

조밀룩방금속들에서 단빈살창점결함의 특성

진 학 선

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《자연과학부문 교원, 연구사들은 수학, 물리학, 생물학을 비롯한 기초과학에 대한 연구를 심화시키고 사회주의경제건설과 인민생활향상에서 나서는 과학기술적문제들을 풀기 위한 연구사업을 적극 벌리며 여러 분야의 첨단과학기술을 연구도입하는데 힘을 넣어야 합니다.》(《김정일선집》 증보판 제18권 457페이지)

인공지구위성과 원자로, 립자가속기에 쓰이는 구조재료들과 부품품들에서는 강한 립자속조임에 의하여 점결함이 많이 생긴다. 또한 립자속조임에 의하여 결정에 점결함을 만들어 재료의 특성을 개선하는 연구도 많이 진행되고있다.

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

우리는 조밀룩방금속들에 대한 해석정밀형압입원자방법[1, 2]과 분자정력학적방법[3]을 적용하여 이 금속들의 점결함특성들을 연구하였다.

조밀룩방금속들에 대한 해석정밀형압입원자방법의 기본방정식들은 다음과 같다.[1]

$$E = \sum_{i=1}^n E_i \quad (1)$$

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

$$F(\rho) = -F_0(1 - \ln(\rho/\rho_e))^n (\rho/\rho_e)^n, \quad f(r) = f_e(r_1/r)^\lambda, \quad \lambda \approx 6 \quad (3)$$

$$\phi(r) = \begin{cases} \sum_{j=-1}^5 k_j (r/r_1)^j, & r_1 \leq r < r_5 \\ \sum_{j=0}^7 l_j (r/r_5 - 1)^j, & r_5 \leq r < r_c \\ 0, & r > r_c \end{cases} \quad (4)$$

$$M(P) = \alpha(1 - \exp(-(\ln |P/P_e|)^2)) \quad (5)$$

$$P = \sum_m f^2(r_m) \frac{r_{mx}^2 + r_{my}^2 + \beta r_{mz}^2}{r_m^2} \quad (6)$$

리용된 입력파라미터들은 살창상수 a , 결함에너지 E_c , 단빈살창점형성에너지 E_{1f} , 탄성상수 C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} , 체심립방구조와 조밀룩방구조사이의 구조에너지차 E_{bh} 혹은 조밀립방구조와 조밀룩방구조사이의 에너지차 E_{th} 이며 위의 기본함수들에 포함된 모형파라미터들은 n , α , β , F_0 , $k_{-1} - k_5$ 이다.

조밀룩방금속들인 Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y, Zr에 대한 해석정밀형압입원자포

텐살의 모형파라미터들은 표 1과 같다.[1]

표 1. 조밀육방금속들의 모형파라미터

금속	k_{-1}	k_0	k_1	k_2	k_3
Be	301	-1 343.333 8	2 470.327 2	-2 399.268 7	1 298.589 7
Co	306	-1 356.870 1	2 481.983 3	-2 397.465 9	1 289.280 6
Hf	270	-1 181.109 4	2 133.392 7	-2 040.695 7	1 090.750 5
Mg	104	-455.025 9	821.366 6	-783.925 4	417.325 7
Re	572	-2 462.561 1	4 359.932 0	-4 071.896 4	2 118.777 9
Ru	377	-1 635.048 3	2 920.084 6	-2 760.020 5	1 459.796 6
Sc	192	-810.868 1	1 408.208 5	-1 290.011 5	658.241 3
Ti	266	-1 182.098 2	2 169.455 2	-2 105.064 9	1138.203 3
Y	175	-737.925 5	1 281.434 7	-1 176.232 6	602.772 3
Zr	231	-995.210 2	1 770.005 9	-1 666.001 0	875.436 0

금속	k_4	k_5	α	β	n	F_0
Be	-371.377 2	43.838 8	-0.482 0	1.00	0.98	2.23
Co	-365.888 5	42.811 6	0.013 8	-1.23	0.58	3.06
Hf	-308.800 1	36.160 0	0.016 6	-0.93	0.32	4.64
Mg	-117.488 9	13.665 3	-0.038 4	3.77	0.75	0.93
Re	-582.975 6	66.310 9	0.090 5	-0.55	0.39	5.73
Ru	-410.099 1	47.813 5	-0.229 1	1.21	0.58	4.89
Sc	-177.520 4	19.778 8	-0.147 1	1.76	0.70	2.75
Ti	-324.938 2	38.251 2	0.030 4	-0.94	0.48	3.35
Y	-163.629 9	18.388 6	-0.127 6	2.36	0.55	3.12
Zr	-243.444 3	27.982 3	0.006 2	-1.02	0.53	4.55

분자정력학적방법을 적용하여 해석정밀형압입원자포텐셜에 기초한 단빈살창점결합의 특성 공식들을 유도하였다. 단빈살창점형성에너지는 다음과 같다.

$$E_{lv}^f = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^7 N_i \phi(r_i) + \sum_{i=1}^8 N_i F_0 + \sum_{i=1}^8 N_i [F(\rho_i) + M(P_i)] \quad (7)$$

여기서

$$\rho_i = \sum_{j=1}^8 (N_j - \delta_{ij}) f(r_j), \quad P_i = \sum_{j=1}^8 (N_j - \delta_{ij}) f^2(r_j) \frac{r_{jx}^2 + r_{jy}^2 + \beta r_{jz}^2}{r_j^2} \quad (8)$$

이며 N_i 와 r_i 는 각각 살창원자의 i 번째 린접원자수와 i 번째 린접원자사이거리이다.

제1린접(FN)단빈살창점의 이행에너지는 다음과 같다.

$$E_{lv}^{FN} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{12} N_{im} \phi(r_{im}) + F(\rho_m) + M(P_m) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^7 (N_i - \delta_{il}) \phi(r_i) - F(\rho) - M(P) \quad (9)$$

여기서 전자밀도는

$$\rho = \sum_{i=1}^8 (N_i - \delta_{il}) f(r_i), \quad \rho_m = \sum_{i=1}^{17} N_{im} f(r_{im}) \quad (10)$$

이고 수정항변수는

$$P = \sum_{i=1}^8 (N_i - \delta_{il}) f^2(r_i) \frac{r_{ix}^2 + r_{iy}^2 + \beta r_{iz}^2}{r_i^2}, \quad P_m = \sum_{i=1}^{17} N_{im} f^2(r_{im}) \frac{r_{imx}^2 + r_{imy}^2 + \beta r_{imz}^2}{r_{im}^2} \quad (11)$$

이며 N_{im} 과 r_{im} 은 이행원자가 이행중간점에 있을 때 제 i 린점원자수와 제 i 린점원자사이거리이다.

제 2린점(SN)단빈살창점의 이행에네르기는 다음과 같다.

$$E_{lv}^{SN} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{13} N_{im} \phi(r_{im}) + F(\rho_m) + M(P_m) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^7 (N_i - \delta_{i2}) \phi(r_i) - F(\rho) - M(P) \quad (12)$$

여기서 전자밀도는

$$\rho = \sum_{i=1}^8 (N_i - \delta_{i2}) f(r_i), \quad \rho_m = \sum_{i=1}^{16} N_{im} f(r_{im}) \quad (13)$$

이고 수정 항변수는

$$P = \sum_{i=1}^8 (N_i - \delta_{i2}) f^2(r_i) \frac{r_{ix}^2 + r_{iy}^2 + \beta r_{iz}^2}{r_i^2}, \quad P_m = \sum_{i=1}^{16} N_{im} f^2(r_{im}) \frac{r_{imx}^2 + r_{imy}^2 + \beta r_{imz}^2}{r_{im}^2}. \quad (14)$$

단빈살창점의 확산에네르기는 형성에네르기와 이행에네르기의 합으로 된다.

$$Q_{lv}^{FN \text{ or } SN} = E_{lv}^f + E_{lv}^{FN \text{ or } SN} \quad (15)$$

여기서 Q_{lv}^{FN} 과 Q_{lv}^{SN} 은 각각 제 1린점살창점과 제 2린점살창점으로 확산하는데 필요한 에네르기이다.

조밀 룩방금속들인 Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y, Zr에 대한 단빈살창점의 특성량 계산값들은 표 2와 같다. 비교를 위하여 실험결과[3]들과 다른 제안들의 계산결과[3]들도 함께 주었다.

표 2. 조밀 룩방금속들의 단빈살창점특성량계산값과 실험값(eV)

금속	특성량	론문값	실험값	제안 1	제안 2-4	금속	특성량	론문값	실험값	제안 1	제안 2-4
Be	E_{lv}^f	1.11	1.11	1.12	1.23	Ru	E_{lv}^f	1.87	1.85	1.87	—
	Q_{lv}^{FN}	1.69	1.631	1.74	—		Q_{lv}^{FN}	3.65	—	3.66	—
	Q_{lv}^{SN}	1.74	1.708	1.76	2.420		Q_{lv}^{SN}	3.72	—	3.74	—
Co	E_{lv}^f	1.36	1.35	1.38	1.41	Sc	E_{lv}^f	1.14	1.15	1.14	—
	Q_{lv}^{FN}	2.06	—	2.10	2.301		Q_{lv}^{FN}	1.94	—	1.71	—
	Q_{lv}^{SN}	2.07	—	2.10	2.30		Q_{lv}^{SN}	1.97	—	1.73	—
Hf	E_{lv}^f	1.80	1.80	1.80	2.02	Ti	E_{lv}^f	1.49	1.50	1.49	1.49
	Q_{lv}^{FN}	2.74	—	2.70	—		Q_{lv}^{FN}	2.04	—	2.05	2.31
	Q_{lv}^{SN}	2.83	—	2.78	—		Q_{lv}^{SN}	2.12	—	2.10	2.16
Mg	E_{lv}^f	0.59	0.58	0.59	0.66	Y	E_{lv}^f	1.22	1.25	1.22	1.39
	Q_{lv}^{FN}	0.92	1.388	0.94	1.26		Q_{lv}^{FN}	2.00	—	1.77	2.791
	Q_{lv}^{SN}	0.91	—	0.94	1.27		Q_{lv}^{SN}	2.04	—	1.81	—
Re	E_{lv}^f	2.34	2.30	2.35	2.49	Zr	E_{lv}^f	1.70	1.70	1.70	1.86
	Q_{lv}^{FN}	4.72	—	4.60	—		Q_{lv}^{FN}	2.52	—	2.37	2.645
	Q_{lv}^{SN}	4.73	—	4.64	—		Q_{lv}^{SN}	2.59	1.975	2.42	2.635

표 2로부터 다음과 같은 결론을 얻을 수 있다.

형성에너지에 대한 론문제산결과는 선행제안의 결과에 비하여 실험값에 더 가깝다.

Be에 대한 형성 및 확산에너지의 계산결과는 실험값에 접근하였으며 선행제안들에 비하여 훨씬 개선되었다. Ti에 대한 제1린점, 제2린점 확산에너지의 계산결과는 제안 1의 결과와 거의 일치하며 Y에 대한 제1린점 확산에너지의 계산결과는 제안 1보다 제안 3의 결과에 더 접근하였다. Zr에 대한 형성에너지의 계산결과는 선행연구의 결과값들의 중간정도이며 확산에너지의 계산결과는 제안 2의 결과에 매우 가깝다.

이러한 Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y, Zr의 계산결과들은 실험값 및 선행계산결과들과 잘 일치한다.

맺는 말

더 먼 린점원자들을 고려하여 분자정력학적방법으로 조밀육방구조에서 해석정밀형압입원자포텐셜에 의한 단빈살창점결합들의 특성계산공식들을 유도하였다.

조밀육방금속들인 Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y, Zr의 단빈살창점특성들에 대한 계산결과들은 선행결과들과 잘 일치하였다.

참고 문헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 2, 80, 주체102(2013).
- [2] Journal of Kim Il Sung University(Natural Science), 3, 3, 57, Juche103(2014).
- [3] Hakson Jin et al.; Appl. Phys., A 120, 189, 2015.
- [4] 陶杰 等; 材料科学基础, 化学工业出版社, 334, 2006.

주체105(2016)년 9월 5일 원고접수

Characteristics of Mono-Vacancy Lattice Point Defect in HCP Metals

Jin Hak Son

We derived the formulas on the characteristics of mono-vacancy lattice point defect of HCP structure with molecular static method considering farther neighbor atoms on the basis of the potential form of the precise analytical embedded atom method. And we calculated the characteristics of mono-vacancy lattice point defect of Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y and Zr as the HCP metals.

Key words: PAEAM, HCP metal, mono-vacancy lattice point defect, formation energy