

Model for the evolution of surface layer energy in isothermal crystallization, employing Fermi-Dirac statistics

이헌상*

동아대학교

(heonlee@dau.ac.kr*)

결정화의 초기 기핵 형성에 대한 이해는 나노입자의 제조, 기능성 플라스틱, 화학공학의 분리 공정등 광범위한 분야에서 중요하다. 최근에 제안된 Lee nucleation theory (J. Chem. Phys. 139, 104909 (2013))에서는 결함이 없는 결정의 내부 (core) 부분과 결함을 포함하는 표면층 (surface layer)을 나누어 고려함으로써 등온과정에서 새로운 미분방정식을 제시하였으며, 결정화의 초기 기핵 형성 조건에서 구한 방정식의 해로부터 기핵의 크기는 온도의 1/3제곱에 반 비례한다는 점을 증명하였다. 기존의 classical nucleation theory으로 구한 Gibbs-Thomson 식에서 기핵의 크기는 온도의 역수에 선형적으로 비례하지만, 완벽한 결정이 형성되는 경우를 제외하면 과냉각도가 큰 영역에서 실험결과와 큰 차이가 발생하여 이에 대한 이론적인 수정작업이 과거 수십년 동안 필요하였다. Lee nucleation theory에서는 표면층에너지의 형성 과정에 따라서 이론적인 수정작업을 하지않고도 모든 결정의 기핵 형성에 대해 설명할 수 있다. 이는, Gibbs dividing surface 방법과는 다르게 크기에 의존하지 않는 내부와 표면층을 따로 정의하였기 때문에 가능하였다. 이번 발표에서는 Lee nucleation theory에서 정의한 표면층에너지가 결정기핵형성 이후에 결정의 크기가 커짐에 따라서 어떻게 진화되는 가에 대한 모델을 Fermi-Dirac 통계를 활용하여 제시할 예정이다.