

해석정밀형삽입원자방법에 의한 조밀룩방구조 Zr-X 2원합금들의 형성엔탈피와 희석열계산

리준일, 진학선

해석수정형삽입원자방법[1-3]을 개선하여 1개 원자가 차지하는 체적이 일정한 조건에서 체심립방, 면심립방, 조밀룩방구조들에서의 결합에너지를 계산결과와 실험결과와의 일치성을 훨씬 높이고 Ag, Au, Cu의 구조안정성문제를 해결할수 있는 해석정밀형삽입원자방법[5-8]이 제기되었다.

논문에서는 해석정밀형삽입원자방법포텐셜을 조밀룩방구조의 Zr-X 2원합금의 형성엔탈피와 희석열계산에 적용하기 위한 문제를 고찰하였다.

리론 및 방법

조밀룩방금속에 대한 해석정밀형삽입원자방법에서 2체포텐셜의 형식은 다음과 같다.[6]

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

여기서 $r_i (i=1, 2, \dots)$ 는 가장 안정한 평형상태의 조밀룩방결정에서의 i 번째 린접거리를 표시한다. 또한 r_5 와 r_c 에서의 강화된 편속원활조건을 리용하여 $k_j (j=-1 \sim 4)$ 로부터 $l_j (j=0 \sim 7)$ 를 결정하는 식들은 선행연구[6]에서와 일치한다. 선행연구[3]에서와는 달리 조밀룩방-체심립방 혹은 조밀룩방-면심립방구조사이의 결합에너지를 입력파라미터로 더 받아들이었다.

선행연구[8]에서 제기한 합금포텐셜형식은 $\phi^{ab}(r) = [\phi^a(r)f^b(r)/f^a(r) + \phi^b(r)f^a(r)/f^b(r)]/2$ 이다. 여기서 첨자 a와 b는 각각 합금원소 a와 b를 의미한다. 전자밀도함수 $f^a(r)$ 와 $f^b(r)$ 에 들어가는 전자밀도파라미터 f_e^a 와 f_e^b 는 식 $f_e = [(E_c - E_{1f})/\Omega]^{3/5}$ 으로부터 결정한다.[3] 조밀룩방-조밀룩방 2원합금의 살창상수는 $a = (1-x)a^a + xa^b$ 에 의하여 결정하며 여기서 a^a , a^b 는 각각 가장 안정한 평형상태에서 합금원소 a로만 이루어진 조밀룩방결정과 합금원소 b로만 이루어진 조밀룩방결정의 살창상수이다. 해석수정형삽입원자방법포텐셜을 리용하여 조밀룩방-조밀룩방 2원합금의 형성엔탈피를 계산하는 공식은 다음과 같다.

$$\Delta H = \left[E_c^a + \frac{1}{2} \Phi^a + F^a(\rho) + M^a(P) \right] (1-x) + \left[E_c^b + \frac{1}{2} \Phi^b + F^b(\rho) + M^b(P) \right] x \quad (2)$$

여기서 조밀룩방금속에 대한 2체포텐셜함수의 절단반경[4]을 $r_c = (6a + \sqrt{a^2 + c^2})/4 > r_7$ 로 설정[2]한것과 실제조밀룩방구조의 특성을 고려하면 합금원소 a와 b의 2체포텐셜에 네르기들은 각각 다음과 같이 된다.

$$\Phi^a(r) = [6\phi^a(r_1) + 6\phi^a(r_2) + 6\phi^a(r_3) + 2\phi^a(r_4) + 12\phi^a(r_5) + 6\phi^a(r_6) + 12\phi^a(r_7)](1-x) + [6\phi^{ab}(r_1) + 6\phi^{ab}(r_2) + 6\phi^{ab}(r_3) + 2\phi^{ab}(r_4) + 12\phi^{ab}(r_5) + 6\phi^{ab}(r_6) + 12\phi^{ab}(r_7)]x \quad (3)$$

$$\Phi^b(r) = [6\phi^b(r_1) + 6\phi^b(r_2) + 6\phi^b(r_3) + 2\phi^b(r_4) + 12\phi^b(r_5) + 6\phi^b(r_6) + 12\phi^b(r_7)]x + [6\phi^{ab}(r_1) + 6\phi^{ab}(r_2) + 6\phi^{ab}(r_3) + 2\phi^{ab}(r_4) + 12\phi^{ab}(r_5) + 6\phi^{ab}(r_6) + 12\phi^{ab}(r_7)](1-x) \quad (4)$$

여기서 $\rho = (1-x)\rho^a + x\rho^b$, $P = (1-x)P^a + xP^b$ 이고 전자밀도함수의 절단반경을 $r_{cf} = 2a + \left(\sqrt{13a^2/3 + c^2/4} - 2a \right) \cdot \frac{3}{4} > r_8$ 로 설정한것을 고려하면 ρ^a , ρ^b , P^a , P^b 들은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \rho^a &= N_1 f^a(r_1) + N_2 f^a(r_2) + N_3 f^a(r_3) + N_4 f^a(r_4) + N_5 f^a(r_5) + N_6 f^a(r_6) + N_7 f^a(r_7) + N_8 f^a(r_8) \\ P^a &= N_1 [f^a(r_1)/r_1]^2 (r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta r_{1z}^2) + N_2 [f^a(r_2)/r_2]^2 (r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta r_{2z}^2) + \\ &+ N_3 [f^a(r_3)/r_3]^2 (r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta r_{3z}^2) + N_4 [f^a(r_4)/r_4]^2 (r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta r_{4z}^2) + \\ &+ N_5 [f^a(r_5)/r_5]^2 (r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta r_{5z}^2) + N_6 [f^a(r_6)/r_6]^2 (r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta r_{6z}^2) + \\ &+ N_7 [f^a(r_7)/r_7]^2 (r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta r_{7z}^2) + N_8 [f^a(r_8)/r_8]^2 (r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta r_{8z}^2) \\ \rho^b &= N_1 f^b(r_1) + N_2 f^b(r_2) + N_3 f^b(r_3) + N_4 f^b(r_4) + N_5 f^b(r_5) + N_6 f^b(r_6) + N_7 f^b(r_7) + N_8 f^b(r_8) \\ P^b &= N_1 [f^b(r_1)/r_1]^2 (r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta r_{1z}^2) + N_2 [f^b(r_2)/r_2]^2 (r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta r_{2z}^2) + \\ &+ N_3 [f^b(r_3)/r_3]^2 (r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta r_{3z}^2) + N_4 [f^b(r_4)/r_4]^2 (r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta r_{4z}^2) + \\ &+ N_5 [f^b(r_5)/r_5]^2 (r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta r_{5z}^2) + N_6 [f^b(r_6)/r_6]^2 (r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta r_{6z}^2) + \\ &+ N_7 [f^b(r_7)/r_7]^2 (r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta r_{7z}^2) + N_8 [f^b(r_8)/r_8]^2 (r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta r_{8z}^2) \end{aligned} \quad (5)$$

여기서 $N_i (i=1, 2, \dots, 8)$ 는 조밀룩방결정에서 제 i 번째 린접원자수로서 6, 6, 6, 2, 12, 6, 12, 6이다.

희석열계산에서는 선행연구[7]의 방법을 리용하여 4가지 요인에 의한 에네르기변화량을 고려하였다. 조밀룩방금속에 대한 해석정밀형삽입원자방법포텐셜에서 2체포텐셜의 절단반경을 $r_7 \sim r_8$ 에서 설정하였으므로 용매금속 a에서 원자 하나를 이동시키는것으로 하여 생기는 에네르기변화량은 다음과 같다.

$$E_1 = -F^a(\rho_e^a) - N_1 \phi^a(r_1^a) - N_2 \phi^a(r_2^a) - N_3 \phi^a(r_3^a) - N_4 \phi^a(r_4^a) - N_5 \phi^a(r_5^a) - N_6 \phi^a(r_6^a) - N_7 \phi^a(r_7^a) \quad (6)$$

여기서 ρ_e^a 는 가장 안정한 평형상태에서의 용매금속 a에서 살창원자위치에서의 전자밀도이며 용매금속 a에 1개의 용질원자 b를 삽입하는것으로 하여 생기는 에네르기변화량은

$$E_2 = F^b(\rho_e^a) + N_1 \phi^{ab}(r_1^a) + N_2 \phi^{ab}(r_2^a) + N_3 \phi^{ab}(r_3^a) + N_4 \phi^{ab}(r_4^a) + N_5 \phi^{ab}(r_5^a) + N_6 \phi^{ab}(r_6^a) + N_7 \phi^{ab}(r_7^a) \quad (7)$$

이다.

조밀룩방금속에 대한 해석정밀형삽입원자방법포텐셜에서 설정된 전자밀도함수의 절

단반경을 $r_8 \sim r_9$ 에서 설정한것을 고려하면 용매금속 a에서 원자 하나가 용질원자 b로 교체된 후 주위원자들에서 전자밀도분포의 변화로 생기는 에네르기변화량은 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
 E_3 = & -(N_1 + N_2 + N_3 + N_4 + N_5 + N_6 + N_7 + N_8)F^a(\rho_e^a) + \\
 & + N_1[F^a(\rho_1) + M^a(P_1)] + N_2[F^a(\rho_2) + M^a(P_2)] + N_3[F^a(\rho_3) + M^a(P_3)] + \\
 & + N_4[F^a(\rho_4) + M^a(P_4)] + N_5[F^a(\rho_5) + M^a(P_5)] + N_6[F^a(\rho_6) + M^a(P_6)] + \\
 & + N_7[F^a(\rho_7) + M^a(P_7)] + N_8[F^a(\rho_8) + M^a(P_8)]
 \end{aligned} \quad (8)$$

여기서 $\rho_i (i=1\sim 6)$ 와 $P_i (i=1\sim 6)$ 는 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
 \rho_1 = & (N_1 - 1)f^a(r_1^a) + N_2f^a(r_2^a) + N_3f^a(r_3^a) + N_4f^a(r_4^a) + N_5f^a(r_5^a) + \\
 & + N_6f^a(r_6^a) + N_7f^a(r_7^a) + N_8f^a(r_8^a) + f^b(r_1^a) \\
 P_1 = & (N_1 - 1)[f^a(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta_{1z}^2) + N_2[f^a(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta_{2z}^2) + N_3[f^a(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta_{3z}^2) + \\
 & + N_4[f^a(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta_{4z}^2) + N_5[f^a(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta_{5z}^2) + N_6[f^a(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta_{6z}^2) + \\
 & + N_7[f^a(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta_{7z}^2) + N_8[f^a(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta_{8z}^2) + [f^b(r_1^a)]^2 \\
 \rho_2 = & N_1f^a(r_1^a) + (N_2 - 1)f^a(r_2^a) + N_3f^a(r_3^a) + N_4f^a(r_4^a) + N_5f^a(r_5^a) + N_6f^a(r_6^a) + N_7f^a(r_7^a) + N_8f^a(r_8^a) + f^b(r_2^a) \\
 P_2 = & N_1[f^a(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta_{1z}^2) + (N_2 - 1)[f^a(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta_{2z}^2) + N_3[f^a(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta_{3z}^2) + \\
 & + N_4[f^a(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta_{4z}^2) + N_5[f^a(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta_{5z}^2) + N_6[f^a(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta_{6z}^2) + \\
 & + N_7[f^a(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta_{7z}^2) + N_8[f^a(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta_{8z}^2) + [f^b(r_2^a)]^2 \\
 \rho_3 = & N_1f^a(r_1^a) + N_2f^a(r_2^a) + (N_3 - 1)f^a(r_3^a) + N_4f^a(r_4^a) + N_5f^a(r_5^a) + N_6f^a(r_6^a) + \\
 & + N_7f^a(r_7^a) + N_8f^a(r_8^a) + f^b(r_3^a) \\
 P_3 = & N_1[f^a(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta_{1z}^2) + N_2[f^a(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta_{2z}^2) + \\
 & + (N_3 - 1)[f^a(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta_{3z}^2) + N_4[f^a(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta_{4z}^2) + \\
 & + N_5[f^a(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta_{5z}^2) + N_6[f^a(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta_{6z}^2) + \\
 & + N_7[f^a(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta_{7z}^2) + N_8[f^a(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta_{8z}^2) + [f^b(r_3^a)]^2 \\
 \rho_4 = & N_1f^a(r_1^a) + N_2f^a(r_2^a) + N_3f^a(r_3^a) + (N_4 - 1)f^a(r_4^a) + N_5f^a(r_5^a) + N_6f^a(r_6^a) + \\
 & + N_7f^a(r_7^a) + N_8f^a(r_8^a) + f^b(r_4^a) \\
 P_4 = & N_1[f^a(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta_{1z}^2) + N_2[f^a(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta_{2z}^2) + \\
 & + N_3[f^a(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta_{3z}^2) + (N_4 - 1)[f^a(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta_{4z}^2) + \\
 & + N_5[f^a(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta_{5z}^2) + N_6[f^a(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta_{6z}^2) + \\
 & + N_7[f^a(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta_{7z}^2) + N_8[f^a(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta_{8z}^2) + [f^b(r_4^a)]^2 \\
 \rho_5 = & N_1f^a(r_1^a) + N_2f^a(r_2^a) + N_3f^a(r_3^a) + N_4f^a(r_4^a) + (N_5 - 1)f^a(r_5^a) + N_6f^a(r_6^a) + N_7f^a(r_7^a) + N_8f^a(r_8^a) + f^b(r_5^a) \\
 P_5 = & N_1[f^a(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta_{1z}^2) + N_2[f^a(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta_{2z}^2) + N_3[f^a(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta_{3z}^2) + \\
 & + N_4[f^a(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta_{4z}^2) + (N_5 - 1)[f^a(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta_{5z}^2) + N_6[f^a(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta_{6z}^2) + \\
 & + N_7[f^a(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta_{7z}^2) + N_8[f^a(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta_{8z}^2) + [f^b(r_5^a)]^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \rho_6 &= N_1 f^a(r_1^a) + N_2 f^a(r_2^a) + N_3 f^a(r_3^a) + N_4 f^a(r_4^a) + N_5 f^a(r_5^a) + (N_6 - 1) f^a(r_6^a) + N_7 f^a(r_7^a) + N_8 f^a(r_8^a) + f^b(r_6^a) \\
 P_6 &= N_1 [f^a(r_1)/r_1]^2 (r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta_{1z}^2) + N_2 [f^a(r_2)/r_2]^2 (r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta_{2z}^2) + N_3 [f^a(r_3)/r_3]^2 (r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta_{3z}^2) + \\
 &\quad + N_4 [f^a(r_4)/r_4]^2 (r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta_{4z}^2) + N_5 [f^a(r_5)/r_5]^2 (r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta_{5z}^2) + (N_6 - 1) [f^a(r_6)/r_6]^2 (r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta_{6z}^2) + \\
 &\quad + N_7 [f^a(r_7)/r_7]^2 (r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta_{7z}^2) + N_8 [f^a(r_8)/r_8]^2 (r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta_{8z}^2) + [f^b(r_6^a)]^2 \\
 \rho_7 &= N_1 f^a(r_1^a) + N_2 f^a(r_2^a) + N_3 f^a(r_3^a) + N_4 f^a(r_4^a) + N_5 f^a(r_5^a) + N_6 f^a(r_6^a) + (N_7 - 1) f^a(r_7^a) + N_8 f^a(r_8^a) + f^b(r_7^a) \\
 P_7 &= N_1 [f^a(r_1)/r_1]^2 (r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta_{1z}^2) + N_2 [f^a(r_2)/r_2]^2 (r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta_{2z}^2) + N_3 [f^a(r_3)/r_3]^2 (r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta_{3z}^2) + \\
 &\quad + N_4 [f^a(r_4)/r_4]^2 (r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta_{4z}^2) + N_5 [f^a(r_5)/r_5]^2 (r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta_{5z}^2) + N_6 [f^a(r_6)/r_6]^2 (r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta_{6z}^2) + \\
 &\quad + (N_7 - 1) [f^a(r_7)/r_7]^2 (r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta_{7z}^2) + N_8 [f^a(r_8)/r_8]^2 (r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta_{8z}^2) + [f^b(r_7^a)]^2 \\
 \rho_8 &= N_1 f^a(r_1^a) + N_2 f^a(r_2^a) + N_3 f^a(r_3^a) + N_4 f^a(r_4^a) + N_5 f^a(r_5^a) + N_6 f^a(r_6^a) + N_7 f^a(r_7^a) + (N_8 - 1) f^a(r_8^a) + f^b(r_8^a) \\
 P_8 &= N_1 [f^a(r_1)/r_1]^2 (r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta_{1z}^2) + N_2 [f^a(r_2)/r_2]^2 (r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta_{2z}^2) + N_3 [f^a(r_3)/r_3]^2 (r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta_{3z}^2) + \\
 &\quad + N_4 [f^a(r_4)/r_4]^2 (r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta_{4z}^2) + N_5 [f^a(r_5)/r_5]^2 (r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta_{5z}^2) + N_6 [f^a(r_6)/r_6]^2 (r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta_{6z}^2) + \\
 &\quad + N_7 [f^a(r_7)/r_7]^2 (r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta_{7z}^2) + (N_8 - 1) [f^a(r_8)/r_8]^2 (r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta_{8z}^2) + [f^b(r_8^a)]^2
 \end{aligned} \tag{9}$$

a원자를 b원자로 교체하는것으로 하여 생기는 결합에네르기변화량은 다음과 같다.

$$E_4 = -E_c^a + E_c^b \tag{10}$$

따라서 총에네르기변화량 즉 희석열은 E_1, E_2, E_3, E_4 들의 합으로 된다.

결과 및 분석

6종의 조밀육방구조의 Zr-X 2원합금들에 대한 합금원소의 물분률에 따르는 형성엔탈피계산결과들은 그림과 같다. 그림에서 보는바와 같이 Zr-Co, Zr-Re, Zr-Ru합금들에 대한 계산결과들은 계산결과들중에서 실험결과와 제일 잘 일치하며 특히 Zr-Co, Zr-Ru와 같은 Zr합금들에 대한 계산결과들은 실험결과와 거의 일치한다는것을 알수 있다. Zr-Re에 대한 계산결과들은 실험결과와 합금원소의 물분률이 0.3일 때에만 크게 차이내고 다른 물분률들에서는 거의 일치한다.

그러나 이 합금에서도 해석수정형삽입원자방법의 결과[1]에 비하여 미에데마리론결과[2]와의 일치정도가 훨씬 개선되었다. 또한 Zr-Hf합금들에 대하여서도 해석수정형삽입원자방법에 의한 계산결과[1]에서 나타나던 진동특성도 기본적으로 없어졌다. Zr-Re에 대한 계산결과들은 비록 실험결과와 차이하지만 미에데마리론의 결과[2]와 거의 일치한다. 이것은 해석정밀형삽입원자방법을 여러 물분률을 가진 Zr-X 2원합금연구에 효과적으로 리용할수 있다는것을 보여준다. 해석수정형삽입원자방법의 결과들에 비하여 정확성이 훨씬 높아진 것은 해석정밀형삽입원자방법포텐셜과 더 먼 린접원자들의 영향까지 고려하여 유도된 공식들의 정확성에 의한것이다.

8종의 Zr-X 2원합금들의 희석열계산 및 선행연구결과들은 표와 같다. 표에서 첫 행은 론문계산결과, 둘째 행은 해석수정형삽입원자방법계산결과, 셋째 행은 해석형삽입원자방법계산결과, 넷째 행은 미에데마리론계산결과, 다섯째 행은 실험결과[1]이다.

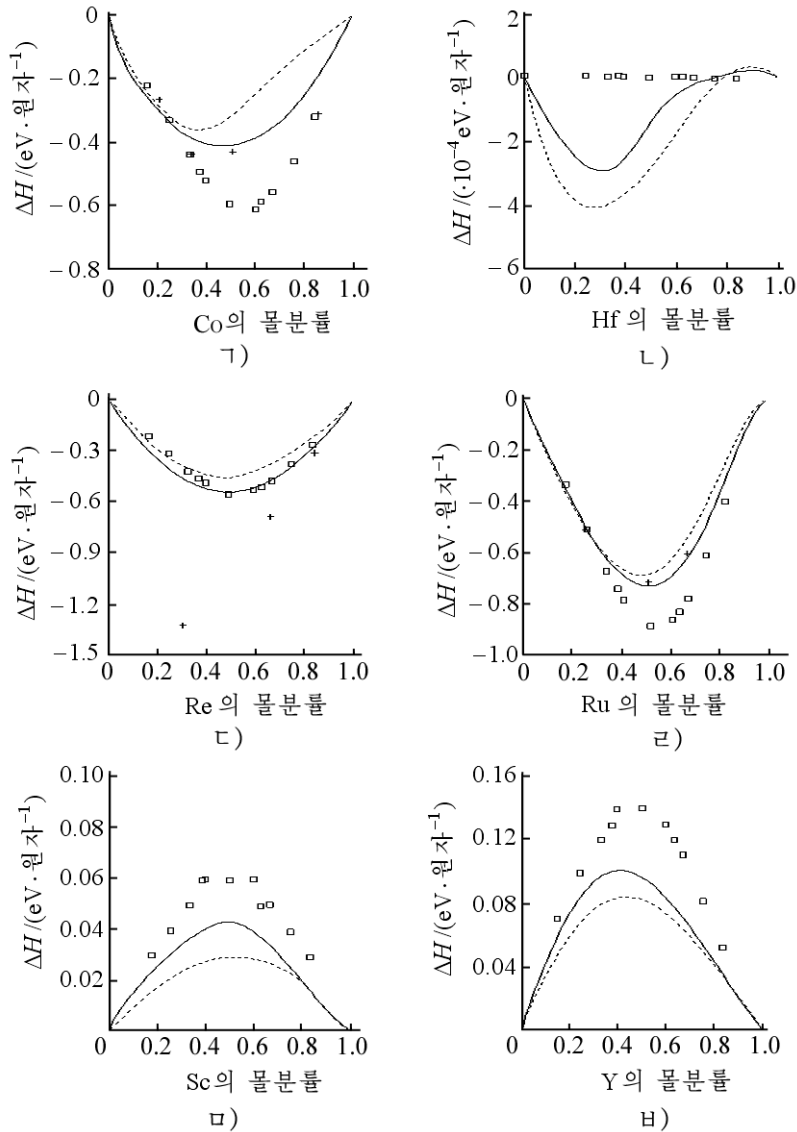


그림. 6종의 조밀육방구조의 Zr-X 2원합금들에 대한
합금원소의 몰분율에 따르는 형성엔탈피계산결과
실선은 론문계산결과, 점선은 해석수정형압입원자방법계산결과,
□는 미에데마리론계산결과, +는 실험결과[1]

표. 8종의 Zr-X 2원합금들의 희석열계산 및 선행연구[1]결과

용질	Co	Hf	Mg	Re	Ru	Sc	Ti	Y
용매(Zr)	-1.60	-0.01	0.13	-1.48	-2.46	0.15	-0.02	0.41
	-2.61	-0.17	-	-1.89	-3.84	0.05	-0.45	0.10
용매(Zr)	-0.30	-0.01	-	-1.05	-0.49	0.05	0.04	0.17
	-1.42	-0.01	0.13	-1.34	-2.21	0.17	-0.01	0.44
	-	0	-	-	-	-	-0.03	-

표에서 보는바와 같이 Zr-Hf, Zr-Ti합금들에 대하여서는 다른 계산결과들에 비하여

실험결과와 더 잘 일치하며 특히 해석수정형삽입원자방법의 결과에 비하여 그 일치정도가 뚜렷이 개선되었다. 또한 Zr-Hf, Zr-Re, Zr-Sc, Zr-Ti, Zr-Y에서 계산결과와 미에데마리론계산결과는 거의 일치한다. 특히 Zr-Mg에서 계산결과는 미에데마리론의 계산결과와 완전히 일치하였다. Zr-Co, Zr-Ru, Zr-Ti에서 선행연구결과들과 미에데마리론계산결과는 잘 일치하지 않지만 계산결과들은 잘 일치한다.

표로부터 계산결과는 총체적으로 선행연구결과들보다 실험 및 미에데마리론의 계산결과와 잘 일치하는것으로 하여 믿음성이 더 높으며 해석정밀형삽입원자방법이 이미 제기된 해석형삽입원자방법들에 비하여 보다 정확하다는것을 알수 있다.

맺 는 말

해석정밀형삽입원자방법을 적용하여 6종의 조밀육방구조의 Zr-X 2원합금들에 대한 합금원소의 몰분률에 따르는 형성엔탈피를 계산하였다. 또한 해석정밀형삽입원자방법을 적용하여 조밀육방-조밀육방 2원합금에서 희석열을 계산하기 위한 공식들을 유도하고 8종의 Zr-X 2원합금들의 희석열을 평가하였다.

참 고 문 헌

- [1] B. Zhang et al.; Theory of Embedded Atom Method and its Application to Materials Science-Atomic Scale Materials Design Theory, Hunan University, 291~332, 2003.
- [2] W. Hu et al.; Comp. Mater. Sci., **23**, 175, 2002.
- [3] W. Hu et al.; J. Phys. Condens. Matt., **13**, 1193, 2001.
- [4] H. Jin et al.; Appl. Phys., A **12**, 189, 2015.
- [5] H. Jin et al.; Appl. Phys., A **123**, 257, 2017.
- [6] C. Jon et al.; Rad. Eff. Def. Sol., **190**, 575, 2017.
- [7] R. A. Johnson; Phys. Rev., **B 39**, 17, 12554, 1989.
- [8] B. Zhang, Y. Quyang; Z. Phys., **B 92**, 431, 1993.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Calculation of Formation Enthalpies and Dilution Heats of Hexagonal Close Packed Zr-X Binary Alloys by Precise Analytic Embedded Atom Method

Ri Jun Il, Jin Hak Son

We calculated the formation enthalpies of six kinds of the hexagonal close packed Zr-X binary alloys as functions of the concentrations of alloy elements by applying the precise analytic embedded atom method. We also derived the formulas to calculate the dilution heats of the hcp-hcp binary alloys with the precise analytic embedded atom method and evaluated the dilution heats of eight kinds of the Zr-X binary alloys.

Key words: formation enthalpy, dilution heat