

## DV-X $\alpha$ 분자궤도법을 이용한 Zn alloy의 기계적 성질 예측

나혜성 · 공종판 · 김양수\* · 강정윤<sup>†</sup>

부산대학교 재료공학과  
\*한국기초과학지원연구원

### A study on the prediction of the mechanical properties of Zinc alloys using DV-X $\alpha$ Molecular Orbital Method

H. S. Na, J. P. Kong, Y. S. Kim\* and C. Y. Kang<sup>†</sup>

Department of Material Science & Engineering, Pusan Univ

\*Korea basic Science Institute

(2007년 4월 4일 받음, 2007년 4월 27일 최종수정본 받음)

**Abstract** The alloying effects on the electronic structures of Zinc are investigated using the relativistic DV-X $\alpha$ molecular orbital method in order to obtain useful information for alloy design. A new parameter which is the d orbital energy level(Md) and the bond order(Bo) of alloying elements in Zinc was introduced and used for prediction of the mechanical properties. The Md correlated with the atomic radius and the electronegativity of elements. The Bo is a measure of the strength of the covalent bond between M and X atoms. First-principles calculations of electronic structures were performed with a series of models composed of a MZn18 cluster and the electronic states were calculated by the discrete variational- X $\alpha$ method by using the program code SCAT. The central Zinc atom(M) in the cluster was replaced by various alloying elements. In this study energy level structures of pure Zinc and alloyed Zinc were calculated. From calculated results of energy level structures in MZn18 cluster, We found Md and Bo values for various elements of Zn. In this work, Md and Bo values correlated to the tensile strength for the Zn. These results will give some guide to design of zinc based alloys for high temperature applications and it is possible the excellent alloys design.

**Key words** Zinc alloy, Dv-X $\alpha$  method, Md, Bo, the prediction of the mechanical properties.

### 1. 서 론

인류는 연금술 때와 같이 오래 전부터 목적에 따라 재료 탐색을 하는 역사를 더듬어 왔으며 하나의 물리적 특성을 향상시키기 위해 수백 개의 시약과 금속재료를 혼합해 시험해 보는 방법을 통해 많은 신소재의 발견과 개발에 이바지해왔다. 그러나 이러한 많은 노력은 막대한 에너지 낭비와 함께 유해한 폐기물 증대를 가져왔었다. 현대에 들어서는 실험적인 많은 부분을 이론적 컴퓨터 계산에 의해 정확하고 높은 효율을 갖는 재료개발을 목표로 이용하는 방법들이 개발되기 시작했는데 그 중 합금 설계방법에 있어서 다양한 금속과 합금의 기계적 성질을 예측하는 전위론도 그중 하나의 방법이 될 수 있었다.<sup>1,2)</sup> 그러나 전위론에 의한 합금설계는 정량적인 기계적 성질의 예측이 불가능하였고 이에 대해 다른 방법을 모색하게 되었다. 재료의 모든 물리적 화학적 성질은 그중에 존

재하는 전자의 거동에 귀착될 수 있으므로 전자상태계산을 정확히 계산한다면 정확한 재료설계가 가능하다는 점에 중심으로 합금설계를 하는 방법이 소개되었다. 본 연구는 그 방법 중 분자궤도법(DV-X $\alpha$ )법을 이용하여 합금설계에 이용하고자 한다.<sup>3)</sup> Density Functional Theory(DFT)의 하나인 DV-X $\alpha$ 법은 Ellis와 Adachi에 의해 개발된 분자궤도법의 일종으로, 경험적 실험 data의 도움 없이 순수 이론적으로 슈레딩거 방정식의 해를 구하는 비경험적 제1원리 계산법이다. DV-X $\alpha$ 법은 Full potential를 사용하므로, 페르미에너지 부근에서의 에너지 준위 계산이 정확하고 몇 개에서 수 백개의 금속원자를 포함하는 다양한 금속 클러스터의 전자상태를 간단히 계산할 수 있으며 전자상태를 쉽게 이해할 수 있는 프로그램 툴과 금속의 내부와 표면의 국소전자상태는 물론 금속중의 불순물, 격자결함근방의 전자상태를 알 수 있으며 이를 통해 물성을 예측할 수도 있다. 또한 DV 법에서는 스핀분극한 경우의 계산도 쉽게 행할 수 있으며, 금속의 자기적 성질에 대해 논의를 하는 것도 가능하다.<sup>4)</sup>

본 연구에서는 강도와 경도가 높아 기계가공, 프레스,

<sup>†</sup>Corresponding author

E-Mail : kangcy@pusan.ac.kr (C. - Y. Kang)

스탬핑 가공 및 조립 품목에 대해 다양하고 쓰이고 있는 아연을 대상으로 DV-X $\alpha$ 법으로 계산을 하였다. 아연에 다양한 금속을 포함했을 경우에 에너지상태를 DV-X $\alpha$ 법으로 계산을 하였다. 그리고 각 첨가금속의 d 오비탈 에너지 레벨(Md)값을 측정하고 이를 통해 기계적 성질을 예측하였다. 기계적 성질을 예측한 식과 실제 아연합금과의 인장강도를 고찰하여 타당성을 검토하였다.

## 2. 실험 방법

본 연구에서는 비경험적 계산방법인 Dv-X $\alpha$ 분자궤도법(discrete variational-X $\alpha$  molecular orbital method)을 이용한 DV-SCAT 코드를 사용하여 분자 궤도의 에너지를 산출하였다.<sup>3)</sup> Dv-X $\alpha$ 분자궤도법은 분자궤도의 파동함수를 구성원자의 원자궤도에 대한 파동함수의 선형결합으로 표시하는 LCAO(linear combination of atomic orbital)법을 이용한다.

$$\Phi_k = \sum_i c_{ik} \chi_i \quad (1)$$

여기서  $\chi_i$ 는 원자궤도의 파동함수, 계수  $c_{ik}$ 는 기저함수의 분자궤도에의 기여도의 크기이며 풀어야 할 계수이며 하트리포스슬레이터(Hartree · Fock · Slater)법을 이용하여 에너지를 산출하였다.<sup>5)</sup> 구성원자의 공유결합성과 이온성을 기술하기 위해 멀리켄<sup>6)</sup>이 제안한 밀도분석을 이용한다. 분자궤도  $k$ 의 점유수를  $f_k$ 로 하면

$$Q_{ij} = S_{ij} \sum_R f_R C_{iR} C_{jR} \quad (2)$$

로 놓으면,  $Q_{ij}$ 는 원자궤도  $i$ 와  $j$ 간의 파동함수의 중첩영역에 있는 전자밀도로 고려할 수 있고, overlap population이라고 부른다. 원자 A에 속하는 원자궤도  $i$ , 원자B에 속하는 원자궤도  $j$ 에 대해서 overlap population의 합을 구한 것이 bond overlap population이 되며, A-B의 공유결합성의 강하기의 척도가 된다. 또 식(2)에 있어서  $Q_{ij}$ 의  $j$ 에 대한 전체 합

$$Q_i = \sum_j Q_{ij} \quad (3)$$

은 원자궤도  $i$ 의 orbital population으로 부르고 궤도  $i$ 에 분배된 전자수로 생각할 수 있다. 어떤 원자에 속한 궤도에 대해서  $Q_i$ 의 합을 구하면 그 원자에 속한 유효 전자수가 얻어진다. 원자번호와 유효전자수와의 차를 net charge라고 부르며, 이온성의 크기를 목적으로 한다. 이와 같이 전자밀도의 해석법은 어떻게 해도 편의적인 것인데, 분자의 전자상태를 이해하기 위해서는 유용한 것이다. 계산으로 얻어진 분자궤도 하나 하나는 프론터어 궤도로 대표되어 지듯이 분자의 성질을 알기 위해 중요한 것이다.

Fig. 1은 Dv-X $\alpha$ 법에 의한 Zn합금의 전자상태계산 흐름도를 나타내었다. Zn은 P 63/mmc 공간군에 속하는 결

정형을 지니고 있고, 격자상수는  $a = 2.665$ ,  $c = 4.947$ 이며, 단위세포 당 2개의 분자 단위( $z = 2$ )를 지니고 있다. 결정구조, Wyckoff, 원자의 좌표 표기는 Table 1에 나타났다. DV-X $\alpha$ 에 대한 기존 연구결과, cluster의 구성 원자수를 최소로 한 경우와 그 수를 증가시킨 경우, 계산시간의 증가만을 가져올 뿐 그 결과는 유사함을 알 수 있다.<sup>4)</sup> Zn은 HCP 결정구조를 갖는 원소로 M(중심원자)를 중심으로 제 1근접원자에서 제3근접원자를 고려하여 계산하기 위해 M-Zn18 cluster model을 선택하였고 D3h의 대칭성을 이용하여 계산하였다. Fig. 2는 M-Zn18 cluster model을 나타내었다. 또한 계산에 있어서 스핀분극을 고려하여 계산하였다. Zn은 천이금속원소로 금속결합에 있어서 Li, Be 등 알칼리 금속 혹은 알칼리 희토류의 s궤도와 p궤도와는 달리 근접원자간 d궤도끼리가 강한 공유결합을 한다. 3d궤도는 반경이 2부근으로 근접원자와 강하게 상호작용을 하는데 장거리까지 미치는 원자궤도간의 상호작용은 없다. 따라서 밴드의 퍼짐은 작게 된다. 이것에 비해 4s, 4p궤도는 좀 더 넓은 범위의 상

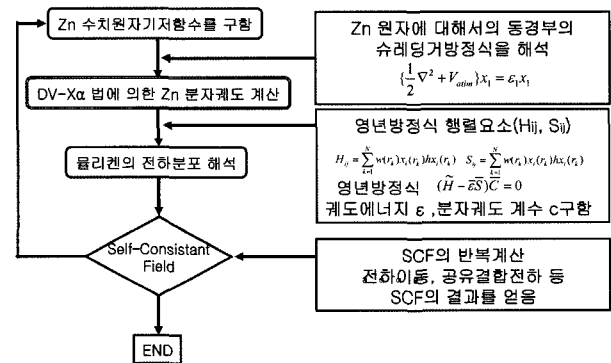


Fig. 1. Schematic flow chart of Dv-X $\alpha$  method.

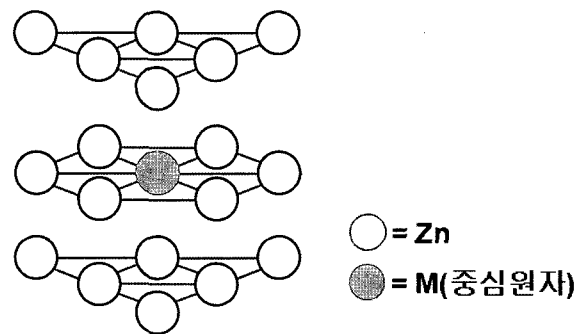


Fig. 2. A cluster model, M-Zn18, used in the calculation.

Table 1. A Zn in the crystal system data.

Atom	Crystal System	Wyckoff letter	x	y	z
Zn	Hexagonal	2c	0.3333	0.6667	0.25

호작용을 나타내 밴드의 퍼짐도 크게 된다. 본 연구에서는 s, p궤도보다는 d궤도가 물성에 영향을 많이 미치므로 d궤도 에너지값을 계산하였고 d 궤도를 갖지 않는 원소는 최외각 전자 s, p궤벨을 계산하였다.<sup>7)</sup> 위의 클러스터 계산에 두 개의 합금 파라미터를 구할 수 있다.

### 3. 결과 및 고찰

DV-X $\alpha$ 법으로 전자상태를 계산할 경우, 모델과 계산값의 적합성 판단은 실험적으로 측정된 전자상태 값과 이론으로 계산되어진 전자상태 값을 비교함으로써 이루어진다.<sup>8)</sup> Table 2는 실험적으로 계산되어진 값과 이론으로 계산되어진 값을 비교하였다. 실험치와 이론치는 오차는 있으나 Spectral line에 따른 에너지의 위치에 있어서 상

당한 유사성을 보여주고 있다.

Fig. 3은 M-Zn18 모델을 이용하여 에너지의 도표를 나타낸 것이다. 에너지 준위의 계산(에너지준위의 높이)은 원자간의 전자기동과 관련이 있으므로, 원소의 전기음성도와 관련된다. 그리고 이 준위는 원자반경과도 관계가 있는 것으로 알려져 있다.<sup>9)</sup> 그리고 이를 통해 합금원소의 거동을 조사할수 있다. 실선은 전자 점유 궤도를, 점선은 비점유 궤도를 각각 의미하고, 모든 에너지 준위는 전자가 채워진 최상위 궤도(Highest Occupied Molecular, HOMO)의 에너지 준위는 계산치의 에너지 고유치로 작성하였다. 그리고 상향 스핀과 하향스핀 중 하향스핀에 주로 반비점유궤도성분으로 구성되어 있어 하향스핀 전자궤도만을 나타내었다. 그림에서 보듯 중심원자에 다른 원자가 들어감에 따라 페르미 에너지( $E_f$ )의 위치가 달라지며 Zn-3d 가전대의 위치 또한 달라진다. 그리고 비점유 궤도(반결합)의 가전자대는 0~10 eV인 곳에 주로 보여준다. Pure Zn에서 결합성분을 보면 26a' level은 1.9% 3p, 10.3% 4s, 87.8% 3d 로 구성되어있다. 반결합 39a' level은 50.1% 3p, 47.7% 4s, 1.4% 3d 로 구성되어있다. Pure-Zn의 반결합영역에서는 d level이 아주 소량 분포되어 있어서 그 중 분포가 가장 많은 38a' level을 선택하게 되었다. Zn-V에서의 반결합성분 중 39a' level은 42.4% 3p, 31.7% 4s, 25.9% 3d로 2.606 eV 근처에 위치하고 있다. Zn-Co 같은 경우 39a'로 44.4% 3p, 18.1% 4s, 37.5% 3d로 2.826 eV 근처에 위치하고 있다. Zn-Cu는 반결합 가전자대에서 3d orbital energy level의 분포가 가장 많은 40a'로 4.031 eV에 위치하고 있다. 반결합 에너지 가전자대에서 3d level energy 분포가 가장 많은 부분을 선택할시 DV-X $\alpha$ 법의 대칭성을 고려하여 에너지값을 선택하는 주의가 필요하다.

Fig. 4는 최외각 전자가 d level을 포함하지 않는 non 전이금속으로 s, p level을 고려하여 계산하였다. s, p level 같은 경우 3정도의 공간적인 퍼짐을 갖기 때문에 여기서는 s, p level에 따른 평균값을 취하였다. 그리고 이후부터 M-Zn18 모델에서 M원자(Ti, V, Cr, Mn...)의 d orbital energy level을 Md라고 한다.

Table 3에는 두 개의 합금 파라미터 Md 값과 Bo값을 나타내었다. 여기서 Bo는 결합차수(bond order)로 원자들간의 전자들의 overlap population 은 Mulliken의 population analysis에 의해 구하였다. Bo 파라미터는 원자들간의 공유결합성의 강한 정도의 지표를 나타내는 것으로 합금의 물리적 특성과 관계가 있다. 특히 Bo 파라미터는 합금의 강도와 연관이 있으므로, 높은 Bo를 가지는 원소는 대부분의 구조용 합금의 주 합금원소로 알려져 있다.<sup>10)</sup>

Md값과 Bo값의 결과를 보면 Md값의 에너지 레벨 위치는 Al > Si > Li > Cu > K > Co등의 순으로 나타나는 것

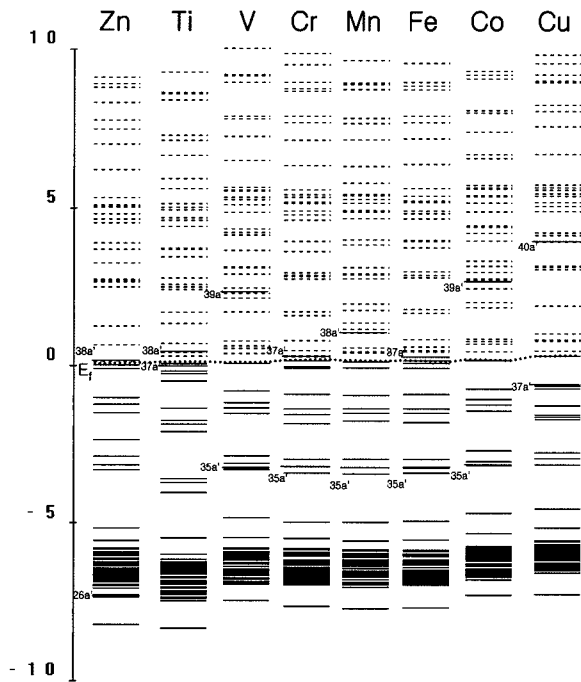


Fig. 3. Energy level structures of pure Zn and alloyed Zn with transition metals.

Table 2. Comparison of the Binding Energy for HCP Zn.

Zn = 1S <sup>2</sup> 2S <sup>2</sup> 2P <sup>6</sup> 3S <sup>2</sup> 3P <sup>6</sup> 3d <sup>10</sup> 4S <sup>2</sup>		
Spectral line	Exp Energy(eV)	Calc Energy(eV)
1s	.	.
2s	1195.7	1126.3
2p	1021.8	995.1
3s	139.6	120.3
3p	88.65	78.3
3d	10	7.2

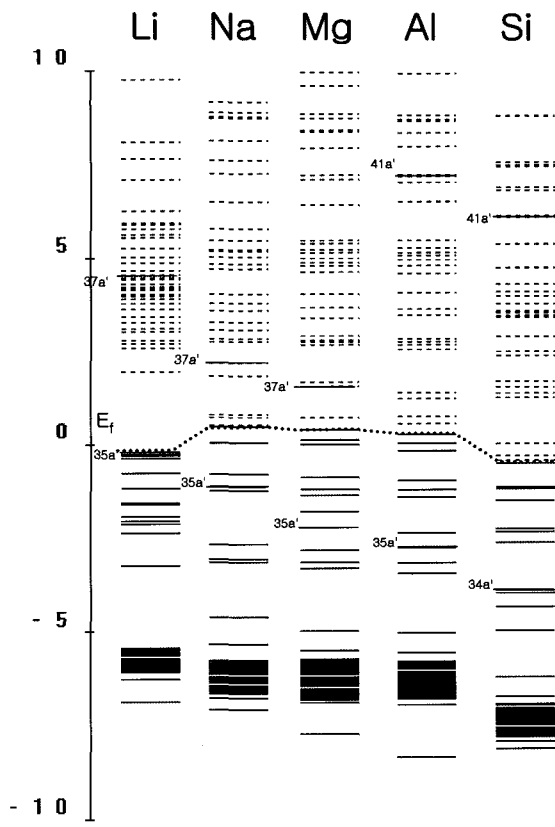


Fig. 4. Energy level structures of alloyed Zn with non-transition metals.

을 알 수 있고 Bo값은  $Zr > Nb > Pr > Nd > Ce > Y$  등의 순으로 나타나고 있다.

여기서 Md, Bo 파라미터와 인장강도와의 관계를 알기 위해 Md, Bo 파라미터 수식을 정의한다.

$$\overline{Md} = \sum X_i \cdot (Md)_i \quad (4)$$

$$\overline{Bo} = (\sum X_i) \cdot (Bo)_i \quad (5)$$

( $X_i$  = The mole fraction of component  $i$  in the alloy,  $(Md)_i$  = respective values for component  $i$ )

Table 4는 ILZRO에서 만들었던 diecasting 합금을 ICP 성분분석 한 데이터로 weight비를 mole fraction비로 변환시켜 나타내었다. 위의 Zn합금은 주로 Al과 Cu가 주합금성분(<4.0%)인 것을 알 수 있으며 나머지 합금성분은 소량(<0.5%) 첨가한 것을 알 수 있다. 앞의 Md 값과 비교해보면 Al(7.20837)과 Cu(4.03151)은 높은 에너지 레벨을 갖는 것을 알 수 있다. Fig. 5은 식(2)번으로 계산하여 그 결과를  $\overline{Md}$ 에 따른 인장강도 그래프로 나타내었다.  $\overline{Md}$  값과 인장강도는 직선적인 관계가 나타나는 것을 알 수 있다. R 값은 0.8443로 나타났다. 여기서 합금 파라미터의 하나인  $\overline{Md}$ 는 기계적 성질과 관련이 있

Table 3. List of Md and Bo values for various elements of Zn.

Element	Md(eV)	Bo	
3d	Ti	0.66551	2.3775
	V	2.60611	2.1023
	Cr	1.81535	1.8463
	Mn	1.24934	1.9573
	Fe	0.30514	1.9828
	Co	2.82689	1.9327
	Ni	1.03917	1.7883
	Cu	4.03151	1.6315
	Zn	0.22490	1.6329
	4d	Y	1.79644
Zr		0.95116	3.0411
Nb		0.85054	2.984
Mo		1.14613	2.1959
Ag		0.64864	1.9479
Cd		0.47841	1.9402
In		0.64034	1.9368
Sn		1.68321	1.8347
5d	Sb	1.72953	1.653
	La	1.87073	2.6348
	Ce	1.23548	2.7548
	Pr	1.06876	2.8935
	Nd	1.10491	2.8388
Other (S,P)	Li	4.10412	0.5453
	Be	1.60259	1.2366
	Na	2.65805	1.6658
	Mg	1.91708	2.2047
	Al	7.20837	2.308
	Si	6.5085	2.1876
	K	2.86345	0.8578
	Ca	1.81827	1.4058

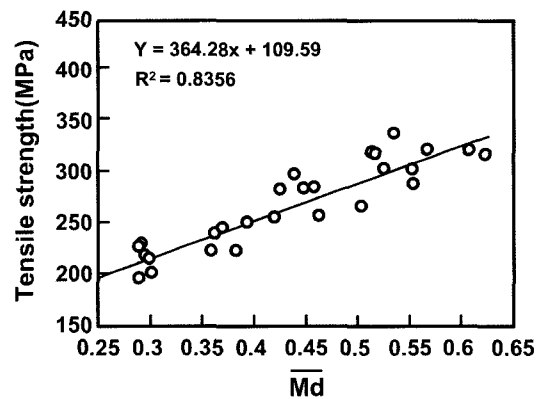


Fig. 5. Correlation to the tensile strength with for the Zn diecasting alloys.

**Table 4.** Chemical composition (mol%) of Zn diecasting alloys.

	Zn	Al	Cu	Mg	Li	Cr	Ti	Ce	V	Si	인장강도
1	95.83	2.93	0.67	0.03	0.01	0	0.02	0.4	0	0.09	259
2	95.11	3.53	0.78	0.05	0	0.13	0.23	0.19	0	0	268
3	93.74	3.36	2.86	0	0.01	0	0.02	0	0	0.02	323
4	95.75	2.36	1.81	0.06	0	0	0.01	0	0	0.01	287
5	96.84	3.09	0	0.03	0.02	0.02	0	0	0	0	299
6	94.21	2.88	2.59	0.04	0	0	0.01	0.28	0	0	305
7	92.05	3.63	3.61	0	0	0.54	0.05	0.13	0	0	318
8	96.81	0.64	2.48	0.03	0.01	0	0.03	0	0	0	242
9	96.38	1.1	2.47	0	0	0.03	0.02	0	0	0	253
10	93.76	3.13	2.9	0	0	0.08	0.13	0	0	0	304
11	93.89	3.31	2.58	0	0	0	0	0.19	0	0.02	291
12	99.03	0.95	0	0	0.02	0	0	0	0	0	199
13	96.32	3.05	0.26	0	0	0	0.03	0.34	0	0	286
14	94.38	3.11	2.5	0	0.01	0.01	0	0	0	0	339
15	96.85	0.68	2.3	0	0	0	0.04	0.12	0	0.01	225
16	96.39	2.21	1.27	0	0.01	0	0.12	0	0	0	285
17	94.66	2.82	2.48	0.03	0.01	0	0	0	0	0	321
18	98.51	0.76	0.3	0	0.01	0	0.04	0.37	0	0	231
19	98.39	0.99	0	0	0	0.1	0.13	0.37	0.01	0.02	219
20	94.13	2.79	2.41	0.04	0.01	0.14	0.12	0.34	0	0.02	320
21	98.73	0.92	0	0.02	0.01	0.1	0.21	0	0	0	229
22	96.51	0.7	2.44	0.02	0.01	0.02	0	0.29	0	0.03	247
23	98.47	1.05	0	0.05	0	0.1	0	0.33	0.01	0	204
24	98.79	0.86	0.31	0.03	0	0	0	0	0	0	221
25	96.56	1.01	2.25	0.04	0	0	0	0.08	0	0.05	225
26	97.16	2.83	0	0	0	0.01	0	0	0	0	258
27	92.30	3.28	3.93	0	0	0.28	0	0.19	0	0.01	323

는 것을 알 수 있다. 그리고 또 다른 합금 파라미터  $\overline{Bo}$ 를 식(3)으로 계산하여 결과를 Fig. 6 $\overline{Bo}$ 에 따른 인장강도 그래프로 나타내었다. 그러나  $\overline{Bo}$  값은 인장강도와 직선적인 관계로 보기는 어렵다. R값 또한 0.621로 낮게 나왔다. 그러나  $\overline{Bo}$  값이 1.635~1.645 사이에 있는 합금들과 1.65~1.665 사이에 있는 합금들이 하나의 균형태로 나오는 것을 알 수 있다.  $\overline{Bo}$  값이 1.635~1.645 사이에 있는 합금은 Al 성분이 1.2%이하로 나타나며 인장강도가 250이하로 나타나고 있다.  $\overline{Bo}$  값이 1.65~1.665 사이에 있는 합금들은 Al 성분이 약 3% 이상으로 인장강도가 260 이상으로 나타나고 있다.  $\overline{Bo}$  파라미터는 앞에서 언급한 것과 같이 합금의 물리적 특성과 깊은 관계가 있다는 것을 알 수 있다. 여기서 인장강도와 파라미터가 직선적 관계가 아닌 균형태로 나타나는 이유로는  $Dv-X\alpha$ 법으로 계산은 비경험적(제1원리) 계산법이라는 것이다. Diecasting과 인장시험이 생기는 전위를 포함하지 않은 계산이기에 이론값과 실험값이 맞지 않는다고 여겨

진다. 이를 해결하기 위하여  $\overline{Md}$ 를 X축,  $\overline{Bo}$ 를 Y축으로 하여  $\overline{Md} - \overline{Bo}$  그래프를 만든다.<sup>11)</sup> Fig. 7은  $\overline{Md} - \overline{Bo}$  그래프와 인장강도와의 관계를 나타내었다.  $\overline{Md} - \overline{Bo}$  값에 따라 Zn합금들은 포물선 내지는 원모양으로 인장강도 영역이 나타날 것으로 예측이 된다. 그리고 Zn(0.22490, 1.6329)에 따른 각 합금원소들의 방향벡터를 나타내었다. Zn(x = 0.22490, y = 1.6329)으로 부터의 방향벡터는 합금 원소에 종류에 따라서 다른 각도의 방향벡터로 표시된다. 1-27번 합금들은 주로 Al과 Cu 원소가 들어간 합금으로 Al, Cu의 합금원소들의 방향벡터 방향으로 나타나는 것을 알 수 있다. 특히 8, 9, 15, 22, 25 합금들은 Al보다 Cu의 원소량이 많은 합금으로 Cu 벡터방향으로 가는 경향을 알 수 있다. 그 중에서도 8,9번의 경우 Cu의 함량이 2.48%, 2.47%로 15, 22, 25번보다 Cu 방향벡터 방향으로 가까워 지고 있다.

앞 과정을 통하여  $\overline{Md} - \overline{Bo}$  그래프와 인장강도로부터 Zn 합금들의 인장강도를 예측할 수 있다.

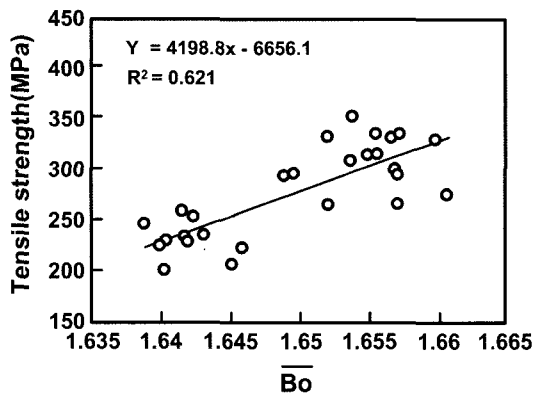


Fig. 6. Correlation to the tensile strength with for the Zn diecasting alloys

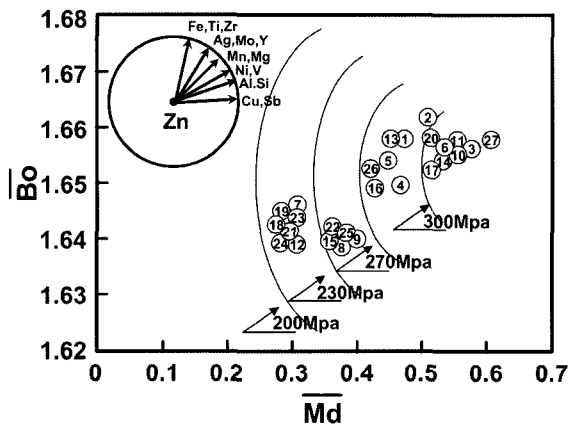


Fig. 7. Bo-Md diagram of showing the location of conventional diecasting Zn alloys.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 Zn 합금을 Dv-X $\alpha$ 법을 이용하여 전자 상태를 계산하고 계산된 합금 파라미터 Md값과 Bo값을 이용하여 인장성질을 예측하고자 하였다.

1. Dv-X $\alpha$  분자궤도법을 이용하여 Zn의 전자상태를 이론적으로 계산하였고 실험적인 값과의 비교를 통해 전자상태의 적합성을 알 수 있었다. 이를 통해 간단한 cluster model로 Zn의 전자상태를 잘 나타낼수 있다는 것을 알 수 있었다.

2 Zn의 Dv-X $\alpha$ 법으로 계산한 Md값과 인장강도와의 관계는 비례하는 것을 알 수 있었고 이를 통해 기계적 성

질 영향이 큰 원소 Al>Si>Li>Cu 등을 알 수 있었다. 그러나 Bo값과 인장강도 관계가 직선적인 관계가 아닌 특정합금원소의 at%에 따라 균형태로 나타나는 것을 알 수 있었다.

3. Zn의  $\overline{Md} - \overline{Bo}$  그래프를 통하여 인장강도 예측을 할 수 있었다. 그러나 Dv-X $\alpha$ 법을 이용한 합금설계방법에 있어서 전위가 어떠한 효과로 나타나는지는 알 수가 없었다. 차후 전위론과 Dv-X $\alpha$ 법과의 관계를 연구할 필요가 있을 것으로 사료된다.

#### 감사의 글

본 연구는 과학기술부/한국과학재단 국가핵심연구센터 사업(R15-2006-022-02004-0)과 교육인적자원부, 산업자원부, 노동부의 출연금으로 수행한 산학협력중심대학육성사업의 연구결과입니다. Dv-X $\alpha$ 법에 있어서 장비 제공을 해 준 한국기초과학지원연구원과 유익한 의견을 주신 한국전기연구원 이동윤 박사께 감사를 드립니다.

#### 참 고 문 헌

1. J. Weertman and J. R. Weertman, Elementary Dislocation Theory, Macmillan, New York (1964).
2. F. R. N Nabarro, Theory of Crystal Dislocations, Clarendon Press, Oxford (1967).
3. H. Adachi, M. Tsukada and C. Satoko, J. Phys. Soc., **45**, 875 Japan (1978).
4. M. Morinaga, Bulletin of the Society for Discrete Variational X, **6**, 424 (1994).
5. J. C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids, **4**, Wiley, New York (1974).
6. R. S. Mulliken, J. Chem. Phys., **23**, 2239-2343, 19-55 (1833,1841).
7. K. Y. S, 처음 배우는 전자 상태계산, 한림원 (1999).
8. Lebugle A, Axelsson U, Nyholm R, Martensson N Phys. Scripta **23**, 825 (1981).
9. R. Ninomiya, M. Morinaga and K. Kubota, J. Alloys and Compounds, **215**, 315-323 (1994).
10. D. W S, I. S. L, D. S B, Kor. J. Mater. Res., **12**(1) 44(2002).
11. M. Morinaga, Y. Murata and H. Yukawa, Materials Science Forum, **449-452**, 37-42 (2004).