

# Crystallography

메카트로닉스 재료개론 (MFA9008)

창원대학교 신소재공학부

정영웅



[yjeong@changwon.ac.kr](mailto:yjeong@changwon.ac.kr)  
<https://youngung.github.io>  
<https://github.com/youngung>

# Fundamentals of Crystallography

---

- ❑ How are atoms are bonded in a solid state?
- ❑ Mathematical representation of crystallographic **points, directions, and planes** (결정점, 결정방향, 결정면)
- ❑ Crystalline, crystal, single crystal / polycrystal (단결정, 다결정)
- ❑ Isotropy (등방성) and anisotropy (이방성)



# Reminder: Crystal structure of solids

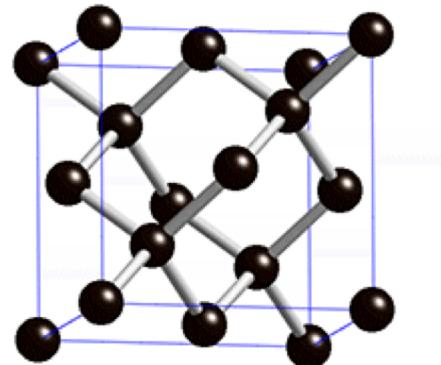
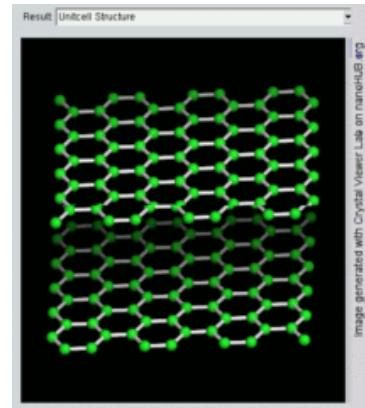
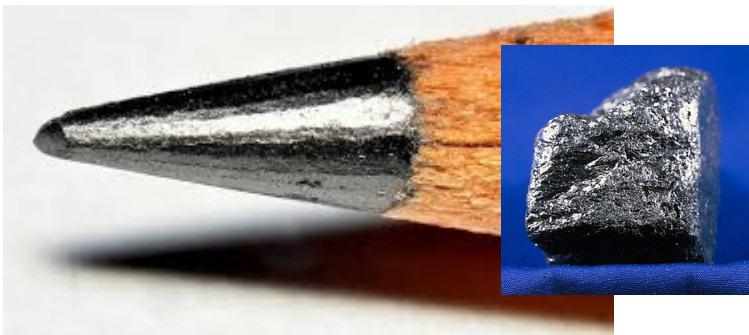


**Figure 1.1** The four components of the discipline of materials science and engineering and their interrelationship.

- We have looked at ‘atomic’ structure – bondings / electron configuration
- We now look at atoms in a bit bigger scale – the collection of atom arrangements.
- The manner the atoms (or molecules, ions) are arranged in the 3D space is termed ‘**crystal structure**’ (결정구조)
- 결정구조학 (신기삼 교수님)



# Reminder: Material properties are influenced by crystal structure



Images from wikipedia.org



# Objectives

---

- 원자/분자 구조에서의 결정질(crystalline)과 비결정질(non-crystalline amorphous) 재료의 차이를 설명할 수 있다.
- 세 방향 지수가 주어질 때, 단위정(unit cell) 내에 이 지수와 일치한 방향을 그릴 수 있다.
- 단위정 내에 그려진 면(plane)의 밀러 지수(Miller index)를 표기할 수 있다.
- 단결정(single crystal)과 다결정(polycrystal) 재료를 구분할 수 있다.
- 재료 성질에서 등방성(isotropy)과 이방성(anisotropy)의 차이를 설명할 수 있다.



# What do you mean by crystal?

□ Solid materials – collection of ‘atomic’ bonds that are placed densely.

- 고체상태의 재료는 원자들이 ‘빽빽하게’ 모여 이뤄진다.
- 이때 원자가 ‘반복적’ 혹은 ‘주기적’인 배열이 장범위(long-range)에서 이뤄진다면, 이러한 재료를 우리는 ‘결정질(crystalline) 재료’라 부른다.
- 일반적으로, 모든 금속과 대부분의 세라믹재료, 그리고 몇몇 폴리머는 ‘응고’ 과정중에서 결정 구조를 형성한다.
- 결정화되지 않은 재료 (즉 장범위 규칙성이 부재)를 우리는 비결정질 혹은 비정질이라 부른다.

□ How the atom bundles are arranged in the 3D space?

- 따라서, 결정 구조는 이렇게 결정질 고체내의 원자(혹은 이온, 분자)의 배열에서의 ‘규칙성’과 밀접한 관계를 가진다.



# Crystalline material. Crystal. (결정)

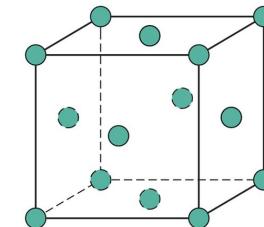
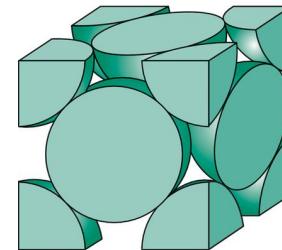
**원자구 모델**(Atomic hard-sphere model): 원자(이온, 분자)를 일정한 지름을 갖는 딱딱한 구로 생각하는 접근법. 이에 따르면, 최인접 원자(nearest atom)들은 서로 '접촉'하고 있다고 생각한다.

앞으로 우리는 원자구 모델 (hard-sphere model)에 국한하여 논의하겠다.

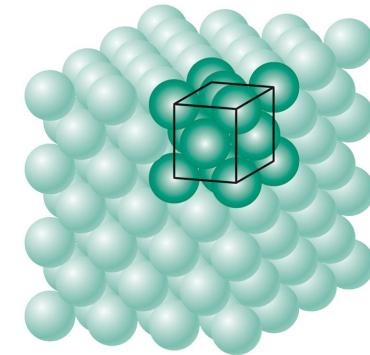
**Lattice (격자)**: array of points that represent the center of the hard-sphere atoms; 원자구 모델에서 원자들의 중심점의 배열이 격자

Reminder: 원자가 '반복적' 혹은 '주기적'인 배열이 장범위(long-range)에서 이뤄진다면, 이러한 재료를 우리는 '결정질(crystalline) 재료'라 부른다.

**Unit cell (단위정)**: 결정질은 '반복성', '주기성'이 있다. 결정 구조를 나타내는 '반복되는 단위'를 단위정이라 정의해서 사용하는 것이 편리하다. 단위정을 사용하면, 결정의 '대칭성'에 대해 시각적으로 살펴보는데 편리하다.



현재 여러분들이 보고 있는 슬라이드에 나타난 '결정구조'는 '입방체'라 부른다.



# 반복성, 주기성, 대칭

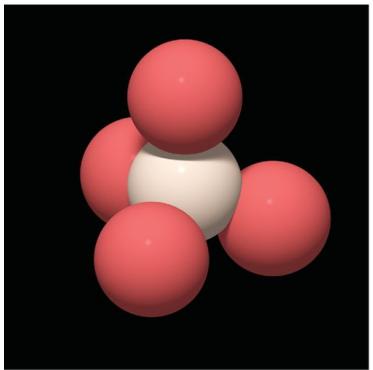
---

- 결정구조를 대표하는 특성은, 반복성과 주기성이다.
- 반복성과 주기성은 수학적 '대칭성'으로 표현 가능하다.
- 따라서 결정 구조는 '대칭성'을 가져야 한다.
- 이때 두 가지 대칭성 존재: rotational, translation



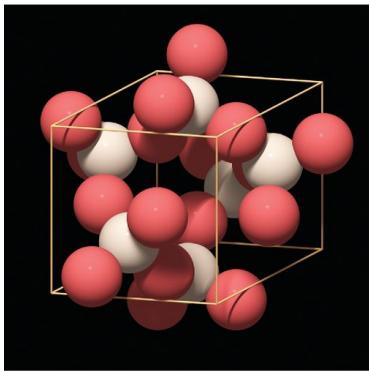
# Atomic bonding – Repetition (periodicity)

Quartz:  $\text{SiO}_2$



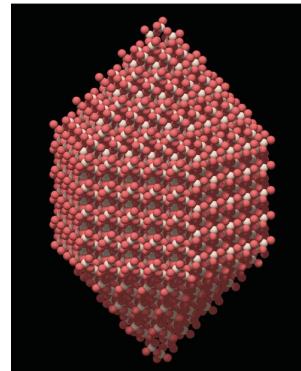
(a)

Courtesy of Amir C. Akhavan



(b)

Courtesy of Amir C. Akhavan



(c)

Courtesy of Amir C. Akhavan



(d)

Courtesy of irocks.com

Atomic bonding

Red sphere: Oxygen  
White sphere: Silicon

The participant atoms are also shared with another bonding basis

This can be repeated many times in 3D space

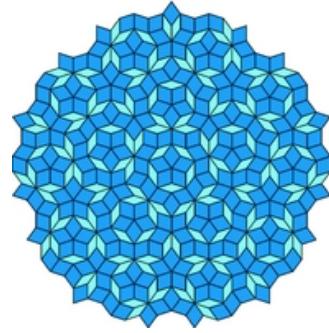
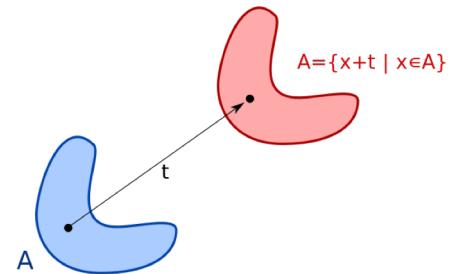
If this repetition occurs many more times?



# Analogy to tiling



Translational symmetry



Rotational symmetry

Rotational symmetry in crystal structure is related with diffraction patterns of crystal structure



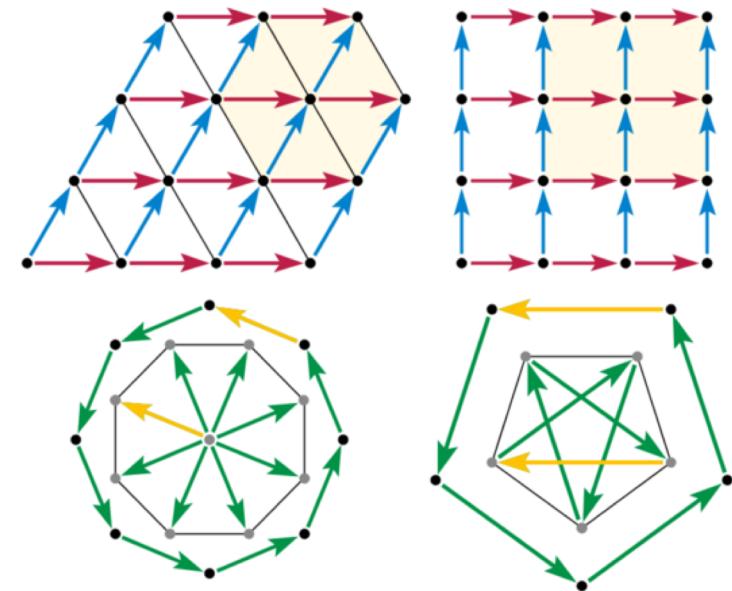
# Rotational Symmetries and Crystals

고체 원자는 ‘빽빽한’ 원자의 모임. 따라서 대칭성을 가진 결정 구조를 띠면서, 또한 삼차원 공간을 translation symmetry를 사용하여 빈틈없이 빽빽하게 채워야 한다. 이러한 조건을 만족하는 rotational symmetry는 ...

Restrictions: 2-fold, 3-fold, 4-fold, 6-fold.

8-fold, 5-fold are not compatible  
(thus cannot completely fill the space)

Mathematicians found a way to fill the space  
with unit shapes with 5,8-fold symmetries



Dan Shechtman (2011 Nobel Prize in Chemistry)

Materials scientists found an actual crystal structures (later called quasi-crystal) that has 5, 8-fold symmetries according to diffraction patterns



# 결정학적 위치, 방향, 면

- 결정학(crystallography)는 결정구조에 대한 학문
- 결정 구조를 가진 결정질 재료를 다룰 때, 단위정내의 특정한 위치, 결정 방향, 결정면을 명확하게 나타내는 객관적인 '약속'이 필요하다.
- 공학에서는 그러한 객관성을 '수학적 방법'을 사용하여 얻는다.
- 여러분들은 재료 공학도로써, 1. 단위정내의 특정한 위치, 2. 결정 방향, 3. 결정면을 세개의 지수(index) 혹은 정수(integer)를 사용하여 표식하는 표기법에 대해 배운다.
- 다시 한번 얘기하자면, 이러한 표기법을 전세계 어디서나 재료공학 전공자라면 공히 익혀 사용한다.

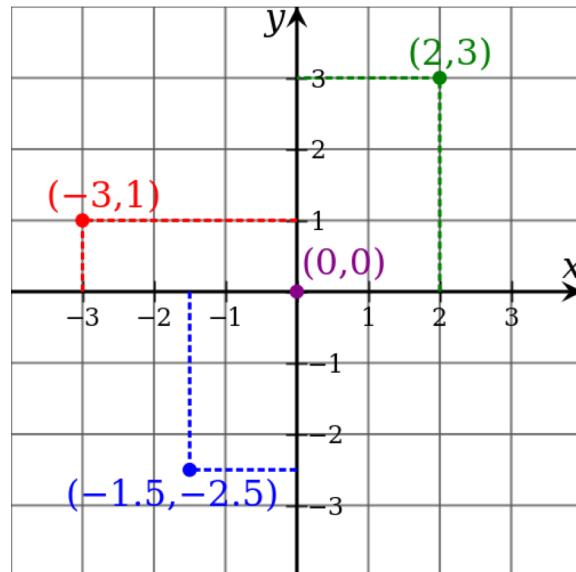


# Coordinate system for crystal structures

좌표계 (coordinate system):  
한 점의 위치를 수학적으로 나타냄

3차원 좌표계 ( $x, y, z$  좌표)  
2차원 좌표계 (GPS, 위도 경도)

Cartesian Coordinate system



결정 구조에서도 원자의 위치를 상대적으로 표현하기 위한 좌표계가 필요.

그러한 좌표계를 우리는 '결정계'(crystal system)라 부른다. 한 결정계는 한가지 특정한 결정구조를 대표하며, 이는 대부분 해당 Unit cell로 표현된다.

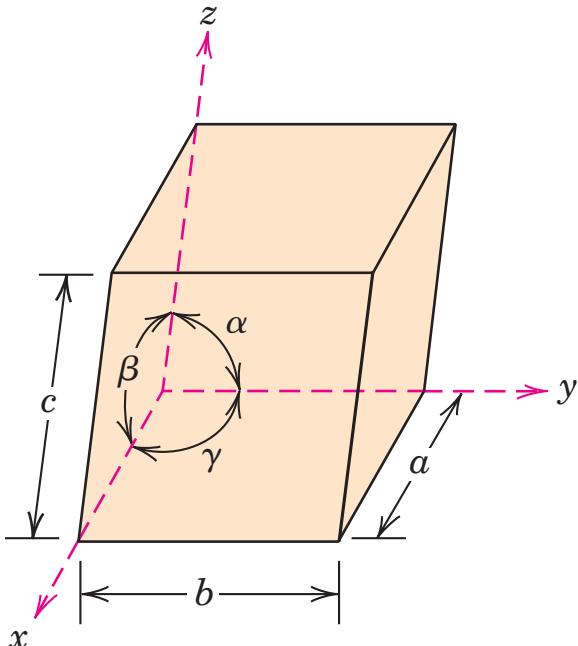


# Crystal Systems #1 Introduction 결정계

**Unit cell:** a repetitive volume which contains the complete lattice pattern of a crystal.

따라서, unit cell을 반복적으로 사용하여 삼차원 공간을 완벽히 채울 수 있다

Warning: 꼭, 직각 좌표계일 필요는 없다.



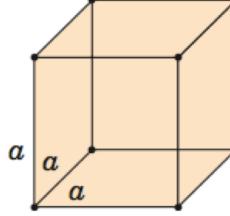
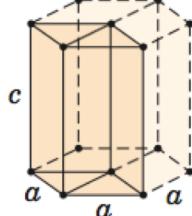
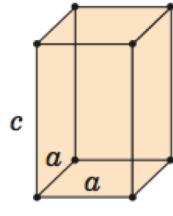
격자 상수  $a, b, c$  (의 상관관계) 와  $\alpha, \beta, \gamma$  가 결정계의 종류를 정의한다

$a, b$ , and  $c$  are the lattice constants (격자 상수)  
 $\alpha, \beta, \gamma$ : Interaxial angles, direction cosines between the three axes of unit cell.

7 Crystal system (표 3.1)  
14 Bravais crystal lattices



# Crystal Systems #1

<i>Crystal System</i>	<i>Axial Relationships</i>	<i>Interaxial Angles</i>	<i>Unit Cell Geometry</i>
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
hexa-: forming compounds words having the sense of '6'			
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
tetra-: forming compounds words having the sense of '4'			

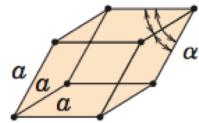


# Crystal Systems #2

Rhombohedral  
(Trigonal)

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



-hedral: '- 개의 면(변)으로 된'

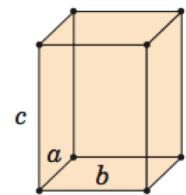
rhombus: 마름모꼴 (모든 변의 길이가 동일)

Trigonal: 'three' equal and equally inclined axes

Orthorhombic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

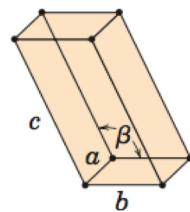


Pseudoorthorhombic의 축약  
Ortho-: 직각 (올바른)

Monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$

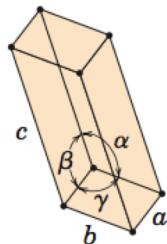


Mono- : 하나  
-clinic: (기울다)

Triclinic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Tri- : 셋  
-clinic: (기울다)



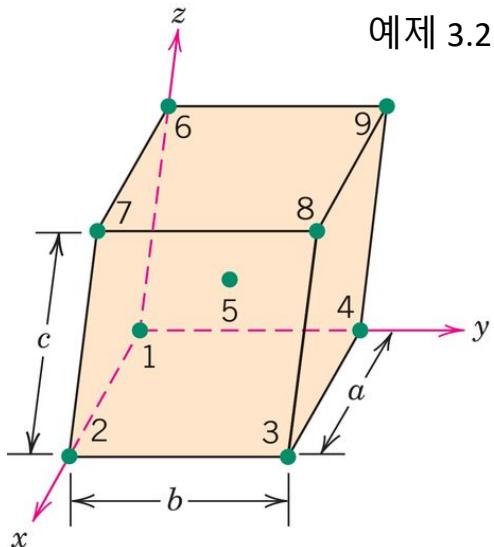
Crystal family	Lattice system	14 Bravais lattices				
		Primitive	Base-centered	Body-centered	Face-centered	Rhombohedrally-centered
	triclinic					
	monoclinic	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$ 	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$ 			
	orthorhombic	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	
	tetragonal	$a \neq c$ 		$a \neq c$ 		
hexagonal	rhombohedral					$\gamma = 120^\circ$ 
	hexagonal	$\gamma = 120^\circ$ 				
	cubic					

Bravais 14 lattices

# Point Coordinates (Unit cell 내의 점좌표)

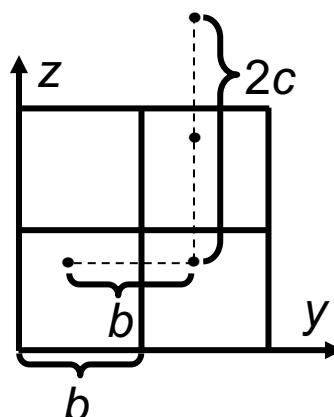
Translation: integer multiple (정수배) of lattice constants

→ identical position in **another unit cell**



Point Number	Fractional Lengths			Point Coordinates
	x axis	y axis	z axis	
1	0	0	0	0 0 0
2	1	0	0	1 0 0
3	1	1	0	1 1 0
4	0	1	0	0 1 0
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
6	0	0	1	0 0 1
7	1	0	1	1 0 1
8	1	1	1	1 1 1
9	0	1	1	0 1 1

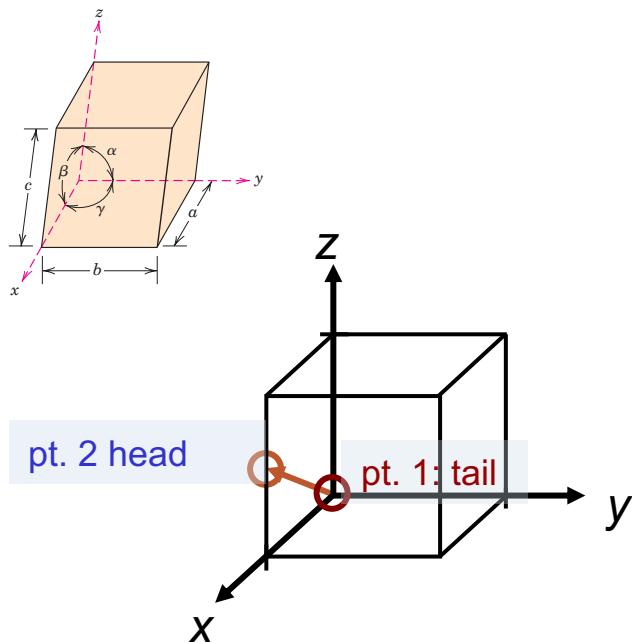
Unit cell이 3차원 공간에서 '반복'된다. Unit cell을 벗어난 공간은 또 다른 'unit cell'에 귀속.



translational symmetry



# Crystallographic Directions (i)



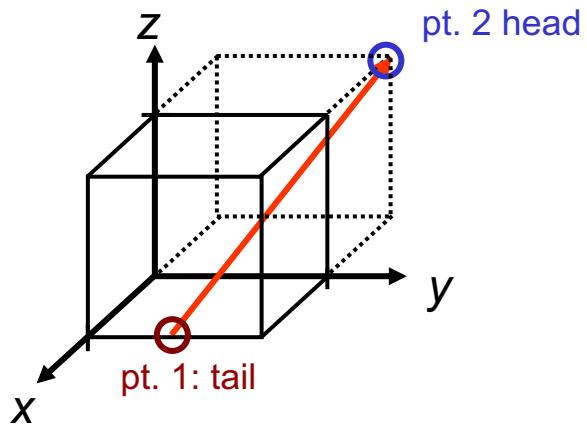
## Algorithm to obtain direction indices (p. 56)

1. x-y-z 좌표계를 설정한다. 편의상 원점은 단위정의 모서리로.
2. 두점을 잇는 방향을 벡터로 표현하고, 꼬릿점 pt. 1:  $(x_1, y_1, z_1)$ ; 그리고 머릿점, pt. 2:  $(x_2, y_2, z_2)$  좌표를 정한다.
3. 꼬릿점의 좌표를 머릿점의 좌표에서 빼준다. 즉  $(x_2 - x_1, y_2 - y_1, z_2 - z_1)$
4. 위의 좌표 차이값을 각각의 격자 상수  $a, b, c$ 로 나눈다:  
$$\frac{x_2 - x_1}{a} \quad \frac{y_2 - y_1}{b} \quad \frac{z_2 - z_1}{c}$$
5. 필요하다면 위의 수를 특정수를 나누거나 곱해 모두 '정수'로 나타낸다.
6. 얻어진 '정수'형태의 지수들을 콤마로 분리하지 않고 bracket을 사용하여 나타낸다:  $[uvw]$
7. 음수가 있다면 overbar 를 사용하여 나타낸다.

$$\frac{a-0}{a} \quad \frac{0-0}{b} \quad \frac{c/2-0}{c} \Rightarrow 1, 0, 1/2 \Rightarrow 2, 0, 1 \Rightarrow [201]$$



# Crystallographic Directions (ii)



$$\text{pt. 1 } x_1 = a, \quad y_1 = b/2, \quad z_1 = 0$$

$$\text{pt. 2 } x_2 = -a, \quad y_2 = b, \quad z_2 = c$$

$$\frac{-a-a}{a} \quad \frac{b-b/2}{b} \quad \frac{c-0}{c}$$

$$\Rightarrow -2, 1/2, 1$$

지수(index)는 정수(integer)로 표현해야 한다.  
따라서 위의 숫자 모두에 공히 2를 곱하면...

$$-4, 1, 2 \Rightarrow \bar{[4}12]$$

면방향 지수는 쉼표를 지우고 지수를 bracket 기호 '[' ]'에 적는다. 그리고 minus 값은 숫자 위에 overbar를 사용해 표기 한다.



# Crystallographic Directions (iii)

이번엔, 반대로 주어진 방향 지수를 가지고서 실제  
cubic unit cell 내에 해당 방향을 화살표로  
표기해보자.

예제 3.4

Draw  $[1\bar{1}0]$  direction, that originates from 000 point

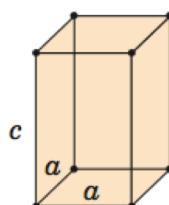
1.  $[1\bar{1}0]$  leads to  $uvw$  of 1, -1, and 0.
2.  $x_0, y_0, z_0 = 0 \cdot a, 0 \cdot b, 0 \cdot c$
3.  $x_1, y_1, z_1 = 1 \cdot a, -1 \cdot b, 0 \cdot c$

Practice) Let's construct the direction step by step



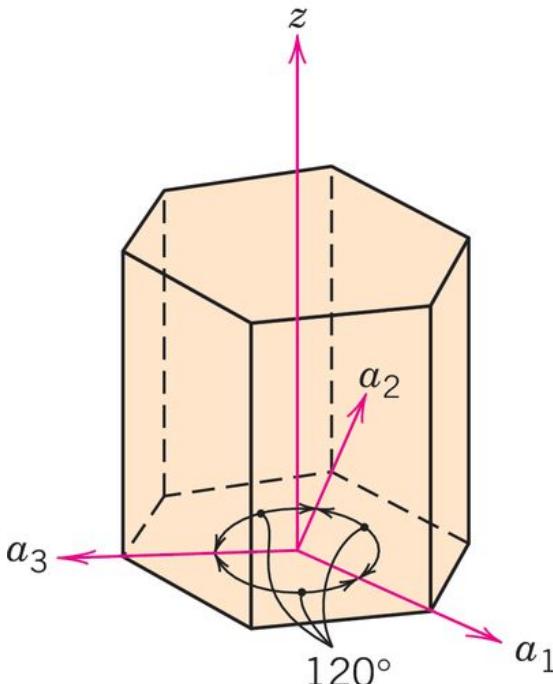
# Family of equivalent crystal directions

- 한 결정 구조에서 몇 개의 다른 방향 지수를 갖는 비평행 방향들이 실제로는 '동등한' (equivalent) 경우가 있다.
  - 이때의 '동등성'은 '원자간의 거리' 등의 실제 물리적 성질이 같다는 의미이다.
  - 예를 들면, cubic structure에서  $[100]$ ,  $[\bar{1}00]$ ,  $[010]$ ,  $[0\bar{1}0]$ ,  $[001]$ ,  $[00\bar{1}]$  방향들은 동등하다.
  - 편의상 동등한 방향들을 묶어 '족' (Family)라고 하며 각괄호를 사용하여 표기한다. (예:  $\langle 100 \rangle$ ).
- 
- Cubic crystal structure의 경우, 지수의 차례나 부호에 관계없이 같은 족의 지수를 갖는 방향은 결정학적으로 동등하다. 예를 들어  $[123]$ 과  $[23\bar{1}]$ 는 동등하다.
  - (주의) 하지만 이러한 관계가 모든 결정 구조에서 성립되는 것은 아니다.
  - 예를 들어 Tetragonal 결정계에서  $[100]$  와  $[010]$ 은 동등하나,  $[001]$ 과는 다르다 (설명할 수 있겠는가?)



# Hexagonal Close-Packed (HCP) Coordinates System

- 육방의 경우, 동등한 방향 (equivalent direction)이 같은조의 방향 지수를 갖지 않는 경우가 생긴다.
- 예를 들어, 육방 구조에서 [111] 방향과 [ $\bar{1}01$ ] 방향은 동등하다.
- 이를 Miller-Bravais 좌표계를 사용하여 해결할 수 있다.
- Miller-Bravais 좌표계는 3개의 축을 한 면(basal 면이라 부름)에 놓고, 각축간의 각도를 120도로 유지, 나머지 한축을 그 면에 수직방향으로 놓은 좌표계이다.



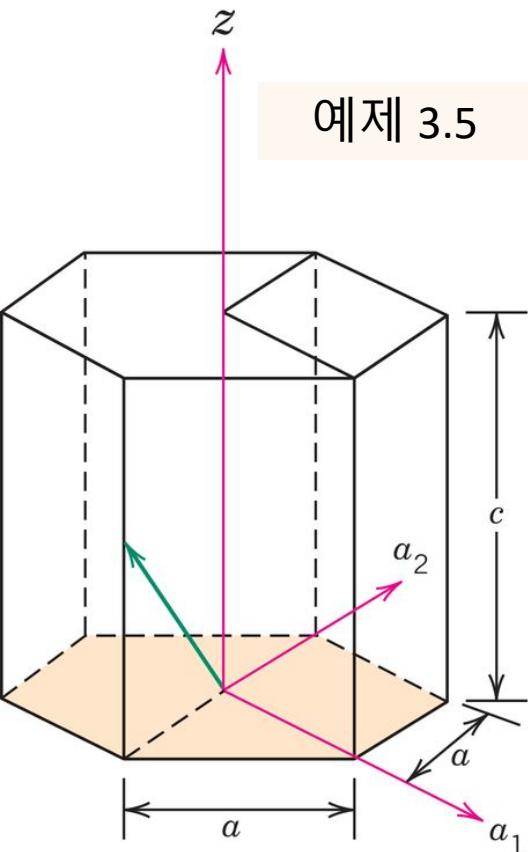
[ $u'v'w'$ ]  
[ $uvtw$ ] in hexagonals

3차원 공간, 하지만 4개의 축 그리고  
4개의 지수 (4개의 coordinates)

따라서, 4개의 지수 중 하나는  
독립적이지 않다 ( $t = -u - v$ )



# HPC Crystallographic Directions (ii)



예제 3.5

Find the [uvtw] of the direction marked as the green arrow

[uvw] 와 [uvtw] 관계

네 지수법의 u,v,t 는 basal 면의  $a_1, a_2, a_3$  축상의 벡터  
지수와 연관되며, w는 z축과 연관된다.

3지수계를 Miller-Bravais 4지수계로 전환하는 방법:

See Eqs. 3.3a – 3.3d

$$[UVW] \rightarrow [uvtw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = (-u - v)$$

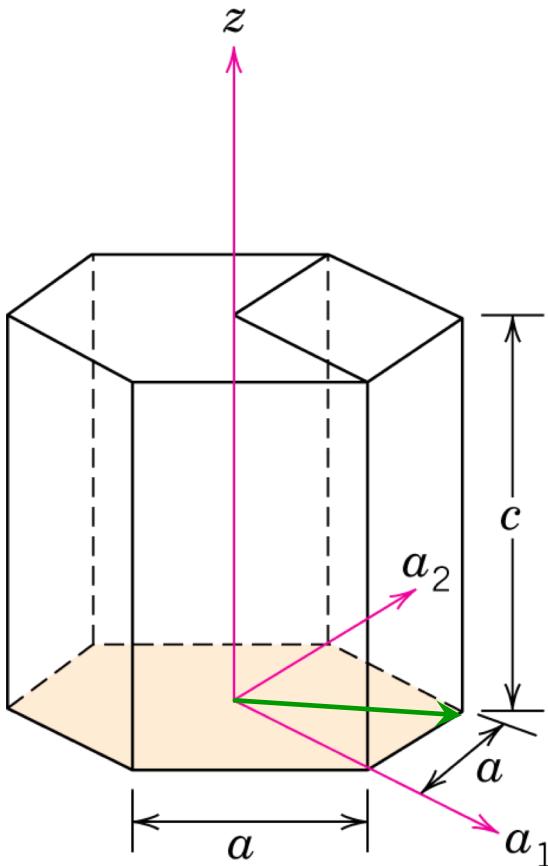
$$w = W$$

예제. [010] 을 Miller-Bravais 4지수계로 바꾸면,

$$u = \frac{1}{3}(0 - 1), v = \frac{1}{3}(2 - 0), t = \frac{1}{3} - \frac{2}{3}, w = 0$$



# HPC Crystallographic Directions (iii)



Determine indices for green vector

Example

- |   | $a_1$ | $a_2$ | $z$ |
|---|-------|-------|-----|
| 1. Tail location                                | 0     | 0     | 0   |
| Head location                                   | $a$   | $a$   | 0   |
| 2. Normalized                                   | 1     | 1     | 0   |
| 3. Reduction                                    | 1     | 1     | 0   |
| 4. Brackets                                     | [110] |       |     |
| 5. Convert to 4-axis parameters (eq 3.3a- 3.3d) |       |       |     |

$$u = \frac{1}{3}[(2)(1) - (1)] = \frac{1}{3} \quad v = \frac{1}{3}[(2)(1) - (1)] = \frac{1}{3}$$

$$t = -\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right) = -\frac{2}{3} \quad w = 0$$

6. Reduction & Brackets

$$1/3, 1/3, -2/3, 0 \Rightarrow 1, 1, -2, 0 \Rightarrow [11\bar{2}0]$$



# Example

$$[UVW] \rightarrow [uvw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

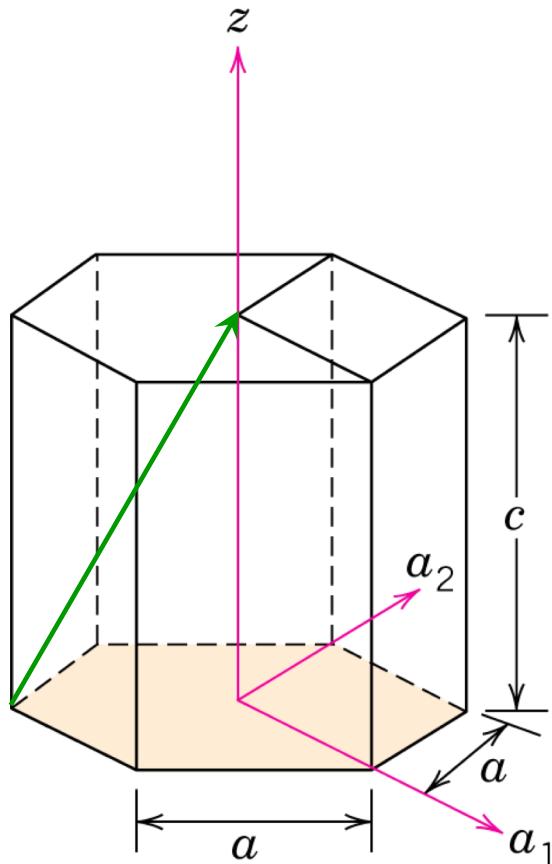
$$t = (-u - v)$$

$$w = W$$

Determine indices for green vector

$a_1, a_2, z$  세축으로 이루어진 좌표계로 보아라

$a_1$	$a_2$	$z$
-------	-------	-----



- 1-1. Tail location       $-a$        $-a$       0
- 1-2. Head location      0      0       $c$
2. Subtraction       $a$        $a$        $c$
3. Normalize      1      1      1
4. Reduction      1      1      1
5. Brackets      [111]
6. Convert to 4-axis parameters (eq 3.3a- 3.3d)

$$u = \frac{1}{3}(2 \times 1 - 1) \quad v = \frac{1}{3}(2 \times 1 - 1)$$

$$t = -\frac{1}{3} - \frac{1}{3} \quad w = 1$$

7. Reduction & Brackets

$$1/3, 1/3, -2/3, 1 \quad \Rightarrow \quad 1, 1, -2, 3$$

[11̄23]



# Example

$$[UVW] \rightarrow [uvw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

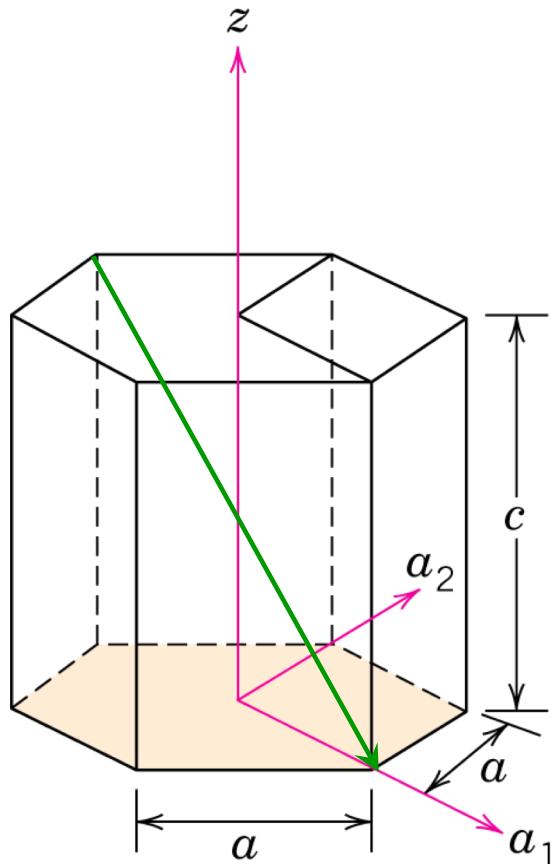
$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = (-u - v)$$

$$w = W$$

Determine indices for green vector

$a_1, a_2, z$  세축으로 이루어진 좌표계로 보아라



- |   | $a_1$       | $a_2$ | $z$ |
|---|-------------|-------|-----|
| 1-1. Tail location                              | -a          | 0     | c   |
| 1-2. Head location                              | a           | 0     | 0   |
| 2. Subtraction                                  | 2a          | 0     | -c  |
| 3. Normalize                                    | 2           | 0     | -1  |
| 4. Reduction                                    | 2           | 0     | -1  |
| 5. Brackets                                     | [20\bar{1}] |       |     |
| 6. Convert to 4-axis parameters (eq 3.3a- 3.3d) |             |       |     |

$$u = \frac{1}{3}(2 \times 2 - 0) \quad v = \frac{1}{3}(2 \times 0 - 2)$$

$$t = -\frac{4}{3} + \frac{2}{3} \quad w = -1$$

7. Reduction & Brackets

$$\frac{4}{3}, -\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}, -1 \Rightarrow 4, -2, -2, -3$$

$$[4\bar{2}\bar{2}\bar{3}]$$



# Example

$$[UVW] \rightarrow [uvw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

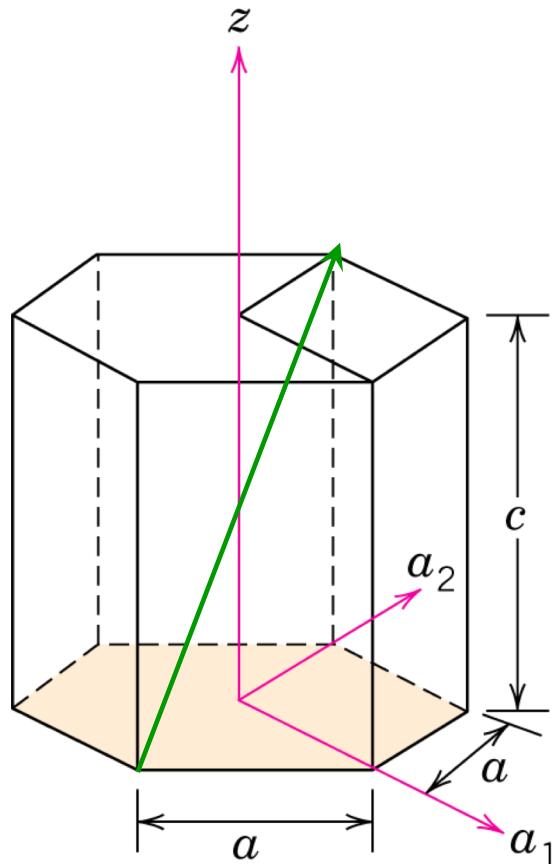
$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = (-u - v)$$

$$w = W$$

Determine indices for green vector

$a_1, a_2, z$  세축으로 이루어진 좌표계로 보아라



- |   | $a_1$ | $a_2$ | $z$ |
|---|-------|-------|-----|
| 1-1. Tail location                              | 0     | -a    | 0   |
| 1-2. Head location                              | 0     | a     | c   |
| 2. Subtraction                                  | 0     | 2a    | c   |
| 3. Normalize                                    | 0     | 2     | 1   |
| 4. Reduction                                    | 0     | 2     | 1   |
| 5. Brackets                                     | [021] |       |     |
| 6. Convert to 4-axis parameters (eq 3.3a- 3.3d) |       |       |     |
- 1-1. Tail location      0      -a      0  
 1-2. Head location      0      a      c  
 2. Subtraction      0      2a      c  
 3. Normalize      0      2      1  
 4. Reduction      0      2      1  
 5. Brackets      [021]  
 6. Convert to 4-axis parameters (eq 3.3a- 3.3d)

$$u = \frac{1}{3}(2 \times 0 - 2) \quad v = \frac{1}{3}(2 \times 2 - 0)$$

$$t = -\frac{2}{3} + \frac{4}{3} \quad w = 1$$

7. Reduction & Brackets

$$-2/3, 4/3, -2/3, 1 \Rightarrow -2, 4, -2, 3$$

$$[\bar{2}\bar{4}\bar{2}\bar{3}]$$



# Example

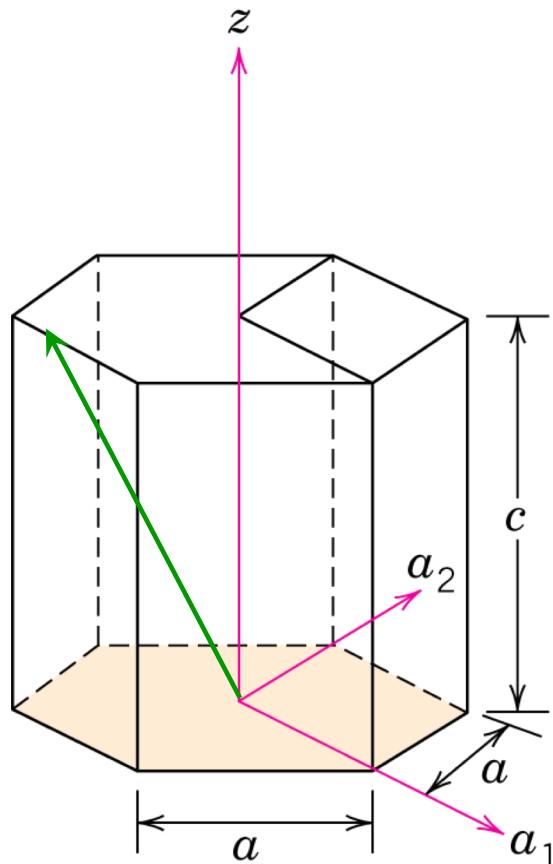
$$[UVW] \rightarrow [uvtw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = (-u - v)$$

$$w = W$$



Determine indices for green vector

$a_1, a_2, z$  세축으로 이루어진 좌표계로 보아라

$a_1$	$a_2$	$z$
-------	-------	-----

- 1-1. Tail location      0      0      0
- 1-2. Head location     $-2/3a$      $-a$      $c$
2. Subtraction           $-2/3a$      $-a$      $c$
3. Normalize             $-2/3$        $-1$       1
4. Reduction            -2      -3      3
5. Brackets                 $[\bar{2}\bar{3}3]$
6. Convert to 4-axis parameters (eq 3.3a- 3.3d)

$$u = \frac{1}{3}(2 \times (-2) + 3) \quad v = \frac{1}{3}(2 \times (-3) + 2)$$

$$t = \frac{1}{3} + \frac{4}{3} \quad w = 3$$

7. Reduction & Brackets

$$-1/3, -4/3, 5/3, 3 \quad \Rightarrow \quad -1, -4, 5, 9$$

$[\bar{1}\bar{4}59]$



# Example

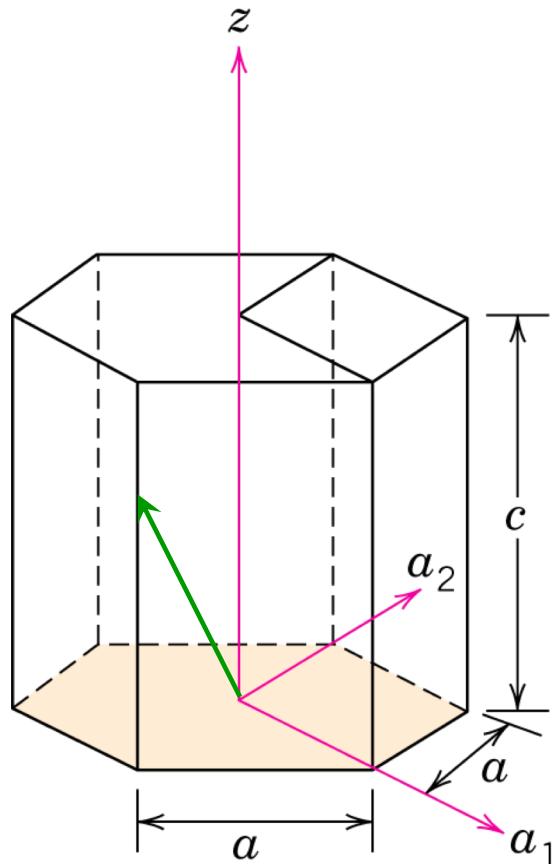
$$[UVW] \rightarrow [uvtw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = (-u - v)$$

$$w = W$$



Determine indices for green vector

$a_1, a_2, z$  세축으로 이루어진 좌표계로 보아라

$a_1$	$a_2$	$z$
-------	-------	-----

- 1-1. Tail location      0      0      0
- 1-2. Head location      0      -a      2/3c
2. Subtraction      0      -a      2/3c
3. Normalize      0      -1      2/3
4. Reduction      0      -3      2
5. Brackets      [0̄32]
6. Convert to 4-axis parameters (eq 3.3a- 3.3d)

$$u = \frac{1}{3}(2 \times 0 - (-3)) \quad v = \frac{1}{3}(2 \times (-3) - 0)$$

$$t = -1 + 2 \quad w = 2$$

7. Reduction & Brackets

1,-2, 1, 2

=> 1,-2,1, 2

[1̄212]



# HCP Crystallographic Directions (ii)

$$[UVW] \rightarrow [uvw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = (-u - v)$$

$$w = W$$

$$[UVW] \leftarrow [uvw] ?$$

$$3u = (2U - V)$$

$$3v = (2V - U)$$

$$6v = (4V - 2U)$$

$$6v + 3u = (3V)$$

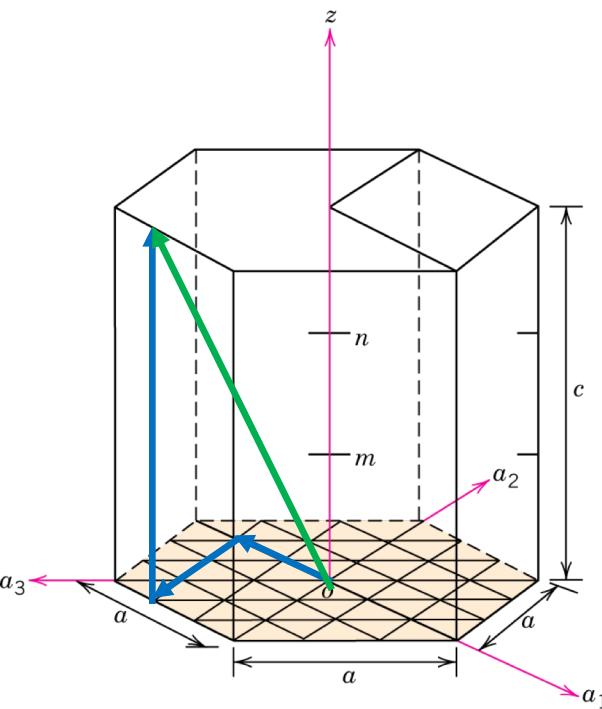
$$2v + u = V$$

$$3u = (2U - 2v - u)$$

$$4u + 2v = 2U \quad \rightarrow \quad 2u + v = U$$



# HCP Crystallographic Directions (ii)



[ $\bar{1}\bar{4}59$ ]

$$2u + v = U$$

$$u + 2v = V$$

$$2 \times (-1) - 4 = -6 = U$$

$$-1 + 2 \times (-4) = -9 = V$$

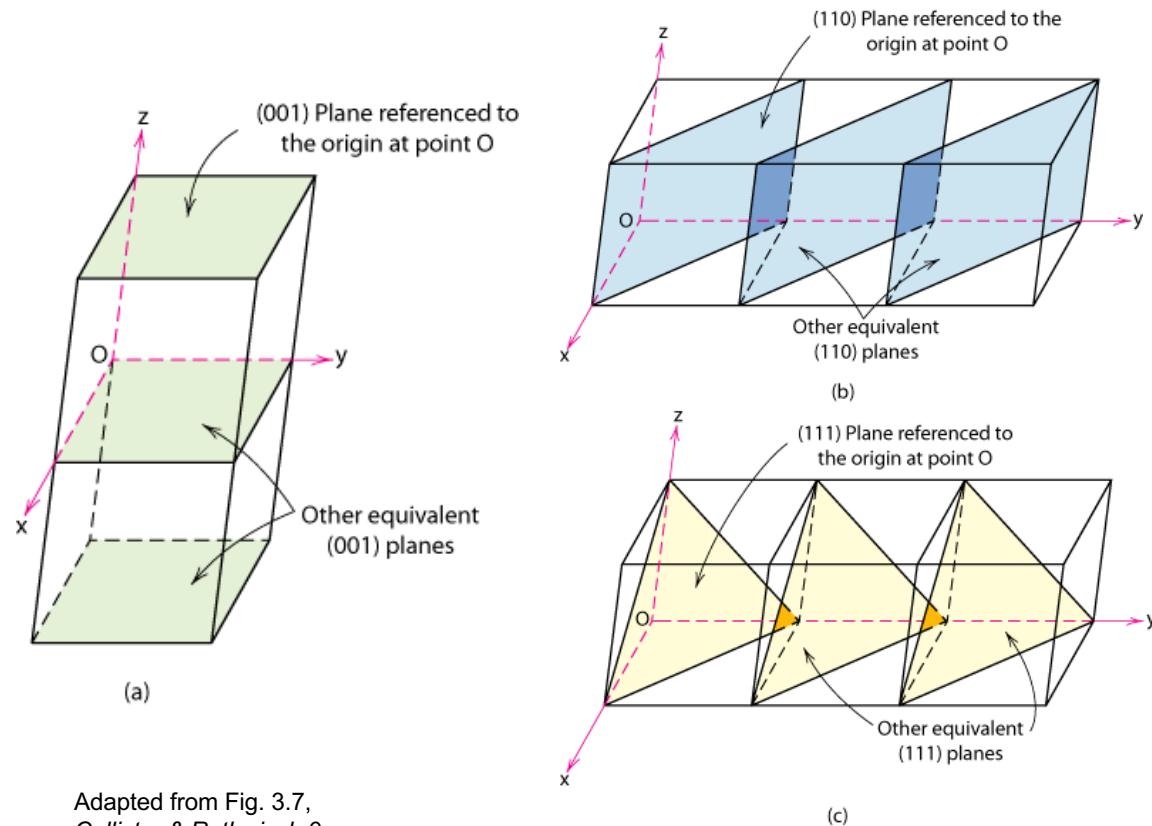
$$9 = w = W$$

$$-6, -9, 9$$

$$-2/3, -1, 1$$



# 결정면의 지수를 구하는 방식을 배우기 앞서...



Adapted from Fig. 3.7,  
Callister & Rethwisch 9e.



# Crystallographic Planes (ii)

- 결정면의 경우도 비슷한 원리로 indices를 찾는다.
- 밀러 지수 (Miller index; 보통 세 지수  $h,k,l$ 로 표기하여 나타낸다):
  - Reciprocals of the (three) axial intercepts for a plane.
  - Cleared of fractions & common multiples (정수; integer).
  - All parallel planes have the same Miller indices.

## □ Algorithm (procedure) used to determine the Miller index

1. 만약 면이 선택된 좌표의 중심을 지날 경우, 적절한 평행이동을 통해 다른 평행한 면으로 이동시키거나 다른 단위정에 새로운 좌표축 중심을 만들어야 한다.
2. 위의 과정을 통하여 결정학적 면이 3축을 만나거나 평행하게 놓이고, 여기서 각축의 면과 만나는 지점의 중심과의 거리를 격자상수  $a, b, c$ 의 단위로 표시한다. 여기서 각  $x,y,z$ 축이 교차하는 지점의 좌표를 각각  $A, B, C$ 로 표시.
3. 구해진  $A, B, C$ 의 역수를 취한다. 이때, 면과 평행한 축은 무한대에서 만나고, 그의 역수는 따라서 0이 된다.
4. 구해진 수의  $1/A, 1/B, 1/C$ 를 각각  $a, b, c$  격자 상수의 단위로 표준화한다. 즉  $\frac{a}{A}, \frac{b}{B}, \frac{c}{C}$ 를 취함.
5. 이들 세 값의 공통수를 곱하거나 나누어 최소의 정수로 나타낸다.
6. 마지막으로 parenthesis 를 사용하고, 콤마를 생략하여 나타낸다: ( $hkl$ )

$$h = \frac{na}{A}$$

$$k = \frac{nb}{B}$$

$$l = \frac{nc}{C}$$



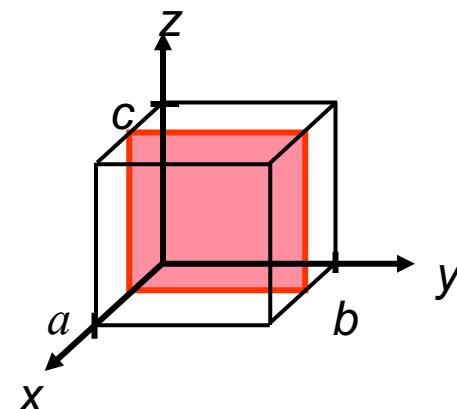
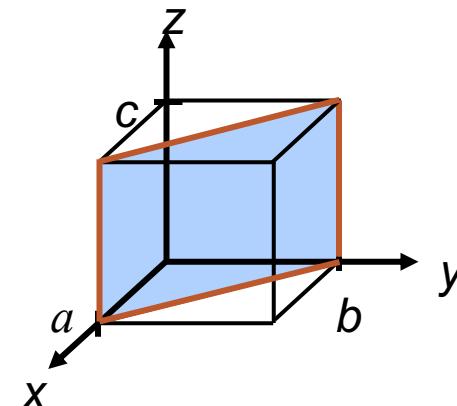
# Crystallographic Planes (iii): exercise 1

example

	$a$	$b$	$c$
1. Intercepts	1	1	$\infty$
2. Reciprocals	$1/1$	$1/1$	$1/\infty$
	1	1	0
3. Reduction	1	1	0
4. Miller Indices	(110)		

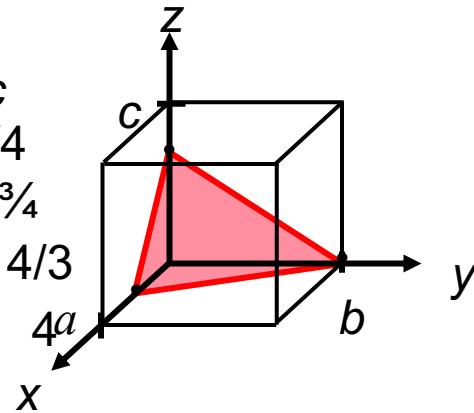
example

	$a$	$b$	$c$
1. Intercepts	$1/2$	$\infty$	$\infty$
2. Reciprocals	$1/\frac{1}{2}$	$1/\infty$	$1/\infty$
	2	0	0
3. Reduction	2	0	0
4. Miller Indices	(100)		



# Crystallographic Planes (iii): exercise 2

<u>example</u>	$a$	$b$	$c$
1. Intercepts	1/2	1	3/4
2.	1½	1/1	1¾
Reciprocals	2	1	4/3
3. Reduction	6	3	4a
4. Miller Indices	(634)		



Family of Planes  $\{hkl\}$

Ex:  $\{100\} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$



# Crystallographic Planes (iii): exercise 3 (HCP)

□ In hexagonal unit cells the same idea is used

example

$a_1$

$a_2$

$a_3$

$c$

1. Intercepts

1

$\infty$

-1

1

2. Reciprocals

1/1

1/ $\infty$

1/-1

1/1

3. Reduction

1

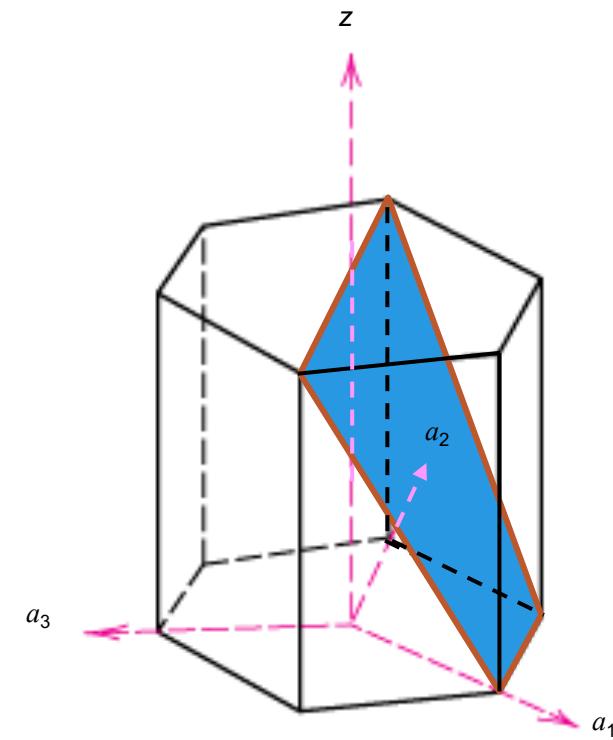
0

-1

1

4. Miller-Bravais Indices

(10 $\bar{1}$ 1)



Adapted from Fig. 3.8, Callister & Rethwisch 9e.



# Assignment

---

## □ 교재 3장 연습문제

➤ 3.12, 3.16, 3.24

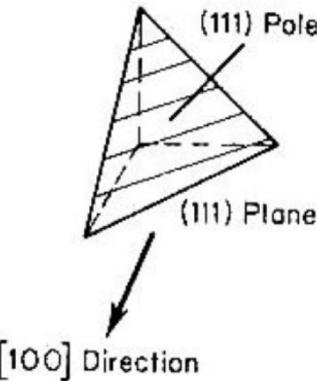
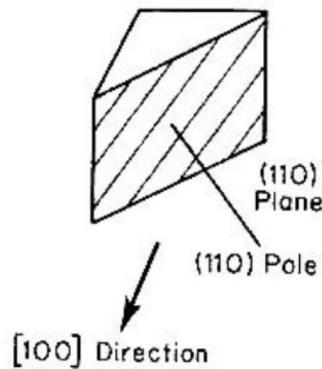
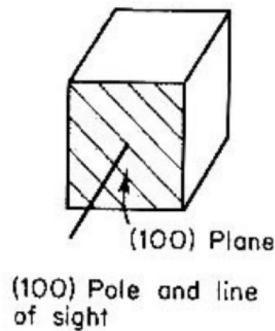


# Equivalent directions due to rotational symmetry

All crystal structures have ‘translational’ symmetry.

Crystal structures may have ‘additional’ symmetries.

Cubic crystal structure has three types of rotational symmetries:



**Four-fold  
Rotation**

**Two-Fold  
Rotation**

**Three-Fold  
Rotation**



# Equivalence in family (due symmetries)

평행한 방향(혹은 면) 사이에서의 equivalence → translational symmetry

비평행 방향(혹은 면) 사이에서의 equivalence → rotational symmetry

Cubic의 경우:

$$[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}] \rightarrow \langle 100 \rangle$$
$$(110), (101), (011), (\bar{1}10), (\bar{1}01), (0\bar{1}1) \rightarrow \{110\}$$



# Materials and Packing

## Crystalline materials...

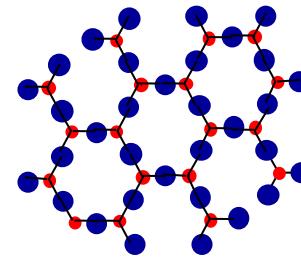
- atoms pack in periodic, 3D arrays
- typical of:
  - metals
  - many ceramics
  - some polymers

## Noncrystalline materials...

- atoms have no periodic packing
- occurs for:
  - complex structures
  - rapid cooling

"Amorphous" = Noncrystalline

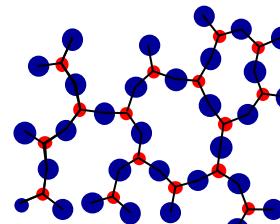
"Quasi-crystal" = ordered but not periodic



crystalline  $\text{SiO}_2$

Adapted from Fig. 3.11(a),  
*Callister & Rethwisch 9e.*

• Si      • Oxygen



noncrystalline  $\text{SiO}_2$

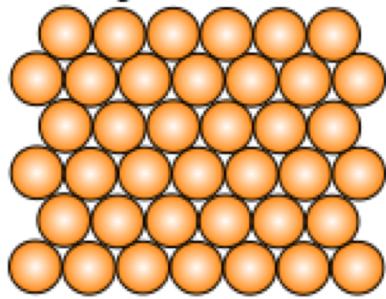
Adapted from Fig. 3.11(b),  
*Callister & Rethwisch 9e.*



# Schematic illustrations of crystalline, polycrystalline and amorphous materials

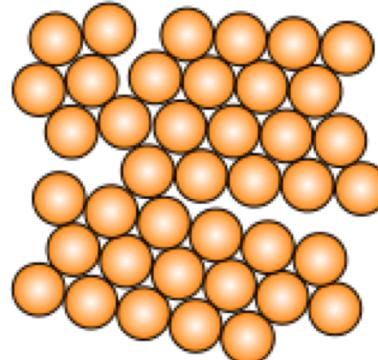
결정질

Crystalline



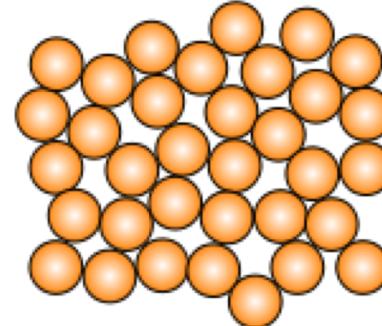
다결정질

Polycrystalline



비정질(=비결정질 noncrystalline)

Amorphous



- Grain
- Grain boundary (결정립계)

만약, 결정질이 외부의 아무런 제약없이 성장한다면, 몇몇 보석에서 나오는 것과 같이 평탄한 표면을 갖는다. Single crystal (단결정)



The schematic illustration is shown for 2D space. Remember that an actual crystal is in 3D space and the participant atoms must fill the 3D space.



# Single crystal, Polycrystal

- Single crystal: 주어진 재료 시편의 결정이 '단'하나로 구성됨
- Polycrystal: 주어진 재료 시편을 다양한 방위의 결정들로 구성됨

## 단결정의 예

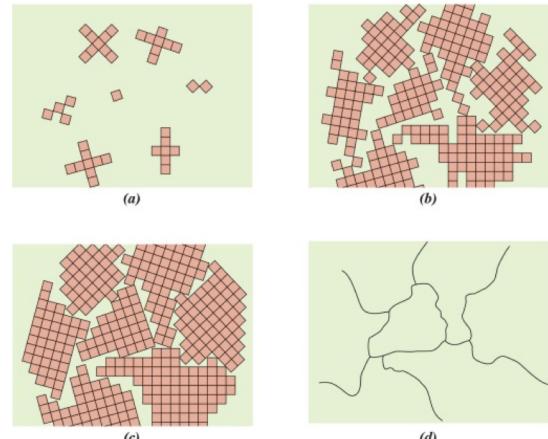


Silicon ingots

반도체, 솔라셀  
등의 주재료



응고 과정중에  
나타나는 다결정



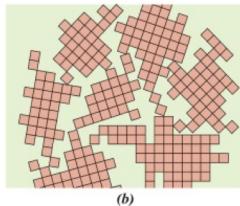
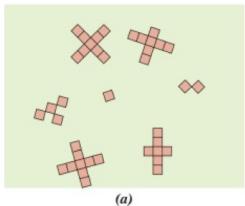
Adapted from W. Rosenhain, An Introduction to the Study of Physical Metallurgy, 2nd edition, Constable & Company Ltd., London, 1915.

Fig\_03\_10

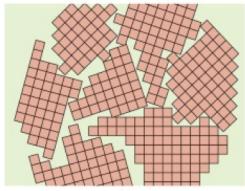


# Q: Why atoms are packed in an ordered manner?

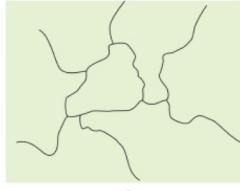
Solidification: more atoms are sticking to each other



(a)

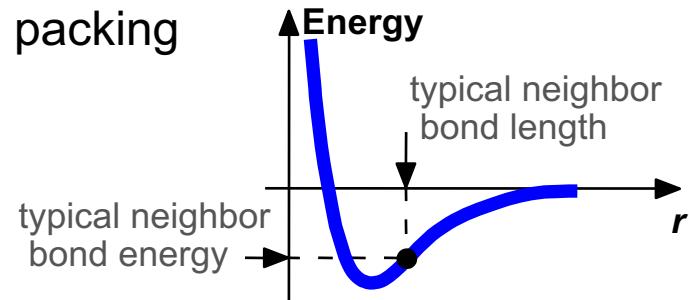
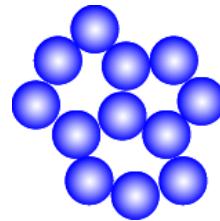


(c)

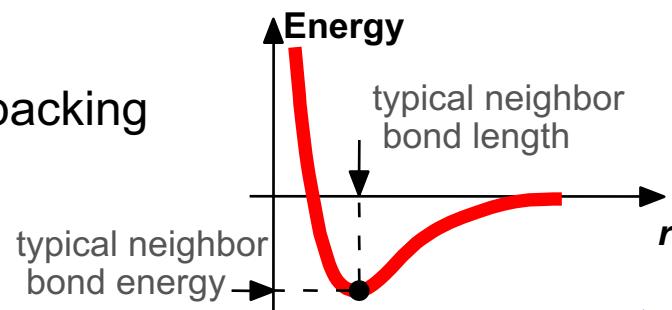
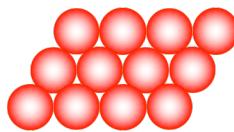


Adapted from W. Rosenhain, An Introduction to the Study of Physical Metallurgy, 2nd edition, Constable & Company Ltd., London, 1915.

- Non dense, **random** packing



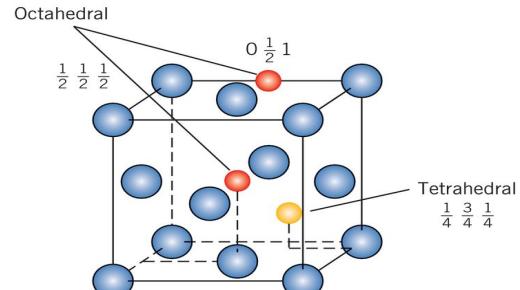
- Dense, **ordered** packing



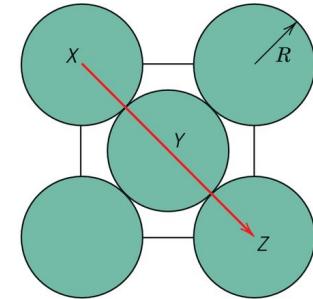
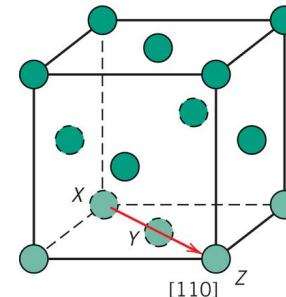
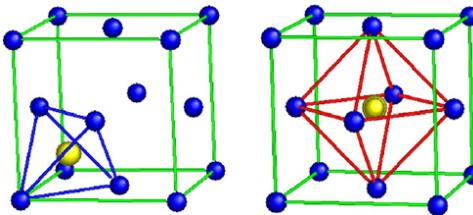
A: Dense, ordered packed structures tend to have lower energies.



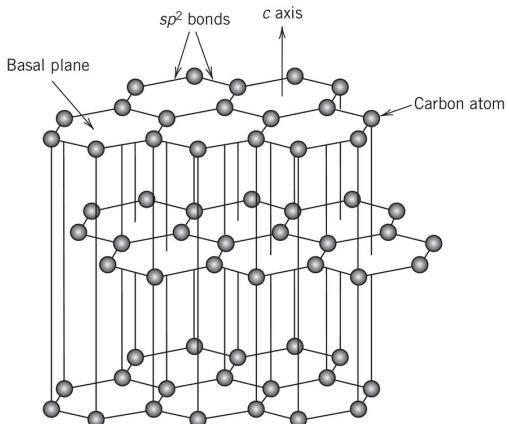
# Points, Directions and Planes in unit cell



Interstitial atoms (alloying, 합금)



Stiffness 의 방향성



흑연의 atomic bonding force –  
면방향에 따라 다름

고체상태 물질의 다양한 결정 구조적 현상을 설명할 때, 결정 구조상의 특정 위치 (point), 방향 (direction), 면(plane)을 칭하는 수학적 약속이 필요.

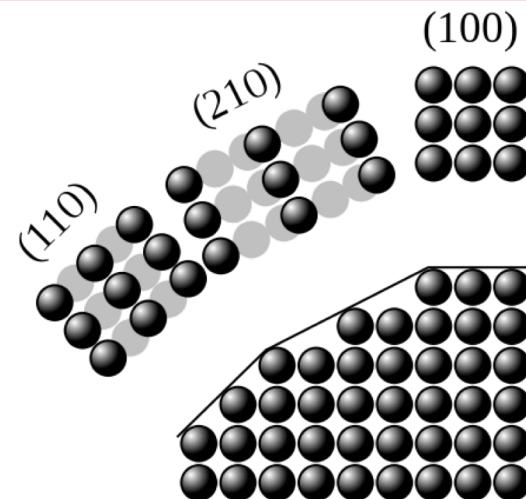


# Anisotropy

□ 단결정 재료의 물성은 측정된 결정 방향에 따라 다를 수 있다.

- 탄성 계수, 전기 전도도, 굴절률 등은 [100]이냐, [111]이냐에 따라 다른 값을 가진다.
- 물성의 방향성(즉 방향에 따라 물성이 달라지는 경향)을 **이방성**(anisotropy)라 부른다.
- 그와 반대로, 측정된 물성이 방향과 관계없을 때 **동방성**(isotropy)라 한다.
- 결정 구조의 이방성은 결정의 대칭성(symmetry)과 관계있다.
- 일반적으로 대칭성이 낮은 결정구조 일수록 이방성이 강한 경향

Dense and less dense crystallographic planes



**Table 3.3**  
Modulus of Elasticity  
Values for Several  
Metals at Various  
Crystallographic  
Orientations

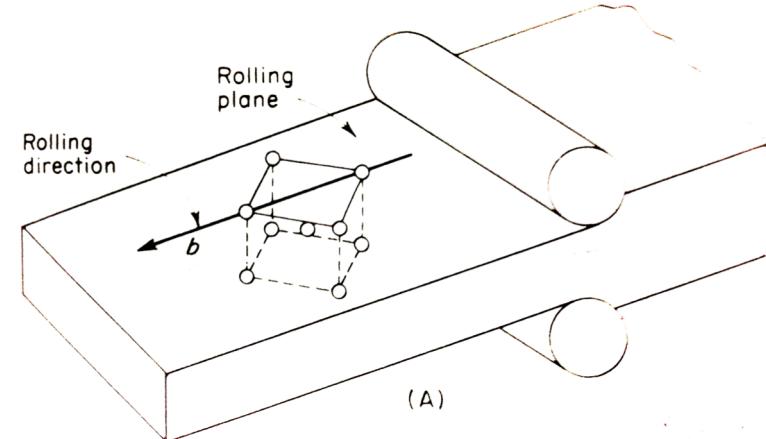
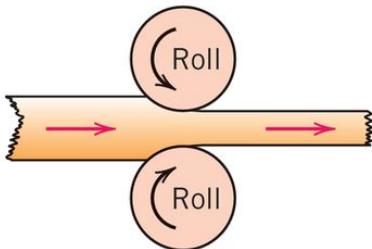
Metal	Modulus of Elasticity (GPa)		
	[100]	[110]	[111]
Aluminum	63.7	72.6	76.1
Copper	66.7	130.3	191.1
Iron	125.0	210.5	272.7
Tungsten	384.6	384.6	384.6

Source: R. W. Hertzberg, *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials*, 3rd edition.  
Copyright © 1989 by John Wiley & Sons, New York.  
Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.

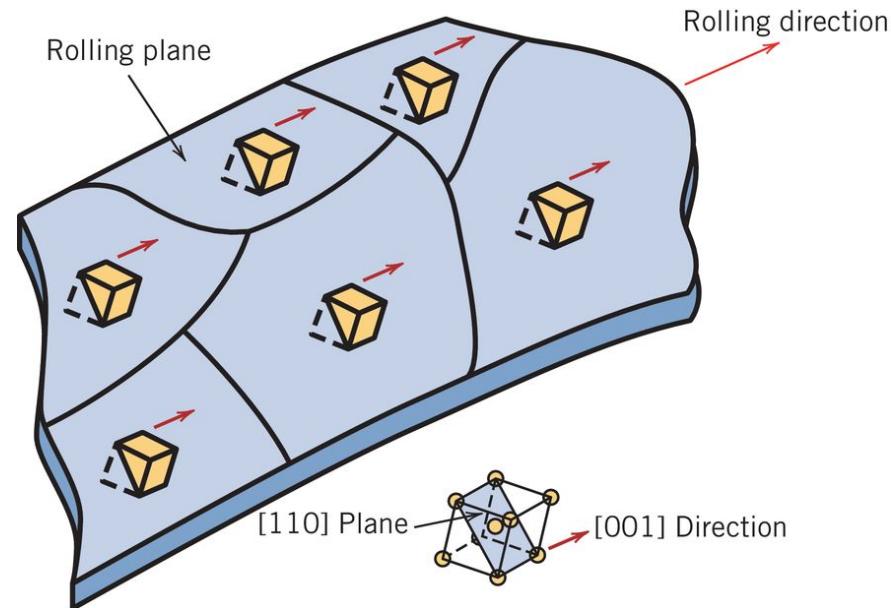
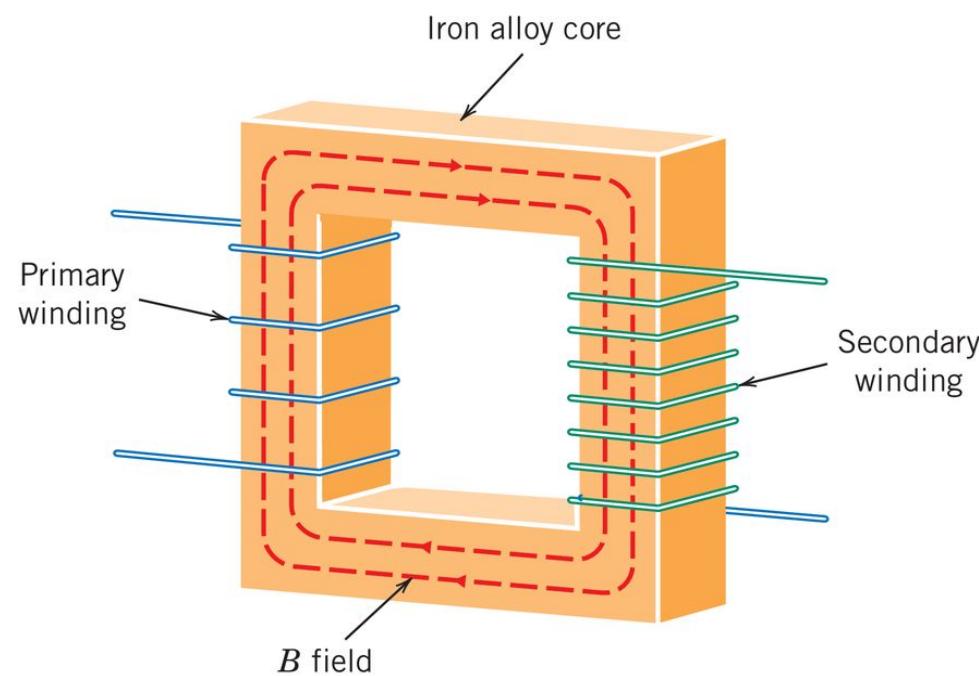


# Texture and anisotropy

- 단결정은 이방성을 띠지만 다결정 재료들은 개별 결정립(grain)의 결정 방향(방위; orientation)이 완전한 무질서(random)를 가질 수 있다.
- 이러한 경우, 개별 단결정이 가진 이방성이 드러나지 않고, 다결정 재료는 전체적으로 등방성을 보인다.
- 구조 금속 재료의 경우, 제조 공정 단계에서 다결정내 결정립들이 특정한 방위를 선호하며 나타날 수 있다.
- 이러한 경우 우리는 해당 다결정 재료가 **집합조직** (texture)을 가졌다라고 표현한다.



# 전기 강판 (철-규소 합금)



$\langle 100 \rangle$  방향이 easy-magnetization – 자기장이 이 방향으로 작용하면 변압기의 에너지 손실이 낮아진다.

$(110)[001]$  집합조직

이방성을 가진 전기강판은  
포스코의 주력 상품중의 하나.

