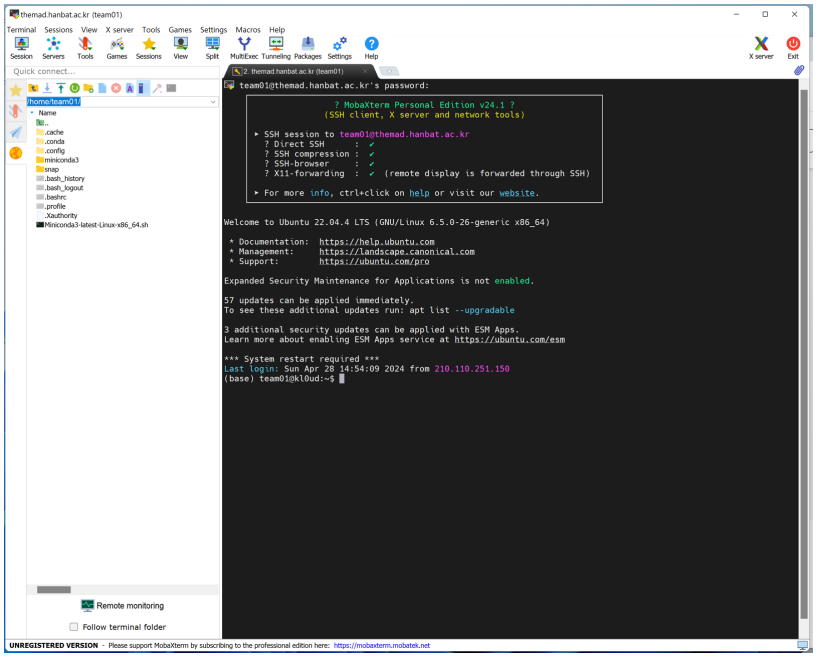
Username: team01 ~ team 04

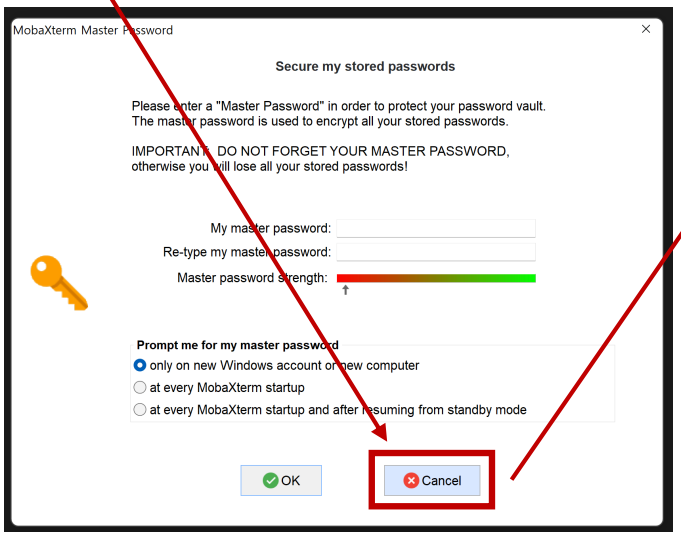
PW: n8318

Connecting Server

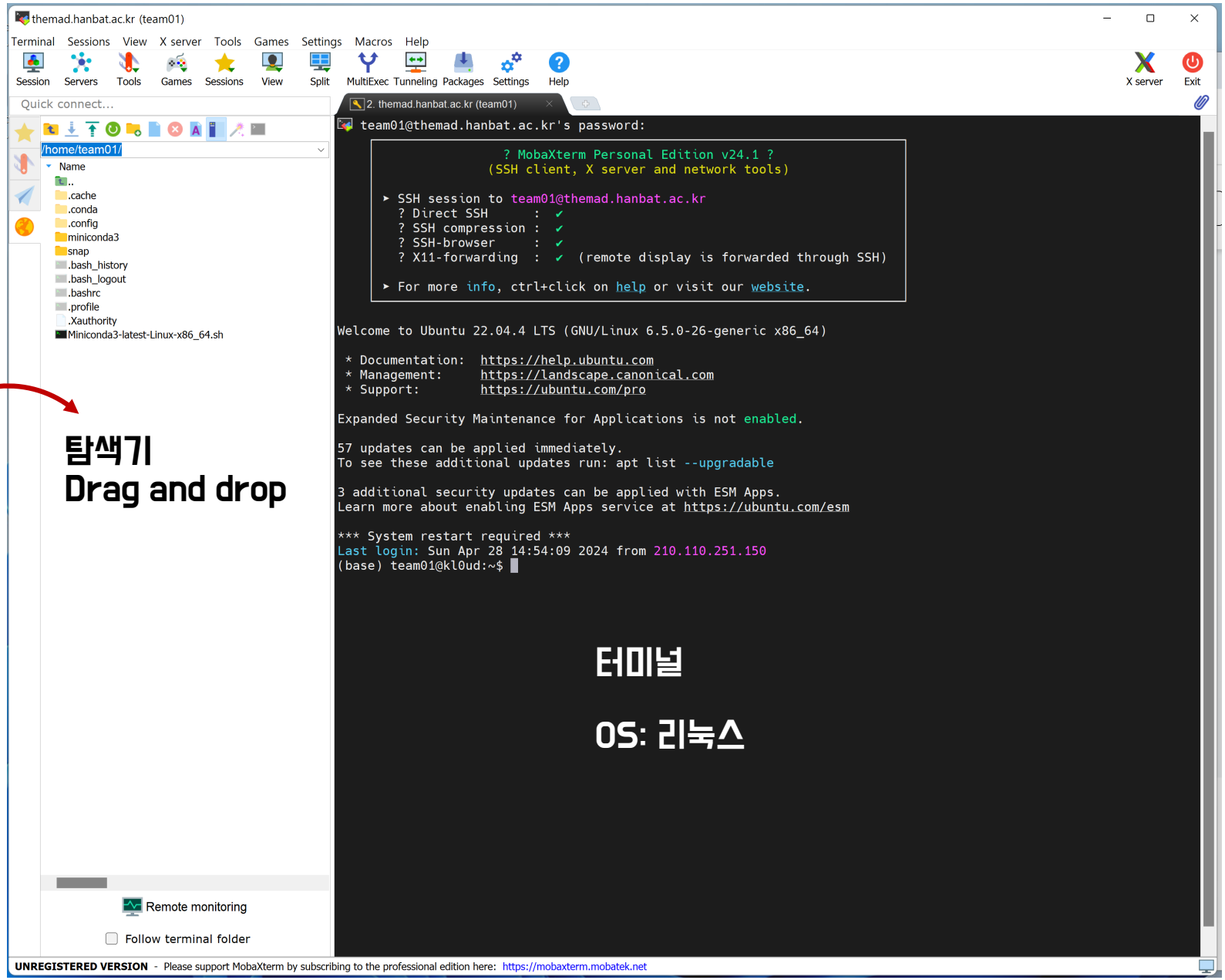








Connecting Server



파일이동

탐색기
Drag and drop

터미널

OS: 리눅스

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**

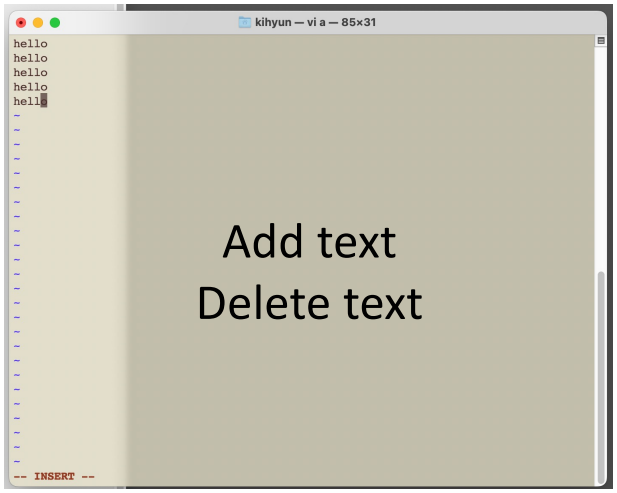
- cp = copy files (or directory) to other directory
  - cp name_of_files ../name_of_directory
  - cp test.txt example.txt : **복붙 이면서 파일이름 변경**
  - cp ../name_of_files ./name_of_directory

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

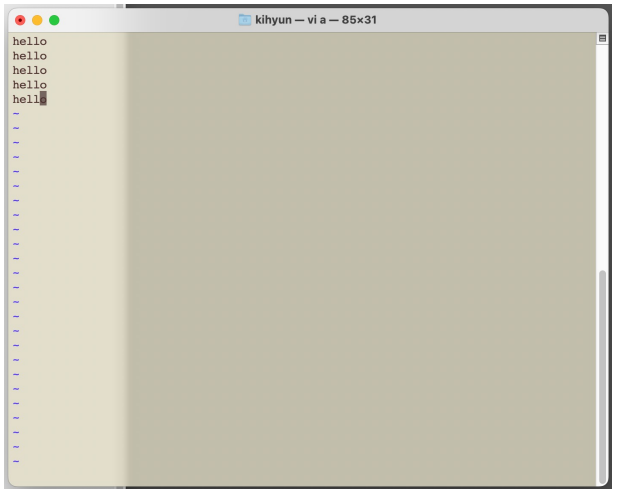
Linux Command

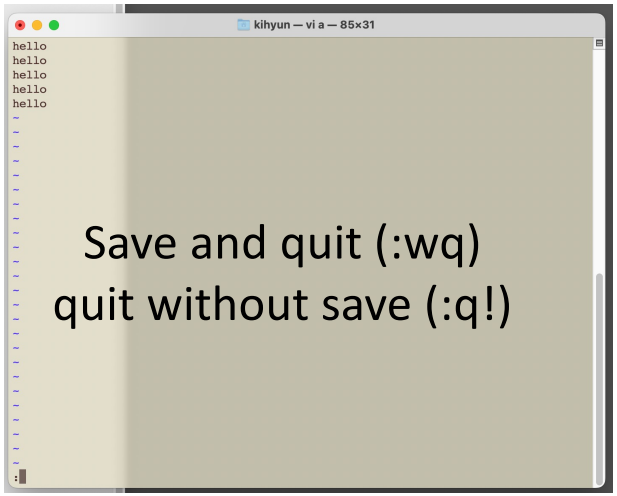
- vi editor = text editor
- vi = viewer
- Basic command : vi textfile
- If there is no file, will make file (열 파일이 없으면 생성)
- If there is file, will open file (열 파일이 있으면 오픈)

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



Add text
Delete text



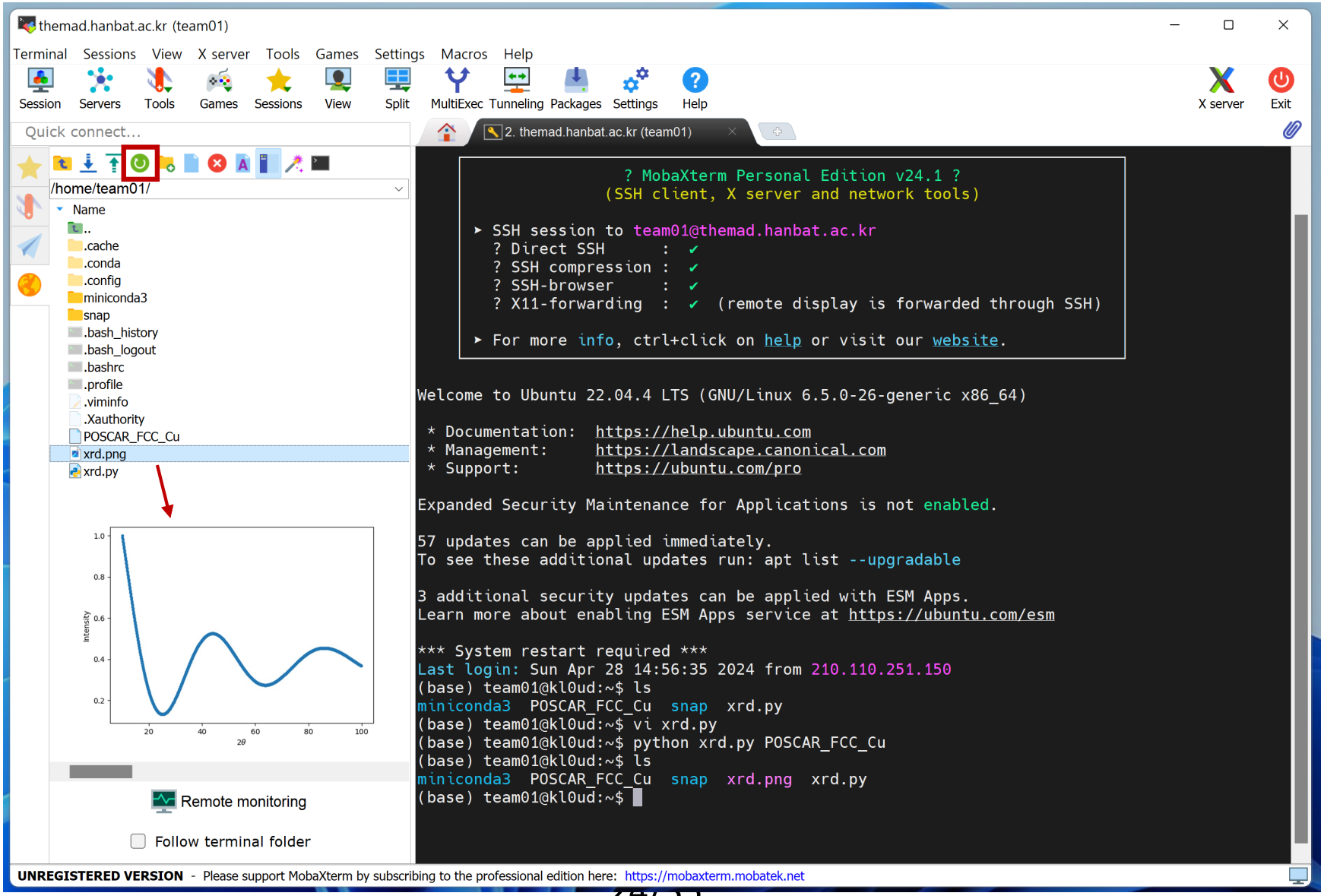


Save and quit (:wq)
quit without save (:q!)

Three different modes

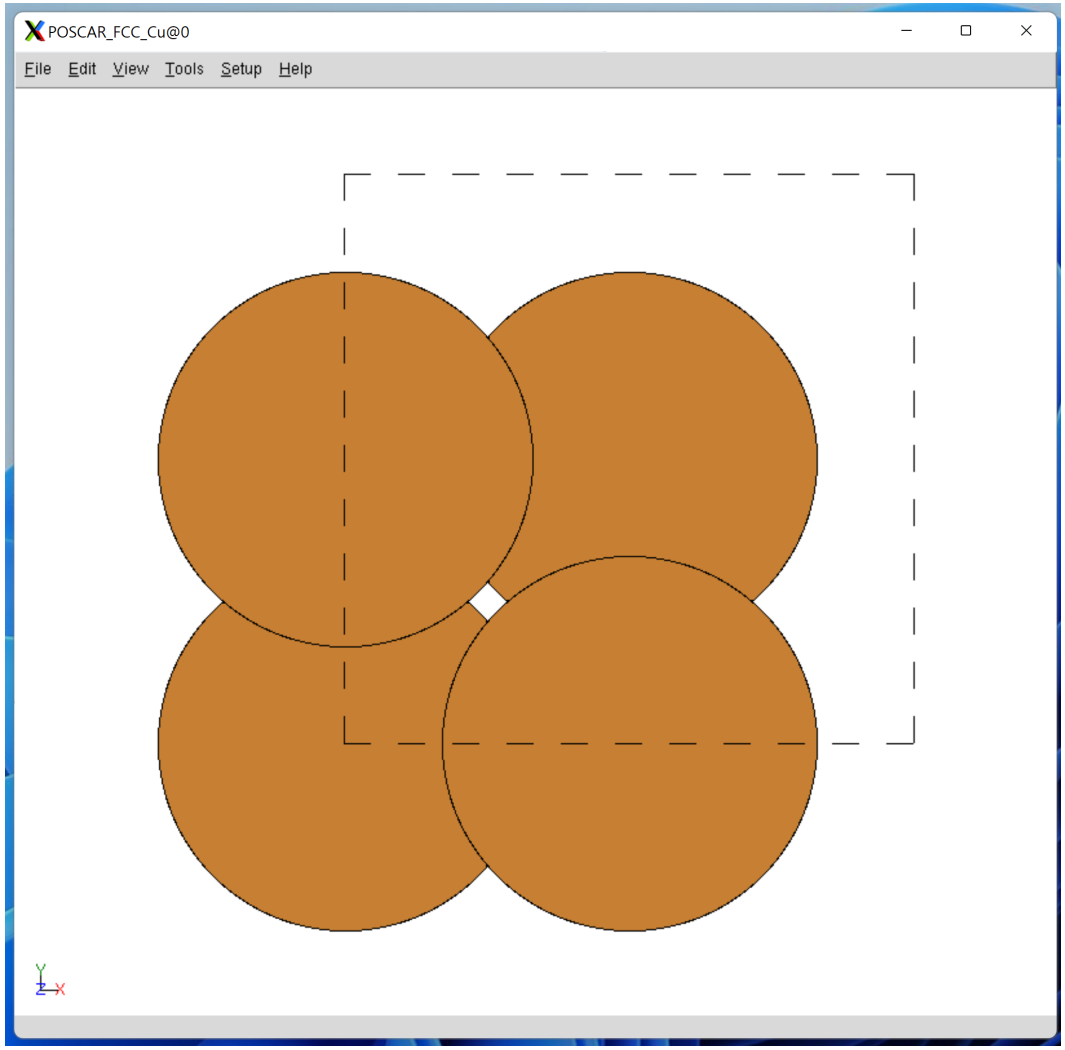
XRD Simulation

python xrd.py POSCAR_FCC_Cu



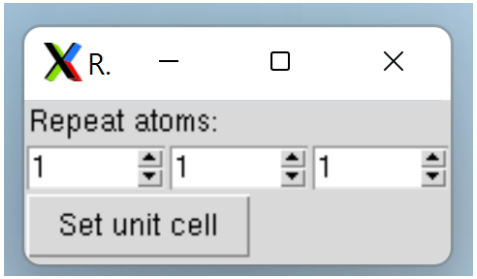
XRD Simulation

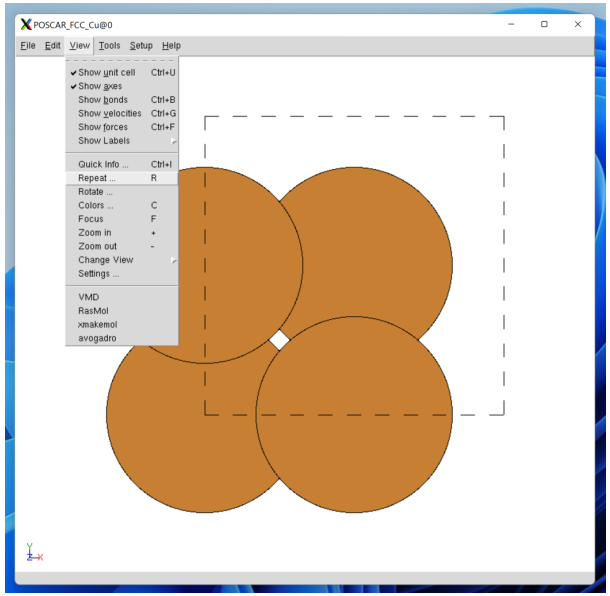
ase gui POSCAR_FCC_Cu



XRD Simulation

ase gui POSCAR_FCC_Cu

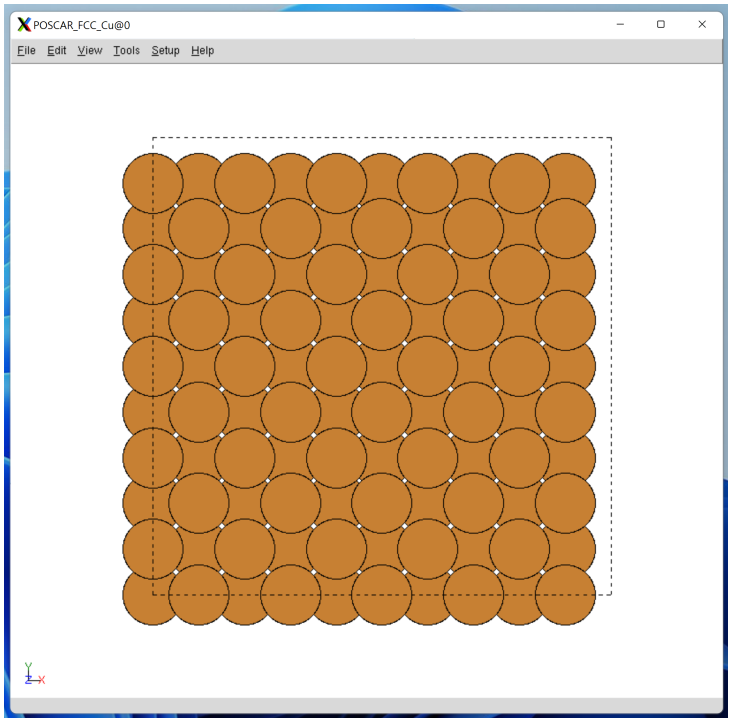




숫자 키우고
(5,5,5)

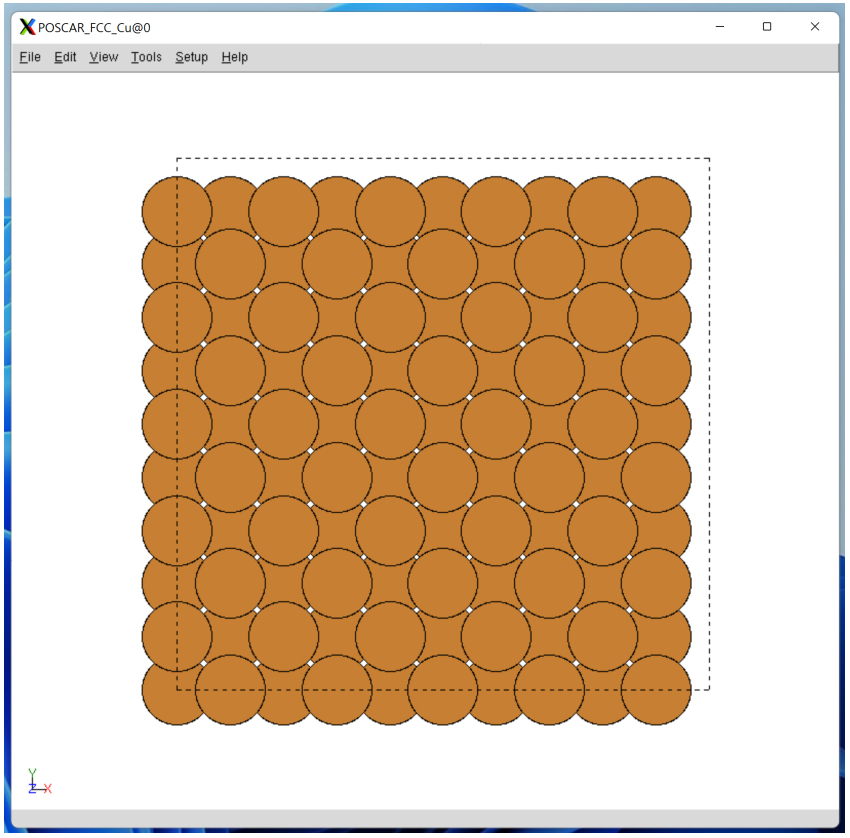
Set unit cell

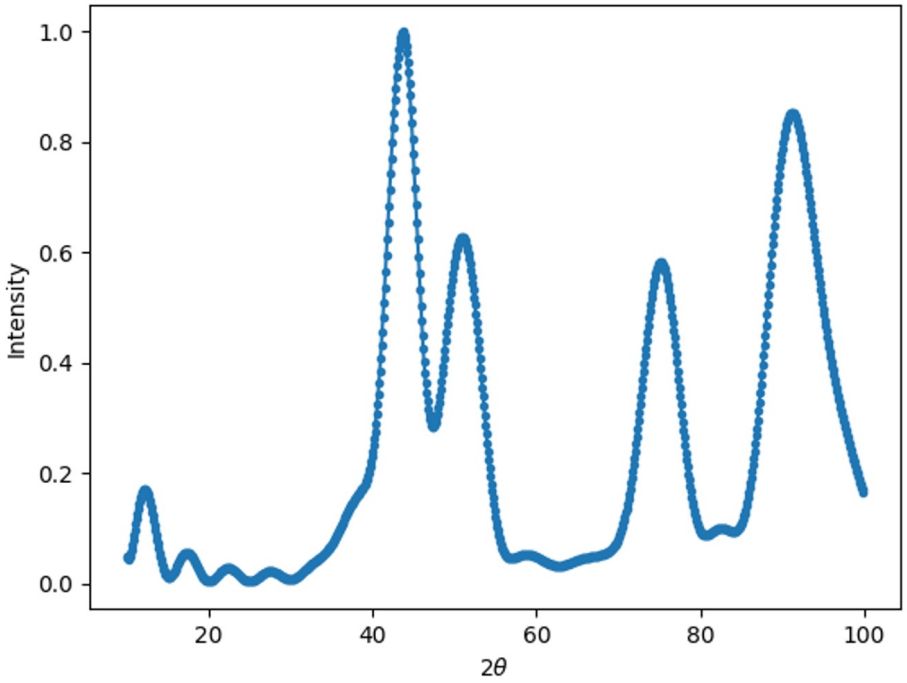
다른이름으로 저장
(POSCAR_big)



XRD Simulation

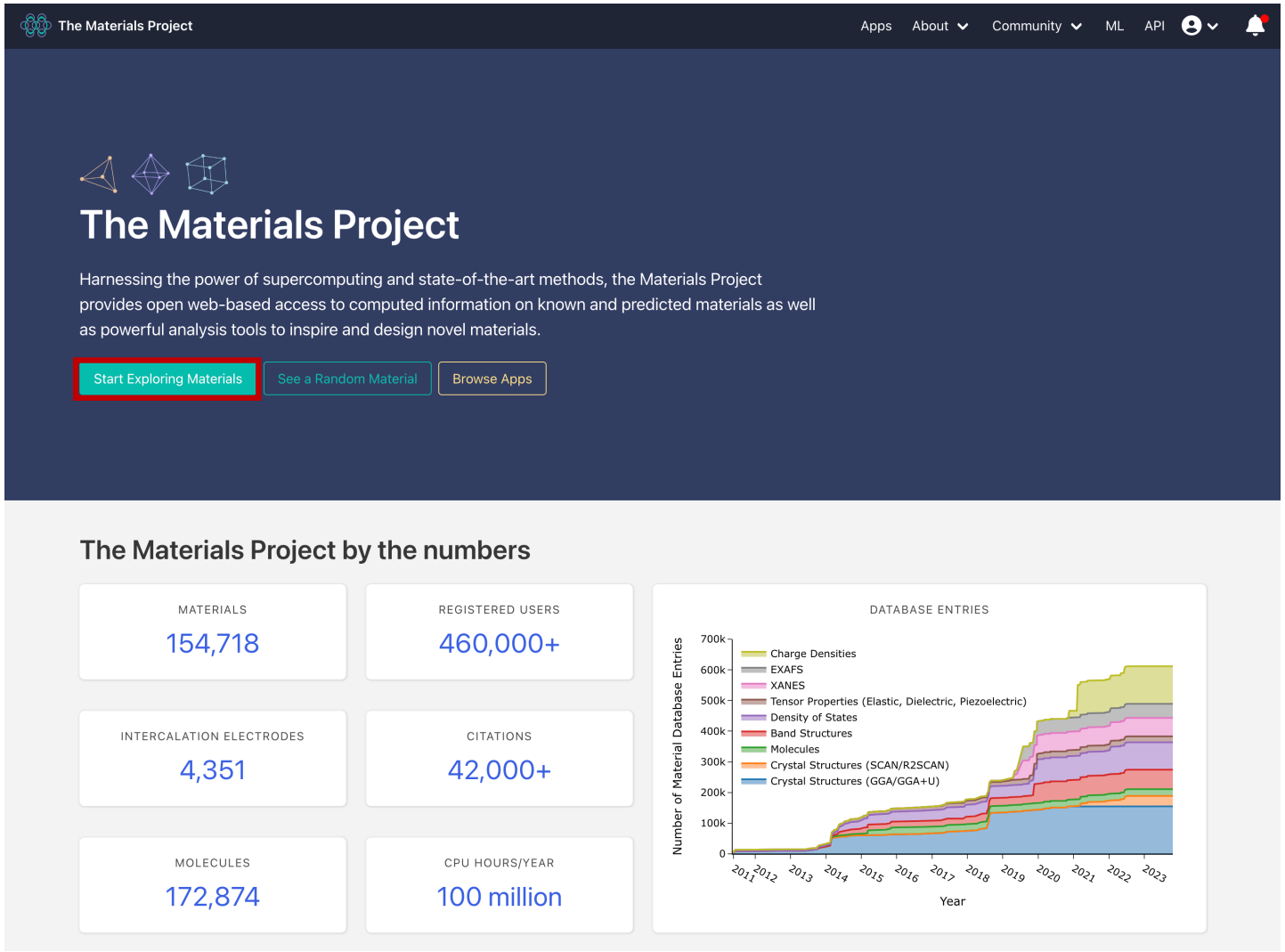
python xrd.py POSCAR_big



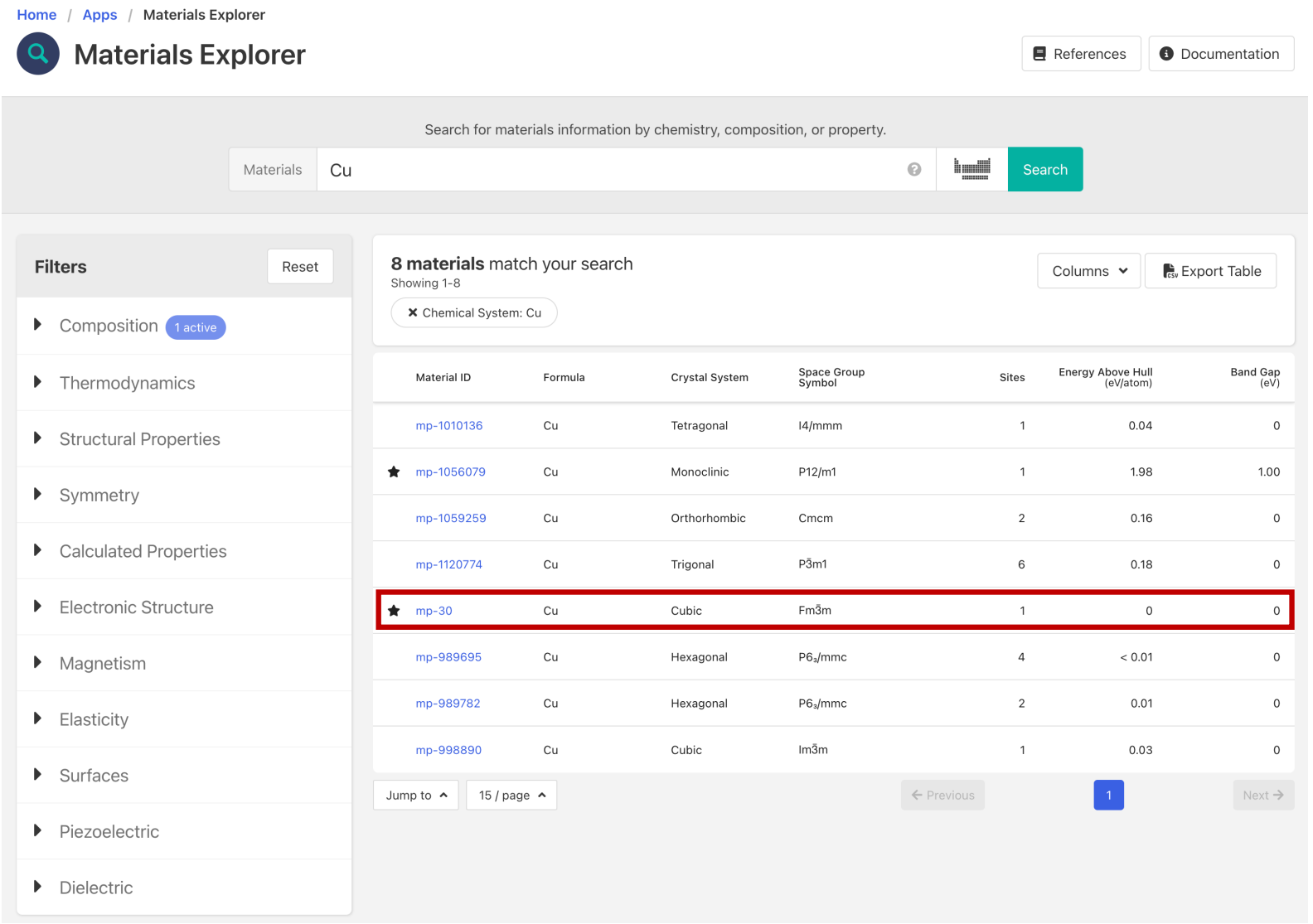


How to get POSCAR file

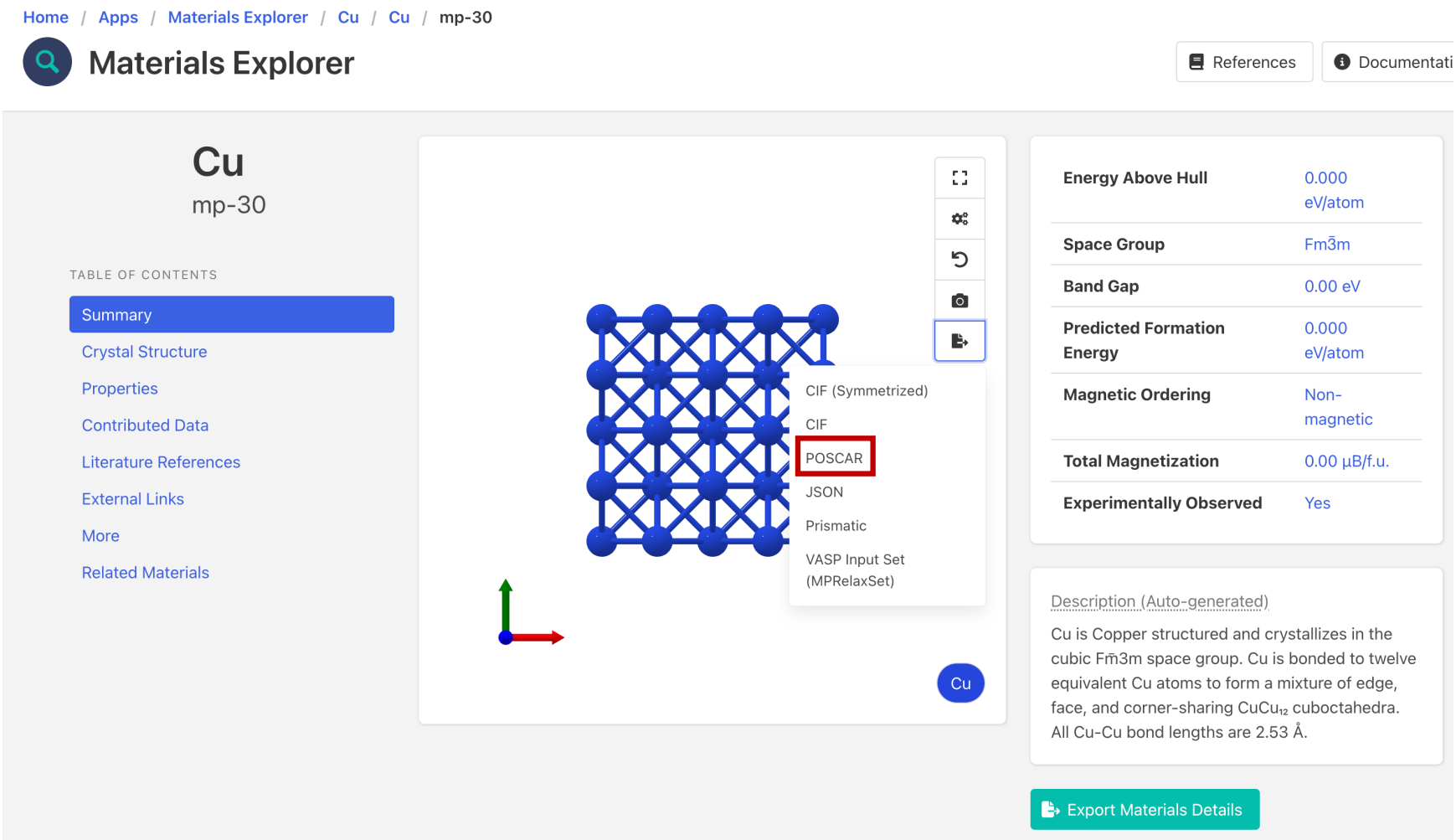
Need to register (next-gen.materialsproject.org)



How to get POSCAR file



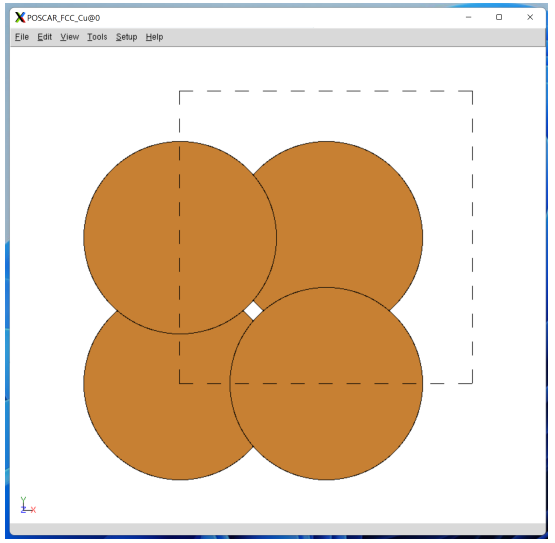
How to get POSCAR file



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
  0.0000000000000006   3.5774306715697510   0.0000000000000002
  0.0000000000000000   0.0000000000000000   3.5774306715697510
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)

a 벡터

b 벡터 박스 크기

c 벡터

원소 종류

갯수

좌표지정방법 (direct : 박스기준 분율, cartesian : 절대좌표)

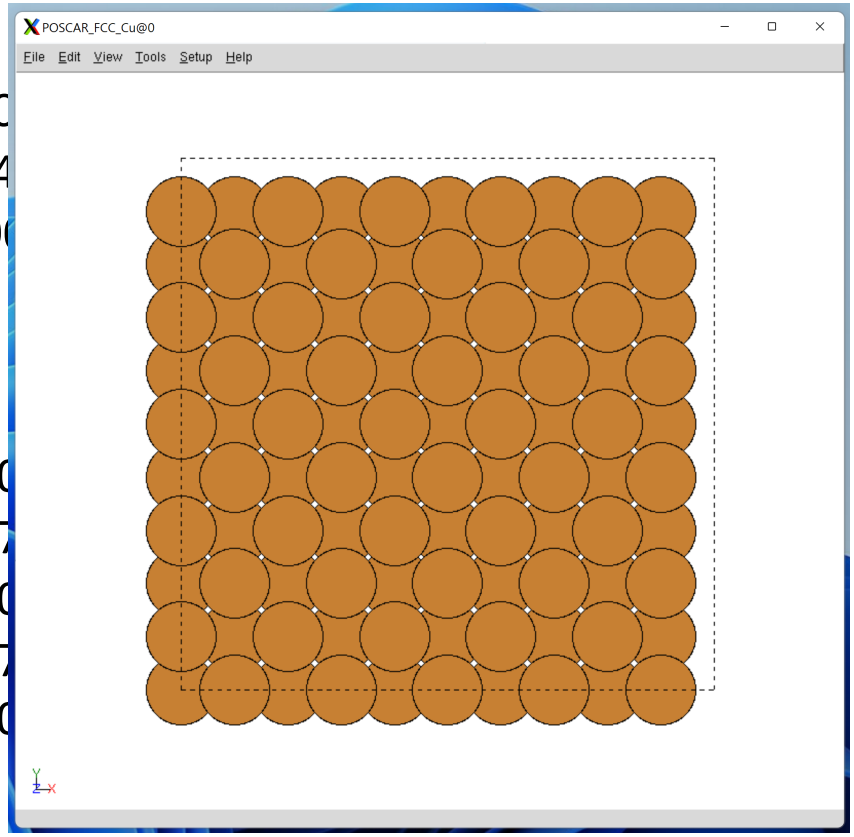
각 원자들의 좌표

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 (5/19)

   방병조, 전진영, 최성민, 최은서, 민유빈

2. Team02 (5/19)

   이찬복, 방현우, 남선미, 정소영, 박서연

3. Team03 (5/26)

   임종범, 심태준, 오예원, 서지혜, 전영은

4. Team04 (5/26)

   한준희, 명건우, 최현주, 길지수

'4개씩 XRD 그림제공'

→ XRD의 이론

→ 각각이 어떤 구조인지

→ 어떤 원소가 여기에 해당되는지

→ 왜 Peak이 저렇게 나왔는지

→ 추가 토의내용

Schedule

1	5월 12일	보고서/발표 작성 요령 + 이론	신기현
2	5월 19일	실습 (1조, 2조)	오장현
3	5월 26일	실습 (3조, 4조)	오장현
4	6월 2일	휴강	-
5	6월 9일	발표평가	신기현

XRD Simulation : 오장현 조교에게 문의 ()

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

Evaluation

1. 보고서는 개인 제출 - 6/16일 까지 (이후 제출 0점)
   - 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) - 6/9일
   - 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)

One more thing …

모두가 생성형 AI 를 사용한다.

어떻게 해야 좋은 평가를 받을 수 있나?

→ 나만의 창의적, 차별적 접근법 필요