P-182

## 스피넬 페라이트의 비이완 표면에너지의 계산 I

## Energy Calculation of the Unrelaxed Surfaces of Some Spinel Ferrites I

**신형섭**
가야대학교 보석신소재공학부

고체의 표면에너지는 표면에 축적된 에너지로 재료반응의 구동력이다 따라서 표면에너지를 측정하거나 계산한다면 다양한 재료 현상을 이해하고 예측할 수 있다 그러나 표면에너지의 측정은 금속과 같이 단순한 구조를 갖는 일부 재료에서만 가능하며, 구조가 복잡한 산화물은 표면에너지를 구하기가 어렵다

계산에 의한 방법에서도 역격자와 같은 까다로운 개념이 이용되어야 하고, 강력한 연산 기능의 컴퓨터도 필요하다 본 연구에서는 산화물의 비이완 표면에너지를 다음 식을 이용하여 한정된 크기의 실격자에서 간단하게 계산하는 방법을 구명하였다

$$\text{Surface energy} = [(\text{Lattice energy/molecule})_{\text{finite crystal}} - (\text{Lattice energy/molecule})_{\text{infinite crystal}}] \times (\text{molecules/unit cell}) \times (\text{unit cells/surface area})$$

표면에너지는 표면이 형성될 때 증가하는 에너지이기 때문에, 무한격자와 표면을 하나 갖는 반무한격자의 격자에너지 편차로부터 얻을 수 있다 결정구조가 정스피넬인 $ZnFe_2O_4$와 역스피넬인 $Fe_3O_4$의 실격자를 model로 하여 (100), (110), (111) 등의 비이완 표면에너지를 계산하였으며, 각 표면의 형태에 따른 안정성도 비교하였다

P-183

## Dental Frit 제조와 Opacifier 및 Pigment 첨가에 따른 Color 영향

## Manufacture of Dental Frit Usable Dental Porcelain and Effect of Color According to Additive of Opacifier and Pigment

**박선민, 고대진*, 윤주영, 오유근**
요업(세라믹)기술원 도자기연구센터
*(주)알파덴트 기술연구소

치과 재료란 질병, 사고 또는 선천적 결손에 의해 상실된 치아 경조직을 대체함으로써 치아의 형태와 기능을 회복시키는데 사용되는 재료들을 말한다 이러한 재료들은 구강 내에서 사용되므로 생체친화적이어야 하며, 형태 부여가 용이하고 경제적으로 제작될 수 있어야 할 뿐만 아니라 장기간 구강내에서 사용하기에 충분한 강도와 자연치와 유사한 심미성을 요구한다 사용되는 재료로는 금속, 고분자, 세라믹들이 모두 치과 재료로 응용되고 있으나, 현재 우리나라는 선진국에서 개발된 도재를 거의 수입에 의존하고 있다

본 연구에서는 치과 재료 중 세라믹스 분야의 dental porcelain에 사용할 수 있는 leucite 결정을 형성시킨 dental frit제조와 여기에 색상의 다양화와 색상재현에 대한 효율을 향상시키고자 opacifier와 pigment를 첨가하여 심미성 있는 도재의 색상 변화를 연구 분석하였다