

쌍정의 성장 속도에 관한 몬테카를로 시뮬레이션

이재욱, 김도연
서울대학교 재료공학부

쌍정판을 가진 쌍정은 쌍정이 없는 결정에 비해 성장이 빠른 것으로 알려져 있다. 두개의 평행한 쌍정면으로 이루어진 쌍정판은 결정 외벽에 요각을 제공하므로 이차원 핵생성을 촉진하여 성장을 빠르게 한다. 이러한 성장 기구를 TPRE (Twin-Plane-Reentrant-Edge) 기구라 한다. 육각 판상의 germanium, AgBr 결정과 BaTiO₃ 액상 소결체에서 발견되는 조대한 비정상 입자 등이 이 기구에 의해 성장하는 것으로 알려져 있다. 이 기구는 1960년대에 이미 알려졌지만 이중 핵생성의 일종으로 여겨졌을 뿐 구체적인 성장 속도식은 밝혀지지 않았다. 본 연구에서는 기존의 핵생성 이론을 바탕으로 성장 속도식을 유도하고 이를 몬테카를로 시뮬레이션 결과와 비교하였다.

B₂O₃의 첨가가 TiO₂의 입자성장에 미치는 영향Effect of B₂O₃ addition on the Grain Growth of TiO₂

김홍일, 이종훈,* 김도연
서울대학교 재료공학부
*고려대학교 재료공학과

소결과정에서 일어나는 정상 입자성장과 비정상 입자성장은 계면(고액 계면 혹은 입계) 구조와 밀접한 연관을 가지는 것으로 알려져 있다. 원자적으로 거친 계면을 가질 경우에는 정상 입자성장을 하고, 원자적으로 평평한 계면을 가질 경우에는 비정상 입자성장을 한다. 입자의 계면 구조는 온도와 첨가물의 첨가에 의해 바뀔 수 있는데, 본 연구에서는 B₂O₃의 첨가가 TiO₂의 입자성장에 미치는 영향을 고찰하였다. 순수한 TiO₂를 1350°C에서 2시간 소결할 경우에는 정상 입자성장이 일어났지만, 2 mol% B₂O₃를 첨가하면 비정상 입자성장이 일어났다. 순수한 TiO₂의 입계는 매끈한 곡선모양을 보였으나 B₂O₃를 첨가한 경우에는 faceting한 입계가 관찰되었다. 따라서 B₂O₃ 첨가에 의해 TiO₂의 입계는 roughening-faceting 전이를 일으키는 것을 확인할 수 있었으며, 이는 TiO₂의 비정상 입자성장을 일으키는 직접적인 요인으로 해석되었다.