B9 18:10 - 18:25

High Temperature Phase Transition of $KLiSO_4$ by Neutron Powder Diffraction

강성웅, 이확주, 조양구, 박현민, 최용남*, 이창희*

한국표준과학연구원 결정구조그룹
*한국원자력원구소 중성자물리실

$KLiSO_4$는 ferroelastic 특성을 가지는 물질로 온도에 따른 많은 상전이 현상이 존재하는 것으로 알려져 있다. 구조해석을 위하여 휘발법을 이용한 저온 수용액법으로 $KLiSO_4$ 단결정을 성장시켰으며, 성장된 단결정의 상전이 온도를 확인하기 위하여 DSC를 측정하였다. 이 결과 708K, 949K에서 상온($P6_3$)과 다른 상(phase)이 있음을 확인하였다. 각상의 구조를 밝히기 위하여 Neutron powder diffraction을 이용하여 302K, 500K, 653K, 760K, 840K, 920K 그리고 960K에서 데이터를 수집하였다. 측정조건은 0° ~160° , step size는 0.05° , 스텝당 측정시간은 144 sec였다. 고온측정에서 얻은 중성자 회절데이터를 이용하여 Rietveld refinement를 실행하였으며, 고온에서 $KLiSO_4$의 상전이에 따른 각 phase들을 refine함으로써 온도 변화에 따른 $KLiSO_4$의 구조를 밝혔다.