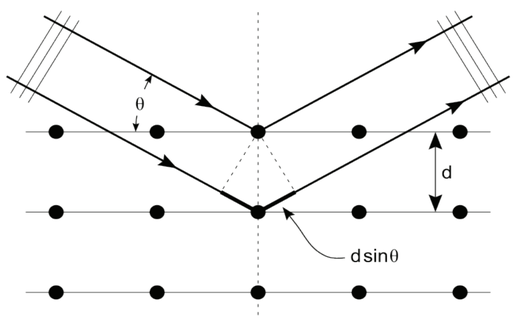
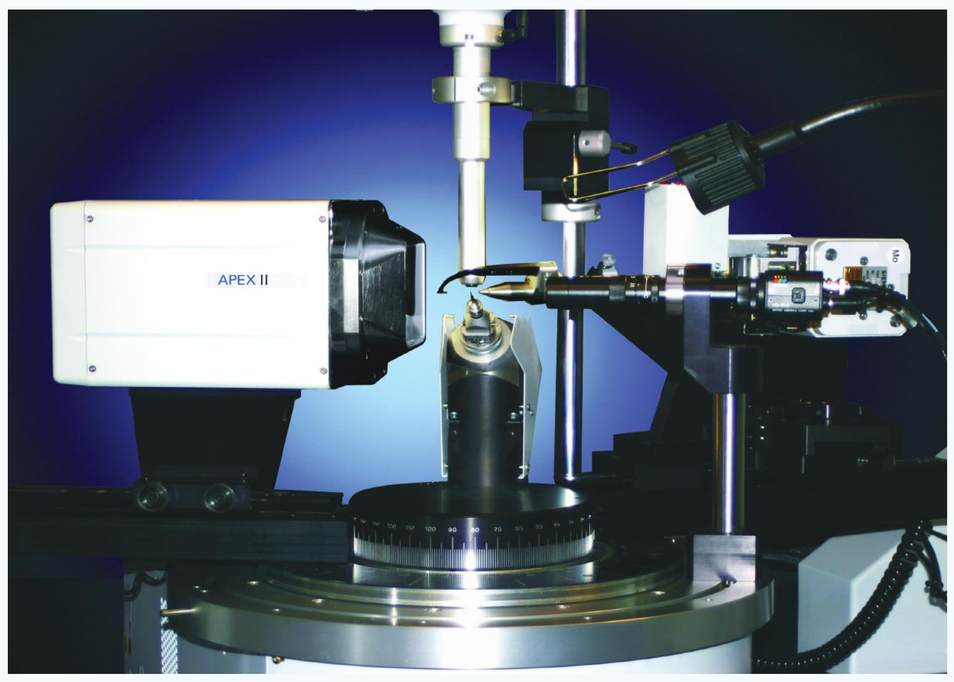
Single Crystal X-ray Diffractometer
단결정 X-선 회절 분석기 (X-ray Crystallograph)

원리 및 특징

- **결정(Crystal) :** 물질의 단위가 되는 원자, 분자, 이온쌍 등이 3차원적으로 반복 배열한 것
- 결정에 X-선을 조사하면 결정 중의 각 원자에 의한 산란 X-선이 간섭하여 특정한 방향으로 강한 회절 X-선을 생성시키며, 이러한 간섭 무늬 효과를 **회절패턴(Diffraction pattern)**이라 함



Bragg's law
$n\lambda = 2d\sin\Theta$



- 1913년 W. L. Bragg는 결정에 의해 입사 X-선의 회절이 생기는 조건식인 브래그법칙(Bragg's law)을 제시 : 다수의 격자면에서 산란 X-선의 간섭은 각 면간의 경로차가 파장의 정수배일 때 강한 회절 X-선이 생기는 것을 밝힘. **즉, 브래그법칙은 X-선 파장과 원자 면간거리 사이의 관계를 설명**
- 단결정 X-선 회절법은 광물이나 저분자 화합물로부터 단백질이나 핵산 같은 생체고분자에 이르기까지 원자적인 척도로 입체구조를 규명하는 가장 유력한 방법임

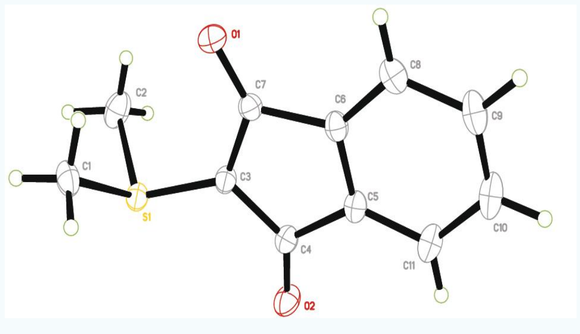
용도 및 활용 분야

- 단결정 물질에 X-선을 조사하여 발생하는 X-선 회절패턴을 분석(Bravais lattice, Lattice constant, Space group)하여 **유기, 무기 화합물의 입체적인 분자구조 및 결정구조 분석**
- **물질을 구성하는 원자의 종류 및 위치, 온도인자, 원자간 거리, 결합각, 비틀림각, 원자간의 결합종류, 분자간의 결합력, Configuration 등의 정보 제공**
- 유기 및 유기금속 화합물의 3차원 구조분석
- 금속 착물 및 클러스터 화합물의 3차원 구조분석
- Unit cell 측정
- Crystal screening

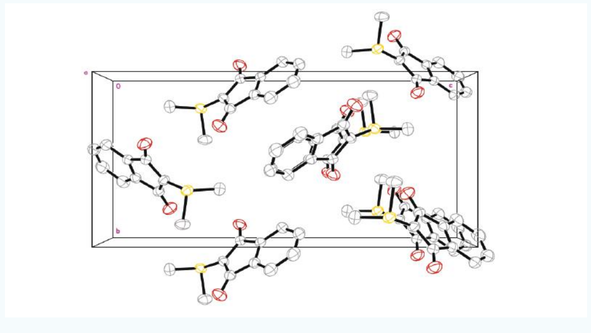
보유 장비 및 주요 규격

Model : Bruker SMART APEX II
Max power : 50 kV, 40 mA
X-ray source : MoKα radiation (λ =0.71073 Å)
Monochromator : Graphite crystal
Detector : Charge-Coupled Device (CCD)
Resolution : 0.75Å
Low temperature device : 90 ~ 300 K

활용 예시



Ylid 화합물의 분자 구조



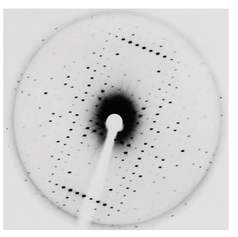
Ylid 화합물의 결정 구조

결정구조 해석의 흐름도

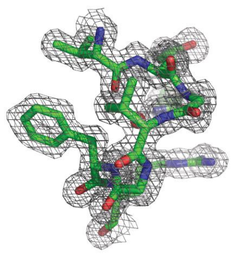
결정성장
- 목적 물질
- 결정 조제
- 현미경관찰, 밀도측정

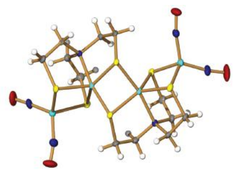


회절실험
- 결정의 장착
- 반사피크 search 및 격자상수 결정
- 반사강도 측정
- 구조인자 산출



구조해석
- 해석법의 선택과 적용
- 전자밀도 분포
- 원자 배치
- 구조인자 계산
- 수정계산 ← NO ← 올바른 구조인가? → YES
- 구조의 출력





KRICT 한국화학연구원 화학분석센터
Korea Research Institute of Chemical Technology Center for Chemical Analysis