

## 아스피린 단결정의 성장 및

## Brillouin 산란법에 의한 탄성특성 연구

Growth of aspirin crystals and their elastic properties studied  
by Brillouin scattering

김태현, 고재현, 이광세\*, Y. Ike\*\*, S. Kojima\*\*

한림대학교 전자물리학과, \*인제대학교 나노공학부, \*\*University of Tsukuba (Japan)

[hwangko@hallym.ac.kr](mailto:hwangko@hallym.ac.kr) (고재현)

약제 공학적 디자인을 위해서는 약제물질들의 유리상 및 결정상의 탄성 특성이 반드시 필요한 물성임에도 불구하고 자세히 보고된 사례가 적다. 본 연구에서는 대표적인 약제물질인 아스피린(Aspirin[acetylsalicylic acid])을 단결정으로 성장시키고 Brillouin 산란법을 이용하여 결정상에서 몇 개의 탄성계수의 온도의존성을 측정하였다.

단결정의 성장은 99% 순도의 아스피린 powder를 이용하여 유기용매(acetone, ethanol)에 녹인 후 서서히 용액을 증발시키는 재결정방법<sup>(1)</sup>을 이용하였고 [그림 1]과 같은 morphology를 가지는 아스피린 단결정을 성장시켰다. 이렇게 얻은 아스피린 단결정의 Brillouin 스펙트럼을 Multi-pass tandem Fabry-Perot interferometer를 이용하여 측정하였고 103K~403K의 온도영역에서 하나의 Longitudinal Acoustic(LA) phonon과 두 개의 Transverse Acoustic(TA1, TA2) phonons에 의한 각 모드별 Brillouin frequency shift를 측정하였다. 이때 결정에 laser입사방향과 반대방향으로 역산란된 Brillouin 산란광을 측정하였으며, 입사하는 laser 편광 방향이 [010]이 조건에서 phonon의 진행방향이 [100]인 Acoustic phonon의 Brillouin shift를 측정하였다. 측정된 Brillouin shift[그림 2-(a)]로 결정내의 음속도(sound velocity)를 계산할 수 있었으며, 이를 바탕으로 탄성계수의 온도의존성을 [그림 3]과 같이 얻을 수 있었다. [표 1]은 상온(293K)에서 측정된 Acoustic waves의 Brillouin frequency shift와 음속도, 그리고 탄성계수를 표현한 것이다.

이렇게 얻어진 실험 Data를 두 가지 이론적 model을 사용하여 해석하였다. 하나는 Debye model에 기반한 [식 1-(1)]의 Lakkad function<sup>(3)</sup>이고 두 번째는 Einstein model에 기반한 [식 1-(b)]의 Varshni function<sup>(3)</sup>으로써, 이 두 식을 적용하여 LA모드에 대한 fitting parameter들을 얻었으며, [그림 4]와 [표 2]에 fitting 결과가 정리되어 있다.

이 실험결과를 통해 두 가지 model에서 구한 특성 온도들의 이론 비가 이론적 예측치인  $\theta_E/\theta_D = 0.75$ <sup>(3)</sup>에 근접한 결과를 얻어, LA모드의 경우 두 가지 model로 설명이 가능하지만 TA1, TA2의 경우 설명을 할 수 없다는 사실을 얻었다. 문헌상의 실험조건<sup>(2)</sup>으로는 온도에 의존하는 탄성계수  $C_{11}$ ,  $C_{55}$ 를 얻었지만 본 실험의 조건으로는  $C_{11}$ ,  $C_{55}$ 뿐만 아니라  $C_{66}$ 까지 동시에 얻을 수 있었다.

## 참고문헌

1. C. Aubrey-Medendorp, S. Parkin, and T. Li, J. Pharm, "The Confusion of Indexing Aspirin

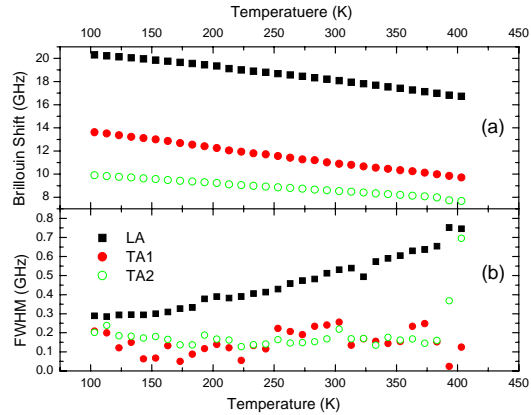
Crystals", J. Pharm. Sci. 97,1361 (2008)

2. J.-H. Ko, K.-S. Lee, Y. Ike, S. Kojima, "Elastic properties of aspirin in its crystalline and glassy phases studied by micro-Brillouin scattering", Chem. Phys. Lett. 465, 36-39 (2008)

3. T. Sonehara, E. Tatsu, and S. Saikan, "Temperature dependence of the Brillouin frequency shift in crystals", J. Appl. Phys. 101, 103507 (2007)



[그림 1] 아스피린 단결정



[그림 2] Brillouin shift와 FWHM(Full width at half maximum)

	$\nu_B$ (GHz)	Sound Velocity (m/s)	Elastic Constant (GPa)
LA	17.08	2909	$C_{11}=11.77$
TA1	10.33	1758	$C_{66}=4.30$
TA2	8.17	1385	$C_{55}=2.77$

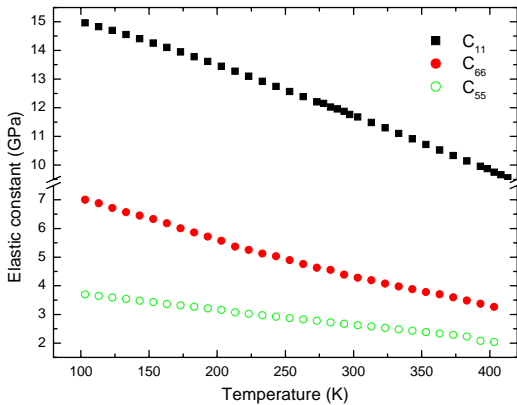
[표 1] 실온(297K)에서의 실험으로 얻은 Data

$$\nu_B(T) = \nu_0^D \sqrt{1 - b\theta_D F(T/\theta_D)}$$

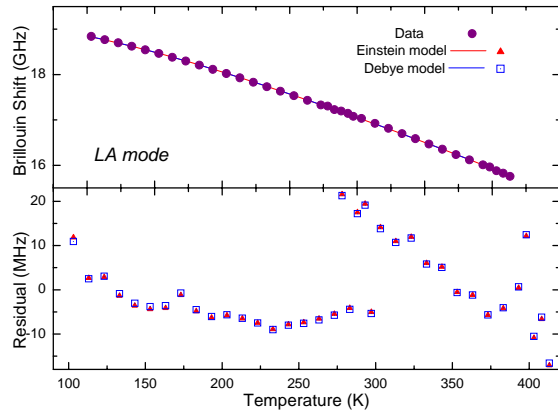
$$F(T/\theta_D) = 3 \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^4 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3}{\exp(x) - 1} dx \quad (a)$$

$$\nu_B(T) = \nu_0^E \sqrt{1 - \frac{a'}{\exp(\theta_E/T) - 1}} \quad (b)$$

[수식 1] Lakkad function<sup>(a)</sup>과 Varshni function<sup>(b)</sup>



[그림 3] 탄성계수  $C_{11}$ ,  $C_{55}$ ,  $C_{66}$ 의 온도 의존성



[그림 4] LA 모드의 Brillouin frequency shift와 fitting 결과

Debye model			Einstein model			$\theta_E/\theta_D$
$\nu_0^D$	b	$\theta_D(K)$	$\nu_0^E$	a'	$\theta_E(K)$	
19.08	$1.08 \times 10^{-3}$	357.2	19.05	0.291	271.2	0.76

[표 2] LA 모드에 대해서 두 가지 모델을 적용하여 얻은 fitting parameters