

분자동력학법에 의한 $(1-x)\text{CaO} \cdot x\text{Al}_2\text{O}_3$ 유리의 구조

Structures of $(1-x)\text{CaO} \cdot x\text{Al}_2\text{O}_3$ Glasses by Molecular Dynamics Method

이성주, 강은태

경상대학교 세라믹공학과

분자동력학법을 사용하여 $(1-x)\text{CaO} \cdot x\text{Al}_2\text{O}_3$ 유리의 구조를 계산하였다. 38 mol%에서 계산된 동경분포함수(Radial Distribution Function)를 Hannon 등의 중성자 회절에 의해 측정된 값과 비교하였다. 또한 계산에 의해 구해진 Elastic constants, Bulk modulus 등의 몇가지 물성을 보고된 실험값들과 비교하여 사용된 potential model과 parameter들의 적법성을 확인하였다. Al_2O_3 의 함량이 38 mol%일때 실제 유리를 제조하여 XPS(X-ray Photoelectron Spectroscopy)로 비가교산소(non-bridging oxygens)와 가교산소(bridging oxygens)의 비를 측정하고, MD로 계산된 값과 비교하였다. 이들 비교에 의해 계산된 구조는 실험으로 얻어진 결과를 잘 재현함을 알 수 있었다. 이 유리계에서의 구조분석은 $\text{CaO}:\text{Al}_2\text{O}_3 > 1$ 인 조성에서는 단지 4배위 알루미늄만 존재하고, $\text{CaO}:\text{Al}_2\text{O}_3 < 1$ 인 조성에서는 4배위 알루미늄외에 5배위, 6배위도 존재한다고 보고된 바 있다. 계산된 값 또한 Al_2O_3 의 함량이 증가함에 따라 알루미늄의 배위수가 증가함을 보였다. 또한, Al_2O_3 의 함량에 따른 intermediate range order의 구조 변화도 Ring Size Distribution (RSD)의 분석을 통하여 행하였다.

방전플라즈마 소결법으로 제조된 Al_2O_3 -SiC Nanocomposite의 미세구조

Microstructural Analysis of Al_2O_3 -SiC Nanocomposite Sintered by Spark Plasma Sintering Method

채재홍, 심광보*

요업기술원 나노세라믹센터

*한양대학교 세라믹공학과

방전플라즈마 소결법으로 Al_2O_3 -SiC nanocomposite을 제조하기 위하여 Sub micron의 α - Al_2O_3 를 사용하고, nano SiC 분말의 첨가량을 변화시키고, 소결온도를 변화시켜 복합체를 제조하였다. 이때 상대밀도 90% 이상의 소결체를 제조하여 현미경관찰을 통하여 소결 초기부터 완료까지의 미세구조를 관찰하였다.

저온에서 소결한 시편에서는 Al_2O_3 grain boundary에 SiC 입자들이 분포되어 있었지만 소결온도가 높아지면 Al_2O_3 Grain이 성장하여 내부에 SiC 입자가 분포되어 있는 입내분포를 볼 수 있었다. 입내에 SiC 입자가 분포되어 있는 시편에서 물성이 크게 증가됨을 확인할 수 있었다. 또한 SiC 함량이 증가되면 입내 분포 역시 증가하여 물성의 향상을 확인할 수 있었다.