

X-선 회절에 의한 비정질 금속 $Fe_{78}Si_9B_{13}$ 의 구조분석

한서대학교 물리학과 이희복*
충북대학교 물리학과 김선옥, 유성초

Structural analysis of amorphous alloy $Fe_{78}Si_9B_{13}$ by X-ray diffraction

Dept. of Physics, Hanseo Univ., H. B. Lee*
Dept. of Physics, Chung-buk National Univ., S. O. Kim, S. C. Yu

I. 서론

액체와 결정의 중간 단계인 비정질의 구조 분석은 비정질체의 물성분석에 필요하다. 본 연구는 비정질 자성 합금 $Fe_{78}Si_9B_{13}$ 의 X-선 회절상을 분석하여 근접 원자간의 원자 분포를 나타내는 원자분포함수(atomic distribution function), 동경분포함수(radial distribution function: RDF) 등을 계산하였다. 이같은 계산은 최인접원자수 및 원자분포를 알려 주므로 비정질 자성체의 특성을 미시적으로 연구하는데 큰 도움이 된다.

II. 실험방법 및 분석

초급랭법으로 제작된 리본형의 시료를 X-선 회절장치에 넣고 Mo K α 선(0.7107Å)을 사용하여 X-선 회절상을 측정하였다. 이 때 2θ 는 5°에서 80°까지 측정하였으며, 총 측정에 20시간이 소요되었다. 측정된 회절상에서 편광인자, 흡수계수 및 Background 등을 보정하고, 원자의 Hartree-Fock wave function으로 부터 산출한 scattering factor를 사용하여 보정된 회절상(corrected intensity)을 전자단위(electronic unit)로 규격화하였다.

규격화된 회절상으로부터 계산한 structure factor $a(k)$ 를 Fourier 적분하여 원자분포함수(atomic distribution: $G(r)$)를 계산하였다. 즉,

$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty k (a(k) - 1) \sin(kr) dk$$

이다. 또한, 계산된 $G(r)$ 로 동경원자분포함수(radial distribution function: $RDF(r)$)를 계산하였다. $RDF(r)$ 는 $4\pi r^2 \rho_0 + r G(r)$ 로 정의되며 여기서 ρ_0 는 평균원자밀도이다. 최인접 원자수는 RDF 의 첫번째 peak 아래부분의 면적을 계산하여 얻을 수 있으나, 보다 정밀하게는 첫번째 peak를 Gaussian 분포로 fitting하여, 그 아래 면적을 계산하여 구하는 것이 바람직하다.

III. 분석결과 및 고찰

측정된 회절상과 분석된 결과들은 모두 전형적인 비정질 금속의 구조를 나타내었다. 이 시료의 최인접 원자간 평균거리는 2.595Å이었으며, 최인접 원자수는 13.5이었다. "domain-size parameter"는 대략 14.5Å이었다. 최인접 원자분포와 관련된 자성은 별도로 발표한다.

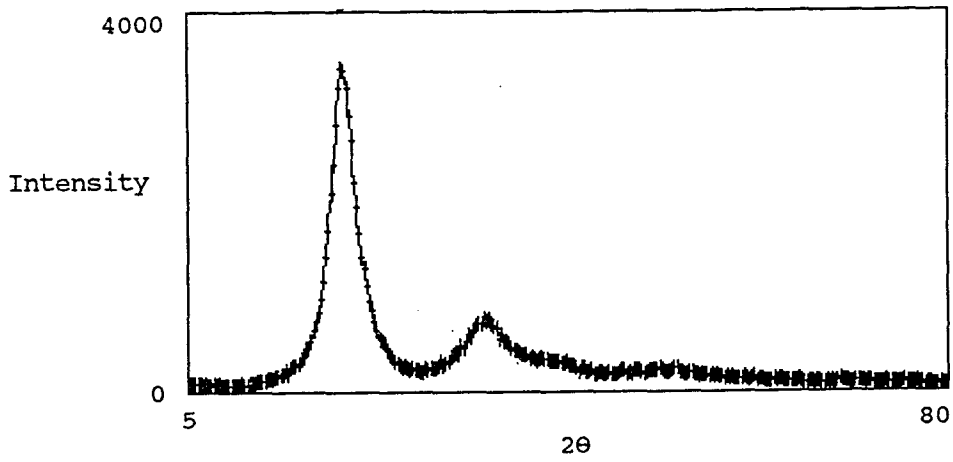


그림 1. X - 선 회절상

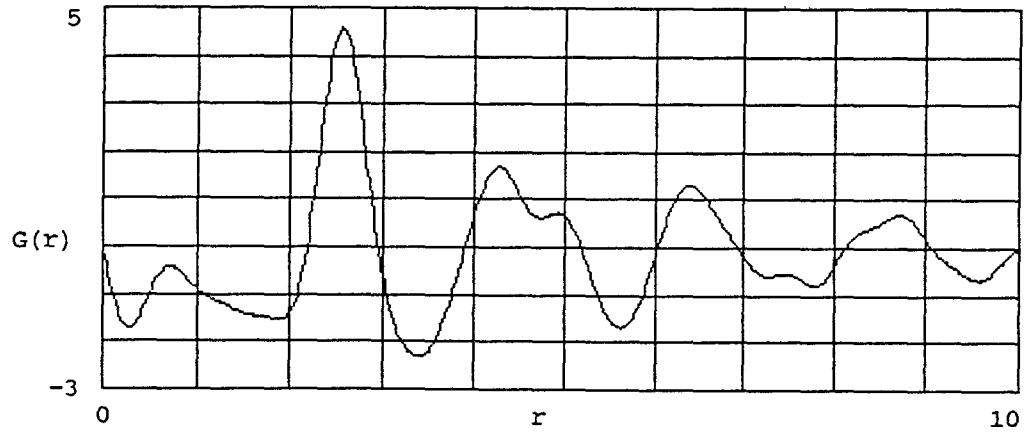


그림 2. 원자분포함수 $G(r)$

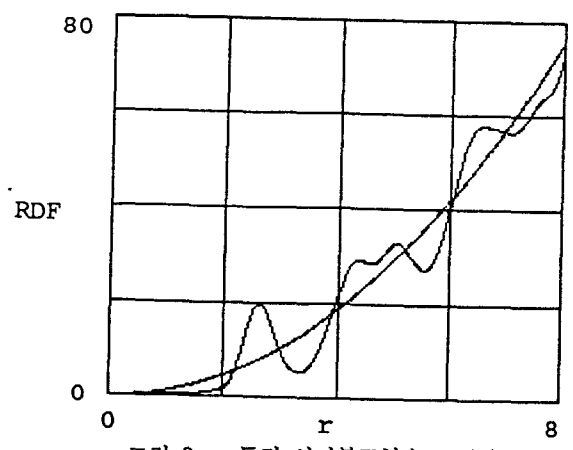


그림 3. 동경 원자분포함수 $RDF(r)$