

금속-비금속 화합물의 탄성상수에 미치는 결정구조와 이온결합성의 영향  
 ( Effects of Crystal Structure and Ionicities on Elastic Constants  
 of Metal- Nonmetal Compounds )

한국과학기술원 서 주원 이 혁모

1. 서 론

일반적으로 재료의 탄성성질은 원자구조 및 결합기구에 큰 연관성이 있다고 알려져 있다. 특히, 이온결합 또는 공유결합등의 결합기구는 이온결합성(ionicity)의 크기에 의해 보다 명확히 결정되는 경향을 보인다. 따라서, 여러 금속-비금속 화합물의 탄성상수 즉, 전단상수 및 Poisson 비의 변화를 결정구조와 이온결합성의 크기에 의해 정성적으로 분석하여 보았다.

2. 계산방법

1) 이온결합성의 크기( $f_i$ )

가장 간단한  $MN_X^{8-N}$ (M: 금속, X: 비금속) 결정구조를 만족하는 화합물은 유전이론(dielectric theory)을 이용하여 계산한 Phillips 와 Van Vechten(PV) 의 값을 사용하였다. 이 구조로부터 벗어나 다중결합을 갖는 화합물에 대해서는 PV 의 기본이론에 평균배위수를 보정한 Levin 의 계산값을 인용하였다.

2) 전단상수( $G$ )

사면체구조(tetrahedral structure)를 갖는 화합물은 Valence Force Field(VFF) 모델을 사용하여 전단상수( $G_s$ ) 값을 계산하였고, Rocksalt 와 CsCl 구조를 갖는 화합물에 대해서는 VFF 모델에 bond charge 개념을 보정하여 전단상수( $G_s$ )를 계산하였다. 그리고, non-central force 를 포함한 Voight 의 전단상수( $G_v$ )를 계산하여  $G_s$  값과 비교하여 보았다.

3) Poisson 비( $\nu$ )

대부분의 화합물에 대해서는 일정한 변형(constant strain)을 가정하는 Voight 의 평균값을 단결정의 탄성상수 즉, 부피상수(bulk modulus)와 전단상수를 이용하여 계산하였다. 그밖의 화합물은 문헌상의 값을 인용하였다.

3. 결과 및 고찰

Poisson 비는 부피상수보다 전단상수에 의해 크게 좌우되는데, 사면체 배위를 하는 Zinc-Blende 와 Wurtzite 구조 화합물의 전단상수 값은  $f_i$  가 증가함에 따라 감소하여 Poisson 비를 증가시키는 경향을 나타낸다. 그러나,  $f_i$  가 임계값( $f_i = 0.785$ ) 이상으로 증가하면 강한 이온결합을 하는 육면체 배위의 Rocksalt 구조 화합물 또는 CsCl 구조 화합물이 더 안정해 진다. 이들 화합물의 전단상수 값은  $f_i$  가 증가함에 따라 증가하여 Poisson 비를 감소시키는 경향을 보인다. 이런 현상은 Keating-Martin 의 bond bending force 즉, non-central force 효과를 고려하여 설명할 수 있다.

4. 참고문헌

- 1) J.C.Phillips, Rev.Mod.Phys., 42 (1970) 317.
- 2) R.M.Martin, Phys.Rev B., 1 (1970) 4005.
- 3) N.S.Gillis, Phys.Rev B., 3 (1971) 1482.

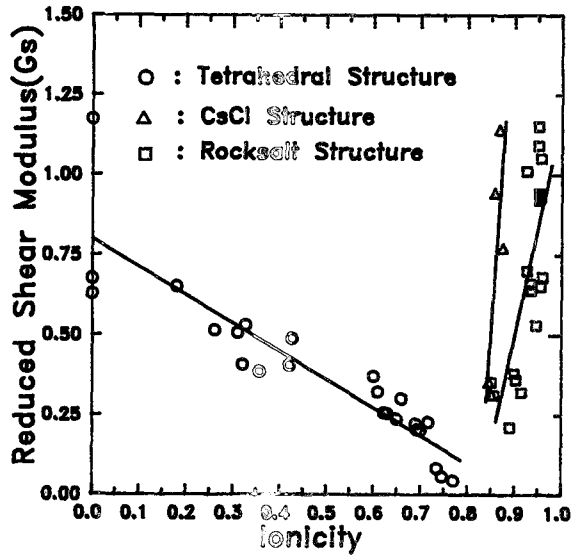


Fig.1 Reduced shear modulus  $G_s$  as a function of ionicity.

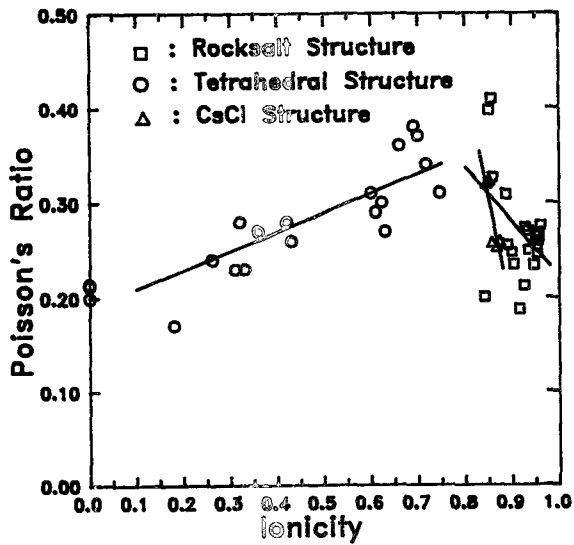


Fig.2 Poisson's ratio of as function of ionicity.