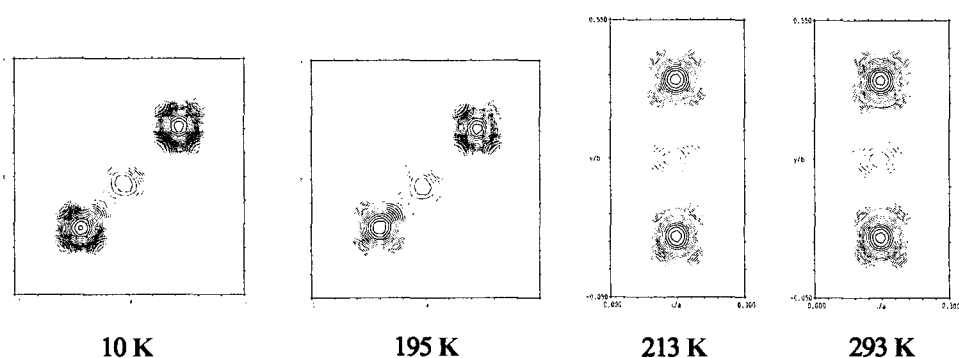


$K(H_{0.34}D_{0.66})_2PO_4$ 의 상전이에 따른 결정구조 변화

김신애, 성기훈, 이창희
한국원자력연구소 하나로이용기술개발부

$K(H_{0.34}D_{0.66})_2PO_4$ 는 KH_2PO_4 (KDP)의 수소원자를 중수소가 일부 치환한 결정이다. 실험에 사용한 시료는 KDP 원료시약을 중수(D_2O)에서 성장시킨 것으로, 단결정 구조해석을 통해 D와 H의 점유율을 정련하였다. 본 연구에서는 상전이에 따른 결정구조의 변화를 연구하기 위하여 한국원자력연구소의 연구용 원자로인 하나로에 설치된 고분해능 분말회절장치(HRPD)로 상온에서부터 10K 까지 온도를 변화시켜가며 회절패턴을 측정하였다. 그 결과 190-195K 사이에서 상전이가 일어났으며, 이것은 DSC(Differential Scanning Calorimetry) 측정결과와 상온에서 단결정 분석결과 D의 점유도로 계산한 상전이 온도와의도 잘 일치한다. 10K와 298K에서 측정된 회절패턴에 대해 프로그램 FullProf를 사용하여 각각 리트벨트 구조정련을 수행한 결과, 상온에서는 정방정계이며 공간군은 I-42d 이고 저온에서는 사방정계인 Fdd 2로 변한다. 온도변화에 따른 핵밀도 분포를 측정된 결과 상온에서 D/H는 2회 대칭축을 중심으로 50% 점유도의 두 가지 가능한 위치를 갖는 무질서(disorder) 상태로 존재하나 온도가 내려갈수록 한 쪽으로 치우쳐 상전이 온도 아래에서는 하나의 산소와 결합하여 질서(order) 상태를 보이며 다른 하나와는 수소결합을 이룬다.



온도변화에 따른 핵밀도분포

* 본 연구는 과학기술부 원자력연구개발 사업의 일환으로 수행되었으며 과학재단 지원에 의한 유전체단결정은행에서 육성한 시료를 사용하였음