

전자회절도형의 해석을 위한 계산 프로그램 작성 A Computer Programming for Analysis of Electron Diffraction Patterns

김진규, 김윤중

한국기초과학지원연구원 나노환경연구부 전자현미경팀

1. 서론

전자와 시편과의 상호반응을 통해 내부구조를 분석하는 장비인 TEM의 주요 분석법은 고분해능 이미징기법과 회절도형 분석법을 들 수 있는데, 그 중에서도 회절도형 분석법은 구조분석에 있어 가장 기본이 되는 기법이며, 실질적으로 가장 많이 사용되고 있는 방법이다. 회절도형의 해석을 위한 도구로 제공되는 프로그램은 이미 다수의 연구자에 의해 개발되어 왔으며, 또한 수많은 연구자들이 이를 이용하고 있다. 그러나 대부분의 공개용 프로그램은 DOS 운영체제(STEREOPROJ, DIPANA 등)에서 설계되어 있어 사용상의 불편이 초래되고, 최근에 개발된 Windows 또는 Macintosh 환경의 상업용 프로그램들은(JEMS, Desktop Microscopist 등) 비유적인 면을 고려할 때 쉽게 사용할 수 없는 것이 현실이다.

본 연구에서는 물질의 구조 분석에 사용되는 회절도형의 해석을 위한 여러 가지의 계산식을 프로그램화 하여 단순한 스프레드 프로그램의 이용을 뛰어넘는 편리성과 확장성을 제공하는 공개용 프로그램을 제작하여 연구자에게 최대의 편이를 제공하고자 하였다.

2. 개발방법

DOS 운영체제의 불편함을 해소하고자 Windows 환경의 Visual Basic 언어를 사용하여 프로그램을 제작하였다. 각각의 계산에 필요한 식들은 이미 이론적으로 정립되어 있기 때문에 쉽게 이용 및 응용을 할 수 있었다(금동화 외 1996). 스프레드형식의 문서프로그램을 이용한 방식의 불편함을 해소와 지속적인 확장성을 도입한 설계로 프로그램의 이용자들이 꾸준히 상위버전의 프로그램을 자유로이 이용할 수 있도록 제작되었다.

3. 결과 및 고찰

본 공개용 프로그램은 그림 1에서와 같이 사용자의 작업 내용을 알기 쉽도록 하기 위해 항상 상단에 현재 작업 중인 결정학적 데이터가 표시되도록 설계하였으며, 다색상의 조합을 이용한 설계의 도입으로 기존 프로그램의 단조로움을 탈피한 시각적 효과도 제

공하였다. 프로그램의 여러 가지의 내용과 기능은 다음과 같다.

1) 데이터베이스 개념이 도입된 자료의 관리 기능

기존에 구현된 DOS 환경 또는 최근 Windows 환경의 프로그램에서 사용자의 데이터 관리의 불편함을 해소하기 위해 그림 1에서 보듯이 각각의 입력한 결정학적 자료들은 데이터베이스에 축적되기 때문에 사용할 때마다 매번 입력해야 하는 번거로움과 파일 처리 검색 방식의 불편함을 해소하였다.

2) 면간거리, 면간각, 정대축의 계산의 기능

그림 2에 나타난 것처럼 전자회절도형의 해석에 필수 요건인 세 요소에 대해 사용자의 편의에 따라 결과 값을 얻을 수 있도록 작성되었다.

먼저 면간거리의 경우, 사용자가 입력한 한 개의 면지수에 대해 결과 값을 얻을 수 있는 방식, 면지수의 범위를 지정하는 방식 그리고 면간거리의 범위를 지정하는 방식이 마련되어 있다. 범위 지정 방식에서는 각각의 면지수와 거리에 따라 자유롭게 재 정렬할 수 있어 사용자의 편의를 최대한 도모하였다.

면간각의 경우도 마찬가지로, 두 개의 면지수를 지정하여 결과 값을 산출하는 방식과 한 개의 면지수에 대한 임의의 각도를 가지는 여러 개의 면지수를 산출하는 방식을 제공하였다.

정대축의 경우에는 육방정계와 그 외의 결정정계를 구분하여 3- 또는 4-면지수 표시법 방식으로 결과 값을 산출하도록 지정되어 있다.

3) 시편기울기 작업에 따른 정대축 사이의 각도와 두께변화량의 계산

하나의 결정 시편에 대한 정확한 해석을 위해서는 보통 세 방향 이상의 회절자료를 얻게 되며, 이를 위해서는 반드시 시편기울기 작업이 수반되게 된다. 그러므로 시편의 기울기 각도에 따른 두께의 변화는 중요한 인자로 작용을 하게 되며, 이를 계산할 필요가 있게 된다. TEM 분석에 있어 정대축의 이동시에 분석자가 제일 먼저 인지 하게 되는 것은 정대축 방향에 앞서 모니터에 표시되는 각도에 대한 좌표이다. 그림 2에서 보듯이 이동 전의 각도와 이동 후의 각도에 대한 값을 입력하여 정대축 사이의 직접적 각도를 제공할 수 있고 또한 이동 각도에 따른 두께의 변화를 수식 계산(Zou et al., 2004)에 의해 근사적으로 제공할 수 있도록 하였다. 두께 변화량의 근사계산은 특정 방향이 아닌 임의의 tilting 작업이 수반되는 생물 시편의 경우에도 적절하게 이용할 수 있으리라 사료된다.

4) 기타 및 추가 기능 계획

그림 2에서 보듯이 help 메뉴에서는 프로그램의 정보와 다운로드가 가능한 웹 사이트를 기록하였다. 이것은 앞으로의 지속적인 기능 확장에 따른 프로그램의 정보를 사용자에게 제공하여 더 많은 기능을 자유로이 이용할 수 있도록 하는데 목적이 있다. 현재의 프로그램은 회절자료의 초보 분석자들의 교육용 프로그램으로도 유용하리라 사료되는데 앞으로 아래와 같은 기능을 추가하고자 한다.

- 사용자에게 의한 검출 버그 수정
- 꾸준한 결정학적 자료의 데이터베이스 구축
- 실격자 및 회절도형의 시뮬레이션
- 수렴성 회절도형이 시뮬레이션
- 입체투영도의 시뮬레이션
- 기타 사용자의 요구 사항

참고문헌

1. 금동화, 김궁호, 이확주, 투과전자현미경 분석학, 청문각 : 366-369, 1996.
2. X. Zou, A. Hovmoller and S. Hovmoller, Ultramicroscopy 98 : 187-193, 2004.

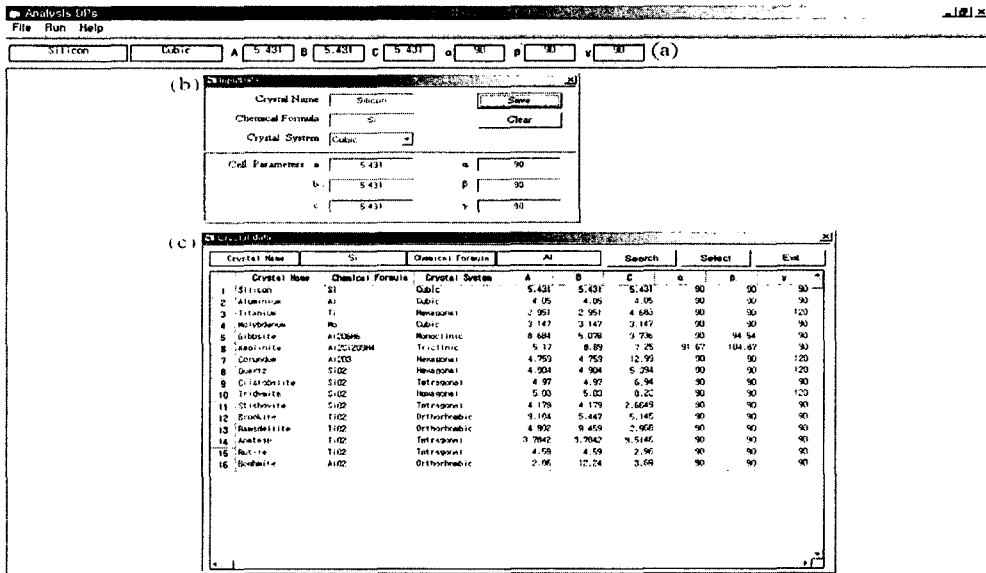


Fig. 1. (a) Main screen; (b) Input window; (c) Selection window of the program.

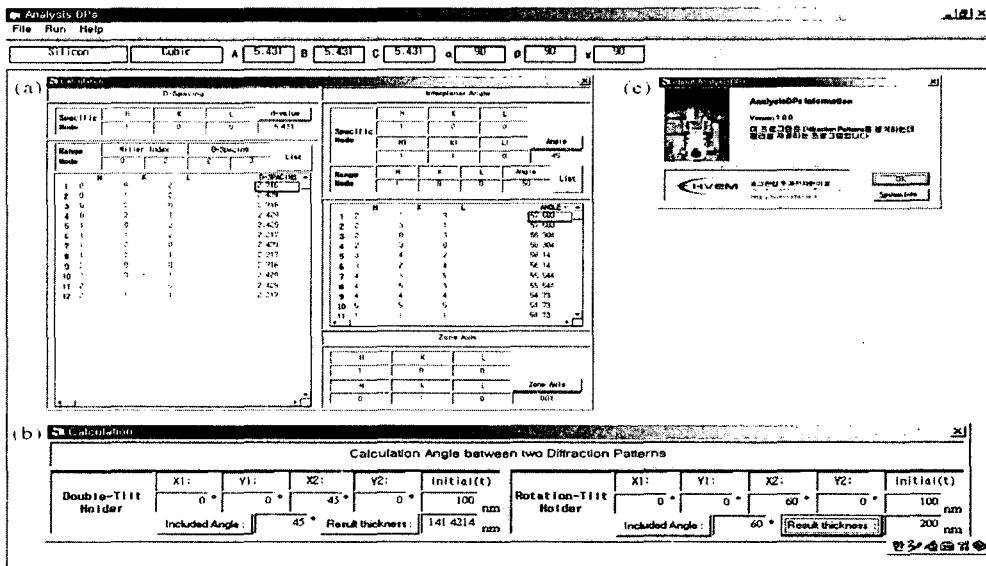


Fig. 2. (a) Calculation window of d-spacing, inter-planar angle and zone axis; (b) Calculation window of angle and thickness variation between zone axes; (c) Program information window.