

해석정밀형삽입원자방법에 의한 조밀룩방금속들의 쌍빈살창점결함의 특성

진학선, 윤철수

경애하는 최고령도자 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《기초과학은 과학기술강국을 떠받드는 주춧돌입니다. 기초과학이 든든해야 나라의 과학 기술이 공고한 토대우에서 끊임없이 발전할수 있습니다.》(《조선로동당 제7차대회에서 한 중앙 위원회사업총화보고》 단행본 40페이지)

고체재료에서 점결함들은 확산, 산화, 결정성장에 큰 영향을 미치며 점결함의 대부분을 차지하는 빈살창점결함은 재료의 특성과 제품의 성능에 직접 영향을 준다.[4]

본문에서는 조밀룩방금속들에 대한 해석정밀형삽입원자방법[1, 2]과 분자정력학적방법[3]을 적용하여 이 금속들의 쌍빈살창점결함특성들을 연구하였다.

조밀룩방금속들(Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y, Zr)에 대한 해석정밀형삽입원자포텐셜의 모형파라미터들을 표 1에 주었다.[2]

표 1. 조밀룩방금속들에 대한 해석정밀형삽입원자포텐셜의 모형파라미터들

| 금속 | k_{-1} | k_0 | k_1 | k_2 | k_3 | k_4 | k_5 | α | β | n | F_0 |
|----|----------|------------|-----------|------------|-----------|----------|--------|----------|---------|------|-------|
| Be | 303 | -1 360.301 | 2 516.637 | -2 458.873 | 1 338.523 | -384.873 | 45.660 | -0.230 | 1.14 | 0.32 | 2.21 |
| Co | 306 | -1 356.870 | 2 481.983 | -2 397.466 | 1 289.281 | -365.889 | 42.812 | 0.014 | -1.23 | 0.58 | 3.06 |
| Hf | 270 | -1 181.109 | 2 133.393 | -2 040.696 | 1 090.751 | -308.800 | 36.160 | 0.017 | -0.93 | 0.32 | 4.64 |
| Mg | 104 | -455.026 | 821.367 | -783.925 | 417.326 | -117.489 | 13.665 | -0.038 | 3.77 | 0.75 | 0.93 |
| Re | 572 | -2 462.561 | 4 359.932 | -4 071.896 | 2 118.778 | -582.976 | 66.311 | 0.091 | -0.55 | 0.39 | 5.73 |
| Ru | 377 | -1 635.048 | 2 920.085 | -2 760.021 | 1 459.797 | -410.099 | 47.814 | -0.229 | 1.21 | 0.58 | 4.89 |
| Sc | 192 | -810.868 | 1 408.208 | -1 290.012 | 658.241 | -177.520 | 19.779 | -0.147 | 1.76 | 0.70 | 2.75 |
| Ti | 266 | -1 182.098 | 2 169.455 | -2 105.065 | 1 138.203 | -324.938 | 38.251 | 0.030 | -0.94 | 0.48 | 3.35 |
| Y | 175 | -737.926 | 1 281.435 | -1 176.233 | 602.772 | -163.630 | 18.389 | -0.128 | 2.36 | 0.55 | 3.12 |
| Zr | 231 | -995.210 | 1 770.006 | -1 666.001 | 875.436 | -243.444 | 27.982 | 0.006 | -1.02 | 0.53 | 4.55 |

표 1에서 n 은 무분량, F_0, α, β, k_i 의 단위는 eV이다.

선행연구[2]에서와는 달리 Be에 대한 입력파라미터에서 포논분산특성에서 주파수의 최대값이 실험결과에 비하여 커지는것을 고려하여 C_{33} 의 값을 14로부터 25.9로 조정하였다. 다른 금속들과 비교하여도 원래의 14는 다른 탄성상수값에 비해볼 때 상대적으로 지나치게 작다. 또한 이렇게 조정하면 결함에너지-환산거리곡선계산결과와 Rose방정식곡선과의 불일치를 보여주는 부정합도 ΔS 의 값을 7.27로부터 0.19로 낮출수 있다.

1. 계 산 방 법

제1린접(FN)쌍빈살창점형성에너지는 다음과 같다.

$$E_{2v}^f = -\sum_{i=1}^7 (N_i - \delta_{i1}) \phi(r_i) + \sum_{i<9,j} N_{ij} F_0 + \sum_{i<9,j} N_{ij} [F(\rho_{ij}) + M(P_{ij})] \quad (1)$$

여기서 N_{ij} 는 한 빈살창점의 제*i*린접, 다른 빈살창점의 제*j*린접으로 되는 살창원자개수로
서 FN쌍빈살창점주위의 원자분포를 표시한다.

제2린접(SN)쌍빈살창점형성에너지는 다음과 같다.

$$E_{2v}^f = -\sum_{i=1}^7 (N_i - \delta_{i2}) \phi(r_i) + \sum_{i<9,j} N_{ij} F_0 + \sum_{i<9,j} N_{ij} [F(\rho_{ij}) + M(P_{ij})] \quad (2)$$

여기서 N_{ij} 는 SN쌍빈살창점주위의 원자분포를 표시한다. 식 (1)과 (2)에서

$$\rho_{ij} = \sum_{k=1}^8 (N_k - \delta_{ik} - \delta_{jk}) f(r_k), \quad P_{ij} = \sum_{k=1}^8 (N_k - \delta_{ik} - \delta_{jk}) f^2(r_k) \frac{r_{kx}^2 + r_{ky}^2 + \beta r_{kz}^2}{r_k^2} \quad (3)$$

이며 대응하는 쌍빈살창점결합에너지는 다음과 같다.

$$E_{2b} = 2E_{1f} - E_{2f} \quad (4)$$

조밀 룡방금속에서 쌍빈살창점결합의 확산물림새를 그림에 보여주었다.

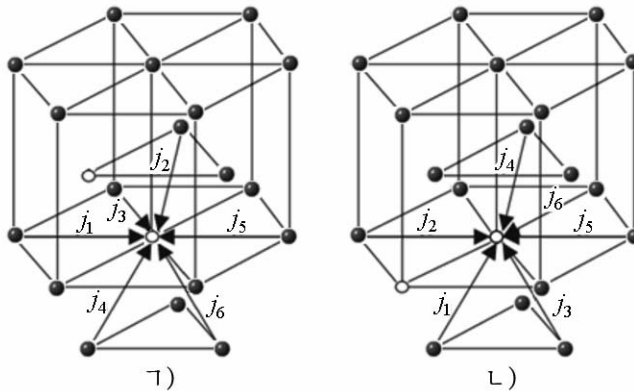


그림. 조밀 룡방금속에서 쌍빈살창점결합의 확산물림새
ㄱ) FN, ㄴ) SN

그림에 제시된 제1린접쌍빈살창점에 대한 5개의 이행경로 $j_k(k=1\sim5)$ 를 고려하여 쌍빈
살창점의 이행에너지를 계산한다.

j_k 경로에서 이행원자의 이행전 에너지는 다음과 같다.

$$E_k^0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^7 N_{ik}^0 \phi(r_i) + F(\rho_k^0) + M(P_k^0) \quad (5)$$

여기서

$$\rho_k^0 = \sum_{i=1}^8 N_{ik}^0 f(r_i), \quad P_k^0 = \sum_{i=1}^8 N_{ik}^0 f^2(r_i) \frac{r_{ix}^2 + r_{iy}^2 + \beta r_{iz}^2}{r_i^2} \quad (6)$$

이며 N_{ik}^0 은 j_k 경로이행원자의 이행전 린접원자분포를 나타낸다.

이행원자가 이행마루점에 있을 때 에네르기는

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{13} N_{ik} \phi(r_{ik}) + F(\rho_k) + M(P_k) \quad (7)$$

이다. 여기서

$$\rho_k = \sum_{i=1}^{17} N_{ik} f(r_{ik}), P_k = \sum_{i=1}^{17} N_{ik} f^2(r_{ik}) \frac{r_{ikx}^2 + r_{iky}^2 + \beta r_{ikz}^2}{r_{ik}^2} \quad (8)$$

이며 N_{ik} 와 r_{ik} 는 j_k 경로이행원자가 마루점까지 이행했을 때 주위원자분포이다. 이에 대응하는 이행에네르기는 다음과 같다.

$$E_k^m = E_k - E_k^0 \quad (9)$$

2. 형성 및 결합에네르기

표 2에 10종의 조밀룩방금속들에 대한 쌍빈살창점의 형성에네르기와 결합에네르기의 계산값을 주었다. 제1행은 론문계산값이고 제2행은 제안 1의 선행계산값[3], 제3행은 실험값[3]이다.

표 2. 10종의 조밀룩방금속들에 대한 쌍빈살창점의 형성에네르기와 결합에네르기의 계산값(eV)

| 금속 | Be | Co | Hf | Mg | Re | Ru | Sc | Ti | Y | Zr |
|----|------------|------|-------|------|-------|------|------|------|------|-------|
| FN | 1.96 | 2.59 | 3.29 | 1.10 | 4.28 | 3.30 | 2.13 | 2.78 | 2.25 | 3.18 |
| | E_{2v}^f | 2.11 | 2.56 | 3.35 | 1.10 | 4.38 | 3.46 | 2.17 | 2.78 | 3.18 |
| | | — | — | — | — | — | — | 2.76 | — | — |
| | 0.23 | 0.13 | 0.31 | 0.08 | 0.40 | 0.44 | 0.15 | 0.20 | 0.19 | 0.22 |
| | E_{2v}^b | 0.13 | 0.20 | 0.24 | 0.08 | 0.32 | 0.11 | 0.20 | 0.12 | 0.21 |
| | | 0.21 | 0.400 | — | 0.131 | — | — | 0.22 | — | 0.236 |
| SN | 1.97 | 2.60 | 3.30 | 1.10 | 4.30 | 3.32 | 2.12 | 2.79 | 2.22 | 3.18 |
| | E_{2v}^f | 2.09 | 2.57 | 3.35 | 1.09 | 4.40 | 3.45 | 2.15 | 2.79 | 3.18 |
| | | — | — | — | — | — | — | 2.76 | — | — |
| | 0.23 | 0.12 | 0.30 | 0.09 | 0.38 | 0.42 | 0.16 | 0.20 | 0.22 | 0.22 |
| | E_{2v}^b | 0.15 | 0.19 | 0.24 | 0.09 | 0.31 | 0.12 | 0.20 | 0.15 | 0.21 |
| | | 0.17 | 0.44 | — | 0.133 | — | — | 0.22 | — | 0.248 |

론문계산결과는 전반적으로 제안 1의 결과들과 유사하며 실험값과의 일치정도도 비슷하지만 Be과 Zr에서 제1린접쌍빈살창점결합에네르기는 실험값에 더 접근하였다.

3. 이행 및 확산러기에네르기

표 3에 조밀룩방금속들에 대한 쌍빈살창점의 이행에네르기와 확산러기에네르기계산값과 실험값을 주었다. Be외에 FN쌍빈살창점이행에서 j_2 경로의 이행에네르기가 제일 작으며 단빈살창점이행에네르기보다도 작고 j_1, j_3, j_4, j_5, j_6 경로의 이행에네르기들은 서로 매우 비슷하다. SN쌍빈살창점이행에서 j_1 경로의 이행에네르기가 제일 작으며 역시 단빈살창점이행

에네르기보다도 작고 j_2, j_3, j_4, j_5, j_6 경로들의 이행에네르기들은 서로 매우 비슷하다. Ti에 대한 계산결과들은 실험값[3]과 잘 일치한다. 그러나 Zr의 확산려기에네르기계산결과들은 실험값[3]보다 좀 커진다.

FN쌍빈살창점의 j_2 경로와 SN쌍빈살창점의 j_1 경로는 제일 가능한 이행경로로 된다. 그림으로부터 FN- j_2 이행 후 FN쌍빈살창점은 SN쌍빈살창점으로 되며 SN- j_1 이행 후 SN쌍빈살창점은 FN쌍빈살창점으로 된다. 이것은 이행과정에 FN쌍빈살창점과 SN쌍빈살창점이 반복적으로 출현한다는것을 의미한다. 다른 류형의 쌍빈살창점, 실패로 제3린점, 제4린점의 쌍빈살창점들이 나타날 확률은 작다.

우와 같은 형식의 이행을 FN \leftrightarrow SN형반복이행이라고 할수 있다. 기타 제안[3]에서는 FN \leftrightarrow SN형, FN \leftrightarrow FN형, SN \leftrightarrow SN형의 세가지 반복이행이 다 가능한것으로 연구되었다.

표 3. 조밀육방금속들에 대한 쌍빈살창점의 이행에네르기와 확산려기에네르기계산값과 실험값(eV)

| 금속 | Be | Co | Hf | Mg | Re | Ru | Sc | Ti | Y | Zr |
|-------------------|---------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| FN | E_1^m | 0.70 | 0.56 | 0.96 | 0.30 | 2.21 | 1.96 | 0.77 | 0.49 | 0.77 |
| | E_2^m | 0.57 | 0.48 | 0.79 | 0.26 | 2.00 | 1.72 | 0.68 | 0.39 | 0.63 |
| | E_3^m | 0.76 | 0.78 | 1.16 | 0.36 | 2.51 | 1.99 | 0.89 | 0.73 | 0.89 |
| | E_4^m | 0.65 | 0.77 | 1.01 | 0.35 | 2.41 | 1.79 | 0.83 | 0.63 | 0.81 |
| | E_5^m | 0.58 | 0.69 | 0.92 | 0.29 | 2.18 | 1.56 | 0.75 | 0.60 | 0.74 |
| | E_6^m | 0.63 | 0.74 | 0.97 | 0.34 | 2.39 | 1.78 | 0.81 | 0.59 | 0.79 |
| SN | E_1^m | 0.57 | 0.48 | 0.79 | 0.26 | 2.00 | 1.70 | 0.68 | 0.39 | 0.63 |
| | E_2^m | 0.64 | 0.48 | 0.88 | 0.25 | 2.10 | 1.78 | 0.71 | 0.45 | 0.71 |
| | E_3^m | 0.67 | 0.72 | 1.03 | 0.35 | 2.50 | 1.95 | 0.85 | 0.59 | 0.83 |
| | E_4^m | 0.64 | 0.76 | 0.99 | 0.35 | 2.40 | 1.76 | 0.82 | 0.62 | 0.80 |
| | E_5^m | 0.70 | 0.77 | 1.08 | 0.34 | 2.48 | 1.82 | 0.84 | 0.70 | 0.84 |
| | E_6^m | 0.66 | 0.75 | 1.03 | 0.33 | 2.38 | 1.78 | 0.84 | 0.66 | 0.82 |
| Q_2^{FN} | 최소값(계산) | 2.54 | 3.07 | 4.08 | 1.36 | 6.28 | 4.86 | 2.81 | 3.18 | 2.92 |
| | 최대값(계산) | 2.74 | 3.37 | 4.45 | 1.46 | 6.79 | 5.29 | 3.02 | 3.52 | 3.14 |
| | 최소값(실험) | — | — | — | — | — | — | 3.15 | — | 3.12 |
| | 최대값(실험) | — | — | — | — | — | — | 3.40 | — | 3.74 |
| Q_2^{SN} | 최소값(계산) | 2.61 | 3.08 | 4.09 | 1.35 | 6.30 | 5.02 | 2.80 | 3.19 | 2.89 |
| | 최대값(계산) | 2.67 | 3.41 | 4.38 | 1.45 | 6.80 | 5.27 | 2.97 | 3.50 | 3.06 |
| | 최소값(실험) | — | — | — | — | — | — | 2.88 | — | 3.44 |
| | 최대값(실험) | — | — | — | — | — | — | 3.28 | — | — |

Ru은 레외로 된다. 만일 계산결과에 따라 분석한다면 쌍빈살창점의 이행에서는 경로가 제일 가능한 이행경로로 되며 이런 이행 후 쌍빈살창점은 제6린점쌍빈살창점으로 되고 다시 FN \leftrightarrow SN형반복이행이 나타나지 않는다.

또한 Co와 Mg에 대한 계산결과로부터 이 금속결정들의 쌍빈살창점이행과정에서 SN \leftrightarrow SN형과 FN \leftrightarrow SN형의 반복이행이 같이 나타난다.

맺 는 말

더 먼 린접원자들을 고려하고 분자정력학적방법으로 조밀육방금속에서 해석정밀형삽입원자포텐셜에 의한 쌍빈살창점결합들의 특성계산공식들을 유도하였다.

조밀육방금속들인 Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y, Zr의 쌍빈살창점특성들에 대한 계산결과와 선행자료와의 대비분석을 통하여 조밀육방금속들에 대한 해석정밀형삽입원자포텐셜과 제기된 공식들의 정확성을 검증하였다.

참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학) 59, 2, 80, 주체102(2013).
- [2] H. Jin et al.; Applied Physics, A 120, 189, 2015.
- [3] W. Y. Hu et al.; J. Phys.: Condens. Matter, 13, 1193, 2001.
- [4] 陶杰 等; 材料科学基础[M], 化学工业出版社, 334~357, 2006.

주체106(2017)년 9월 5일 원고접수

The Bi-Vacancy Properties of HCP Metals by PAEAM

Jin Hak Son, Yun Chol Su

We derived the formulas on the bi-vacancy properties of HCP metals with molecular static(MS) method considering farther neighbor atoms on the basis of the potential form of the precise analytical embedded atom method(PAEAM). And we obtained the calculation results of the bi-vacancy properties of the HCP metals Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y and Zr.

Key words: PAEAM, HCP metal, bi-vacancy property, formation energy