

Thermodynamic Structure Model for Solid Surface and its Role in Melting

한주환

영남대학교 재료금속공학부

고체가 유한(finite)한 크기를 갖게 되면 필연적으로 그 고체를 둘러싸고 있는 다른 종류의 매질(기체 또는 액체 등)과 접하게 되는데, 이때 고체의 표면(solid surface)을 통해 그 접촉이 이루어진다 그런데, 이 같은 계면의 존재는 단순히 그 계면이 위치하는 곳의 성질만을 국부적으로 변화시키는 것에서 그 영향이 끝나는 것이 아니라, 그 계면을 통해 이루어지는 고체와 주위 매질간의 각종 상호작용(interactions)에 간여함으로써 고체재료의 성질에 지대한 영향을 끼치는 것으로 알려져 있다 따라서 고체재료에 존재하는 계면의 물리·화학적 성질의 규명은 원하는 특성을 가진 재료의 개발을 위해 반드시 필요하며, 이러한 분야의 연구는 재료과학 및 공학의 근간을 이루고 있다고까지 말할 수 있다 계면의 섭리(nature)를 이해하기 위하여 많은 연구가 진행되어 왔으며 그 결과 고체 표면의 구조와 특성 등의 해석에 있어 지금까지 많은 진보가 이루어졌다

그러나 고체표면의 거동 및 역할 등에 있어 아직도 많은 부분이 베일에 쌓여 있는 등 해결되어야 할 문제점들도 여전히 존재하고 있다. 예를 들면, 1) 고체결정의 크기가 감소함에 따라 용융온도는 왜 감소하는가? 2) 용융은 왜 항상 표면에서부터 시작하는가? 3) 과냉각(supercooling)처럼 과가열(superheating)은 존재하는가? 그리고 4) 고체표면의 원자배열 구조 및 특성은 온도에 따라 어떻게 변화하는가? 등 알려져 있지 않은 것들이 매우 많다

본 연구에서는 온도변화에 따른 결정질 고체재료의 표면구조 및 특성 변화를 원자적 수준에서 이해하고, 더 나아가 이를 통해 재료 내 물질이동을 지배하는 기본원리를 파악하고자 통계열역학적 접근법을 적용하였다 그 결과 결정질 고체재료의 표면을 구성하고 있는 원자들은 결정내부 원자들 보다 높은 포텐셜 에너지 준위를 가지고 있어 낮은 온도에서 먼저 용융이 일어남을 알 수 있었으며, 특히 입자의 크기가 감소함에 따른 용융온도의 감소를 설명할 수 있는 논리적 근거를 확보할 수 있었다 아울러 온도의 증가에 따라 고체 표면의 원자배열 구조는 surface roughening과 surface melting의 단계를 거치면서 구조변화를 일으키고 최종적으로는 용융온도에 이르러 표면부위 격자부터 붕괴가 일어나면서 결정의 용융이 진행됨을 알 수 있었다. 또한 이러한 분석을 통해 왜 결정의 용융과정에서는 응고과정에서와 달리 과가열이 관찰되기 어려운지를 설명할 수 있었다