

1. 제목: 4차 A – 결정입자 크기 측정 및 Scherrer Eq. 이해

2. 내용:

a. Crystallite, Grain 및 Particle의 정의

- Crystallite는 작은 단결정 입자로 X-선 Scherrer Eq.을 통하여 분석하는 입자 크기임

b. Crystallite 크기와 회절 피크 폭 (FWHM)의 상관관계: Scherrer Eq.

- X-선 회절에 의한 Crystallite는 coherently scattering domain (결맞게 산란하는 영역)으로

정의됨

c. 시료의 실제 Crystallite 크기에 의한 피크 broadening

- 측정한 피크의 폭에서 장비 영향 요인 제거 필요
- 표준물질 (NIST SRM LaB6 등)로 장비의 분해능 함수 (instrumental resolution function)를

제거

d. Micro-strain이 존재하는 경우에는

- Williamson-Hall plot을 이용하여 μ -strain에 의한 peak broadening과 crystallite size에 의한 broadening을 다시 deconvolution 해야 함

3. 교육 배경 및 특징

- XRD Scherrer Eq.에 의한 결정입자 크기 (crystallite 크기)를 결정
- X-선 회절 피크의 FWHM에 의한 다결정 입자의 크기는 일반적으로 TEM에 의한 결정입자 크기보다 작음