

# 응집물질물리실험 예비보고서

실험주제 : Crystal Growth & X-ray diffraction, Structure transition of BaTiO<sub>3</sub>

HuiJae-Lee<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>*Physics Department, Inha University*

(Dated: September 23, 2022)

이번 실험은 X-ray diffraction을 이용하여 CaTiO<sub>3</sub>, SrTiO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub>를 관측하고 BaTiO<sub>3</sub>의 상전이를 관측하는 것을 목적으로 한다. 각 시료들은 고상소결법을 통해 제작한다.

## I. INTRODUCTION

CaTiO<sub>3</sub>, SrTiO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub>는 강유전성을 가진 물질이며 그 특정한 구조를 일컬어 페로브스카이트(perovskite) 구조를 가지는 물질이다. 이런 강유전성 물질들은 현대 시대에 축전기의 역할을 하는 물질로써 주목받고 있다. 이번 실험에서는 고상소결법을 통해 다른 물질로 부터 위 세 페로브스카이트 물질을 제조하여 X-ray diffraction으로 그 분자구조를 관찰하고 BaTiO<sub>3</sub>의 유전체적 특징을 분석한다.

## II. EXPERIMENT

### A. Theory

#### 1. CaTiO<sub>3</sub>, SrTiO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub>

CaTiO<sub>3</sub>, SrTiO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub>는 페로브스카이트 구조를 가지는 정육면체 결정의 모서리에 Ba, 면 중심에 O, 부피중심에 각각 Ca, Sr, Ti가 위치한 형태이다. 이들은 강유전성 물질이며 고유의 퀴리온도가 존재한다. 한가지 예시로, BaTiO<sub>3</sub>의 퀴리온도는 408 K이다. 즉, 135 °C 이상의 온도로 BaTiO<sub>3</sub>를 가열하면 편극이 깨진다.

\* hjee6674@inha.edu

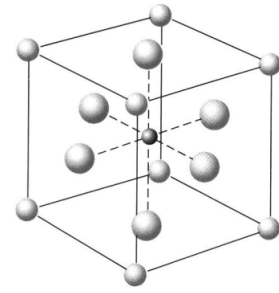
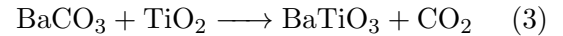
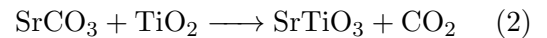
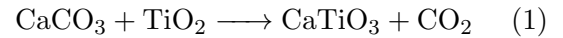


FIG. 1. BaTiO<sub>3</sub>의 결정구조

이번 실험에서 CaTiO<sub>3</sub>, SrTiO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub>는 각각 다음의 과정을 거쳐 합성을 진행한다.



각 물질의 물질량은 TABLE I에 적어놓았다.

#### 2. 고상소결법

소결은 금속 또는 세라믹 분말에 열을 가하여 밀도가 조절된 물질 또는 성분을 생산하는 공정 기술이다. 소결은 재료과학 및 공학의 기본요소 중 합성, 가공요소로 분류되고 있다. 기본적으로 소결은 고상소결과 액상소결로 나눌 수 있다. 이번 실험에서 이용할 고상소결은 소결 온도에 도달했을 때 전체적으로 고체 상태에서 치밀화되

Compound	molar mass (g/mol)
BaCO <sub>3</sub>	197.34
BaTiO <sub>3</sub>	233.19
CaCO <sub>3</sub>	100.09
CaTiO <sub>3</sub>	135.94
SrCO <sub>3</sub>	147.63
SrTiO <sub>3</sub>	183.49
TiO <sub>2</sub>	79.866
CO <sub>2</sub>	44.009

TABLE I. 실험에 관련된 물질들의 물질량

는 과정이다. 고상소결법은 진행 시간에 따라 크게 세 stage로 나눌 수 있는데, 순서대로 initial stage, intermediate stage, final stage로 부른다 (FIG. 2).

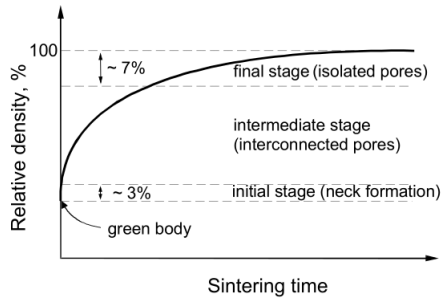


FIG. 2. 고상소결 과정

Two-particle model에서 설명하는 initial stage는 입자 사이에 neck을 형성하는 과정이다. neck이 형성되어 두 입자가 연결되면 물질 수송 (material transport)이 일어나는데 이에 대한 많은 메커니즘이 알려져 있다(FIG. 3).

intermediate stage에서는 모든 입자의 가장 자리를 따라 실린더 모양의 기공이 형성된다. 이후 입자가 성장하면서 final stage에 도달하면 실린더 모양의 기공이 단절되고 각 꼭짓점에 격리된 기공이 남는다(FIG. 4).

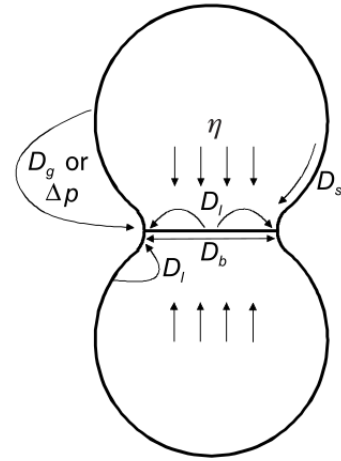


FIG. 3. 두 입자 사이에 형성된 neck과 물질 수송 메커니즘

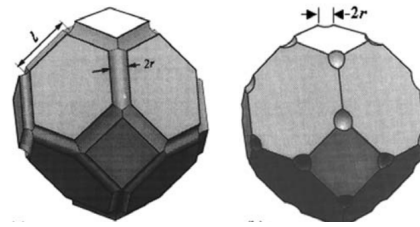


FIG. 4. 기공이 형성된 기하학적 모델. 왼쪽부터 순서대로 intermediate stage, final stage에 형성되는 모델이다.

### 3. X-ray diffraction

X-ray diffraction는 결정 구조를 해석하는 방법 중 하나로, 브래그 법칙을 이론적인 토대로 이용한다. 결정에 X선을 입사시키면 X선의 일부는 투과하고 일부는 산란되는데 산란되는 X선은 결정 구조의 규칙성에 관한 정보를 포함한다. 규칙적으로 배열된 결정에 입사각  $\frac{\pi}{2} - \theta$ 로 입사하는 X선을 고려해보자(FIG 5). 브래그 법칙은 입사선과 평면 사이 각도  $\theta$ , 결정면 사이 간격  $d$ , X선의 파장  $\lambda$  사이 관계를 보여준다.

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (4)$$

$n$ 은 정수이다.

## B. Experimental Methods

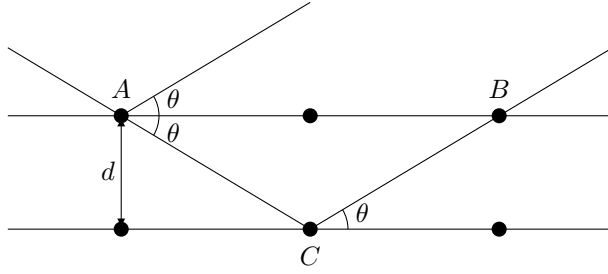


FIG. 5. 결정에 입사하는 X선에 대한 브래그 법칙

- 
- [1] C. Kittel, P. McEuen, and P. McEuen, *Introduction to solid state physics*, Vol. 8 (wiley New York, 1996).
- [2] R. Brook, Sintering: An overview, in *Concise Encyclopedia of Advanced Ceramic Materials*, edited by R. BROOK (Pergamon, Oxford, 1991) pp. 438–440.
- [3] S.-J. L. Kang, Preface, in *Sintering*, edited by S.-J. L. Kang (Butterworth-Heinemann, Oxford, 2005) pp. xi–xii.