

고망간강 입계에너지에 미치는 스핀 효과

이영주*, 박종일, 박언병, 최승덕, 양 혁¹, 이억균¹, 이순기², 장우길², 최종교²

포항산업과학연구원 부품신소재연구센터

¹한국과학기술원 화학과

²포스코 후판연구그룹

1. 서론

철강에서 그레인바운더리는 에너지가 높아 핵생성 자리를 제공하거나 결함이 제거되는 자리로서 중요한 역할을 한다. 고망간강에 보론 (붕소 : B) 원소를 첨가하면 강의 인장강도가 증가하고 Grain boundary (GB)에서 핵생성을 억제하는 것으로 알려져 왔다. 이는 B이 GB에 끼어 들어가 두 그레인 사이의 결함을 강하게 해주며 동시에 GB 에너지를 낮추어 주어 GB를 안정화 시키는 역할을 하는 것으로 추론될수있다. 하지만 이에 대한 실험적이나 이론적인 증거는 전무하다. 이에 대한 명확한 해답은 GB의 정확한 원자구조, GB 에너지/생성엔탈피, 그리고 GB 화학결합상태를 알아야만 한다. 본 연구에서는 순수철과 고망간강에서 스핀상태에 따라 GB의 정확한 원자구조, GB 에너지/생성엔탈피, 그리고 GB 화학결합이 어떻게 다른지를 원자단위 제일원리 계산으로부터 밝혀내고자 한다.

2. 계산방법

제일원리 계산은 전자밀도함수이론을 이용하였고 세부적으로는 generalized gradient approximation, norm-conserving, non-local, scalar-relativistic pseudopotentials을 이용하였다. 전자밀도를 기술하기위해서는 numerical double zeta plus polarization basis functions을 이용하였다.

3. 계산결과

계산에 고려한 GB 원자구조는 $\Sigma 3(111)$, $\Sigma 3(112)$, $\Sigma 5(201)$, $\Sigma 5(301)$, $\Sigma 9(114)$, $\Sigma 9(2211)$ 이었다. 스핀에 따른 순수철의 GB 에너지 변화는 $\Sigma 3(111)$ 의 경우 비자성의 경우 45.56 mJ/m^2 이었고 상자성의 경우 287.86 mJ/m^2 로서 매우 다른 값을 주었다. 다른 GB 구조들에 대해서는 비자성과 상자성에서 의미있을 정도의 큰 차이는 없었다. 망간이 32 wt% 함유된 고망간강에서도 비슷한 결과를 보여주었다.