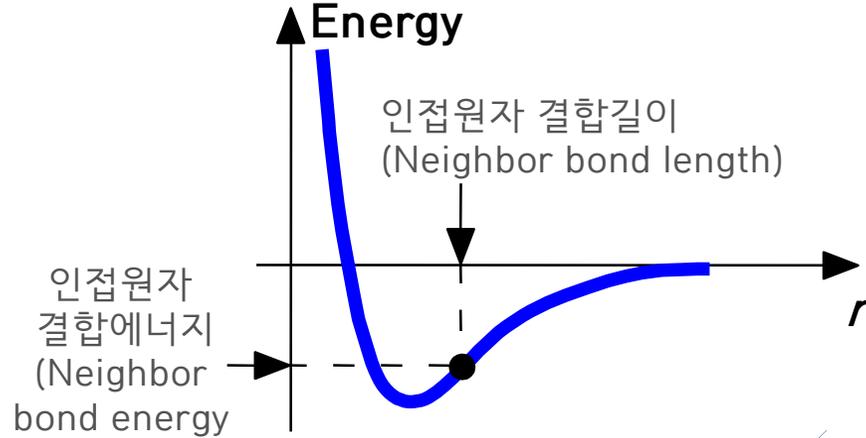
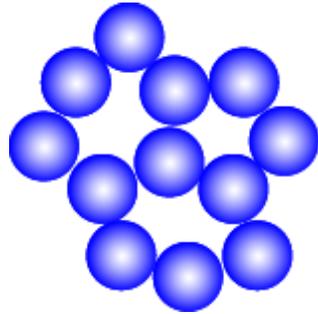


# 소재의 특성 (구조, 결정 및 결합)

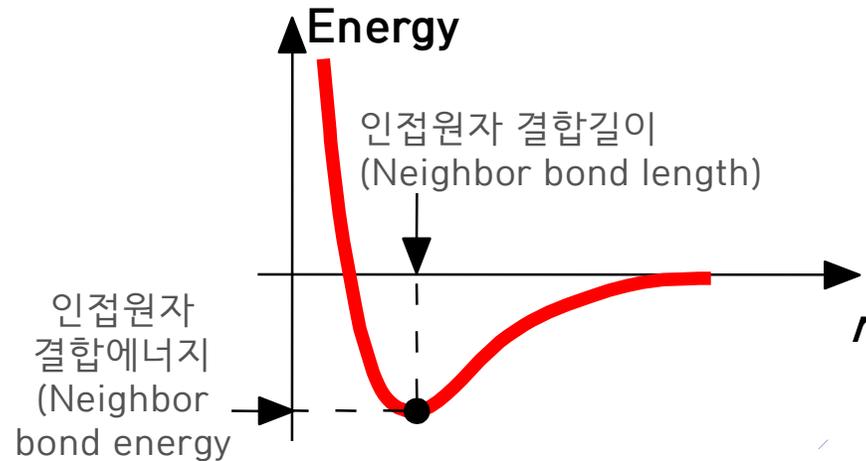
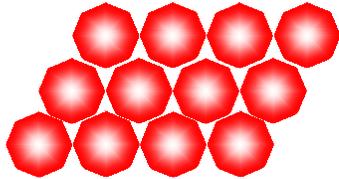
허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

# 에너지와 밀집 (Energy and Packing)

- 비밀집 무작위 배열  
(Non dense, **random** packing)



- 밀집 정렬 배열  
(Dense, **ordered** packing)

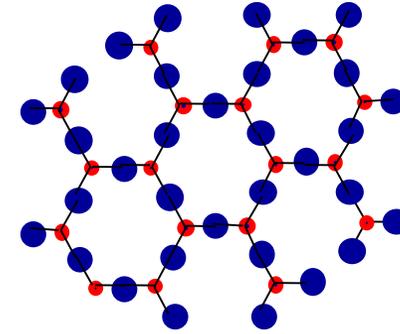


밀집, 정렬구조로 배열된 구조는 낮은 (작은) 에너지를 갖는 경향 있음  
허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

# 재료와 밀집 (Materials and Packing)

- 결정 재료 (Crystalline materials)

- 규칙적인 3차원 배열을 갖는 원자
- 해당되는 물질:
  - 금속
  - 대부분의 세라믹
  - 몇몇 고분자



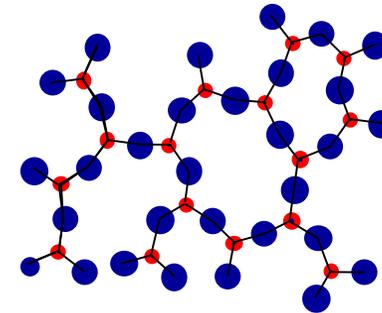
결정형 실리카  
(crystalline SiO<sub>2</sub>)

- 비정질 재료 (Noncrystalline materials)

- 규칙적인 3차원 배열을 갖지 않는 원자
- 해당되는 물질:
  - 복잡한 구조
  - 급랭 (rapid cooling)

“비정질 (Amorphous)”  
= 비결정 (Noncrystalline)

• Si      ● Oxygen



비정질 실리카  
(noncrystalline SiO<sub>2</sub>)

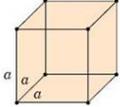
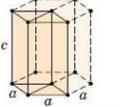
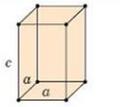
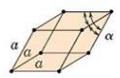
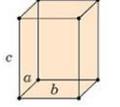
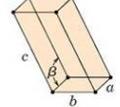
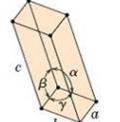
허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

Adapted from Fig. 3.11 Callister & Rethwisch 9e.

# 결정계 (Crystal Systems)

- 7 결정계 (7 crystal systems)

**Table 3.1** Lattice Parameter Relationships and Figures Showing Unit Cell Geometries for the Seven Crystal Systems

Crystal System	Axial Relationships	Interaxial Angles	Unit Cell Geometry
 Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
 Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
 Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
 Rhombohedral (Trigonal)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
 Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
 Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
 Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

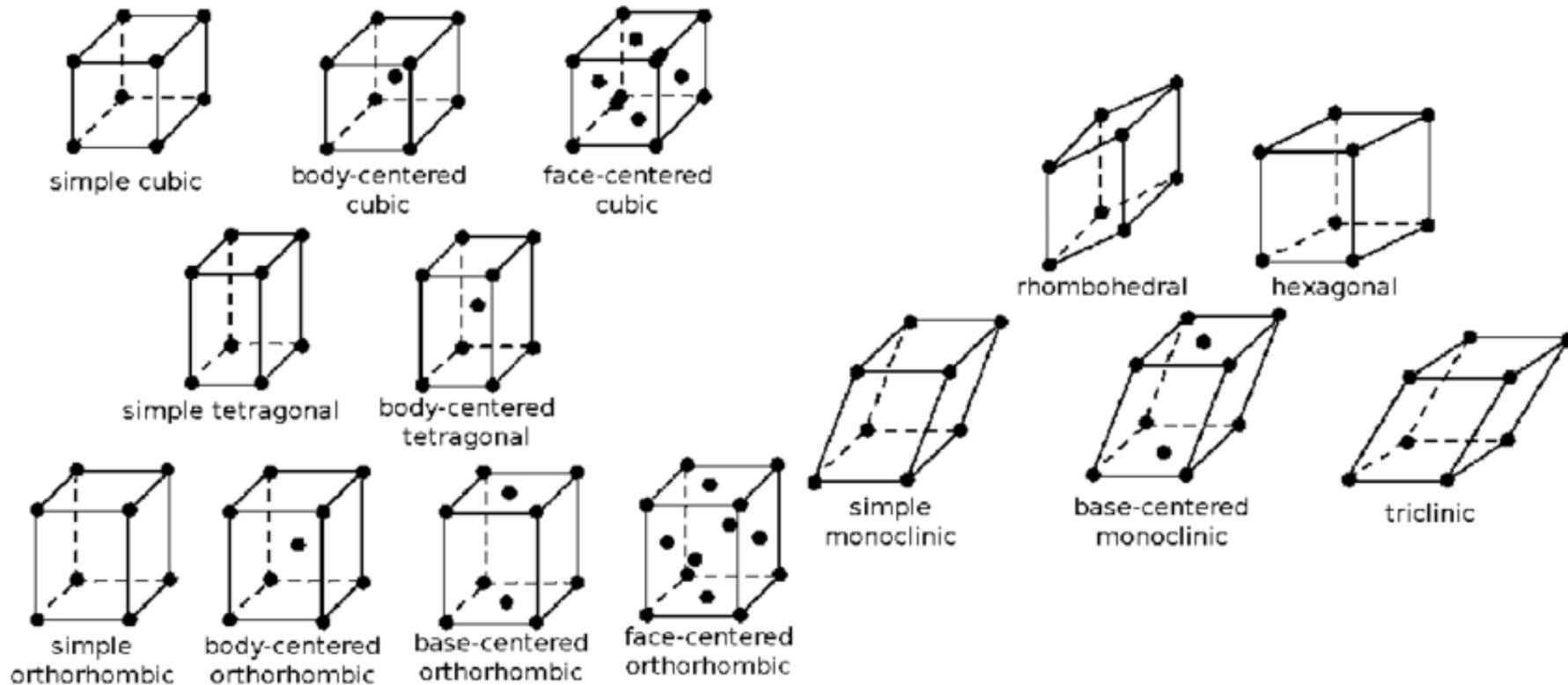
WileyPLUS: VMSE  
Crystal Systems and  
Unit Cells for Metals

허가없

합니다.

# 결정계 (Crystal Systems)

- 14 결정 격자 (14 bravais lattices)

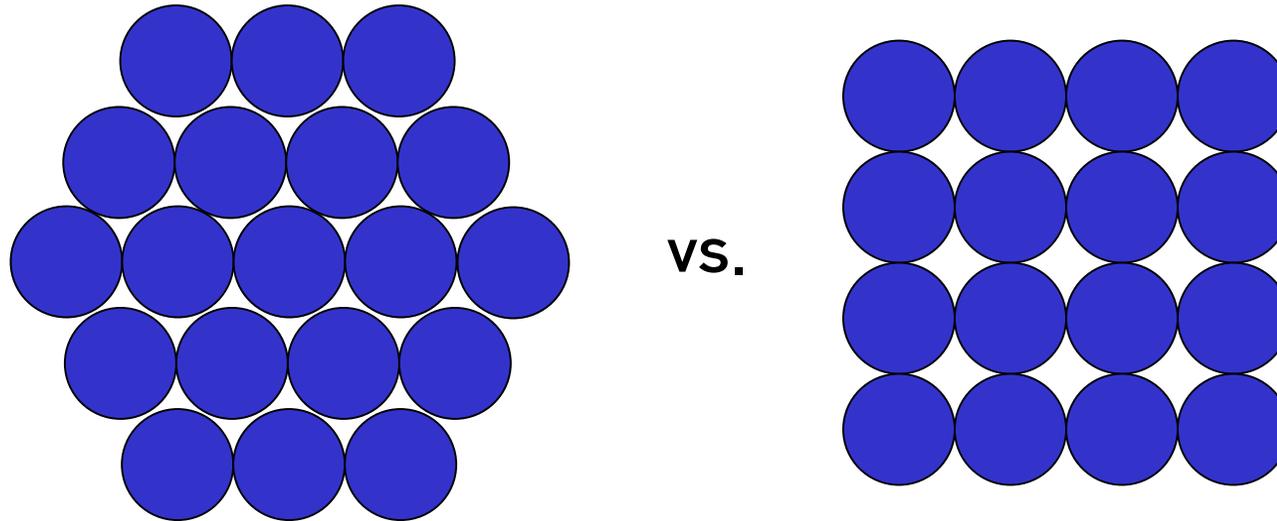


허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

# 금속 결정 구조 (Metallic Crystal Structures)

- 금속 결정구조
  - 빈공간을 최소화 할 수 있는 금속원자 밀집구조 구현

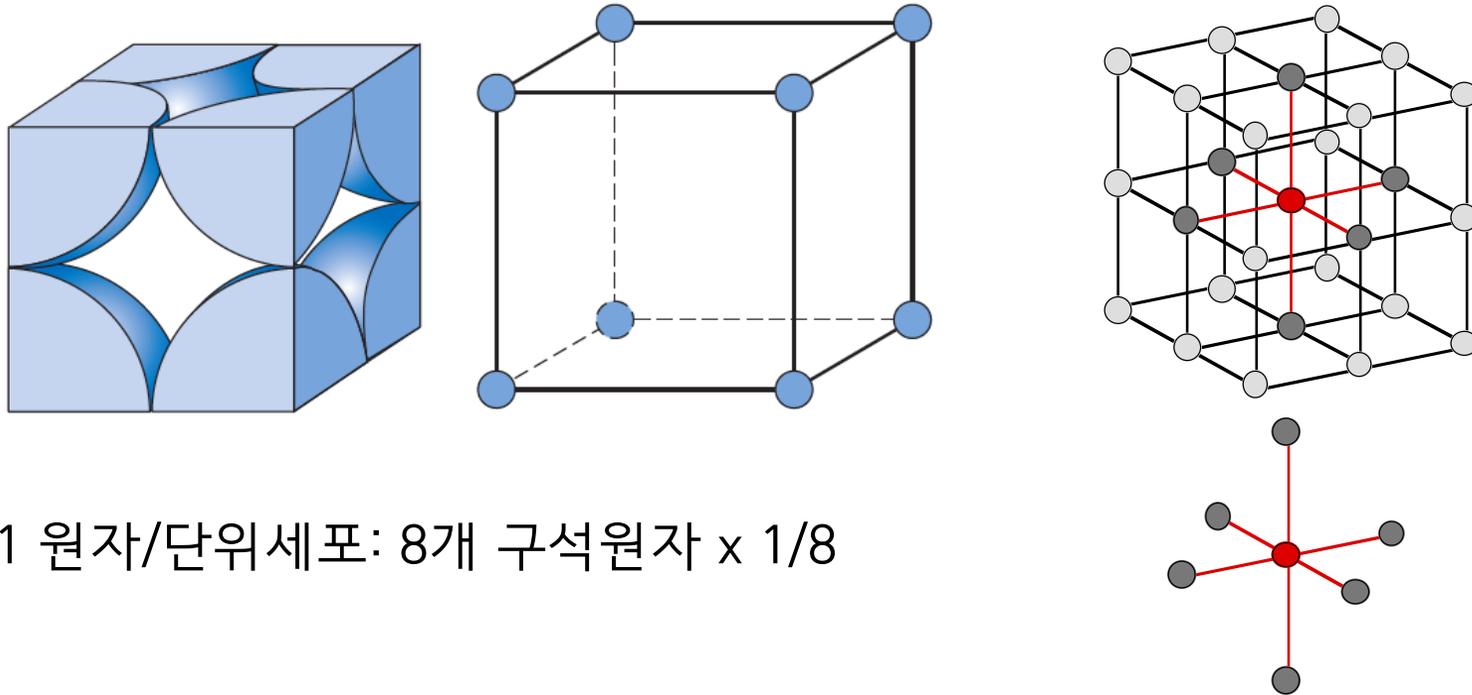
2-차원 구조



허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

## 단순밀집구조 (Simple Cubic Structure :SC)

- 낮은 배열밀도로 헐치 않음 (폴로늄 (Po)의 결정구조)
- 밀집방향 (Close-packed directions) 육방밀집구조 (cube edges) 가짐.
- 배위수 (Coordination #)  
: 최인접원자수 = 6

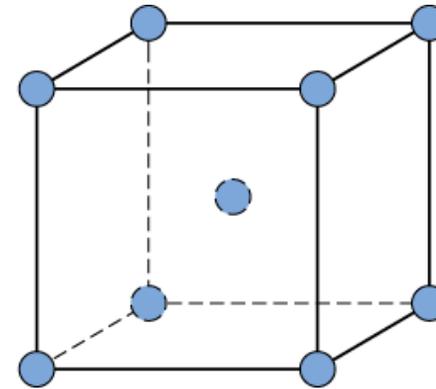
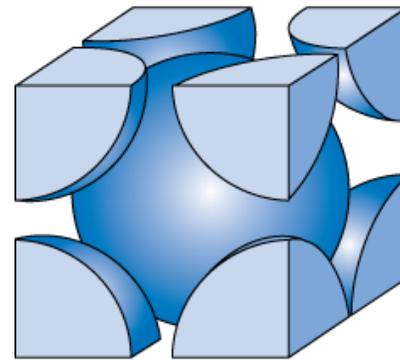
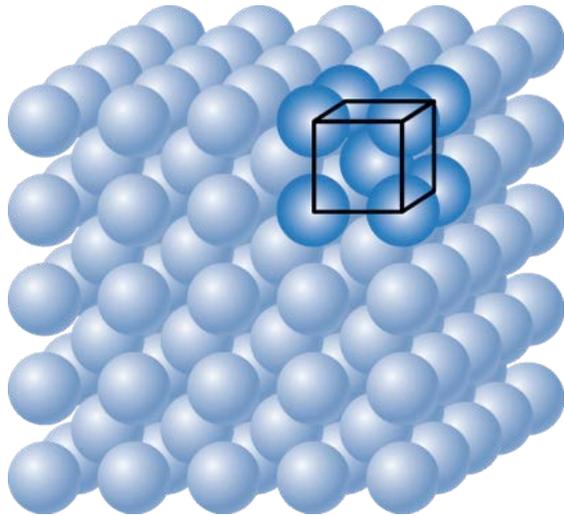


1 원자/단위세포: 8개 구석원자  $\times$  1/8

허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

## 체심입방구조 (Body Centered Cubic Structure: BCC)

- 입방의 대각선을 따라 원자가서로 맞닿아 있음
  - 예시: Cr, W, Fe ( $\alpha$ ), Tantalum, Molybdenum
  - 배위수 (Coordination #) = 8



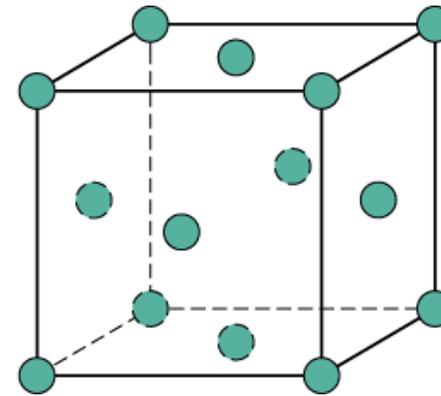
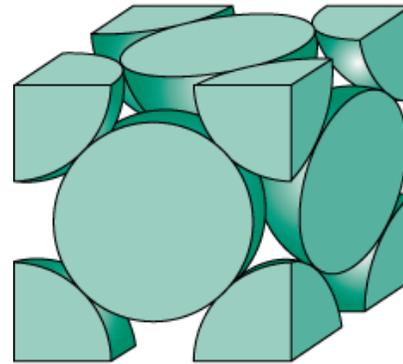
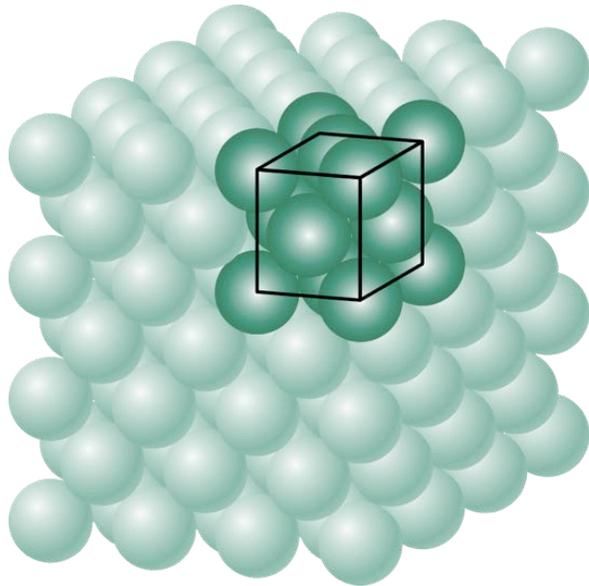
Adapted from Fig. 4.1,  
*Callister & Rethwisch 9e.*

2 원자/단위세포: 1개 중심원자 + 8개 구석원자  $\times$  1/8

## 면심입방구조 (Face Centered Cubic Structure: FCC)

- 원자들이 면의 대각선을 따라 서로 맞닿아 있음
  - 예시: Al, Cu, Au, Pb, Ni, Pt, Ag

- 배위수 (Coordination #) = 12



4 원자/단위세포: 6개 면상원자  $\times$  1/2 + 8개 구석원자  $\times$  1/8

**허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.**

Adapted from Fig. 3.T, Callister & Rethwisch 9e.

## 이론적 밀도 (Theoretical Density, $\rho$ )

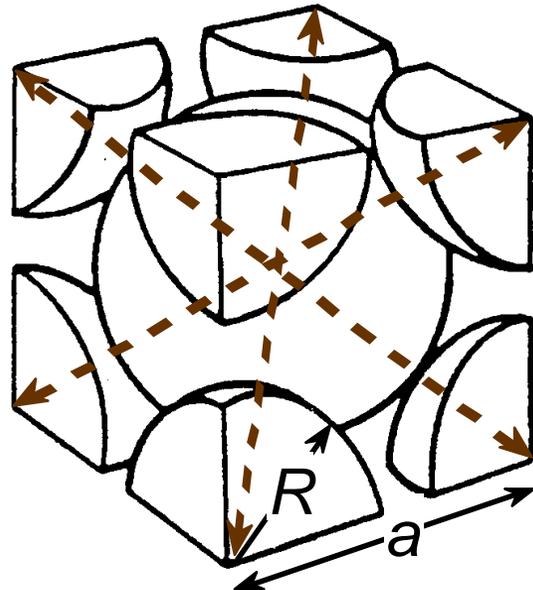
$$\text{밀도 } (\rho) = \frac{\text{단위세포내 원자의 총질량}}{\text{단위세포의 총부피}} = \frac{nA}{V_C N_A}$$

$n$  = 원자수/단위세포

$A$  = 원자량 (g/mol)

$V_C$  = 단위세포의 부피 (= 정육면체에 대해  $a^3$ 로 정함)

$N_A$  = 아보가드로 수 (Avogadro's number:  $6.022 \times 10^{23}$ /mol)



- 예시: Cr (BCC)

$$A = 52.00 \text{ g/mol}$$

$$R = 0.125 \text{ nm}$$

$$n = 2 \text{ atoms/unit cell}$$

$$a = 4R\sqrt{3} = 0.2887 \text{ nm}$$

$$\rho_{\text{theoretical}} = 7.18 \text{ g/cm}^3$$

$$\rho_{\text{actual}} = 7.19 \text{ g/cm}^3$$

단 배포 및 사용을 불허합니다.

Adapted from Fig. 4.1(a), Callister & Rethwisch 9e.

# 세라믹의 원자결합

## • 결합 (Bonding)

- 이온 또는 공유결합의 성질을 나타낼 수 있음.
- 원자간 전기음성도 (electronegativity) 차이가 클수록 % 이온특성 (% ionic character) 증가.

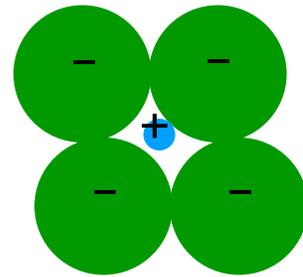
IA																	0
H																	He
2.1	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	-
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
1.0	1.5											2.0	2.5	3.1	3.5	4.1	-
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
1.0	1.3											1.5	1.8	2.1	2.4	2.9	-
							VIII										
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.9	1.1	1.2	1.3	1.5	1.6	1.6	1.7	1.7	1.8	1.8	1.7	1.8	2.0	2.2	2.5	2.8	-
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.3	1.4	1.4	1.5	1.4	1.4	1.5	1.5	1.7	1.8	2.0	2.2	-
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
0.9	0.9	1.1	1.2	1.4	1.4	1.5	1.5	1.6	1.5	1.4	1.5	1.5	1.6	1.7	1.8	2.0	-
Fr	Ra	Ac	Lanthanides: 1.0-1.2														
0.9	0.9	1.0	Actinides: 1.0-1.2														

허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

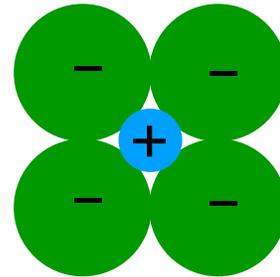
# 결정구조 결정 인자

- 이온의 상대적 크기 (Relative sizes of ions)

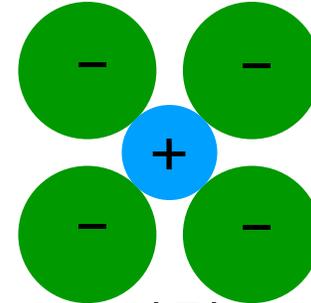
- 안정구조 형성시, 반대로 전하를 띤 이웃한 이온의 수 극대화



불안정



안정



안정

- 중성 전하의 유지 (Maintenance of Charge Neutrality)

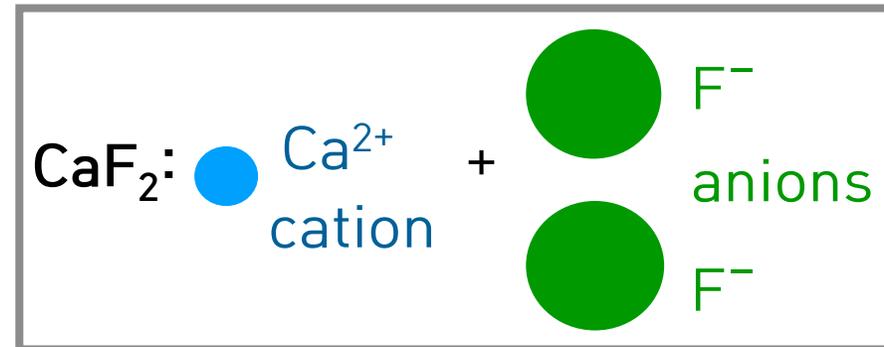
- 세라믹 순전하: 0 (중성)

- 화학식에서의 반영



m, p 중성전하를

유지하도록 결정

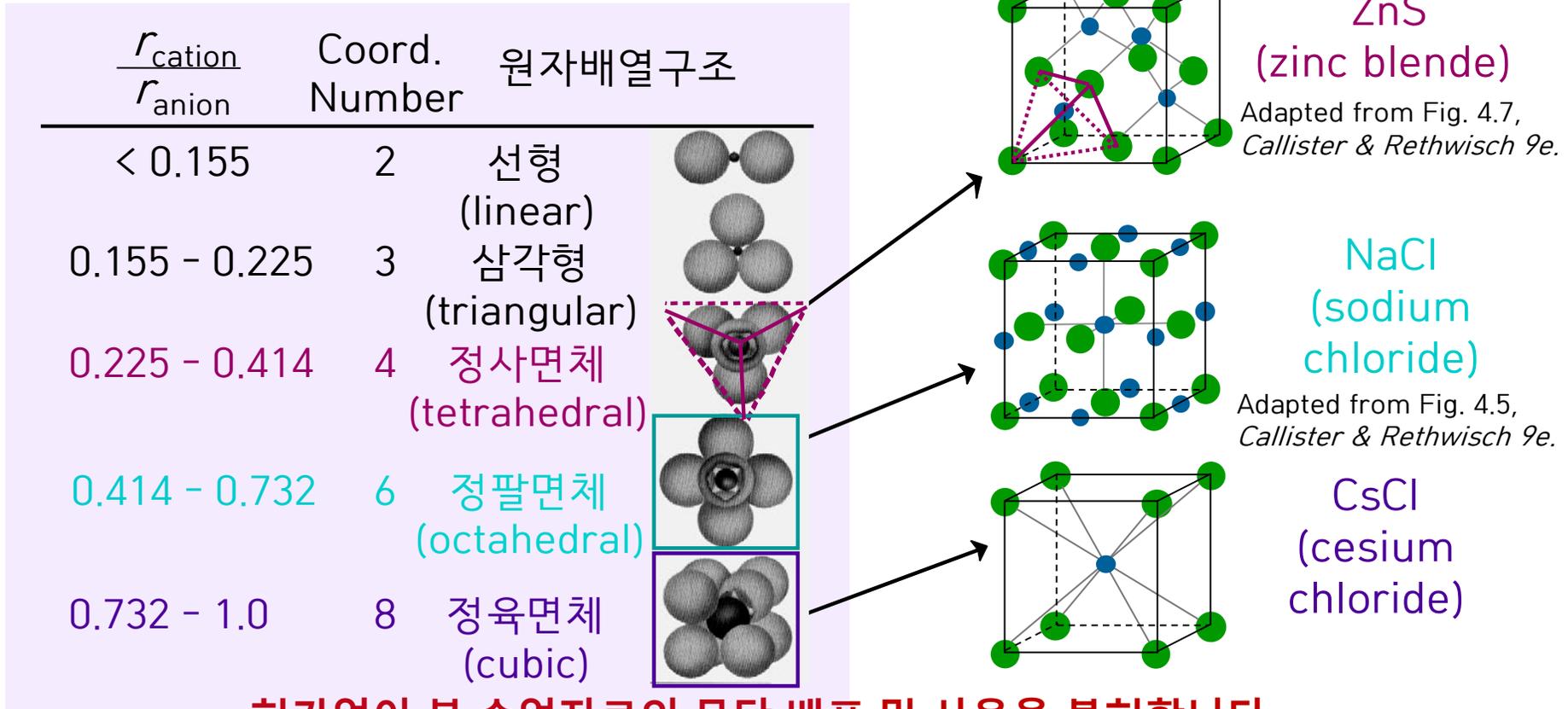


허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

Adapted from Fig. 4.4, Callister & Rethwisch 9e.

# 배위수 (Coordination Number)와 이온거리 (Ionic Radii)

- 배위수 (Coordination Number)  $\sim \frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}}$
- 안정구조형성을 위해 양이온을 둘러싼 음이온 갯수



**허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.**

Adapted from Fig. 4.6, Table 4.3, Callister & Rethwisch 9e.

# 재료의 특성

## • 재료의 특성

### a) 금속 (Metals)

- 금속 결합 밀집구조 (close-packing)
- 원자량 일반적으로 큼

### b) 세라믹 (Ceramics)

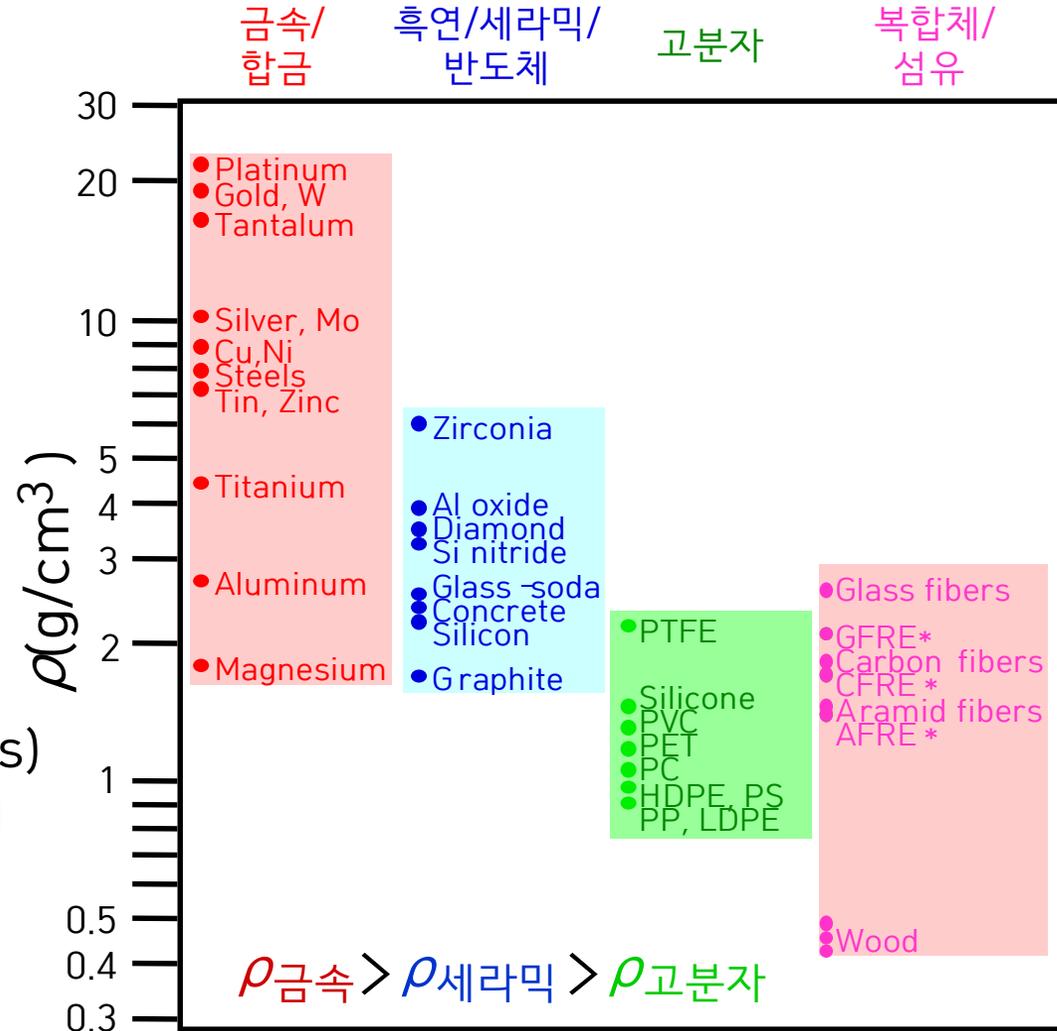
- 금속대비 밀집도 낮음
- 가벼운 원소 포함

### c) 고분자 (Polymers)

- 낮음 밀집 밀도 (대부분 비정질: amorphous)
- 가벼운 원소로 구성 (C,H,O)

### d) 복합재료 (Composites)

- 중간 물성



허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

Data from Table B.1, Callister & Rethwisch, 9e.

## 탄소 (Carbon)

- 다이아몬드 (Diamond)

- a) 구조

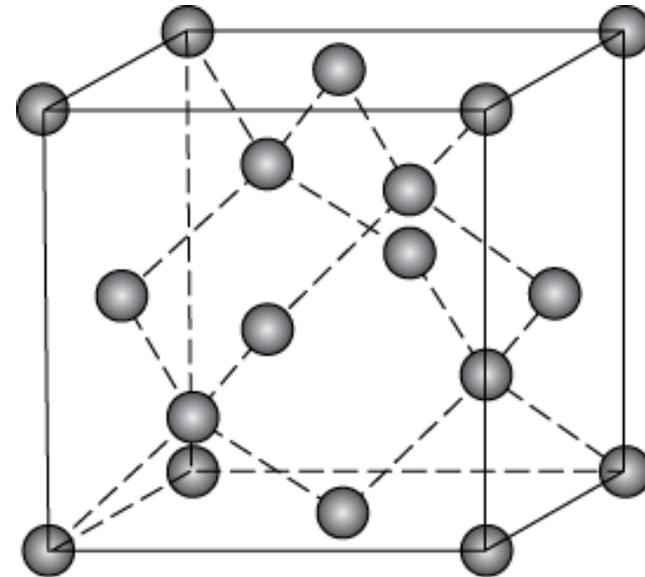
- 탄소의 정사면체 결합 (tetrahedral bonding)

- b) 물성

- 높은 경도 (hardness),
- 매우 높은 열전도도 (thermal conductivity)
- 큰 단결정 (single crystals)

- c) 용도

- 보석, 다이아몬드 박막
- 물질을 절제, 깎을 때 사용
- 딱딱한 표면 코팅 통해 의료용 기구, 절삭용도 등으로 사용



허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

Fig. 4.17, Callister & Rethwisch 9e.

## 탄소 (Carbon)

- 흑연 (graphite)

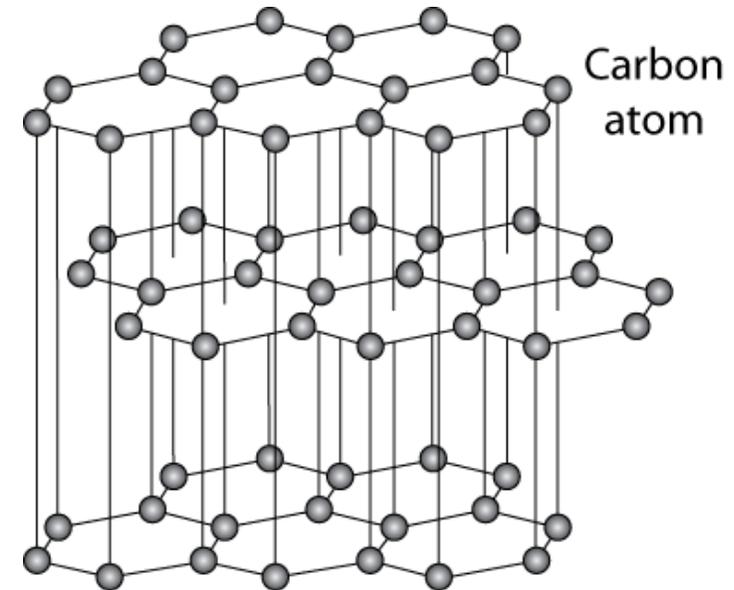
a) 구조

- 층상구조 (layered structure)
- 탄소원자의 평행 육각배열 (parallel hexagonal arrays)



b) 특성

- 층간의 약한 분자간력 (van der Waal's forces)
- 층간이 약하게 미끄러짐  
: 윤활유 (lubricant) 및 연필로 사용

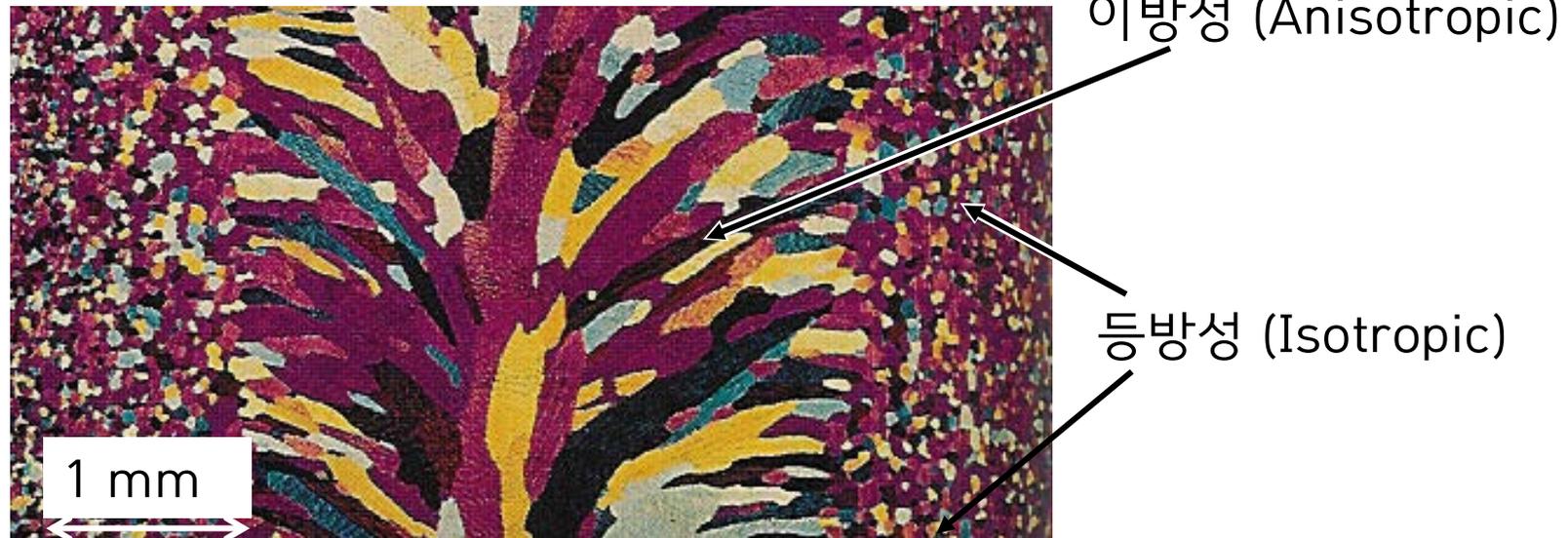


허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

Fig. 4.18, Callister & Rethwisch 9e.

# 다결정 (Polycrystals)

- 다결정 (polycrystals): 대부분의 물질에 해당
- Nb-Hf-W plate



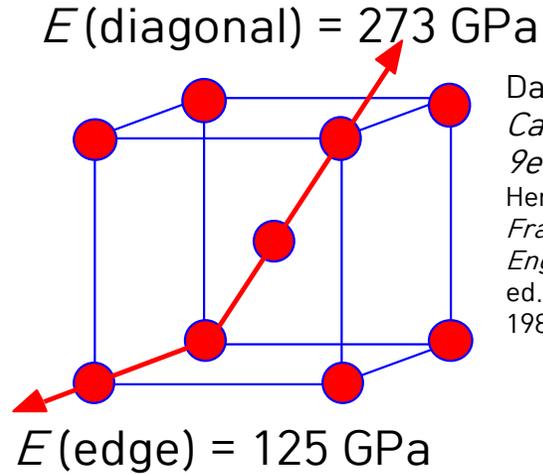
- 결정립 (grain): 단결정 (single crystal)
- 각 결정립이 무작위적으로 배열 (random orientation)  
: 대부분 원소의 물성이 비배열적임 (not directional).
- 결정립 크기: 1 nm ~ 2 cm (몇 개에서 몇 백만개 원자층).

**허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.**

# 단결정 (Single) vs 다결정 (Polycrystals)

## • 단결정 (Single Crystals)

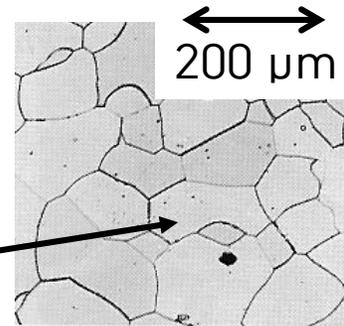
- 방향에 따라 물성이 변함:  
이방성 (anisotropic)
- 예시: BCC구조 철의 기계적 물성  
→ 방향 따른 철 탄성계수 ( $E$ )의  
이방성 나타냄



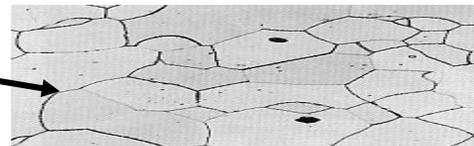
Data from Table 3.3,  
*Callister & Rethwisch 9e*. (Source of data is R.W.  
Hertzberg, *Deformation and  
Fracture Mechanics of  
Engineering Materials*, 3rd  
ed., John Wiley and Sons,  
1989.)

## • 다결정 (Polycrystals)

- 물성이 방향에 따라 변하거나  
변하지 않을 수 있음.
- 결정립이 무작위로 배열된 경우  
(randomly oriented): 등방성  
( $E_{\text{poly iron}} = 210 \text{ GPa}$ )
- 결정립이 직조된 경우(textured)  
: 이방성 (anisotropic) 나타냄



Adapted from Fig.  
6.19(b), *Callister &  
Rethwisch 9e*.  
[Fig. 6.19(b) is courtesy of  
L.C. Smith and C. Brady, the  
National Bureau of  
Standards, Washington, DC  
(now the National Institute  
of Standards and  
Technology, Gaithersburg,  
MD).]



허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 금합니다.

# 정리 (결정계)

## 1) 원자의 배열구조

- 원자는 결정 (crystalline) 또는 비정질 (amorphous) 구조로 배열됨.

## 2) 결정계

- 결정계의 좌표 (points), 방향 (directions), 면 (planes)  
결정계의 방향 (결정방향) 및 면 (결정면)은 원자 밀도와 관련됨.

## 3) 단결정과 다결정

- 재료의 결정성:
  - 단결정 (single crystals) 또는 다결정 (polycrystalline)
- 재료의 결정성과 물성:
  - 재료의 물성과 단결정: 배열에 따른 이방성 (directional, anisotropic) 나타냄.
  - 재료의 물성과 다결정:  
배열에 따른 등방성 (non-directional, isotropic) 나타냄.  
무작위적으로 배열된 결정립에 의한 물성  
여기없이 본 수업 자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

# 정리 (결정구조)

## 1) 금속 결정구조

- 일반적 금속 결정구조: FCC, BCC, and HCP.
  - 배위수 (Coordination number) 및 원자배열인자 (atomic packing factor) FCC와 HCP 결정구조에 같음.
- 물질의 밀도 (density) 예측: 원자량 (atomic weight), 원자 반지름 (atomic radius) 결정의 기하구조 (crystal geometry)

## 2) 세라믹 결정구조

- 세라믹 원자간 결합: 이온결합 (ionic bond) 및 공유결합 (covalent bond).
- 세라믹 결정구조의 중요한 점
  - 중성전하 (charge neutrality) 유지
  - 양이온 (cation)-음이온 (anion)의 반지름 비율.

## 3) 동소체

- 동소체 (allotropy):
  - 원소는 같고 결정 구조는 다른 물질. (동질이상, polymorphism)

**허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.**