

Liquid as an Assemblage of Temporary Atomic Clusters Bounded Tightly

한주환

영남대학교 재료금속공학부

용융(melting)은 소위 용융온도(melting point)라 불리는 특정온도(T_m)에서 결정성 고체재료가 갑자기 상 전이를 일으켜 고체로부터 액체로 바뀌는 현상으로, 일상적으로 자주 경험하는 매우 일반적인 현상임에도 불구하고 여전히 많은 부분이 베일에 가려져 있는 실정이다. 예를 들면, 용융과정 중에 원자적인 수준에서 원자배열에 어떠한 일이 일어나고 있는지, 액체상태에서 원자들은 어떻게 배열하고 있는지, 그리고 왜 특정한 온도에서만 전이가 일어나는지와 이러한 원자배열 변화의 구동력(driving force)은 무엇인지 등 알려져 있지 않은 것들이 매우 많다

용융현상에 대해 지난 70여년 동안 무수히 많은 연구와 이론들이 제안되었는 바, 이를 요약하면 첫째, 온도의 증가에 따른 원자의 열진동이 특정 문턱 값(threshold value)을 초과할 때 결정의 불안정성이 나타나 용융이 이루어진다는 Lindemann criterion, 둘째, 온도의 증가에 따라 격자 내 포논(phonon) 진동수의 변화가 나타나고 특정온도 이상에서는 허수 값을 갖게 되면서 격자가 붕괴한다는 Born instability, 그리고 마지막으로 용융온도 부근에서 전위 또는 공공(vacancy) 같은 내인성(intrinsic) 결함들이 자발적으로 생성되면서 결정의 장-주기성(long-range order)을 깨뜨리기 때문이라는 Cahn 등의 주장이 있다

그런데, 용융은 서로 독립적인 두 상(phase)인 고체와 액체 간의 전이현상 이므로, 이를 완전히 이해하려면 용융과정을 통해서 이 상들이 서로 어떻게 연결되어 있는지, 즉 용융과정 중 원자수준에서 어떠한 일이 일어나는지를 규명하여야 한다 그러나 Born과 Lindemann 이론은 단지 고체격자만을 해석의 대상으로 삼았기 때문에 액체에 대한 어떠한 해석적 정보(액체의 상태, 액체 내 원자의 배열 등)도 제공해 주지 못하고 있으며, 더욱이 왜 고체가 액체로 되어야 하는지에 대해 아무런 설명도 주지 못하고 있다 또한 Cahn 등의 이론에서 상정하고 있는 내인성 결함의 자발적 생성에 의한 상 전이 또한 기본적으로 격자구조를 전제하고 있다는 점에서 앞의 두 이론과 비슷한 문제점을 지니고 있다

본 연구에서는 결정질 재료의 용융현상을 원자적 수준에서 이해(atomistic mechanism)하고 더 나아가 액체 상태 및 성질에 대한 원자모델을 제시하고자 통계열역학적 접근법을 적용하였다 그 결과 액체상태는 강하게 결합된 주기성을 지닌 소수의 원자들이 임시로 모여 이루어진 클러스터들이 서로 무질서하게 결합 배열된 상태이며, 용융온도 이상에서는 원자들이 이러한 임시 클러스터들의 집합체 형태로 존재하는 것이 고체 격자상태로 존재하는 것보다 더 낮은 자유에너지를 갖게 됨을 알 수 있었다