

소재의 특성 (결함 및 확산)

허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

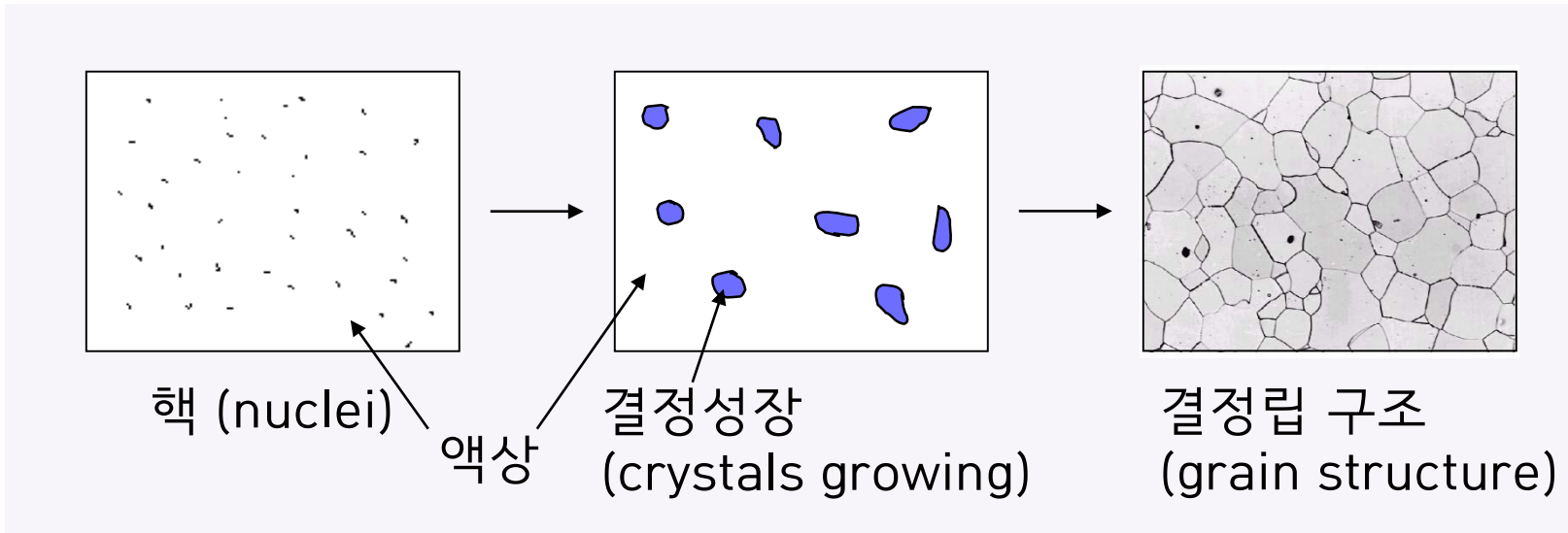
고체에서의 결함 (Imperfections in Solids)

응고 (Solidification)

a) 원리: 액상 용융된 재료 (molten material)의 주조 (casting) 결과물

b) 2 단계 성장/형성

- 핵 (Nuclei) 형성 → 핵 성장 및 결정 형성 → 결정립 (grain) 구조
- 성장한 결정립이 서로 만날 때까지 계속 성장함.



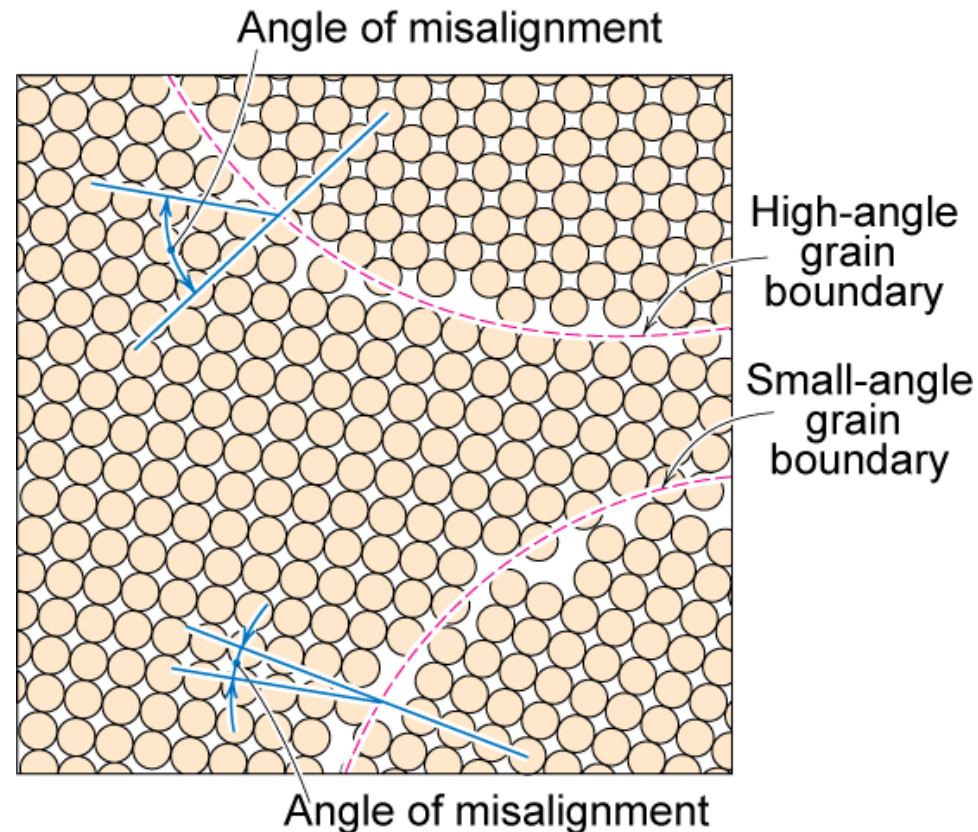
[Photomicrograph courtesy of L. C. Smith and C. Brady, the National Bureau of Standards, Washington, DC (now the National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.)]

허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

다결정 재료 (Polycrystalline Materials)

결정립계 (Grain Boundaries)

- 결정사이 영역 (regions between crystals)
- 한 영역의 격자와 다른 영역으로 전이 (transition from lattice of one region to that of the other)
- 약간 불규칙적임
- 결정립계에서의 낮은 밀도
 - 높은 이동도 (high mobility)
 - 빠른 확산정도 (high diffusivity)
 - 높은 화학적 반응성 (high chemical reactivity)



고체에서의 결함 (Imperfections in Solids)

고체의 결함 유형

점결함 (Point defects)

- 공공원자 (Vacancy atoms)
- 침입형 원자 (Interstitial atoms)
- 치환형 원자 (Substitutional atoms)

선결함 (Line defects)

- 전위 (Dislocations)

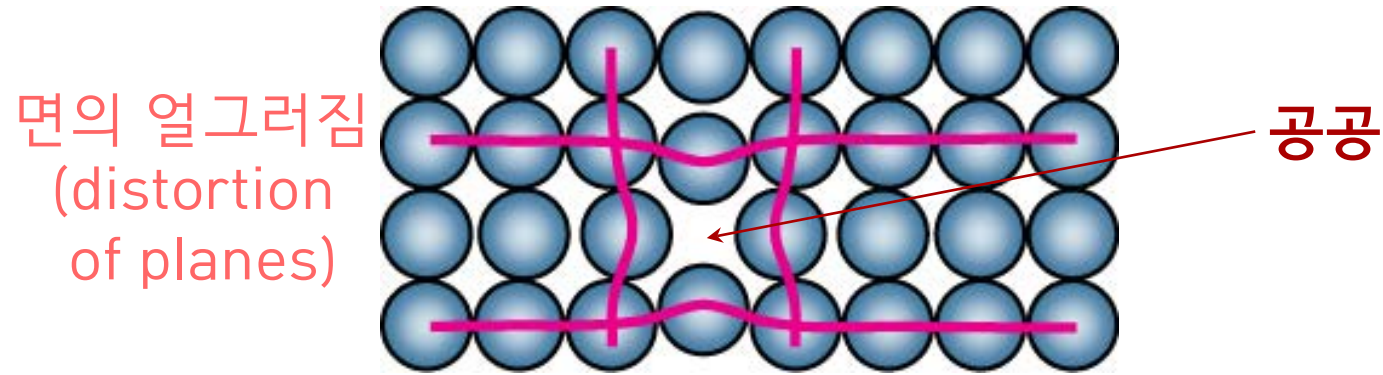
면결함 (Area defects)

- 결정립계 (Grain Boundaries)

금속에서 점결함

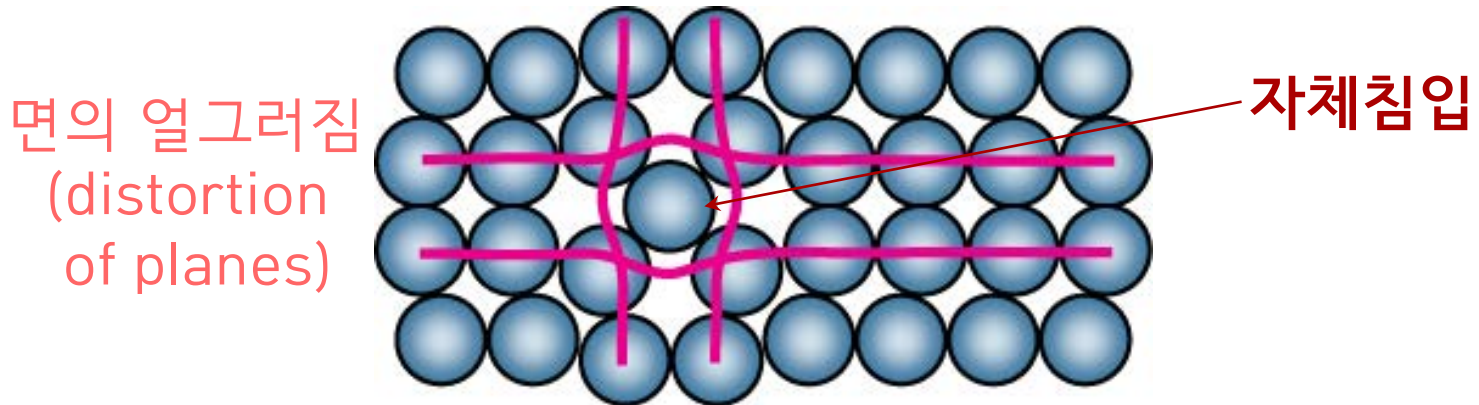
공공 (Vacancies)

- 구조내 비어있는 원자 부분 (vacant atomic sites)



자체 침입 (Self-Interstitials)

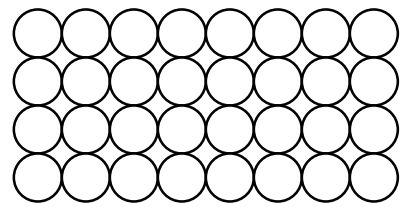
- 원자 사이트 사이에 추가적 원자 ("extra" atoms)가 위치



허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

점결합의 평형농도

- 결합 평형농도 (Equilibrium conc.)의 온도의존성



각 격자 사이트는
잠재적 공공 사이트

결합의 수 $\rightarrow N_v$

잠재적 결합 사이트 수 $\rightarrow N$

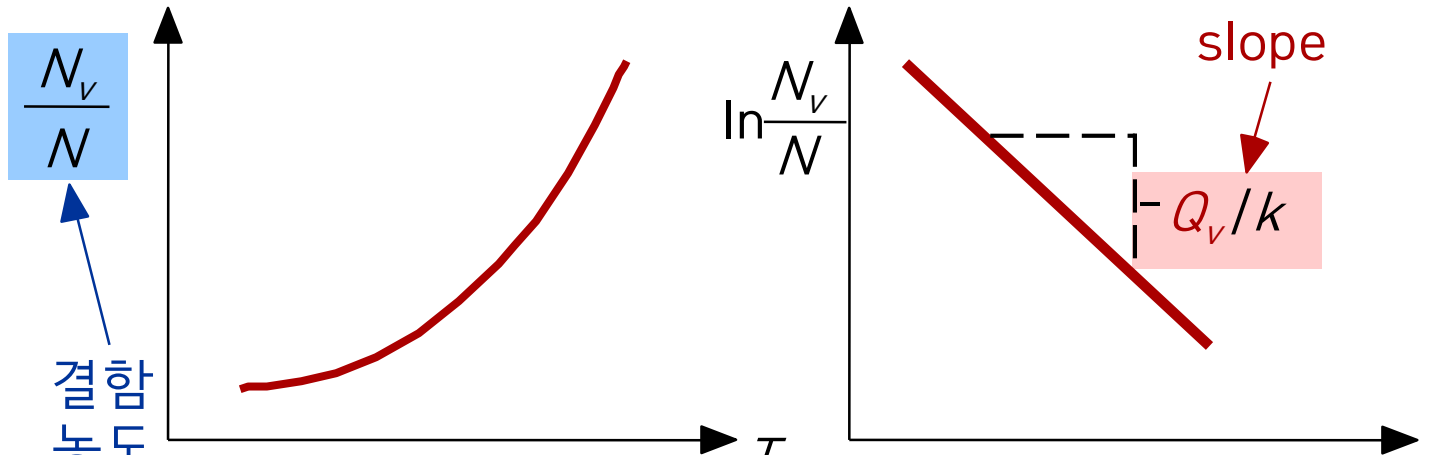
$$\frac{N_v}{N} = \exp\left(\frac{-Q_v}{kT}\right)$$

활성화 에너지 $\rightarrow Q_v$

Boltzmann 상수 $\rightarrow k$

온도 $\rightarrow T$

(1.38 x 10⁻²³ J/atom-K)
(8.62 x 10⁻⁵ eV/atom-K)



세라믹의 점결함 (I)

공공 (Vacancies)

- 세라믹에서 공공은 양이온 (cations)과 음이온 (anions)에 대해 모두 존재.

침입 (Interstitials)

- 양이온에 대해 침입 (interstitials) 존재
- 음이온의 침입 사이트 (interstitial sites) 대비 큰 크기 때문에 침입은 음이온에 대해 관찰되지 않음

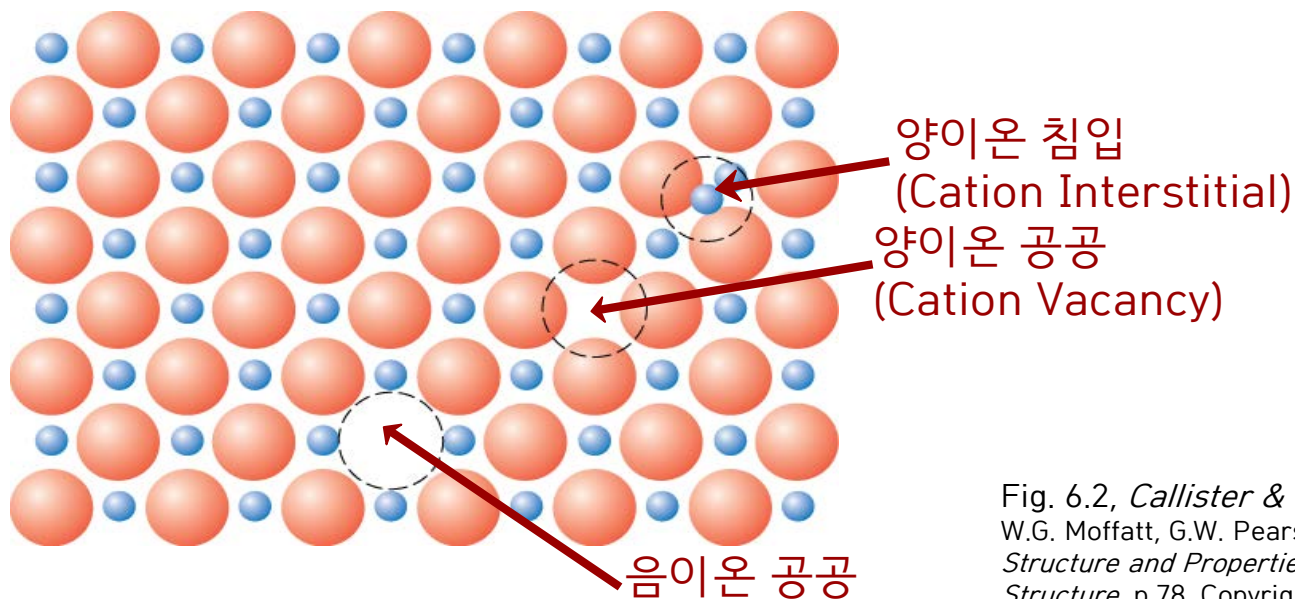


Fig. 6.2, Callister & Rethwisch 9e. (From W.G. Moffatt, G.W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. 1, Structure, p.78. Copyright ©1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley and Sons, Inc.)

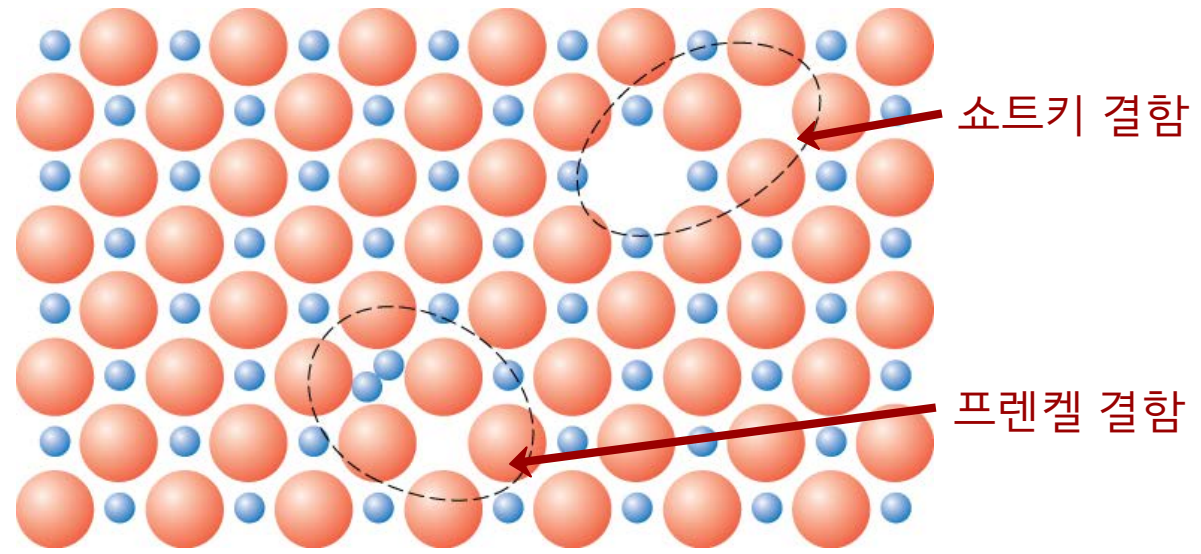
세라믹의 점결함 (II)

프렌켈 결함 (Frenkel Defect)

- 양이온 침입 (cation interstitial)-양이온 공공 (cation vacancy)의 짝

쇼트키 결함 (Shottky Defect)

- 양이온 (cation vacancies)과 음이온 공공 (anion vacancies)의 짝



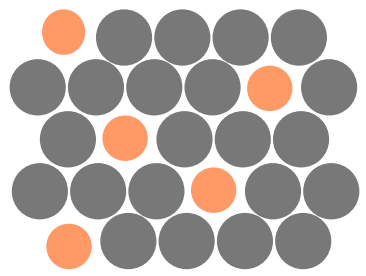
• 결함의 평형 농도 $\propto e^{-Q_D/kT}$

Fig. 6.3, Callister & Rethwisch, From W.G. Moffatt, G.W. Pearsall and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. 1, *Structure*, p.78. Copyright ©1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley and Sons, Inc.)

금속의 점결합 (I)

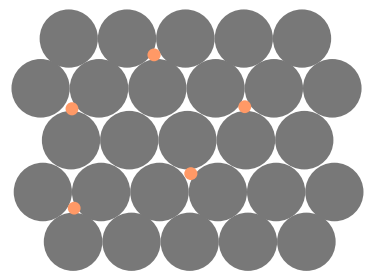
불순물 (impurity, B)이 주재료 (host, A)에 추가

- 불순물 (B)이 주재료 (A)에 추가돼 고용체 (Solid solution) 형성
→ 점 결함의 무작위 분포



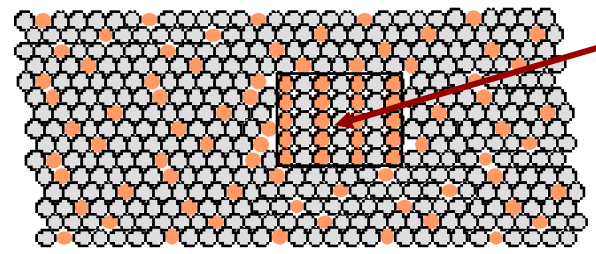
치환형 고용체
(Substitutional solid soln.)
(e.g., Cu in Ni)

OR



침입형 고용체
(Interstitial solid soln.)
(e.g., C in Fe)

- B가 A에 들어 있는 고용체에 새로운 상의 입자 삽입



이차상 입자 (Second phase particle)
- 다른 조성 및 구조

허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

금속의 점결함 (II)

치환형 고용체 (substitutional solid solution) 형성

- W. Hume - Rothery 법칙
 - 원자간 반지름 차이 (Δr) 작음:
 $\Delta r < 15\%$
 - 주기율표상 원소 근접성
(Proximity): 유사한 전자친화도
 - 순수 금속: 동일 결정구조
 - 원자가 (Valency):
낮은 원자가 (lower valency)의
금속 대비 높은 원자가 (higher
valency) 금속 녹이는 경향 있음

Element	Atomic Radius (nm)	Crystal Structure	Electro- negativity	Valence
Cu	0.1278	FCC	1.9	+2
C	0.071			
H	0.046			
O	0.060			
Ag	0.1445	FCC	1.9	+1
Al	0.1431	FCC	1.5	+3
Co	0.1253	HCP	1.8	+2
Cr	0.1249	BCC	1.6	+3
Fe	0.1241	BCC	1.8	+2
Ni	0.1246	FCC	1.8	+2
Pd	0.1376	FCC	2.2	+2
Zn	0.1332	HCP	1.6	+2

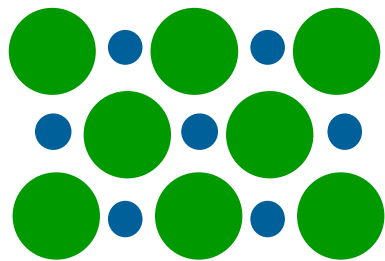
세라믹의 점결합

세라믹 결합의 특징

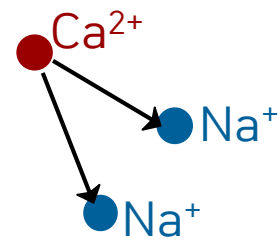
- 불순물 존재시 전기적 중성 (Electroneutrality: charge balance) 유지



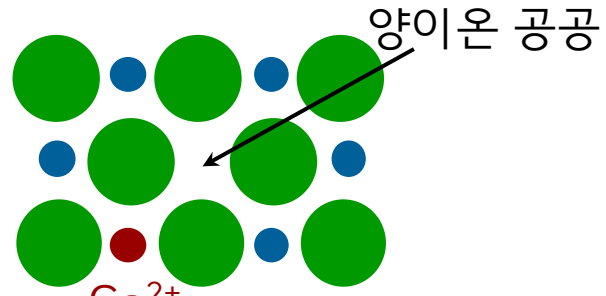
- 치환형 양이온 불순물 (Substitutional cation impurity)



불순물 없는 상태

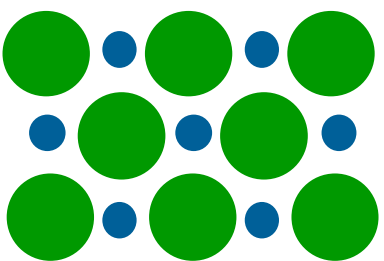


Ca^{2+} 불순물

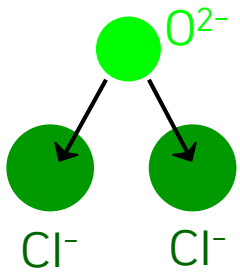


불순물 첨가

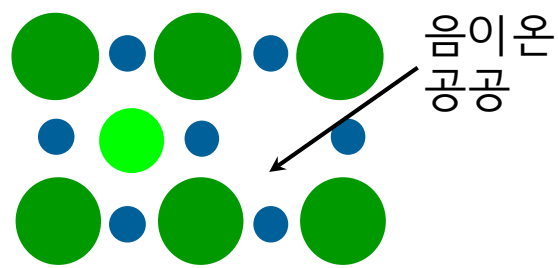
- 치환형 음이온 불순물 (Substitutional anion impurity)



불순물 없는 상태



O^{2-} 불순물



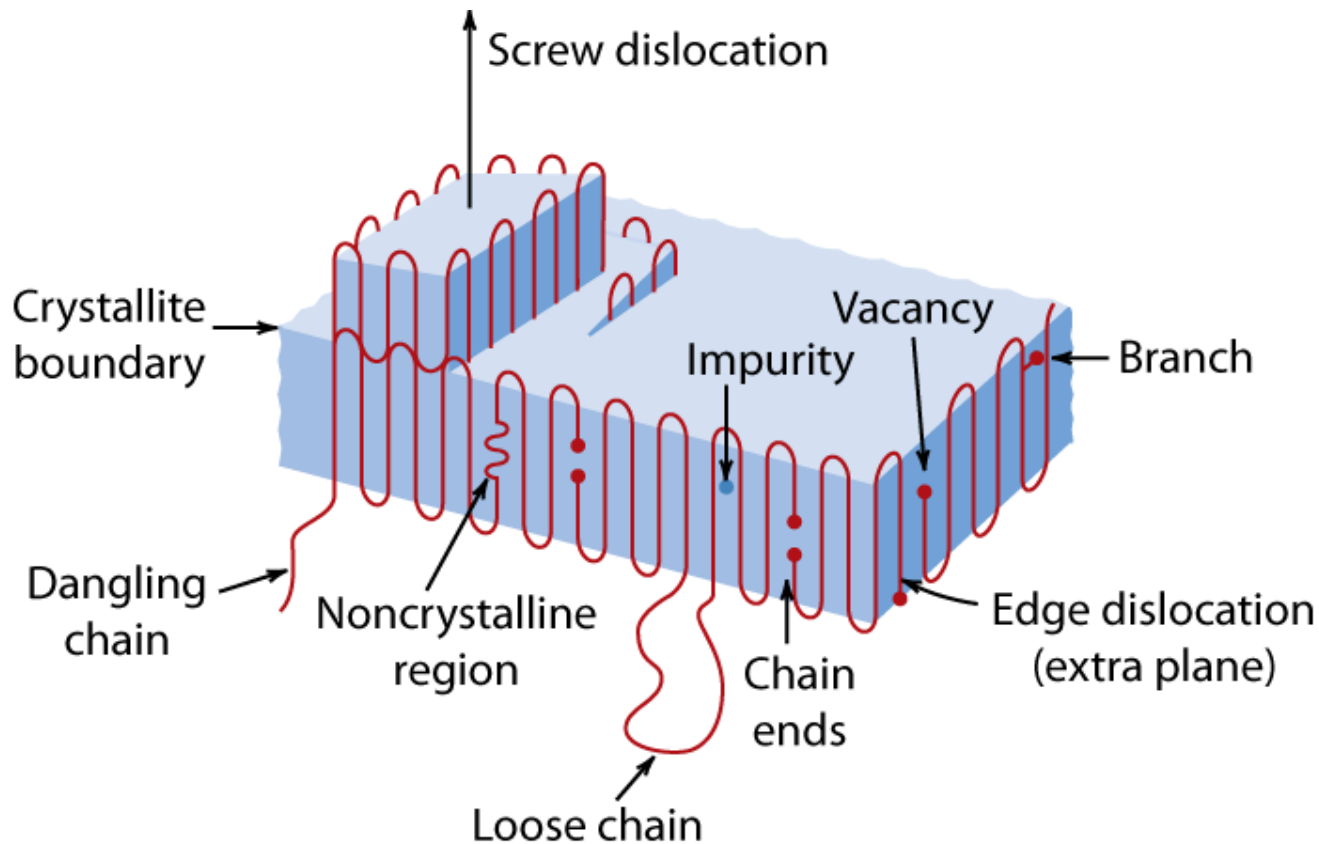
불순물 첨가

허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 금합니다.

고분자의 점결합

고분자의 결합

- 사슬 끝(chain ends)과 옆 사슬 (side chains)처럼 결합은 체인 쌓임 변형 및 불순물에 의해 발생



허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

선결함 (Line Defects)

전위 (Dislocations)

- 어긋난 원자 (misaligned atoms) 주위의 1차원적 결함
- 전위가 움직일 때 결정면 사이의 미끄러짐 (slip)이 영구플라스틱 변형 (permanent (plastic) deformation) 초래

가장자리 전위 (Edge dislocation)

- 결정구조에서 들어간 원자의 추가 절반면 (extra half-plane of atoms)
- 전위선에 수직 (\perp)인 b 벡터
- 버거스 벡터 (Burger's vector, b):
격자변형의 척도

스크류 전위 (Screw dislocation)

- 전단변형 (shear deformation) 으로부터
기인한 나선형 평면 경사 (spiral planar ramp)
- 버거스 벡터 (b)가 전위선에 평행 (\parallel)

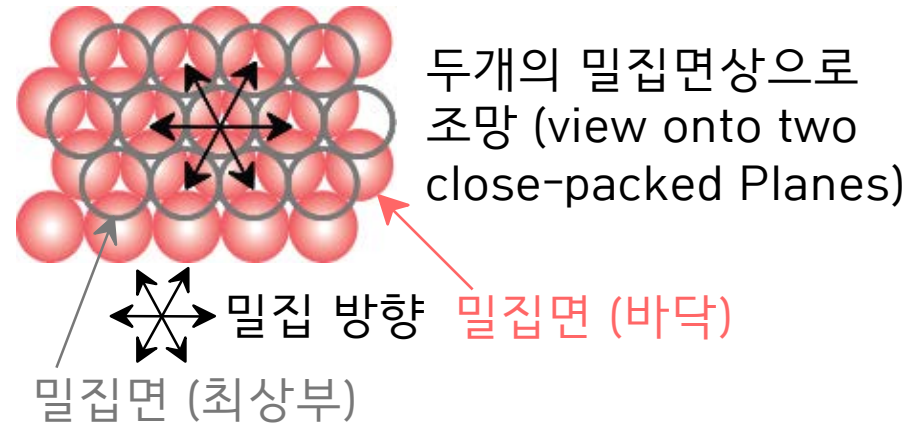


0.2 μm

전위와 결정 구조 (Dislocations & Crystal Structures)

• 구조

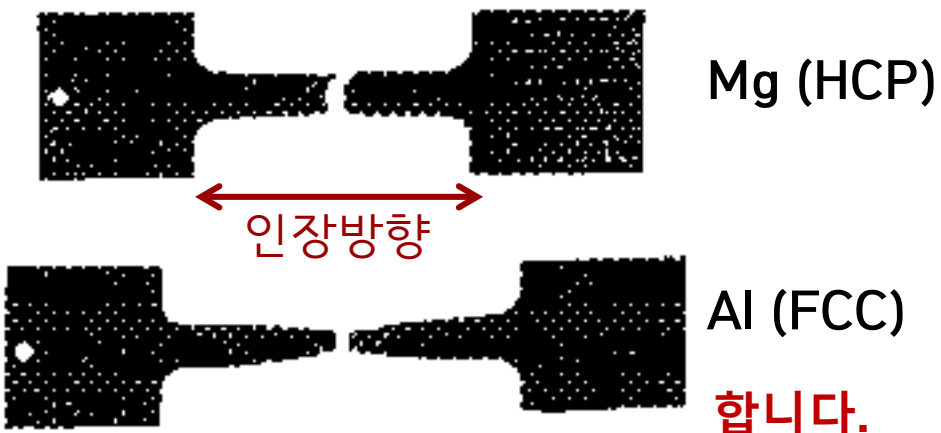
- 밀집면과 방향 선호 (close packed plane and direction)



• 결정구조 비교

- 면심입방구조 (FCC): 많은 밀집면과 방향
- 육방밀집구조 (HCP): 하나의 면, 3개의 방향
- 체심입방구조 (BCC): 없음

• 인장테스트 용 시편



허가없이 본 수

합니다.

면 결함 (Planar Defects)

면결함의 응용 (촉매)

a) 촉매

- 화학반응에서 반응에 참여하지 않으면서 반응속도 향상

b) 촉매의 활성화 사이트

- 촉매의 활성화 사이트는 주로 면결함

자동차 촉매변환기용 $(\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_2$ 단결정

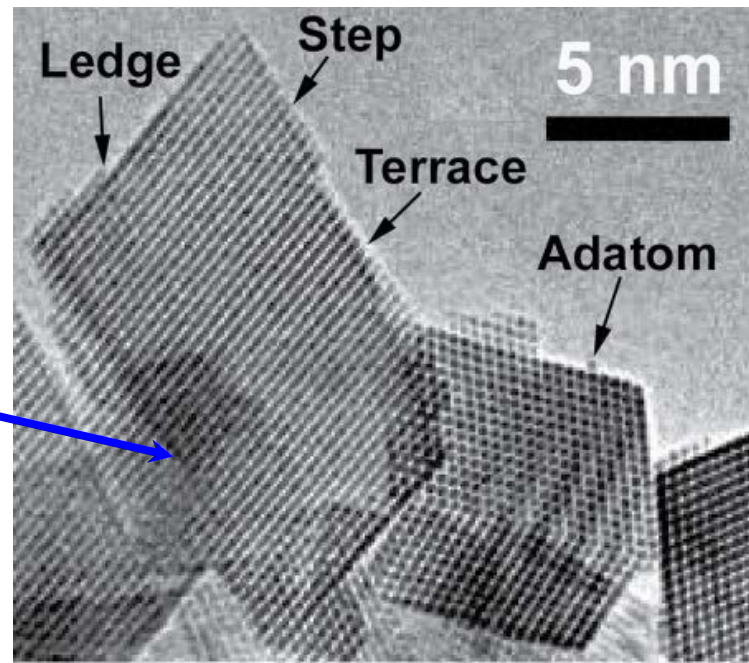
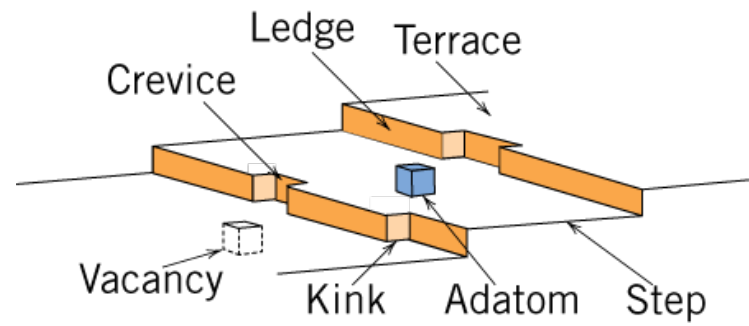


Fig. 6.17, Callister & Rethwisch 9e.
 [From W. J. Stark, L. Mädler, M. Maciejewski, S. E. Pratsinis, and A. Baiker, "Flame Synthesis of Nanocrystalline Ceria/Zirconia: Effect of Carrier Liquid." Chem. Comm., 588–589 (2003). Reproduced by permission of The Royal Society of Chemistry.]

허가없이 본 수업자료의 무단 배포 및 사용을 불허합니다.

Fig. 6.16, Callister & Rethwisch 9e.