

Crystallography and Anisotropy

금속가공학특론 (AMB2004)

창원대학교 신소재공학부
정영웅



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)
- ❑ Orientation and its mathematical representation
 - Euler angles
 - Transformation matrix
 - Tensor transformation (very briefly but will be revisited later)



Reminder: Crystal structure of solids

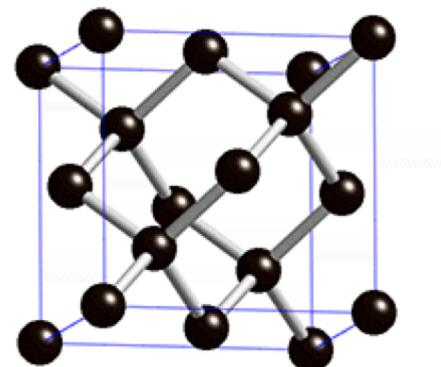
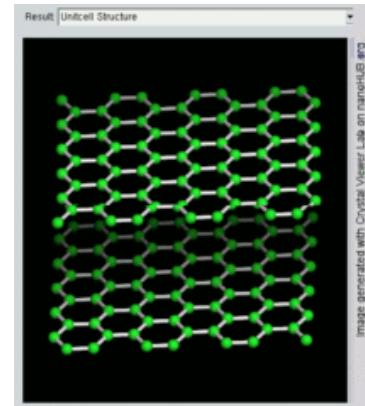
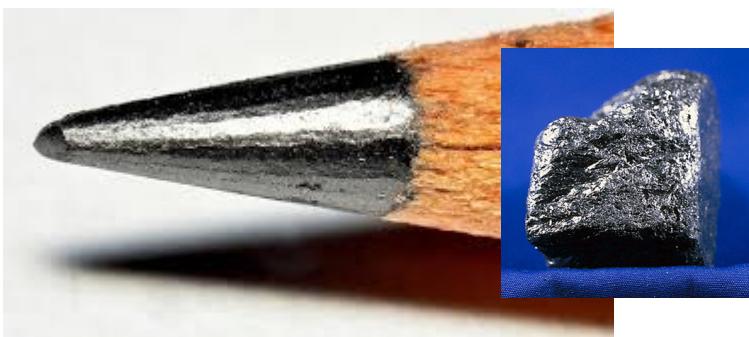


Figure 1.1 The four components of the discipline of materials science and engineering and their interrelationship.

- The manner the atoms (or molecules, ions) are arranged in the 3D space is termed '**crystal structure**' (결정구조)



Reminder: Material properties are influenced by crystal structure



Images from wikipedia.org



Objectives



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.

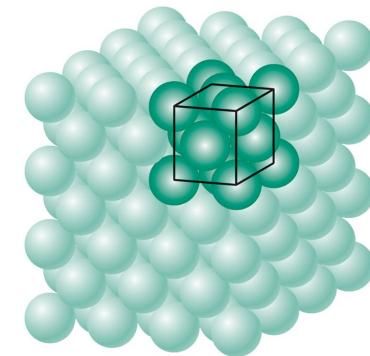
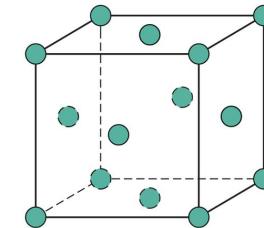
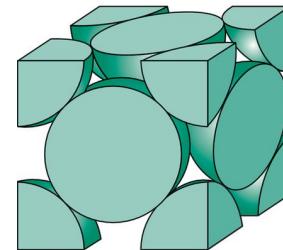
앞으로 우리는 원자구 모델 (hard-sphere model)에 국한하여 논의하겠다.

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.



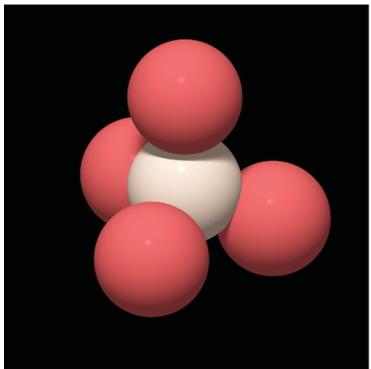
반복성, 주기성, 대칭

- 결정구조를 대표하는 특성은 수학적
‘대칭성’(symmetry)으로 표현 가능하다.
- 결정 구조는 ‘대칭성’을 가져야 한다.
- 이때 두 가지 대칭성 존재: **rotational, translation**



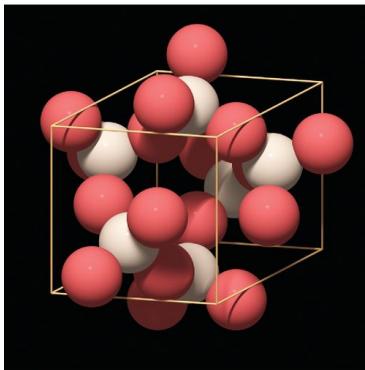
Atomic bonding – Repetition (periodicity)

Quartz: SiO_2



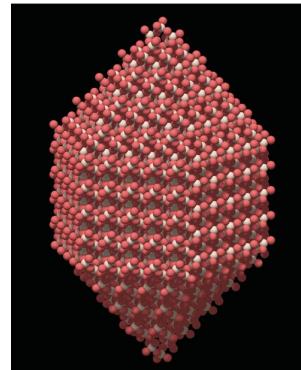
(a)

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

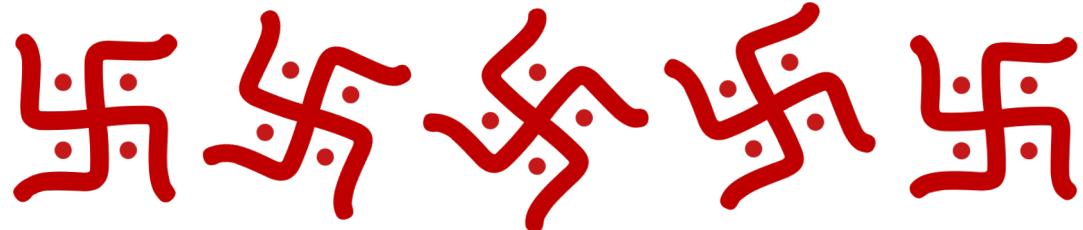
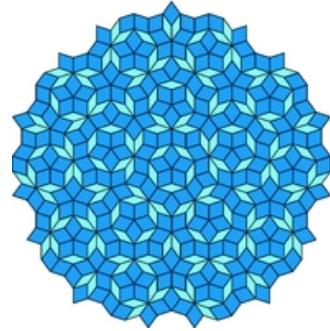
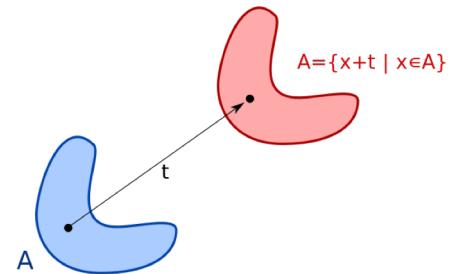
If this repetition occurs many more times?



Analogy to tiling



Translational symmetry



Rotational symmetry

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



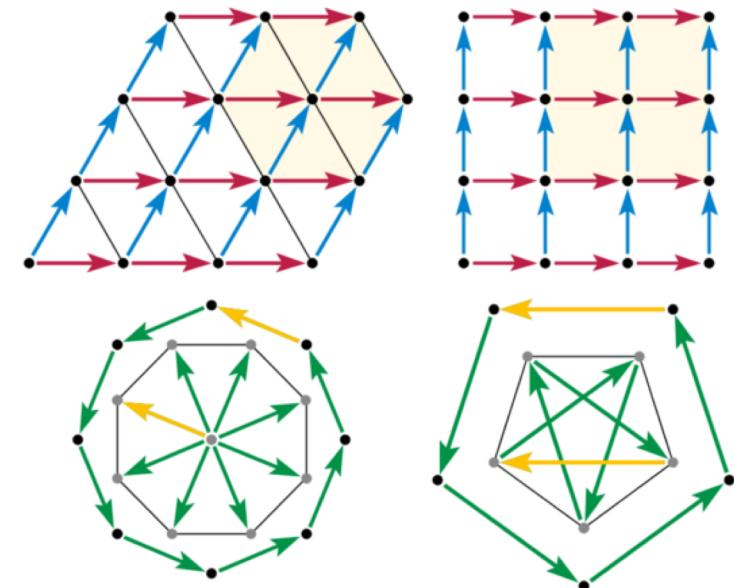
Rotational Symmetries and Crystals

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

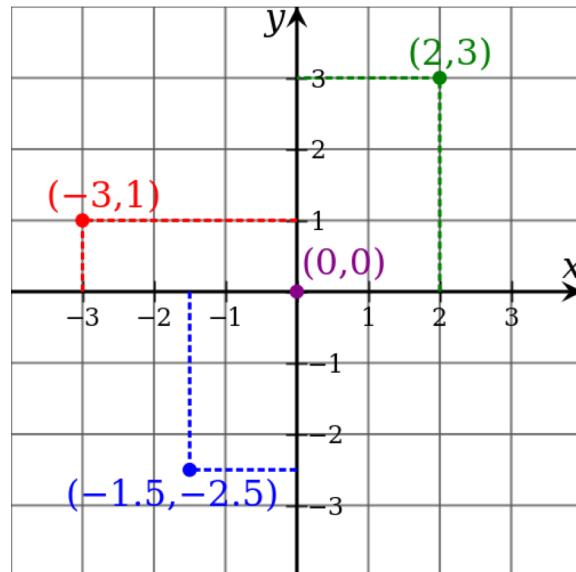


Coordinate system for crystal structures

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.

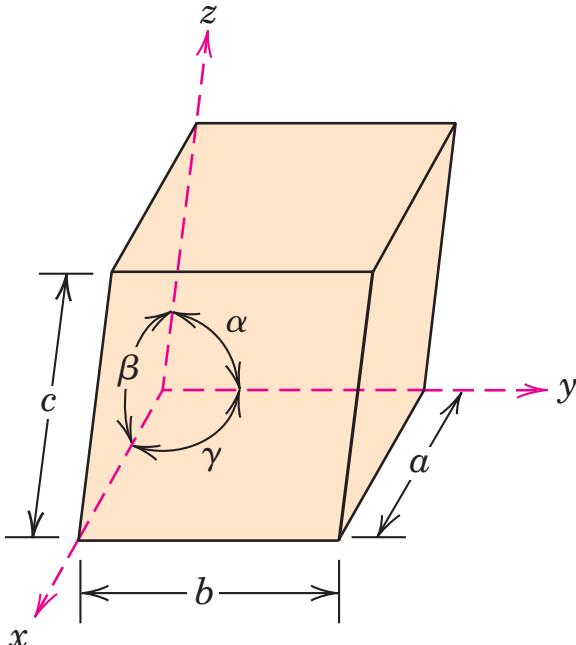


Crystal Systems #1 Introduction 결정계

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 α, β, γ 가 결정계의 종류를 정의한다

a, b , and c are the lattice constants (격자 상수)
 α, β, γ : Interaxial angles, direction cosines between the three axes of unit cell.

7 Crystal system (표 3.1)
14 Bravais crystal lattices



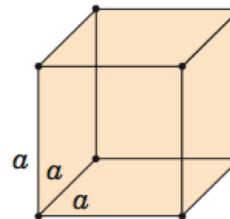
Crystal Systems #1

| <i>Crystal System</i> | <i>Axial Relationships</i> | <i>Interaxial Angles</i> | <i>Unit Cell Geometry</i> |
|-----------------------|----------------------------|--------------------------|---------------------------|
|-----------------------|----------------------------|--------------------------|---------------------------|

Cubic

$$a = b = c$$

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

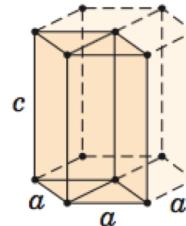


Hexagonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

hexa-: forming compounds
words having the sense of '6'

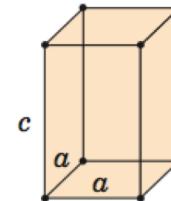


Tetragonal

$$a = b \neq c$$

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

tetra-: forming compounds
words having the sense of '4'

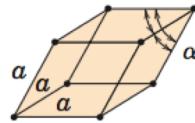


Crystal Systems #2

Rhombohedral
(Trigonal)

$$a = b = c$$

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



-hedral: '- 개의 면(변)으로 된'

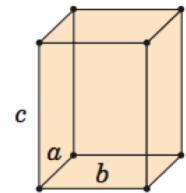
rhombus: 마름모꼴 (모든 변의 길이가 동일)

Trigonal: 'three' equal and equally inclined axes

Orthorhombic

$$a \neq b \neq c$$

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

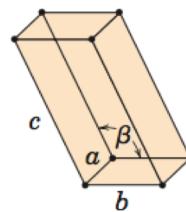


Pseudoorthorhombic의 축약
Ortho-: 직각 (올바른)

Monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

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

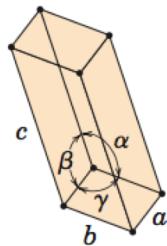


Mono- : 하나
-clinic: (기울다)

Triclinic

$$a \neq b \neq c$$

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



Tri- : 셋
-clinic: (기울다)



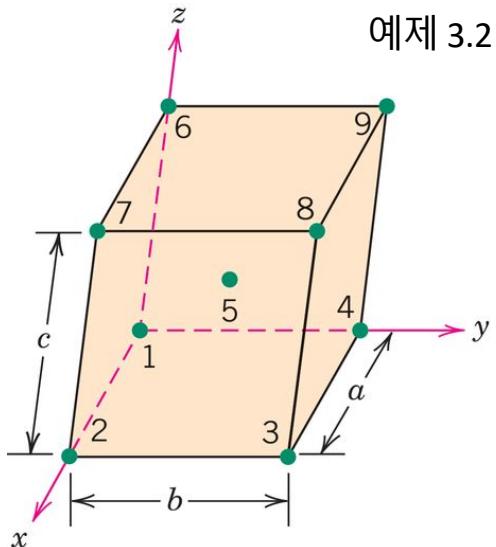
| Crystal family | Lattice system | 14 Bravais lattices | | | | |
|----------------|----------------|---|---|-----------------------|-----------------------|-------------------------|
| | | Primitive | Base-centered | Body-centered | Face-centered | Rhombohedrally-centered |
| | triclinic | | | | | |
| | 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 | | | | | |
| | hexagonal | $\gamma = 120^\circ$ | | | | |
| | cubic | | | | | |

Bravais 14 lattices

Point Coordinates (Unit cell 내의 점좌표)

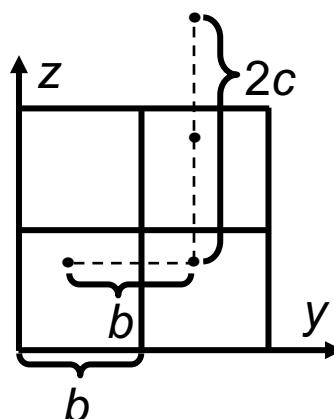
Translation: integer multiple (정수배) of lattice constants

→ 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.

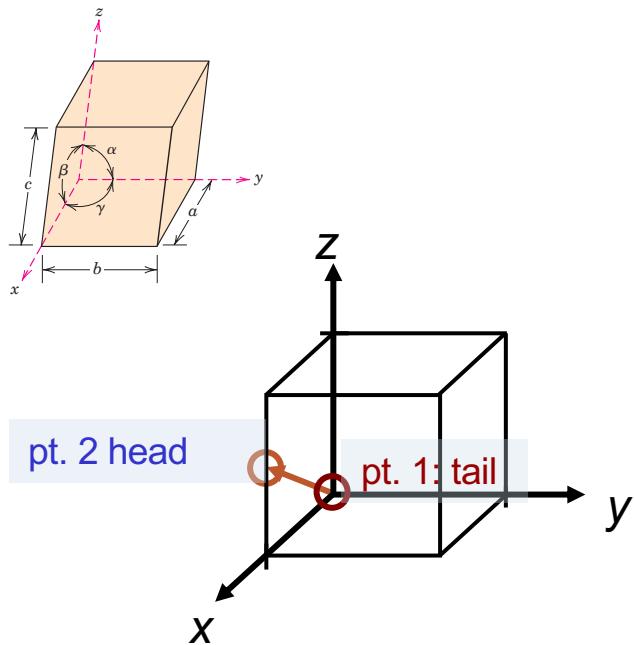


translational symmetry



Crystallographic Directions (i)

Algorithm to obtain direction indices (p. 56)



ex:

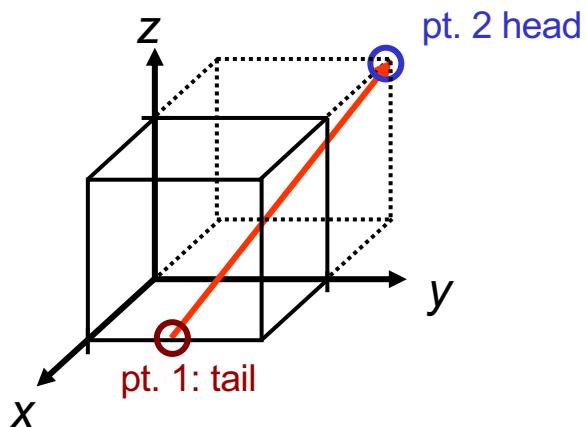
$$\begin{aligned} \text{pt. 1 } & x_1 = 0, y_1 = 0, z_1 = 0 \\ \text{pt. 2 } & x_2 = a, y_2 = 0, z_2 = c/2 \end{aligned}$$

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:
$$\frac{x_2 - x_1}{a}, \frac{y_2 - y_1}{b}, \frac{z_2 - z_1}{c}$$
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 overbar를 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...

$$-4, 1, 2 \Rightarrow \bar{[412]}$$

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. $x_1, y_1, z_1 = 1 \cdot a, -1 \cdot b, 0 \cdot c$

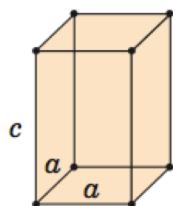
Practice) Let's construct the direction step by step



Family of equivalent crystal directions

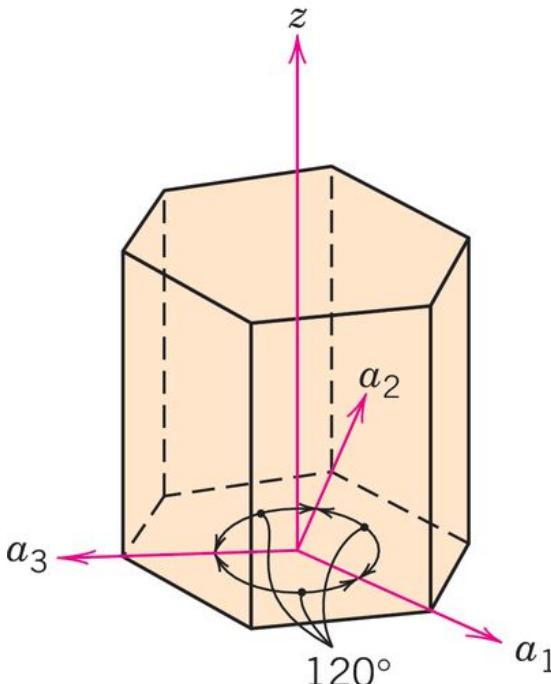
- 한 결정 구조에서 몇 개의 다른 방향 지수를 갖는 비평행 방향들이 실제로는 '동등한' (equivalent) 경우가 있다.
- 이때의 '동등성'은 '원자간의 거리' 등의 실제 물리적 성질이 같다는 의미이다.
- 예를 들면, cubic structure에서 $[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$, $[00\bar{1}]$ 방향들은 동등하다.
- 편의상 동등한 방향들을 묶어 '족' (Family)라고 하며 각괄호를 사용하여 표기한다. (예: $\langle 100 \rangle$).

- 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.



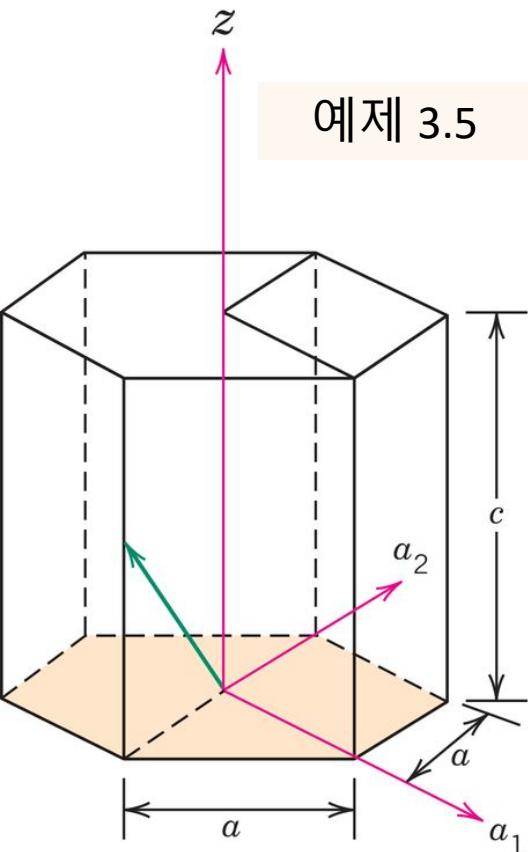
[$u'v'w'$]
[$uvtw$] in hexagonals

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 [uvw] 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

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

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

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

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

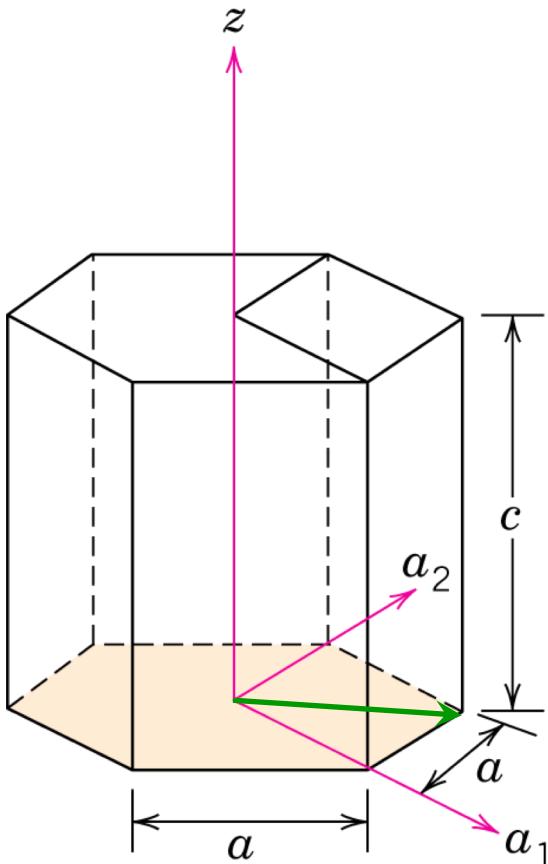
$$w = W$$

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

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



Example

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

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

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

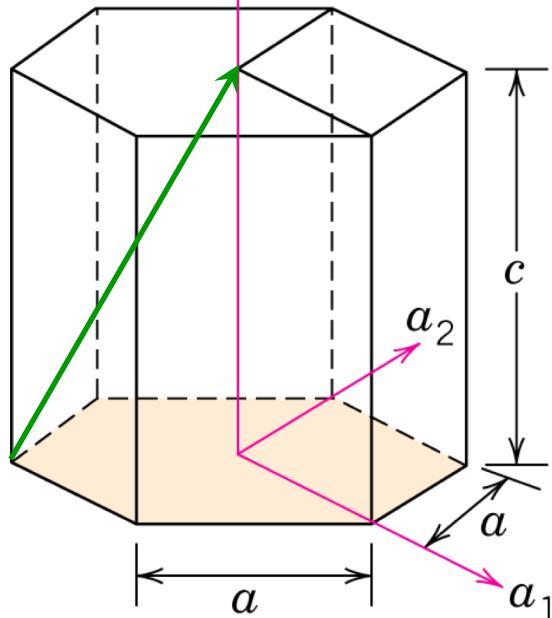
$$t = (-u - v)$$

$$w = W$$

Determine indices for green vector

a_1, a_2, z 세축으로 이루어진 좌표계로 보아라

$a_1 \quad a_2 \quad z$



- 1-1. Tail location $-a \quad -a \quad 0$
- 1-2. Head location $0 \quad 0 \quad c$
2. Subtraction $a \quad a \quad c$
3. Normalize $1 \quad 1 \quad 1$
4. Reduction $1 \quad 1 \quad 1$
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

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

$$[1\bar{1}23]$$



Example

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

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

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

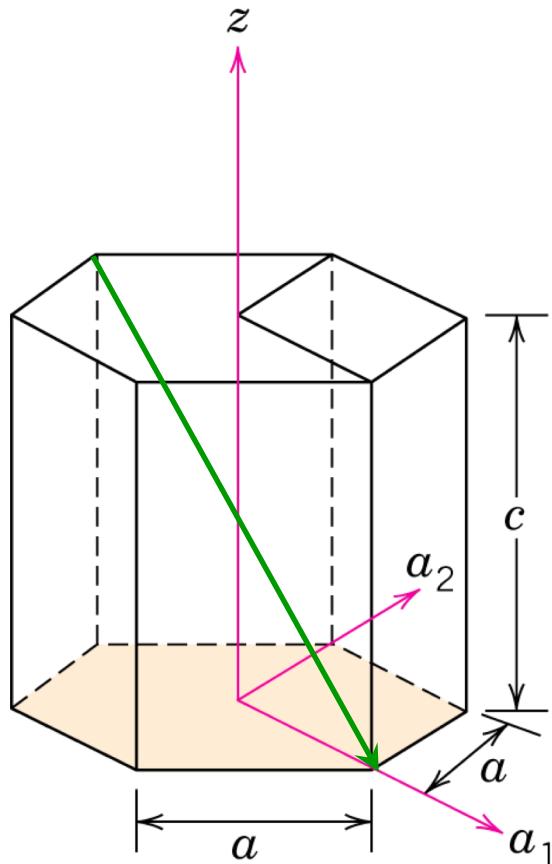
$$t = (-u - v)$$

$$w = W$$

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)

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

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

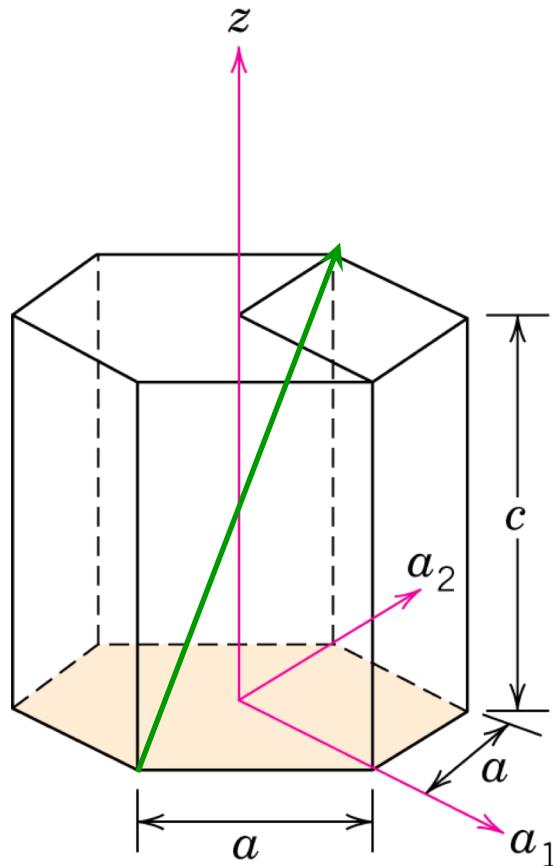
7. Reduction & Brackets

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

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



Example



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)

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

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

7. Reduction & Brackets

-2/3, 4/3, -2/3, 1 => -2, 4, -2, 3

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

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

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

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

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

$$w = W$$



Example

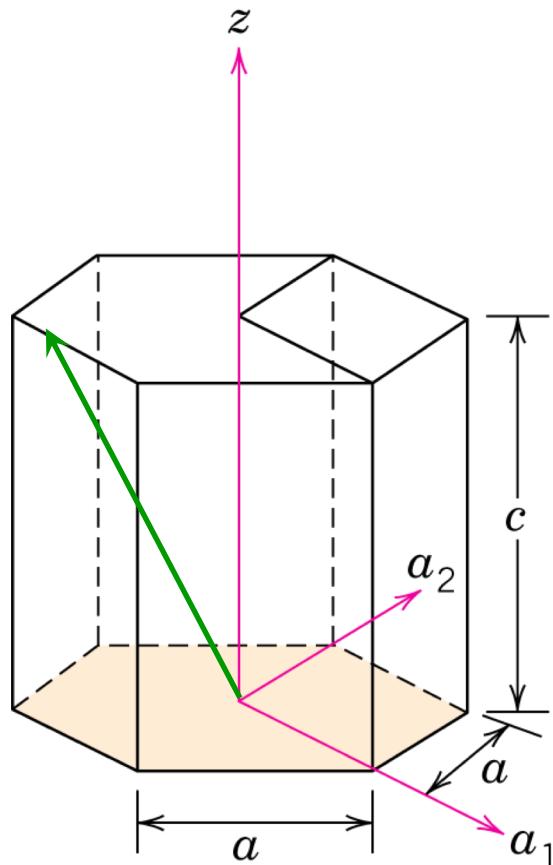
$$[UVW] \rightarrow [uvtw]$$

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

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

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

$$w = W$$



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

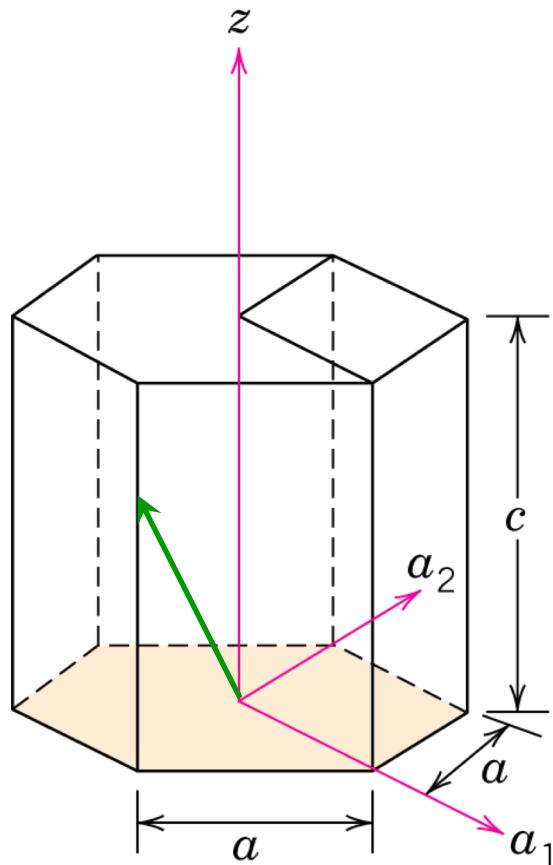
$$[UVW] \rightarrow [uvtw]$$

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

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

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

$$w = W$$



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)

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

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

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

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

$$w = W$$

$$[UVW] \leftarrow [uvtw] ?$$

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

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

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

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

$$2v + u = V$$

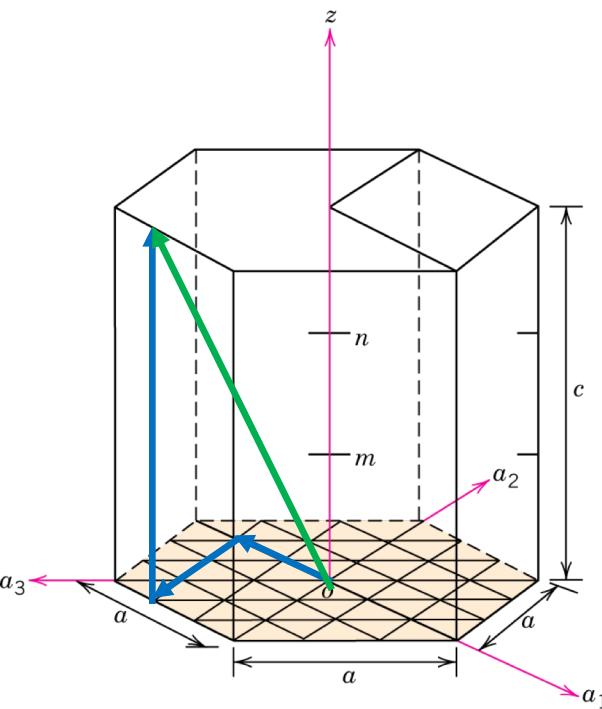
$$3u = (2U - 2v - u)$$

$$4u + 2v = 2U$$

$$2u + v = U$$



HCP Crystallographic Directions (ii)



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

$$2u + v = U$$

$$u + 2v = V$$

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

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

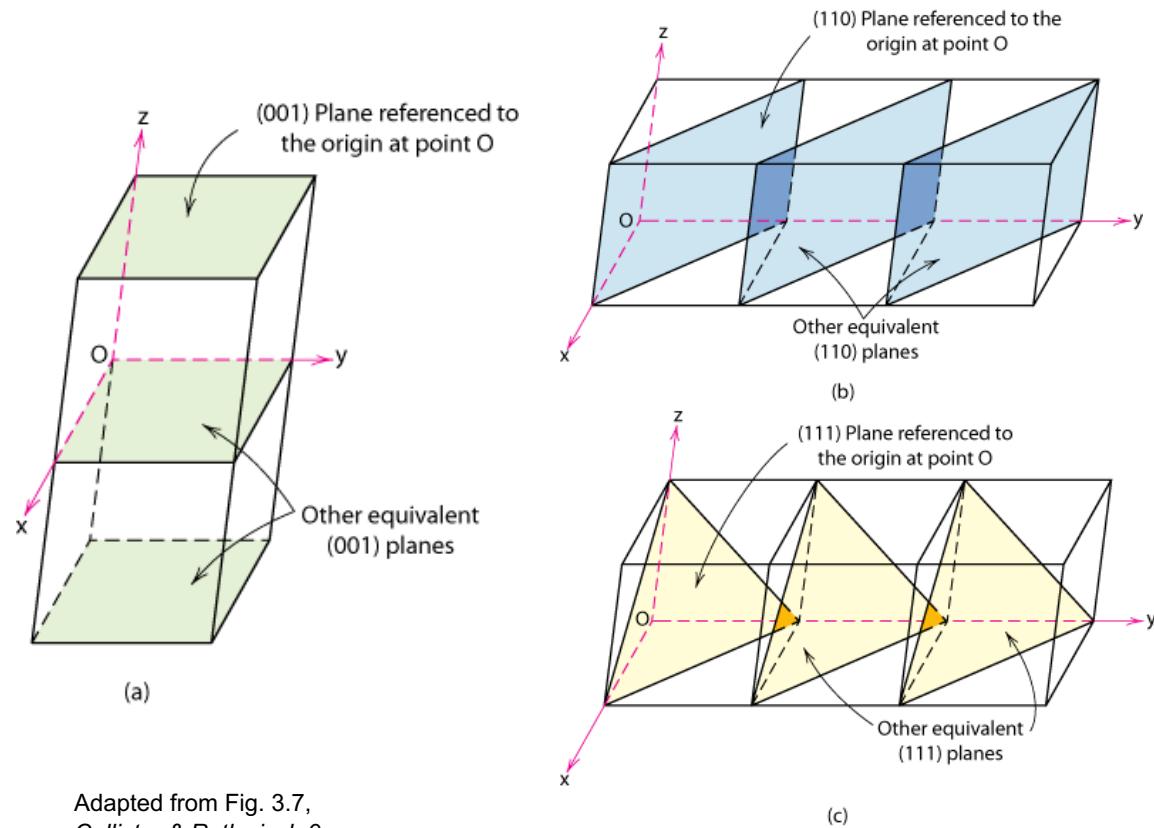
$$9 = w = W$$

$$-6, -9, 9$$

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



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)

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

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

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



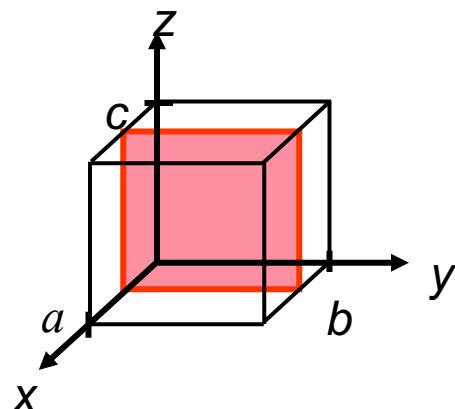
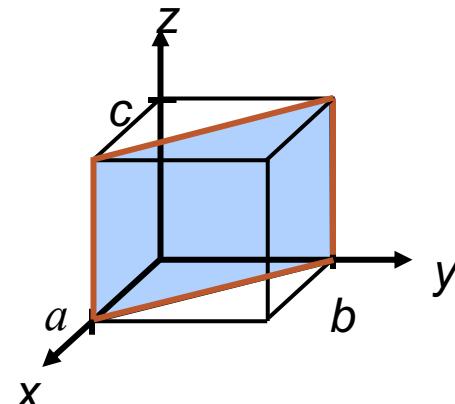
Crystallographic Planes (iii): exercise 1

example

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

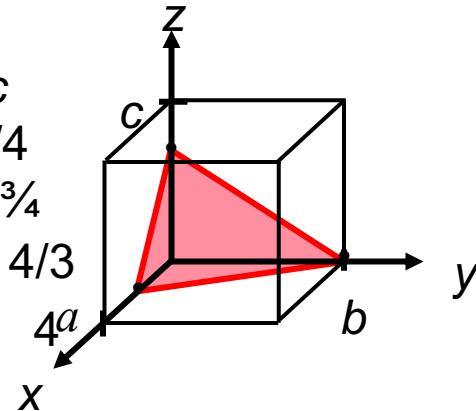
example

| | a | b | c |
|-------------------|-----------------|------------|------------|
| 1. Intercepts | $1/2$ | ∞ | ∞ |
| 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

∞

-1

1

2. Reciprocals

1/1

1/ ∞

1/-1

1/1

3. Reduction

1

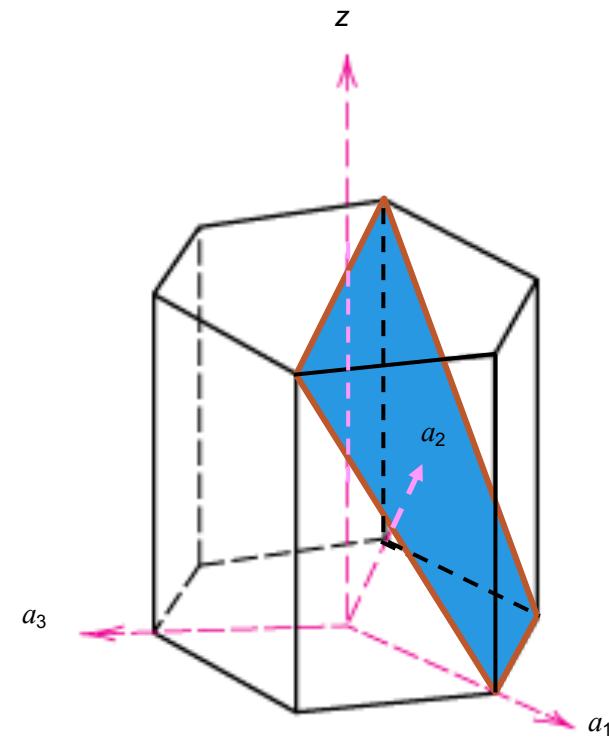
0

-1

1

4. Miller-Bravais Indices

(10 $\bar{1}$ 1)



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

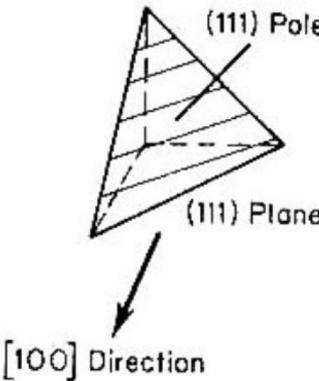
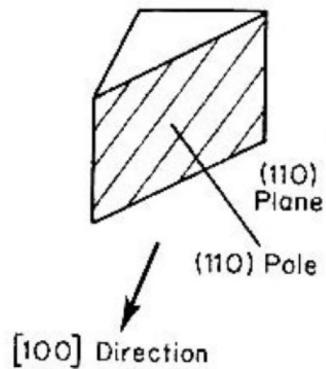
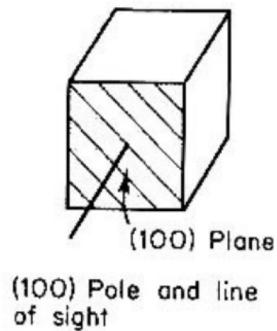


Equivalent directions due to rotational symmetry

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:

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



Materials and Packing

Crystalline materials...

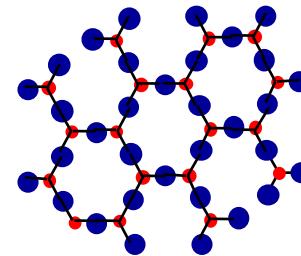
- atoms pack in periodic, 3D arrays
- typical of:
 - metals
 - many ceramics
 - some polymers

Noncrystalline materials...

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

"Amorphous" = Noncrystalline

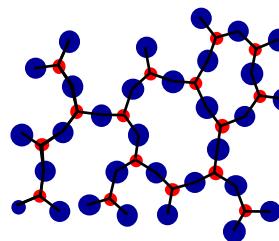
"Quasi-crystal" = ordered but not periodic



crystalline SiO_2

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

• Si • Oxygen



noncrystalline SiO_2

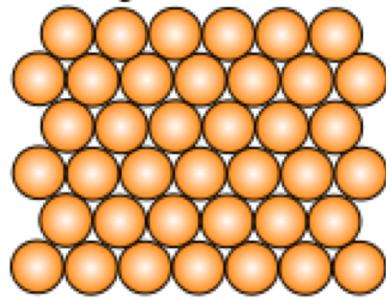
Adapted from Fig. 3.11(b),
Callister & Rethwisch 9e.



Schematic illustrations of crystalline, polycrystalline and amorphous materials

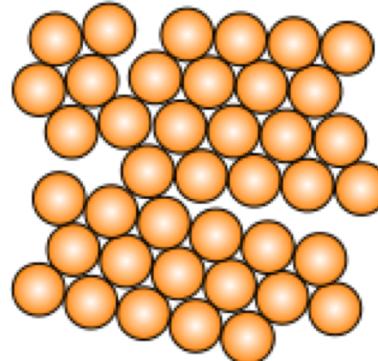
결정질

Crystalline



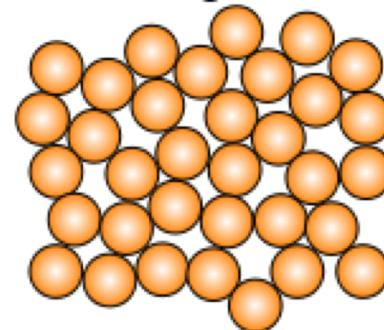
다결정질

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

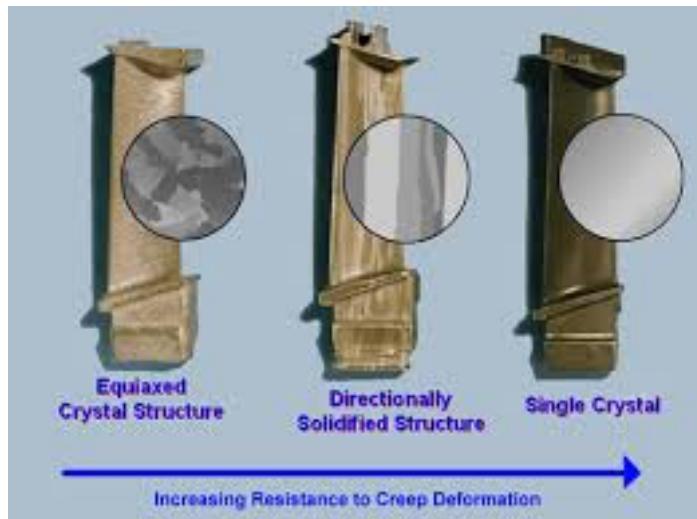
단결정의 예



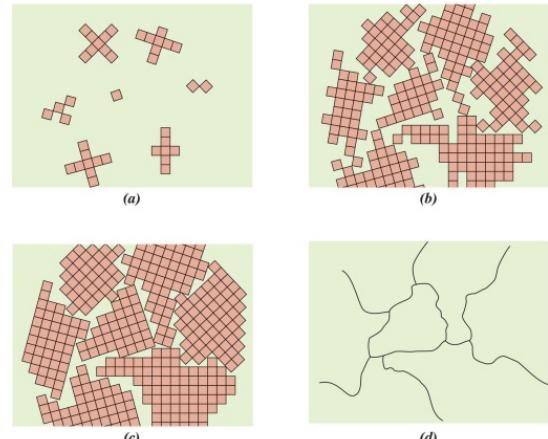
Silicon ingots

반도체, 솔라셀
등의 주재료

Turbine blades



응고 과정중에
나타나는 다결정



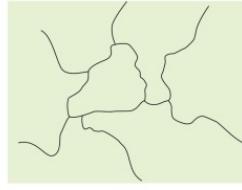
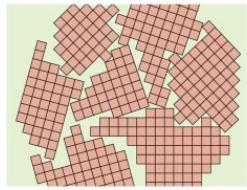
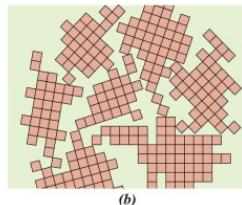
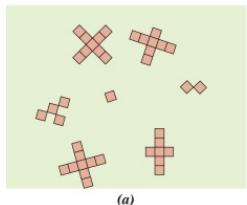
Adapted from W. Rosenhain, An Introduction to the Study of Physical Metallurgy, 2nd edition, Constable & Company Ltd., London, 1915.

Fig_03_10



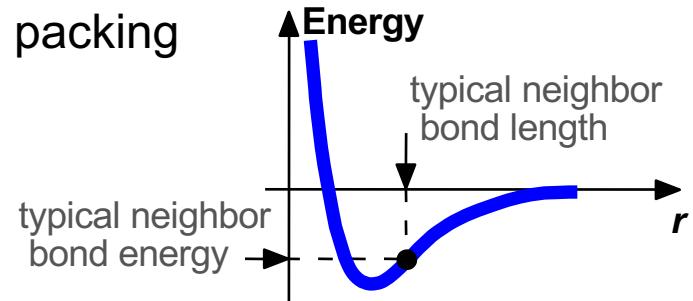
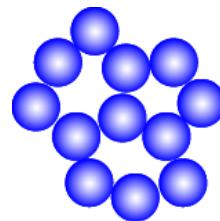
Q: Why atoms are packed in an ordered manner?

Solidification: more atoms are sticking to each other

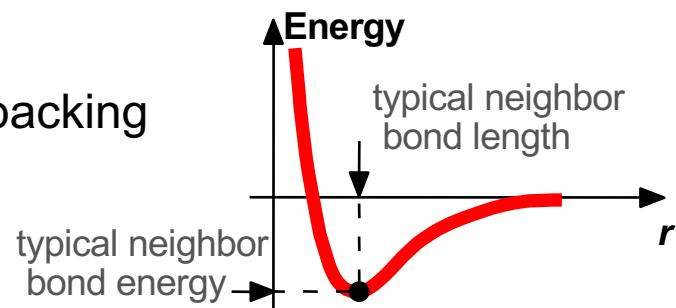
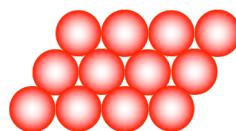


Adapted from W. Rosenhain, An Introduction to the Study of Physical Metallurgy, 2nd edition, Constable & Company Ltd., London, 1915.

- Non dense, **random** packing



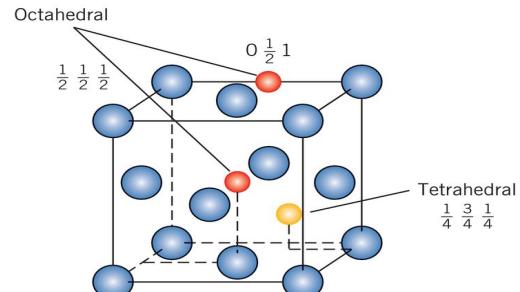
- Dense, **ordered** packing



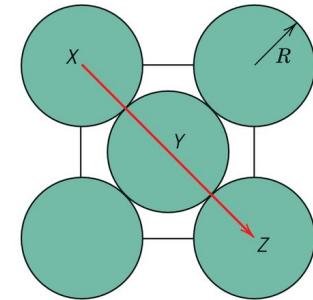
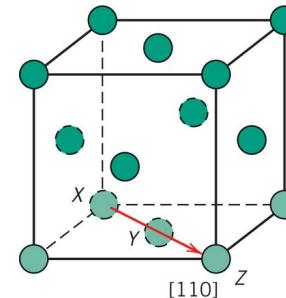
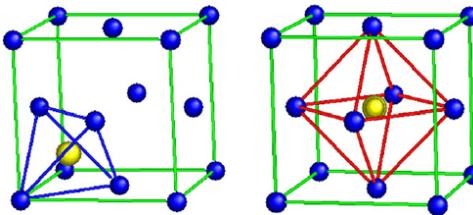
A: Dense, ordered packed structures tend to have lower energies.



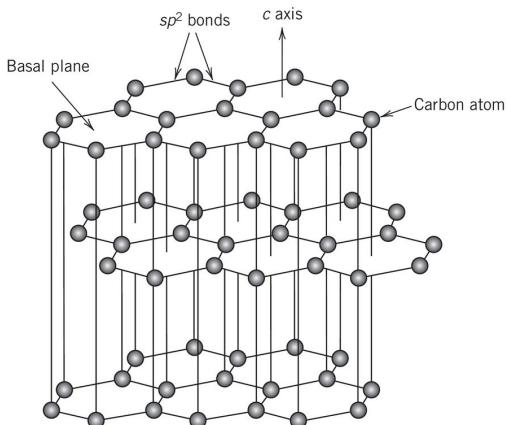
Points, Directions and Planes in unit cell



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

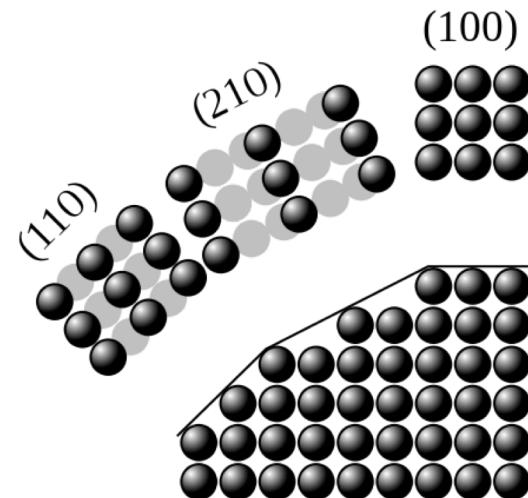


Table 3.3

Modulus of Elasticity
Values for Several
Metals at Various
Crystallographic
Orientations

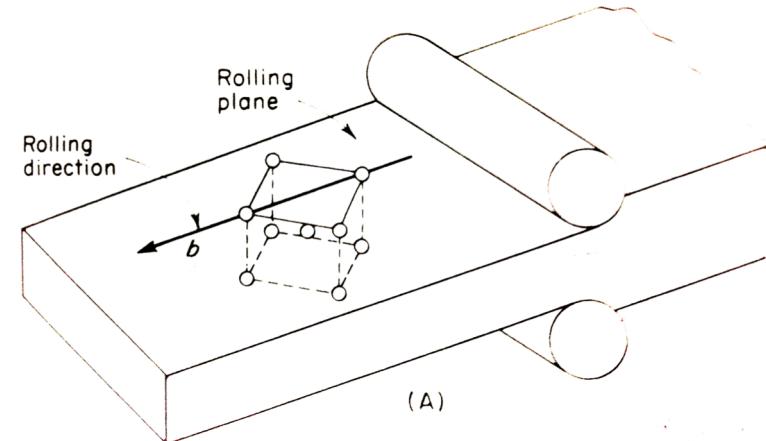
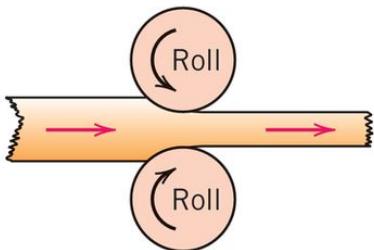
| Metal | Modulus of Elasticity (GPa) | | |
|----------|-----------------------------|-------|-------|
| | [100] | [110] | [111] |
| Aluminum | 63.7 | 72.6 | 76.1 |
| Copper | 66.7 | 130.3 | 191.1 |
| Iron | 125.0 | 210.5 | 272.7 |
| Tungsten | 384.6 | 384.6 | 384.6 |

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.

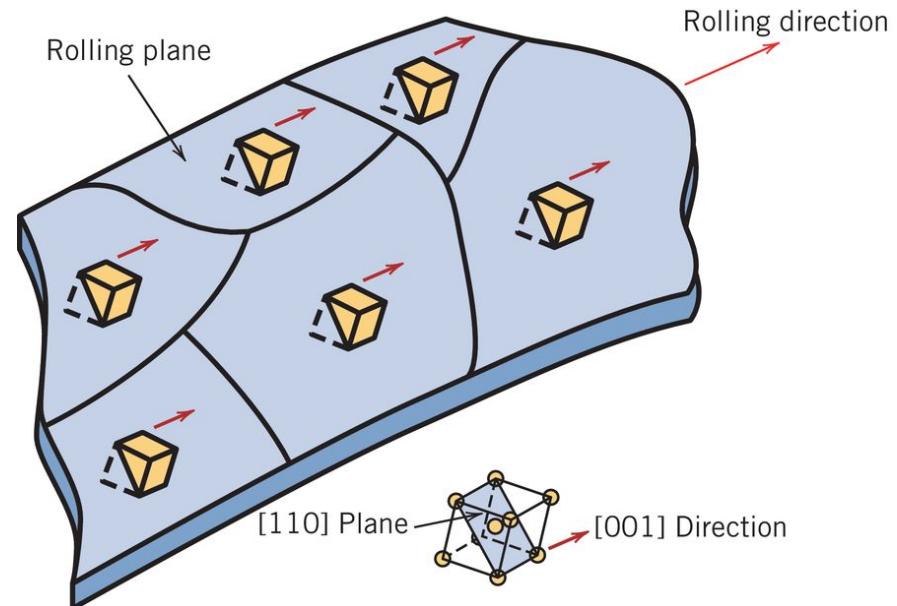
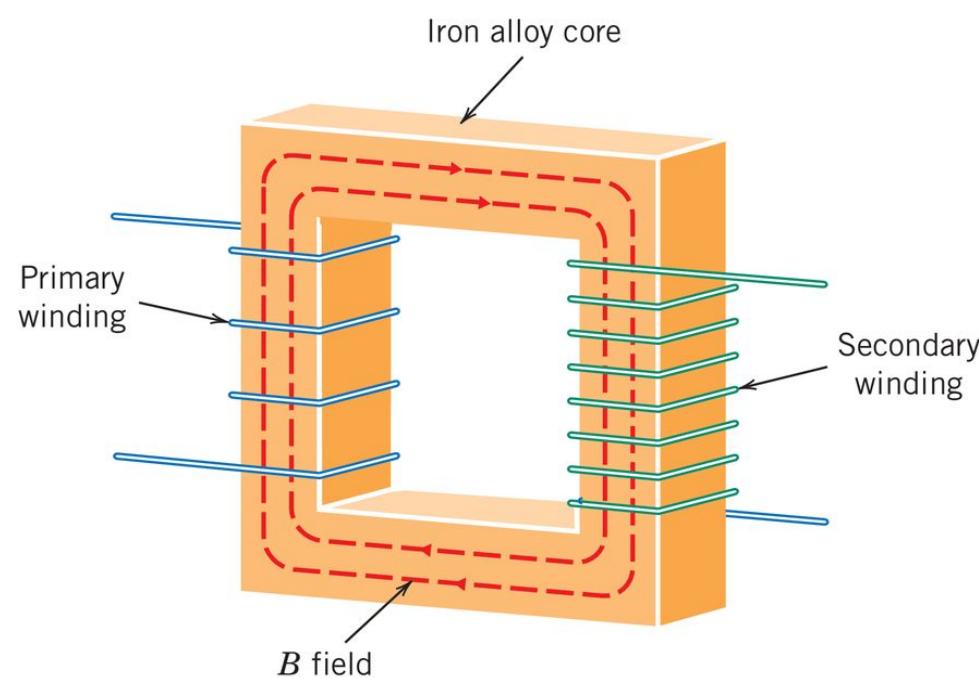


Texture and anisotropy

- 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

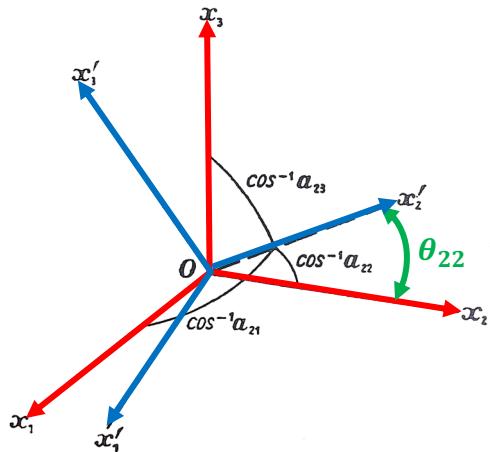
이방성을 가진 전기강판은
포스코의 주력 상품중의 하나.



방위의 수학적 표현 방법

- Quaternion (convenient mathematical notation for representing orientations)
- Rodriguez (a vector and an angle; any arbitrary orientation; misorientation)
- Euler angles (Bunge notation (ϕ_1, Φ, ϕ_2) is widely used – ZXZ convention)
- Transformation matrix

두 축 (axes) 간의 방위 관계



위 그림에서는 x_1, x_2, x_3 로 이루어진 좌표계 1과 x'_1, x'_2, x'_3 로 이루어진 또 다른 좌표계 2가 나타나 있다. 좌표계 2의 x'_2 basis vector와 좌표계 1의 각 basis vector들과의 관계를 a_{21}, a_{22}, a_{23} 의 direction cosine으로 표현했다.

$$a_{22} = \cos(\theta_{22})$$

Old co. sys.

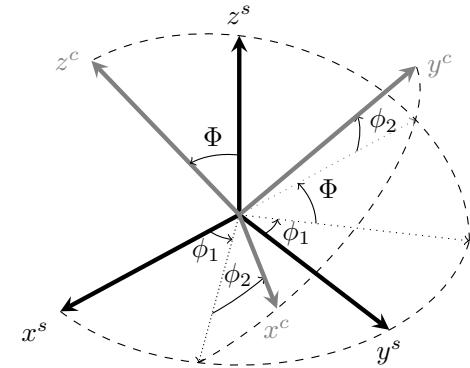
$[e_1 \ e_2 \ e_3]$

$$\begin{bmatrix} \hat{e}_1 \\ \hat{e}_2 \\ \hat{e}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

Transformation matrix (not tensor)

A LaTeX script to generate below illustration:

<https://youngung.github.io/euler/>

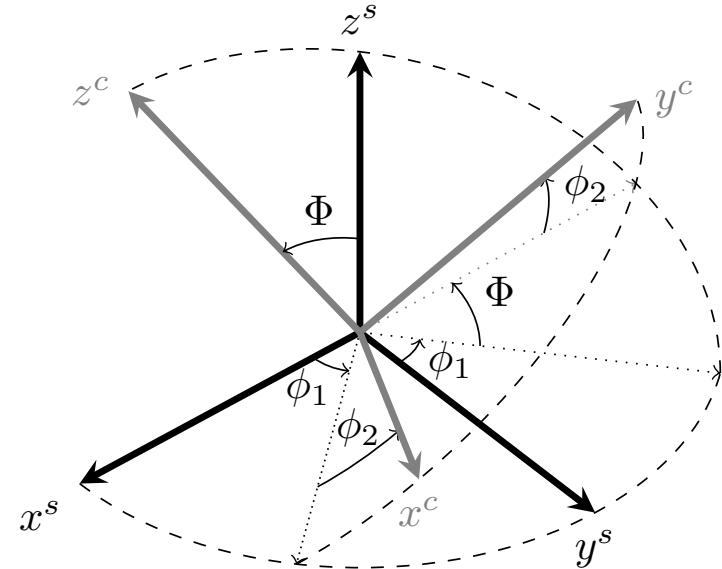
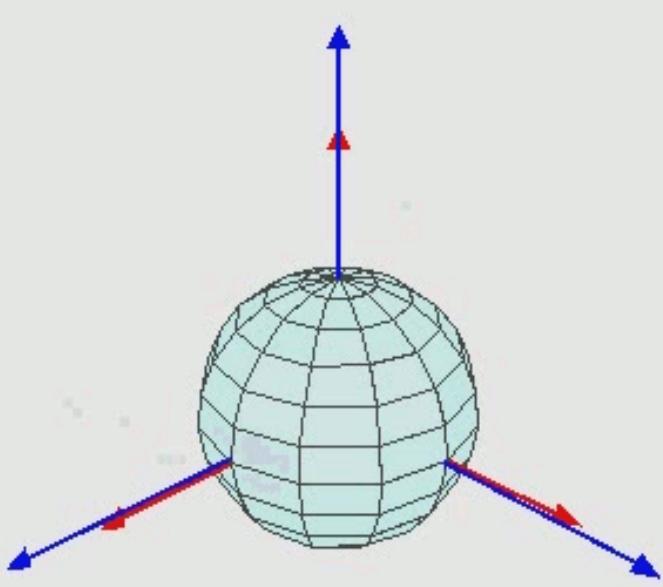


서로 다른 두 좌표계(axes, coordinate)의 방위 관계가 하나의 transformation matrix로 표현됨.



Euler angles

ZXZ convention



- 방위란? 두 좌표계 (axes, coordinate system) 사이의 (방위) 관계를 나타낸다.
- 텍스쳐 커뮤니티에는 Euler angle을 널리 사용한다 (매우 직관적인 표현 방법)
- 하지만 방위와 관련한 수학적 해석, 계산에서는 transformation matrix가 더욱 유용하다.
- 이는 transformation matrix가 tensorial quantity의 좌표 변환에 사용되기 때문.

References:

https://en.wikipedia.org/wiki/Euler_angles

<https://youngung.github.io/euler/>



Tensor?

- Tensor는 물리량을 표현하는 방법; 물리 현상 (그에 따른 물리량)이 좌표계에 무관함을 표현하는데 매우 '우아하게' 쓰일 수 있다.
 - 대표적 우아함이란 Einstein Summation Convention으로 대표되는 간략한 표기법.
 - Scalar, Vector 등으로 표현되는 물리량은 모두 tensor.
 - Tensor는 tensor처럼 좌표변환을 한다. Rank(order)에 따라 달라지는 좌표변환 법 (transformation matrix가 유용하게 쓰인다)
- 예: 힘, 속도, 응력, 변형률, 탄성계수 등은 모두 텐서
- 3차원 공간에서 Rank가 2인 텐서는 종종 3x3 matrix form으로 나타냄.
 - Matrix form으로 표현될 때의 각 component 값은 특정 좌표계에 의해 특정됨을 유의.
- 텐서는 dot-product, double-inner product 등의 operation (~행렬 곱셈);
 - 응력=탄성계수 x 변형률
 - $\sigma = E : \epsilon$ 응력텐서=탄성계수텐서:변형률텐서
 - $\sigma_{ij} = E_{ijkl}\epsilon_{kl}$ Einstein summation convention is assumed; they all quantities should be referred in the same coordinate system(space)



Transformation matrix a_{ij} and Euler angles

1차 rank 텐서, 힘 (force, \mathbf{F})의 좌표 변환법

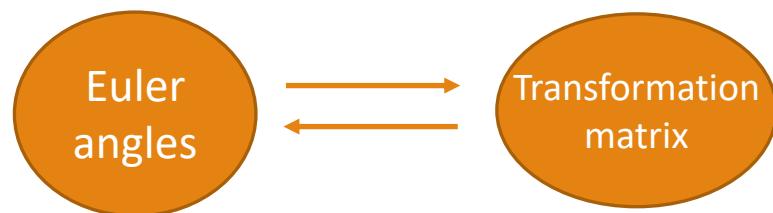
$$\tilde{\mathbf{F}}_i = \sum_j^3 a_{ij} F_j = a_{ij} F_j$$

↑
아인슈타인
축약 표기법

Einstein summation convention

2차 rank 텐서, 응력 (stress, σ)의 좌표 변환법

$$\sigma_{ij} = \sum_k^3 \sum_l^3 a_{ik} a_{jl} \sigma_{kl} = a_{ik} a_{jl} \sigma_{kl} = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}^T$$



$$a_{ij} = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_2 \sin \Phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & \cos \varphi_2 \sin \Phi \\ \sin \varphi_1 \sin \Phi & -\cos \varphi_1 \sin \Phi & \cos \Phi \end{pmatrix}$$

See subroutine EULER in VPSC code

```
c ****
c      subroutine euler (iopt,ph,th,tm,a)
c
c      CALCULATE THE EULER ANGLES ASSOCIATED WITH THE TRANSFORMATION
c      MATRIX A(I,J) IF IOPT=1 AND VICEVERSA IF IOPT=2
c      A(i,j) TRANSFORMS FROM SYSTEM sa TO SYSTEM ca.
c      ph,th,om ARE THE EULER ANGLES (in degrees) OF ca REFERRED TO sa.
c ****
```

Excel or Google spread sheets:
<https://youngung.github.io/euler2ndtensor/>



Einstein summation convention

□ 등호의 서로 다른 편에서 반복되는 index: 각 case에 대한 축약을 뜻함.

➤ $a_i = b_i \rightarrow a_1 = b_1, a_2 = b_2, a_3 = b_3$

□ 곱하기로 연결된 quantity(term)의 index repeat: summation over that index is presumed tacitly (implicit).

➤ 예: $a_{ij}F_j \rightarrow \sum_j a_{ij}F_j \rightarrow a_{i1}F_1 + a_{i2}F_2 + a_{i3}F_3$

□ 위 둘의 응용

➤ 예: $B_i = a_{ij}F_j$

❖ 동호의 다른 편에서 반복되는 index i에 대한 세가지 case의 축약 즉,

- $B_1 = a_{1j}F_j, B_2 = a_{2j}F_j, B_3 = a_{3j}F_j$

❖ 그리고 hidden summation에 따르면 각 case에서.

- $B_2 = \sum_j^3 a_{2j}F_j = a_{21}F_1 + a_{22}F_2 + a_{23}F_3$ (똑같은 operation이 B_1, B_3 에도 적용 됨에 유의)

□ Applicable to tensorial algebra

➤ $\varepsilon_{ij} = M_{ijkl}\sigma_{kl}$

➤ → 9가지 (ij) case

➤ → 각 case마다, $\varepsilon_{21} = M_{21kl}\sigma_{kl} = \sum_k \sum_l M_{21kl}\sigma_{kl}$



예제

- Excel을 사용하여 Euler angle을 transformation matrix로 바꾸는 spreadsheet를 만들어 보자.
 - Euler angle과 rotation matrix about an axis?
 - 세 개의 rotation matrix를 결합

- 힘 벡터 [100N, 50N, 0N]을 Euler angle 45, 30,-20의 방위를 대표하는 transformation matrix를 사용하여 변환 시킨 값은 어떤가?
 - 힘 벡터의 변환 전, 후의 절대값을 구하고, 그 둘을 비교해보아라.
 - 왜 그러한 결과가 나왔다고 생각하는지? 혹은 그 의미가 무엇인지 말해보자.

