

## 분자동력학방법에 의한 체심립방금속들에서 단빈살창점결함의 완화특성

진학선, 리영민

금속재료에서 소성변형, 파괴, 확산 및 상변환과 같은 수많은 과정들은 주요하게 원자들의 움직임과 관련되어 있다. 이런 현상들은 수많은 원자들과 관련되므로 전자수준의 계산으로는 처리하기 힘들고 반경험적인 원자들사이의 포텐셜[3]을 도입하여 그것들사이의 호상작용을 묘사함으로써만 모의가 가능하다.

금속재료에 대한 분자동력학적모의에서는 계를 원자들로 구성된 계로 보고 모형화된 포텐셜함수[1]를 리용하여 원자들사이의 호상작용을 결정한다. 일정한 초기조건과 경계조건에서 매 원자에 대한련립운동방정식들의 풀이를 계차법으로 얻어 계안의 모든 립자들의 운동경로를 결정한다. 이러한 모의를 통해 모든 립자의 위치, 속도, 가속도 등을 설정된 시간걸음간격으로 직접 얻을수 있다.[2]

$N$ 개의 원자들로 구성된 계에서 원자들의 운동방정식들은 다음과 같다.

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \mathbf{F}_i(t), \quad i = \overline{1, N} \quad (1)$$

론문에서는 이 련립운동방정식에 대한 풀이도식들중에서 다음과 같은 뛰어넘기도식[2]을 리용한다.

$$\begin{cases} \mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \Delta t/2)\Delta t \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t/2) = \mathbf{v}_i(t - \Delta t/2) + \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i}\Delta t \end{cases} \quad (2)$$

체심립방금속에 대한 해석정밀형삽입원자방법[3, 4]에서  $i$ 번째 원자의 에네르기는 다음식으로 표시된다.

$$E_i = F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_j \phi(r_{ij}) + M(P_i) \quad (3)$$

이때 이 원자가 받는 힘은 위치에 관한 1계도함수로 표시된다.

$$\mathbf{F}_i = - \left( \frac{\partial E_i}{\partial r_{ix}} \mathbf{e}_x + \frac{\partial E_i}{\partial r_{iy}} \mathbf{e}_y + \frac{\partial E_i}{\partial r_{iz}} \mathbf{e}_z \right) = - \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial E_i}{\partial r_{i\alpha}} \mathbf{e}_\alpha \quad (4)$$

여기서는 중심원자로부터 반경이 살창상수의 5배인 구안에 포함되는 1 729개의 원자들로 이루어진 계를 고찰한다. 이때 반경이 살창상수의 3배인 구(모의부분)안에 놓이는 341개의 원자들은 힘을 받아 움직인다고 보고 나머지 1 388개의 원자들(경계부분)은 자기 위치에 고정되어있다고 보았다. 우리는 중심원자를 빼버린 모의부분안의 원자들이 완화되는 과정을 분자동력학적방법으로 모의하였다.

계산에서는 시간걸음을  $10^{-13}$ s로 설정하고 에네르기는 1eV, 질량은  $1.66057 \cdot 10^{-27}$ kg, 길이는 1nm, 속도는 13 890m/s로 척도화하였다. 모든 원자들은 초기에 안정한 살창점위치에 놓여

있고 그것들의 속도는 령이라고 본다. 이 상태에서는 아무리 풀이도식에 따라 계를 진화시켜도 계는 자기의 상태를 변화시키지 않는다. 이것은 모의프로그램이 정확히 작성되었다는 것을 보여준다. 모의에서는 속도보정방법을 리용하였으며 이때 선행방법과는 달리 모의부분안에 있는 모든 원자들에 식 (4)로 주어지는 힘외에 속도에 비례하는 저항힘이 더 작용한다고 보았다. 이렇게 하면 모의결과에 영향을 주지 않으면서도 계의 완화시간을 단축할 수 있다. 이때 저항힘과 속도사이의 비를 저항결수라고 하자. 체심립방금속 Cr에서 저항결수에 따르는 완화과정을 고찰한 결과는 그림 1-3과 같다.

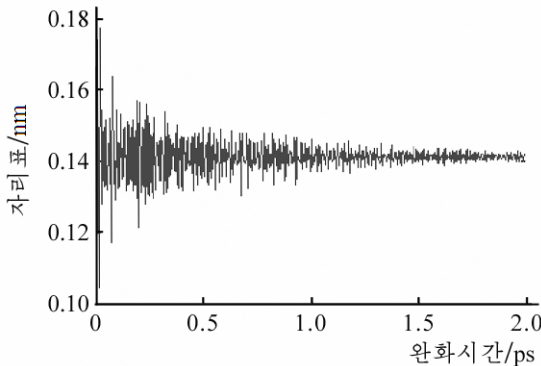


그림 1. 체심립방금속 Cr에서 단빈살창점이 형성된 후 제1린접원자의 완화특성  
저항결수 1일 때, 0.144 2nm → 0.141 3nm

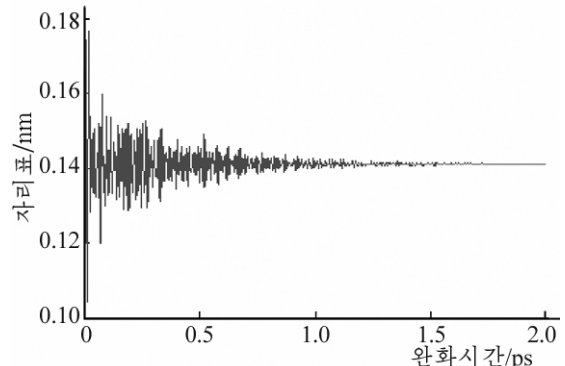


그림 2. 체심립방금속 Cr에서 단빈살창점이 형성된 후 제1린접원자의 완화특성  
저항결수 2일 때, 0.144 2nm → 0.141 3nm

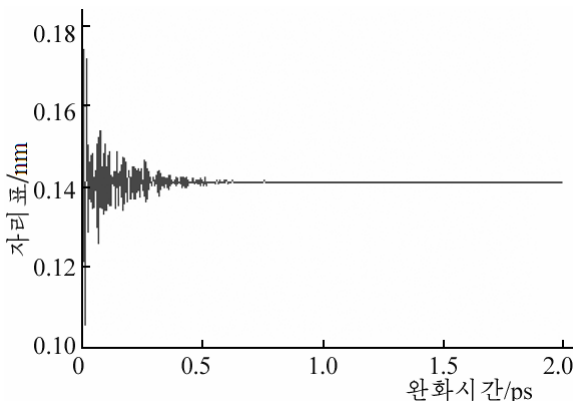


그림 3. 체심립방금속 Cr에서 단빈살창점이 형성된 후 제1린접원자의 완화특성  
저항결수 5일 때, 0.144 2nm → 0.141 3nm

그림 1-3에서 보는바와 같이 저항결수가 커져도 최종완화위치는 달라지지 않으며 완화시간은 저항결수에 반비례한다. 즉 설정한 단위계에서 저항결수가 1일 때에 비하여 5일 때 계의 완화시간은 5배로 단축된다. 그러나 저항결수가 5이상이면 저항결수의 크기가 최종완화위치에 영향을 준다. 따라서 계산에서는 저항결수를 설정된 단위계에서 5로 하였다. 또한 최종완화위치를 결정할 때 약간의 요동이 있는것을 고려하여 마지막 1 000걸음동안의 위치값들을 평균한다.

단빈살창점완화특성을 모의할 때 계의 중심원자를 빼버리고 시작한다. 처음에는 원자

들이 빈살창점방향과 반대방향으로 팽창하다가 다시 빈살창점방향으로 수축하는 과정이 반복되며 점차적으로 이런 과정의 진폭이 작아져 계가 안정한 최종완화위치에 도달하게 된다.

단빈살창점은 입사립자와 빈살창점에 놓여있던 립자가 순간적으로 충돌하여 형성된다. 다시말하여 미처 완화가 되기 전에 계밖으로 튀어나오므로 단빈살창점의 형성에너지  $E_{iv}^f$ 는 미완화형성에너지 즉 분자정력학적방법으로 얻은 결과[1]와 같다고 볼수 있다. 완화에너지  $E_{re}$ 는 미완화형성에너지에서 완화후의 계의 에너지를 뺄면 얻어진다. 형성

체적은 단빈살창점의 제1린접원자들을 정점으로 하는 립방체의 체적에서 1개 원자가 평형 상태에서 차지하는 체적  $\Omega_0$ 을 더는 방법으로 얻는다.

분자동력학적방법에 의한 7종의 체심립방금속들의 단빈살창점완화에너지와 형성체적계산결과는 표와 같다. 표에서 보는바와 같이 Fe, Mo에 대한 계산결과는 선행계산결과들[5]과 매우 잘 일치하며 Cr, Ta, Nb의 계산결과도 비교적 잘 맞는다. 또한 V, W에서는 완화에너지에서 선행계산결과와 차이가 있지만 형성체적에서 선행계산결과들과 잘 일치한다. 총적으로 보면 분자동력학방법에 의하여 단빈살창점결합의 완화과정을 정확히 모의하였다는것을 알수 있다.

표. 체심립방금속들의 단빈살창점완화에너지와 형성체적 계산 및 실험값

금속	특성	완화에너지/eV		형성체적 $\cdot \Omega_0^{-1}$		
		계산값	선행계산 결과 [5]	계산값	선행계산 결과 1[5]	선행계산 결과 2[5]
Cr	$E_{re}$	0.21	0.15	0.88	0.97	0.84
Fe	$E_{re}$	0.17	0.14	0.84	0.86	0.85
Mo	$E_{re}$	0.20	0.19	0.89	0.90	0.73
Nb	$E_{re}$	0.01	0.06	0.95	0.96	0.83
Ta	$E_{re}$	0.13	0.10	0.89	0.79	0.83
V	$E_{re}$	0.04	0.08	0.91	0.86	0.74
W	$E_{re}$	0.11	0.24	0.91	0.92	0.68

이처럼 해석정밀형삽입원자방법과 분자동력학방법을 결합하면 체심립방금속의 단빈살창점결합의 완화과정을 정확히 모의할수 있다.

## 맺 는 말

1) 해석정밀형삽입원자방법과 분자동력학방법을 적용하여 체심립방금속들의 단빈살창점완화특성을 계산하는 방법을 제기하였다.

2) 제기한 방법에 의하여 계산된 Cr, Fe, Mo, Nb, Ta, V, W의 단빈살창점완화특성들은 실험결과들과 거의 일치한다.

## 참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 11, 86, 주체102(2013).
- [2] 송철욱 등; 계산핵물리방법, 김일성종합대학출판사, 166~194, 주체95(2006).
- [3] 김영진 등; 나노물리, 김일성종합대학출판사, 5~27, 주체98(2009).
- [4] H. Jin et al.; Applied Physics, A 120, 189, 2015.
- [5] 张邦维 等; 嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用, 湖南大学出版社, 290~295, 2003.

## **Mono-Vacancy Relaxation Properties of BCC Metals by Molecular Dynamic Method**

*Jin Hak Son, Ri Yong Min*

We suggested a calculation method of the mono-vacancy relaxation properties of BCC metals by combining the precise AEAM(analytic embedded atom method) with the molecular dynamic method. This method was applied to determine the mono-vacancy relaxation properties for Cr, Fe, Mo, Nb, V, Ta and W.

Key words: precise analytic embedded atom method, molecular dynamic, vacancy, relaxation property