

코발트 중의 전자상태에 미치는 3-d 천이금속원소의 영향  
(Effect of 3-d Transition Alloying Elements  
on Electronic States of Cobalt)

C-29

동의대학교 재료공학과 배동수  
(614-714) 부산시 부산진구 가야동 산24번지  
동의대학교 공과대학 재료공학과 전임강사  
TEL:(051)890-1719, FAX:(051)890-1619

### 1. 서론

오늘날과 같이 컴퓨터가 발달한 시대에는, 계산기에 의한 합금설계이론의 중요성이 점차 증가하고 있다고 말할 수 있다. 본 연구의 목적은, Co기 합금설계를 위한 정보를 얻기 위하여, Co기 초합금의 고온강도 특성에 중요한 역할을 하는 3-d 천이금속원소가 Co의 전자상태의 특성에 미치는 영향을 조사하는 데 두었으며, 이를 위한 전자론적 접근을 DV(Discrete-Variational)-X $\alpha$  클러스터(cluster) 계산법을 이용하여 제안하였다.

### 2. 실험방법

#### DV-X $\alpha$ 클러스터 계산법

DV-X $\alpha$  클러스터 계산법은 금속원자의 집합체(클러스터)에 대하여 분자궤도법에 의한 계산을 행한 것으로, Slater가 제안한 X $\alpha$  포텐셜, 즉 전자의 교환상호작용포텐셜,  $V_{xc}$ 는

$$V_{xc}(r) = -3\alpha [3/8\pi \cdot \rho(r)]^{1/3}$$

와 같이, 위치 r에서의 전자밀도,  $\rho(r)$ 의 1/3승에 비례한다는 간단한 형으로 근사되며, 파라메타  $\alpha$ 는 0.7로 고정시켜 사용하고 있다.

#### 클러스터 모델

Co합금은 상온에서는 hcp구조를 가지나, 고온에서는 fcc구조를 가지므로, 본 연구에서는 fcc구조의 MCo<sub>18</sub>모델을 이용하였다. 이 모델은, 중심에 어느 합금원소 M과 그 주위의 제 1근접위치에 12개의 Co원자 및 제 2근접위치에 6개의 Co원자들로 둘러 싸여져 있는 구조로 되어 있다. 계산을 위해 사용된 합금원소인 3-d 천이금속을 중심의 M원자와 치환시켜 계산을 행하였다. 그리고, 이 클러스터 모델에 사용한 격자상수는 순 Co의 격자상수 0.3544nm로 정하였다.

### 3. 실험결과

- 1) 본 계산에 의한 fcc Co의 전자상태밀도는 밴드계산의 결과와 잘 일치하였다.
- 2) 두 개의 합금원자, 결합차수(Bo)와 d-궤도 에너지준위(Md)는, 3-d천이금속에서 원자번호의 증가에 따라 단조롭게 감소하였다.
- 3) Md와 원자반경은 전기음성도가 증가할수록 감소하였다.
- 4) Ti, V 등의 합금원소를 첨가한 경우, 이들의 합금원소에서 Co로 전하이행이 일어나고, 이온결합적인 상호작용에 의해 강한 결합이 생긴다.