

분말 X선회절법에 의한 $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ 화합물의 결정구조 해석 Analysis of Crystal Structure of $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ Compound by X-Ray Diffractometer

순천대학교 조유정, 박준현, 김형순
포항제철(주)기술연구소 허완욱, 윤성섭

1. 서론

결정구조의 해석은 unit cell의 공간군, 격자상수, 첨가 원소의 site 점유율 등을 파악할 수 있어, 그 물질의 반응제어에 도움을 줄 수 있다. Fe_2O_3 , CaO, SiO_2 , Al_2O_3 을 합성하여, 철광석 제조에 있어 소결광의 구성요소로 분석이 요구되는 칼슘페라이트($\text{CaO} \cdot 2\text{Fe}_2\text{O}_3$)를 제조하고, X-선회절법으로 결정구조의 변화를 조사하였다. $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-CaO}$ 계에서 Al_2O_3 와 SiO_2 첨가량(0~10wt%)에 따라 변하는 결정구조 및 격자상수를 측정하였다.

2. 실험방법

칼슘페라이트($\text{CaO} \cdot 2\text{Fe}_2\text{O}_3$)는 CaO와 Fe_2O_3 각각의 산화물을 이용하여 고상반응법에 의해 합성하였다. Fe_2O_3 , CaO, SiO_2 , Al_2O_3 을 조성에 따라 평량한 후 에탄올을 분산매로, ZrO_2 ball을 사용하여 12시간 동안 혼합하였다. 120°C 건조기에서 완전히 건조한 후 성형하여, 1250°C 에서 24시간 동안 소결하였다. 소결된 시편을 마노유발을 사용하여 분쇄한 후 500메쉬로 체거름 하였다. 체거름한 분말을 XRD 분석을 통하여 2θ 값을 얻은 후, 이 2θ 값을 Crysfire 프로그램에 적용시켜 각 조성에 따른 칼슘페라이트의 격자상수를 측정하였다.

3. 실험결과

Fe_2O_3 , CaO계에 SiO_2 와 Al_2O_3 가 첨가됨에 따라 결정구조는 monoclinic 구조에서 triclinic 구조로 변했다. 그에 따른 격자상수는 monoclinic에서 $a=18.1366\text{\AA}$, $b=10.1771\text{\AA}$, $c=11.8150\text{\AA}$, $\alpha=90^\circ$, $\beta=117.120^\circ$, $\gamma=90^\circ$ 가 triclinic에서는 $a=10.08\text{\AA}$, $b=10.66\text{\AA}$, $c=9.111\text{\AA}$, $\alpha=95.65^\circ$, $\beta=114.48^\circ$, $\gamma=64.25^\circ$ 로 변하였다. unit cell의 체적은 $v=1941.019$ 에서 $v=798.54$ 로 감소하였다.

4. 참고문헌

- 1) Katsuhiko Inoue and Tsutomu Ikeda : Iron and Steel, (1982) 2190
- 2) E. Millon, B. Malaman, A. Bonazebi, J. F. Brice, R. Gerardin and O. Evrard : Mat. Res. Bull. Vol. 21 (1986) 985