

## 중성자 4축 단결정 회절장치를 이용한 KD<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>의 결정구조 연구

김신애, 송수호, 이창희

한국원자력연구소

상온에서 정방정계(*I42d*)에 속하는 KD<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> (DKDP)와 KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> (KDP)는 저온에서 사방정계로 상전이를 일으켜 강유전성을 갖게 되며 구조는 물론 물성 연구가 활발한 결정이다. KDP 원료시약을 중수(D<sub>2</sub>O)에서 성장시킨 DKDP 단결정을 한국원자력연구소 하나로의 중성자 4축 단결정 회절장치(Neutron Four Circle Single Crystal Diffractometer; FCD)를 이용하여 회절데이터를 수집하여 구조해석을 행하였다.

한국표준과학연구원의 Enraf-nonius CAD4 diffractometer 로 측정한 격자상수는  $a = 7.4633(7)$ ,  $c = 6.9785(5)$  Å 이며  $Z = 4$  이다. SHELXL97 프로그램을 이용하여 정밀화한 결과, 본 시료는 KDP의 H 자리를 D와 H가 각각 66%와 34% 비율로 차지하고 있으며, 이는 DSC(Differential scanning calorimetry)의 측정 결과와도 매우 유사하다. 2회 대칭축을 중심으로 D/H는 50% 점유도의 두 가지 가능한 위치를 갖는 무질서(disorder)를 보여준다. 297개의 수집 회절데이터 중 144개의 독립 회절반점에 대하여 정밀화한 최종신뢰도 R 값은 4.10%, wR 값은 9.57%이다.

아르곤 분위기에서 DKDP 원료시약을 사용하여 중수에서 육성된 DKDP의 결정구조와도 비교 연구할 계획이다.

\* 본 연구는 과학기술부 원자력연구개발 사업의 일환으로 수행되었으며, 과학재단 지원에 의한 유전체단결정은행에서 육성된 시료를 사용하였음