

Poster 발표 초록

(P-1)

3-D Structure Determination of Inorganic Crystals using HVEM

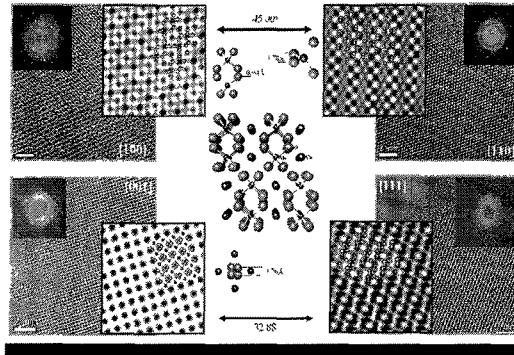
김진규, 김영민, 정종만, 김윤중

한국기초과학지원연구원 전자현미경연구부

초고전압 투과전자현미경(HVEM)을 이용한 전자결정학적 구조분석법을 적용하여 두 개의 결정질, $\text{SmZn}_{0.67}\text{Sb}_2$, CaMoO_4 에 대한 3차원적 구조 해석을 수행하였다. 본원이 보유한 초고전압 투과전자현미경은 고경사각 기울기 ($\pm 60^\circ$) 기능과 원자 분해능 (1.2 Å) 구현이 가능할 뿐만 아니라, 에너지여과장치가 부착되어 있기 때문에 정량적 구조분석에 보다 용이하다. 일반적인 고분해능 전자현미경에 비해 초고전압 투과전자현미경의 구조분석의 우월성을 평가하기 위해 분해능과 고투과력 뿐만 아니라, 에너지 여과 기능의 효과를 고려해보았다. 초고전압 투과전자현미경을 통해 획득한 고분해능 이미지는 결정학적 이미지처리기법(CIP)를 이용하여 분석하였다. 중원자로 구성된 비교적 간단한 구조를 가지는 $\text{Zn}_{0.67}\text{Sb}_2$ 의 3차원적인 원자 배열 구조는 직접적인 해석이 가능하였다. 반면, 상대적으로 중원자와 경원자가 혼합되어 복잡한 구조를 형성하고 있는 CaMoO_4 의 3차원적인 원자 배열구조는 직접적으로 해석이 불가능하였고, X-ray 분석법에 의한 결정학적 자료를 기반으로 한 구조모델링과의 비교를 통하여 간접적으로 해석을 수행하였다. 이와 같이 중원자와 경원자가 혼합되어 있는 경우, 산소원자와 같은 경원자는 약한 산란강도에 의해 고분해능 이미지상에서도 콘트라스트가 약하기 때문에 이미지처리기법이 반드시 요구되는 것으로 사료된다. 3차원적인 원자 배열 구조가 2차원적으로 투영되는 고분해능 이미지에서는 원자간의 거리가 더욱 짧아지기 때문에 두 개 이상의 원자가 겹쳐 보이는 것을 알 수 있다. 그러므로 2차원적인 고분해능 이미지로부터 3차원적인 정보를 얻기 위해서는 보다 많은 정대축방향의 정보가 필요하며, 0.5 Å 이상의 분해능이 요구될 것으로 사료된다.

3D Structure Determination : Complex Structure

- Equipment: JEOL 100SX Micrograph
- Specimen: CaMoO_4 single crystal
- Experimental method: 3D reconstruction using Direct Fourier Transform



3D Structure Determination : Simple Structure

- Equipment: JEOL 100SX Micrograph
- Specimen: SrTiO_3 single crystal
- Experimental method: 3D reconstruction using Direct Fourier Transform

