

비정질 재료 변형 해석을 위한 가중보로노이법

Weighted Voronoi Analysis for Deformation of Metallic Glasses

박 준 영*
Park, Junyoung

요 약

보로노이 다면체 기법은 금속비정질재료에서의 20면체 Short-Range order와 같은 원자 구조를 분석하는 가장 유용한 도구 중에 하나이다. 기존의 보로노이 다면체 기법에서는 다면체의 평면은 다른 크기를 가진 원자간 거리의 중간에 위치하였다. 하지만, 이러한 방법은 필연적으로 분석 오차를 발생시킨다. 대안적인 방법으로서 근평면법이라고 불리는 가중 보로노이법을 사용하면, 원자의 크기의 차이를 고려하여 해석할 수 있다. 본논문에서는 이러한 근평면법을 여러 가지의 성분비를 가진 비정질 재료에 적용하여 기존의 보로노이법과 비교 분석하였다. 결과적으로 보로노이 인덱스, 원자체적 분포, 보로노이 다면체 분포, 20면체의 공간 분포등등에서 기존의 보로노이법은 완전히 잘못된 결과를 보여줄 수도 있다는 것이 발견되었다.

keywords : Voronoi Analysis, Molecular Dynamics, Metallic Glasses

1. 서 론

비정질 금속의 원자구조에 대한 실험에 대해서는 Neutron Diffraction법을 가장 많이 사용하며, 전산모사에서의 원자구조들을 대상으로 하여서는, 보로노이 다면체 법이 가장 흔하게 사용되어진다. 그러나, 이러한 보로노이법을 사용하여 원자구조를 분석하는 여러 연구들은, 계를 구성하는 원자들의 원자반경의 차이 때문에, 태생적으로 오차를 가지고 있다.

비정질 금속의 원자 구조와 마찬가지로, 생물학에서도 원자레벨에서의 단백질 밀도는 Cavity-filling 변종의 열적 안정성을 예측하기 위해서 정확하게 측정되어야만 한다. 이러한 이유로 인해서, 생물학 분야의 연구자들이 원자의 크기에 비례하여 면을 나누는 여러 방법들을 제안하였다. 이중에서, Gellatly와 Finney는 두개의 구로부터 같은 접선길이를 가지는 점들의 궤적에 해당하는 근평면을 이용하였다. 근평면법을 이용하여 원자의 반지름의 차이를 고려해서 원자 구조와 체적을 성공적으로 계산할 수 있다.

2. 근평면법 (Radical Plane Method)

실제 원자 반지름의 차이를 고려하고 Vertex error를 피하기 위하여, Gellatly와 Finney는 근평면법을 제안한다. 두개의 구의 근 평면은 두개의 구로부터의 접선의 길이가 같은 점들의 궤적을 나타낸다. 이것은 아래와 같은 식으로 나타낼 수 있다.

$$(x_i - x_v)^2 + (y_i - y_v)^2 + (z_i - z_v)^2 - r_i^2 = L_c^2 \quad i = 1 - 4 \quad (1)$$

* 정희원 • 금오공과대학교 기계설계공학과 교수 pcello@kumoh.ac.kr

여기서, (x_i, y_i, z_i) 는 각 원자의 좌표이고, (x_v, y_v, z_v) 는 꼭지점의 좌표이고, r_i 는 각 원자의 반지름을 나타내고, L_t 는 꼭지점에서 점점까지의 거리를 나타낸다. 일반적인 보로노이법과 마찬가지로 근평면법에서도, L_t 보다 작은 거리에서는 다른 원자가 존재하지 않는다.

3. 해석결과 및 분석

3.1. 원자 체적의 분포

분자동력학을 이용하여 다른 성분을 가진 2계 시스템(원자반경비, B/A=0.5)에 대한 원자체적에서는 그림 1에 보인 것처럼 현격한 차이를 보여주고 있으며, 체적이 적은 원자보다는 체적이 큰 원자가 대체로 더 큰 오차를 보여주고 있다. 그림 2에 보인것과 같이 이러한 현상은 원자구성비에 따라 많은 차이를 보여주고 있다.

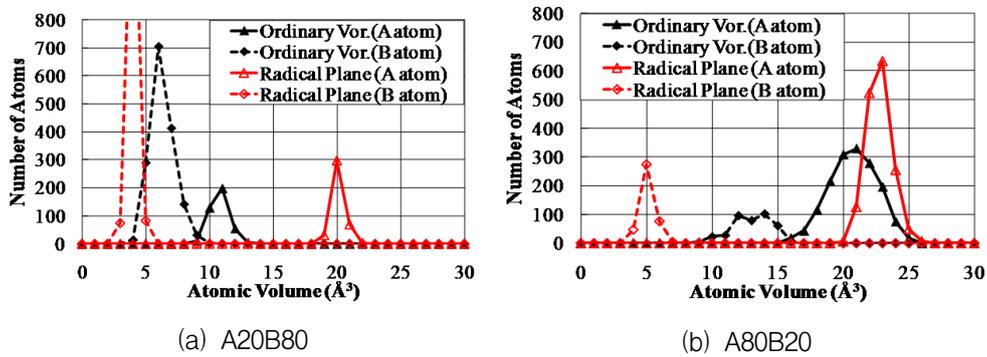


그림 1 다른 성분을 가진 2계 시스템에서의 원자 체적의 분포

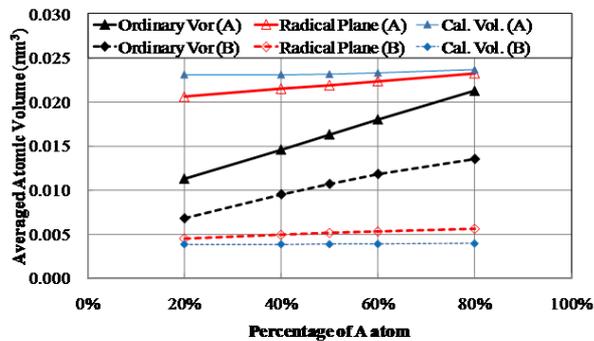


그림 2 평균 원자 체적

감사의 글

본 연구는 2009년 연구재단의 일반연구사업으로 이루어진 것으로, 본 연구를 가능케한 연구재단에 감사드립니다.(No.2009-0065745)

참고문헌

Voronoi, Z. (1908) ..., *Reine Angew Math*, 134, pp.198~204.
 Gellatly, B.J. (1908) *J Mol Biol*, 161, pp.305~312.