

## 해석정밀형삽입원자방법에 의한 체심립방금속들의 쌍빈살창점결합의 특성연구

진 학 선

여러가지 점결합에 대한 컴퓨터모의에서는 원자사이의 힘을 반경험적으로 모형화[2-4]하고있는데 특히 금속에서의 점결합에 대한 연구에서는 다체모형포텐셜인 삽입원자포텐셜[3]을 리용하고있다. 살창사이원자의 평형농도는 빈살창점의 평형농도에 비하여 훨씬 작고 빈살창점결합은 살창사이원자결합에 비하여 더 쉽게 이행하므로 빈살창점결합이행은 금속에서 점결합의 주요확산물림새로 된다.

여러가지 삽입원자방법들중에서 해석수정형삽입원자방법은 적용범위가 넓고 계산결과와 정확성이 높은것으로 하여 금속을 비롯한 각종 재료의 특성모의에 적극 리용되고있다.[4]

우리는 해석수정형삽입원자포텐셜을 보다 개선한 해석정밀형삽입원자포텐셜[1]에 기초하여 체심립방구조의 금속들에서 쌍빈살창점결합의 형성 및 결합에너르기, 이행 및 확산러기에너르기계산식들을 유도하고 특성량들을 계산하였다.

해석정밀형삽입원자모형은 해석수정형삽입원자모형의 2체포텐셜형식을 달리하고 입력파라미터에 구조에너르기차를 포함시켜 모형파라미터들을 새롭게 결정하였다.

모형의 2체포텐셜형식은 다음과 같다.[1]

$$\phi(r) = \begin{cases} \sum_{j=-1}^3 k_j \left( \frac{r}{r_1} \right)^j & r \leq r_2 \\ \sum_{j=0}^7 l_j \left( \frac{r}{r_2} - 1 \right)^j & r_2 < r \leq r_c \\ 0 & r > r_c \end{cases} \quad (1)$$

여기서  $r_i(i=1, 2, \dots)$ 는 결정에서 원자들의  $i$ 째 린접거리,  $r_c$ 는 2체포텐셜함수의 마감거리(전자밀도함수의 마감거리는  $r_{cf}$ 로 표시)이다.

$l_j(j=0, 7)$ 와  $k_j(j=-1, 3)$ 사이의 관계식은 강화된 연속조건 즉  $r_2$ 와  $r_c$ 에서 포텐셜함수와 그것의 1계, 2계, 3계도함수들의 연속조건들로부터 구해진다.

$r_c$ 와  $r_{cf}$ 는 다음과 같다.[1]

$$r_c = r_2 + 0.6 \cdot (r_3 - r_2) \quad (2)$$

$$r_{cf} = r_5 + 0.75 \cdot (r_6 - r_5) \quad (3)$$

제기된 모형에서 리용된 입력파라미터들과 계산된 모형파라미터들은 표 1, 2와 같다.[1]

표 1. 체심립방금속의 입력파라미터

금속	$a/\text{nm}$	$E_c/\text{eV}$	$E_{1f}/\text{eV}$	$C_{11}/\text{GPa}$	$C_{12}/\text{GPa}$	$C_{44}/\text{GPa}$	$E_{1b}/\text{eV}$
Cr	0.288 46	4.10	1.80	346.0	66.0	100.0	0.090
Fe	0.286 64	4.28	1.79	230.0	135.0	117.0	0.082
Mo	0.314 68	6.82	3.10	459.0	168.0	111.0	0.230
Nb	0.330 24	7.47	2.75	252.7	133.1	31.9	0.320
Ta	0.330 26	8.10	2.95	262.0	156.0	82.6	0.260
V	0.303 11	5.30	2.10	232.4	119.4	46.0	0.210
W	0.315 60	8.90	3.95	517.0	203.0	157.0	0.330

표 2. 체심립방금속의 모형파라미터

금속	$k_0/\text{eV}$	$k_1/\text{eV}$	$k_2/\text{eV}$	$k_3/\text{eV}$	$k^{-1}$	$\alpha/\text{eV}$	$n$	$F_0/\text{eV}$
Cr	-202.616 4	281.058 2	-178.014 9	43.311 7	56	-0.297 3	0.87	2.30
Fe	-183.137 8	229.417 3	-129.480 3	27.930 6	55	-0.056 2	0.56	2.49
Mo	-494.104 2	685.091 2	-427.906 9	101.470 4	135	-0.203 2	0.90	3.72
Nb	-340.951 3	480.409 5	-302.665 4	71.829 2	91	-0.001 3	0.77	4.82
Ta	-459.003 8	619.317 4	-374.160 1	85.412 8	128	-0.013 8	0.65	5.15
V	-220.072 1	304.520 5	-189.246 0	44.509 2	60	-0.014 2	0.72	3.30
W	-1 181.862 5	1 631.331 0	-1 005.490 3	233.443 3	322	-0.224 4	0.77	4.95

우리는 미완화쌍빈살창점특성연구에서  $r_c$ 와  $r_{cf}$ 사이의 린접원자들의 영향을 고려하여 계산식을 새롭게 제기하였다.

제1, 제2린접(FN, SN)쌍빈살창점형성에너지는 식 (4), (5)와 같다.

$$E_{1v}^f = -\sum_{i=1}^3 (N_i - \delta_{i1}) \phi(r_i) + \sum_{i,j} N_{ij} F_0 + \sum_{i,j} N_{ij} [F(\rho_{ij}) + M(\rho_{ij})] \quad (4)$$

여기서  $N_{ij}$ 는 한 빈살창점의 제 $i$ 린접, 다른 빈살창점의 제 $j$ 린접으로 되는 살창원자개수로써 FN쌍빈살창점주위의 원자분포이다.

$$E_{2v}^f = -\sum_{i=1}^3 (N_i - \delta_{i2}) \phi(r_i) + \sum_{i,j} N_{ij} F_0 + \sum_{i,j} N_{ij} [F(\rho_{ij}) + M(\rho_{ij})] \quad (5)$$

여기서  $N_{ij}$ 는 SN쌍빈살창점주위의 원자분포이다.

식 (4), (5)에서  $N_i$ 는 주목하는 빈살창점의 제 $i$ 린접원자개수이고

$$\rho_{ij} = \sum_{k=1}^6 (N_k - \delta_{ik} - \delta_{jk}) f(r_k),$$

$$P_{ij} = \sum_{k=1}^6 (N_k - \delta_{ik} - \delta_{jk}) f^2(r_k) \quad (6)$$

이며 대응하는 쌍빈살창점결합에너지는

$$E_{2v}^b = 2E_{1v}^f - E_{2v}^f. \quad (7)$$

그림 1과 같은 9개의 이행경로  $j_k$ 를 고려하여 쌍빈살창점의 이행에너지계를 계산한다.

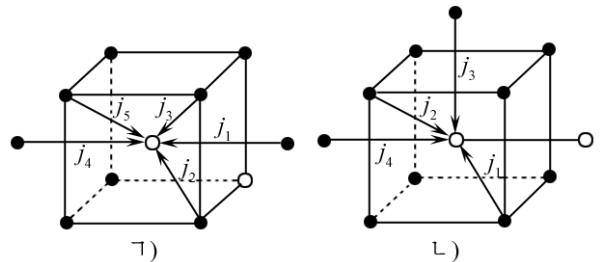


그림 1. 체심립방금속에서 쌍빈살창점결합의 확산물림새

ㄱ) FN, ㄴ) SN

$k$ 의 값범위는 제1린접쌍빈살창점에 대하여 1~5, 제2린접쌍빈살창점에 대하여 1~4이다.  $j_k$ 경로에서 이행원자의 이행전 에너지는 다음과 같다.

$$E_k^0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 N_{ik}^0 \phi(r_i) + F(\rho_k^0) + M(P_k^0) \quad (8)$$

여기서

$$\rho_k^0 = \sum_{i=1}^6 N_{ik}^0 f(r_i), \quad P_k^0 = \sum_{i=1}^6 N_{ik}^0 f^2(r_i) \quad (9)$$

이고  $N_{ik}^0$ 은  $j_k$ 경로이행원자의 이행전 린접원자분포이다.

이행원자가 이행마루점에 있을 때 에너지는 다음과 같다.

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 N_{ik} \phi(r_{ik}) + F(\rho_k) + M(P_k) \quad (10)$$

여기서

$$\rho_k = \sum_{i=1}^6 N_{ik} f(r_{ik}), \quad P_k = \sum_{i=1}^6 N_{ik} f^2(r_{ik}) \quad (11)$$

이며  $N_{ik}$ 과  $r_{ik}$ 는  $j_k$ 경로이행원자가 중간점까지 이행했을 때 주위원자분포와 린접원자사이 거리이다.

대응하는 이행에너지는 다음과 같다.

$$E_k^m = E_k - E_k^0 \quad (12)$$

쌍빈살창점의 형성에너지와 결합에너지를 계산한 결과는 표 3과 같다. 표에서 제 1행은 우리가 계산한 값이고 제2행은 제안 1의 계산값[4], 제3행은 제안 2의 계산값[5]이다.

표 3. 체심립방금속의 쌍빈살창점형성에너지와 결합에너지(eV)

구분		Cr	Fe	Mo	Nb	Ta	V	W
FN	$E_{1v}^f$	3.42	3.36	5.96	5.16	5.65	3.85	7.52
		3.48	3.34	5.87	5.25	5.61	3.99	7.41
		3.68	3.32	4.84	4.96	5.86	3.69	6.95
	$E_{2v}^b$	0.24	0.26	0.40	0.33	0.40	0.26	0.53
		0.22	0.26	0.43	0.38	0.41	0.29	0.56
		0.26	0.22	0.32	0.32	0.40	0.25	0.47
SN		$E_{2v}^f$	3.42	3.41	6.00	5.21	5.72	3.89
	3.49		3.38	5.90	5.30	5.68	4.03	7.46
		3.69	3.35	4.89	5.04	5.96	3.74	7.02
	$E_{2v}^b$	0.23	0.22	0.36	0.28	0.33	0.23	0.48
		0.22	0.22	0.39	0.32	0.34	0.25	0.51
		0.25	0.19	0.27	0.24	0.30	0.20	0.40

표 3에서 보는바와 같이 계산값들은 제3행의 FS모형계산값[5]과 잘 일치하며 특히 결합에너지의 계산값이 잘 일치한다. 모든 금속의 FN과 SN쌍빈살창점형성에너지값은 서로 비슷하며 따라서 두 종류의 쌍빈살창점이 거의 같은 확률로 결정에 존재할수 있다.

쌍빈살창점이행에너지와 확산에너지의 계산값은 표 4와 같다.

표 4. 체심립방금속의 쌍빈살창점이행에너지와 확산려기에너지(eV)

구분	Cr	Fe	Mo	Nb	Ta	V	W
FN	$E_1^m$	1.68	1.84	2.93	1.76	2.64	4.41
	$E_2^m$	0.82	0.65	1.21	0.72	0.90	1.42
	$E_3^m$	0.86	0.71	1.30	0.82	1.01	1.55
	$E_4^m$	2.08	2.23	3.65	2.20	3.25	5.50
	$E_5^m$	0.82	0.65	1.20	0.70	0.89	1.42
SN	$E_1^m$	0.82	0.63	1.18	0.69	0.87	1.39
	$E_2^m$	0.82	0.65	1.20	0.70	0.89	1.42
	$E_3^m$	2.10	2.27	3.69	2.27	3.32	5.58
	$E_4^m$	2.09	2.24	3.65	2.20	3.26	5.51
$Q_{2v}^{FN}$		4.24~4.28	4.01~4.07	7.16~7.26	5.86~5.98	6.54~6.66	4.42~4.51
$Q_{2v}^{SN}$		4.24~4.25	4.04~4.06	7.18~7.20	5.90~5.91	6.59~6.61	4.45~4.46
							8.94~9.07
							8.97~9.00

표 4에서 보는바와 같이 FN쌍빈살창점의 이행에서  $j_2$ 경로이행에너지가 제일 작으며 이것은 단빈살창점의 이행에너지보다 작다는것을 알수 있다. 또한  $j_2, j_5$ 경로이행에너지는 서로 비슷하며  $j_1, j_4$ 경로들의 이행에너지는 다른 경로들에 비하여 훨씬 크다.

SN쌍빈살창점의 이행에서  $j_1$ 경로이행에너지가 제일 작으며 역시 단빈살창점의 이행에너지보다 작다는것을 알수 있다.  $j_1, j_2$ 경로이행에너지는 서로 비슷하며  $j_3, j_4$ 경로이행에너지는 다른 경로들에 비하여 훨씬 크다. 따라서  $j_3, j_4$ 경로이행이 일어날 확률은 훨씬 작다.

FN쌍빈살창점이행이 일어날 때  $j_2$ 경로는 제일 가능한 이행경로이다. 이행후 FN쌍빈살창점은 SN쌍빈살창점으로 변한다. 또한 SN쌍빈살창점이행이 일어날 때  $j_1$ 경로는 제일 가능한 이행경로이다. 결과 SN쌍빈살창점은 FN쌍빈살창점으로 변한다. 이러한 두가지 과정이 연속 반복되면서 체심립방금속의 주요확산물림새가 이루어진다.

Mo, Nb, Ta 및 V의 FN쌍빈살창점의  $j_2$ 경로이행에너지계산값은  $j_5$ 경로의 값에 비하여 조금 크므로  $j_5$ 경로가 제일 가능한 이행경로로 된다.  $j_5$ 경로이행후 FN쌍빈살창점은 제5린점쌍빈살창점으로 되며 앞의 경우에서와 같은 FN쌍빈살창점이행과 SN쌍빈살창점이행의 교체과정을 계속할수 없다. 즉 2개의 빈살창점들은 서로 독립적으로 이행한다.

계산된 모든 체심립방금속들에서 FN쌍빈살창점의  $j_2, j_5$ 경로이행에너지값은 서로 비슷하며 따라서 이러한 두가지 형태의 확산물림새가 발생할 확률도 서로 비슷하다.

쌍빈살창점이행에너지를 계산할 때 이행면우에서 이행원자의 에너지분포에 대한 계산을 통하여 고개마루점의 위치와 이행에너지를 계산한다.

Nb의 FN쌍빈살창점의  $j_2$ 경로이행에 대한 이행에너지분포계산결과와 SN쌍빈살창점의  $j_1$ 경로이행에 대한 고개마루점위치계산결과는 그림 2와 같다. 그림에서 (0, 0)은 이행출발점이며 (1, 1)은 이행마감점이다. 그림면은 쌍빈살창점의 이행경로를 포함하는 이행면으로서 이행출발점과 2개의 빈살창점위치를 지난다. 가로축은 그림 1의 1)에서 오른쪽모서리이다.

그림 2에서 보는바와 같이 이행경로주위에서 린점원자분포의 비대칭성과 배치의 불

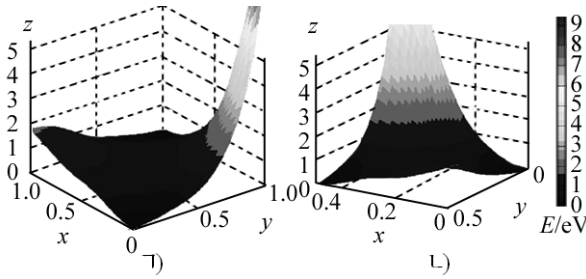


그림 2. Nb 금속 결정에서의 쌍빈살창점 이행모의  
 ㉠) FN쌍빈살창점의  $j_2$  경로, ㉡) SN쌍빈살창점의  $j_1$  경로

균일성에 의하여 이행고개마루점의 위치는 (0.5, 0.5)가 아니라 (0.64, 0.64)로 된다. 마루점을 통한 이행에너지는 0.797 8eV로서 (0.5, 0.5)에서의 0.715eV에 비하여 크며 선행계산결과 0.92eV[5]에 접근하였다. SN쌍빈살창점의  $j_1$  경로이행에 대하여 고개마루점 위치를 계산하면 (0.32, 0.32)이고 이행에너지는 0.777 8eV이며 선행계산결과 0.87eV[5]에 접근하였다.

Cr에 대하여 FN쌍빈살창점의  $j_2$  이행 경로에 대한 이행에너지 계산결과(0.797 8eV)는 중간점을 취하는 방법(0.824eV)보다 오히려 작아졌다.

### 맺 는 말

체심립방금속들에 대한 해석정밀형삽입원자방법에 기초하여 더 먼 린접원자들을 고려한 쌍빈살창점결합들의 특성계산공식들을 유도하여 쌍빈살창점특성량들을 계산하였다.

쌍빈살창점형성에너지에 대한 계산결과는 실험 및 선행연구결과와 잘 일치하며 빈살창점쌍의 결합에너지에 대한 계산결과는 선행연구결과보다 실험결과와 더 잘 일치한다.

모든 체심립방금속들에서는 제1린접빈살창점쌍과 제2린접빈살창점쌍사이의 전환이 진행되는 형태로 이행이 일어난다.

### 참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 2, 75, 주체102(2013).
- [2] G. Simonelli et al.; Phys. Stat. Sol., B 217, 747, 2000.
- [3] P. A. T. Olsson; Comput. Mater. Sci., 47, 135, 2009.
- [4] W. Y. Hu et al.; Comput. Mater. Sci., 23, 175, 2002.
- [5] C. C. Matthai; Philos. Mag., A 52, 305, 1985.

주체105(2016)년 2월 5일 원고접수

## Divacancy Characteristics of BCC Metals by Precise Analytic Embedded Atom Method

Jin Hak Son

We used a new form of the embedded atom potential for BCC metals, and considered the farther neighbor atoms, derived the calculation formulae of the characteristics of divacancy. On the basis of these formulae, we calculated the divacancy characteristics for the BCC metals such as Cr, Fe, Mo, Nb, Ta, V and W, and compared with other data. All results were in good agreement with experimental data and other calculation results.

Key words: embedded atom method, BCC metal, vacancy, formation energy, diffusion