

## $\beta$ - Ti 중의 Au의 확산

이 성 열\*

### Diffusion of Gold in $\beta$ - Titanium

*Lee Sung-Yul*

#### Abstract

Interdiffusion coefficient in the  $\beta$  phase of Ti - Au alloys has been determined by Matano's method in the temperature range 1173 to 1823K with (pure Ti) - (Ti - 1.26 at% Au alloy) couples. The impurity diffusion coefficient of Au,  $D_{Au}$ , in  $\beta$  - Ti has been determined by extrapolating concentration dependence of the interdiffusion coefficient to infinite dilution of solute.

In the whole temperature range,  $D_{Au}$  is about one half of the self - diffusion coefficient in  $\beta$  - Ti. The Arrhenius plot of  $D_{Au}$  indicates an upward curvature, as in the case of the self - diffusion in  $\beta$  - Ti. The curved Arrhenius plot has been examined by the mechanism of phonon - assisted diffusion jumps via monovacancies. The activation energy for the impurity diffusion of Au as well as twelve elements examined by the present author and the co - workers is proportional to the square of radius of the diffusing atom, suggesting that the size effect is dominant in the impurity diffusion in  $\beta$  - Ti.

#### 1. 서 론

b. c. c 금속중에서 자기확산계수의 온도의 존성을 표시하는 Arrhenius plot가 직선성으로부터 위로 오목한 형태의 곡선으로 나타내는 비정상적인 경우가 많다<sup>1)</sup>. 이에 대한 원인을 설명하기 위해 Köhler와 Herzog<sup>2)</sup>는 공공과 최인접원자간의 위치교환의 확산기구에 격자진동에 의한 (111)면 변위

\* 한국해양대학교 이공대학 해양재료공학과

가 부가적으로 기여하는 원자이동기구를 제시하였다. 고온에서 격자진동에 따라 b. c. c 격자의 (111)면 변위가 발생하는 것을 입증하는 근거로서 단결정  $\beta$ -Zr을 사용한 중성자의 비탄성산란실험 연구결과도 제시되고 있다.

이에 의하면 격자진동에 관계하는 에너지 양자(photon)의 운동에너지를 나타내는 종음향파(Longitudinal Acoustic, 이하 LA로 표시함)  $LA<111>$  phonon 분산곡선중에서  $LA^{2/3}<111>$  phonon의 진동수가 현저하게 감소되고 있으며, 이는 격자진동에 의해 (111)면이 변위하여 b. c. c 격자가 붕괴됨을 뒷받침 한다<sup>9)</sup>. 따라서 이와 같은 phonon mode 완화의 영향으로 변위된 (111)면상의 원자가 <111> 방향의 격자점 위치로 되돌아 가려고 하는 힘이 억제되고 결과적으로 원자이동을 위한 자유에너지  $G^M$ 도 감소되는 효과가 얻어진다. 한편, 비정상적인 원자이동을 나타내는 b. c. c 금속의  $G^M$ 에 대하여 Köhler Herzing<sup>2)</sup>는 다음과 같이 표시하고 있다.

$$G^M = G^M_0(1 - T_0/T) \quad (1)$$

여기서  $G^M_0$ 은 단공공의 이동을 위한 자유에너지이고,  $T_0$ 는 금속이 bcc 격자구조를 최소한도 유지할 수 있는 가상적 최저온도이다. 따라서 bcc금속에 관한 자기확산계수의 온도의존성을 식(2)로 표시할 수 있다.

$$D = D_0 \exp(-Q/RT) \exp(G^M_0 T_0/T^2) \quad (2)$$

여기서,  $D_0$ 는 단공공확산기구에 대한 진동수이며,  $Q$ 는 단공공확산기구의 확산을 위한 활성화에너지이다.

확산 계수를 Arrhenius plot 할 경우 직선성으로 부터 편기하는 정도는 식(2)의  $\exp(G^M_0 T_0/RT^2)$  항에 의해 영향을 받는다. 한편, Sanchez와 de Fontaine<sup>4)</sup>는  $\omega$  embryo모델에 근거하여 식(2)와 유사하게 표시되는 확산계수의 온도의존성에 관한 식을 이미 제시한 바 있다. b. c. c.의  $\beta$ 상으로부터 육방정의  $\omega$ 상으로 천이하는 과정중에 발생하는 embryo는 활성화된 상태로서  $\omega$ 상과 동일한 결정구조를 가지며,  $LA^{2/3}<111>$  phonon이 격심하게 완화된 상태의 격자로 간주할 수 있다.

$\beta$ -Ti<sup>5,6)</sup>,  $\beta$ -Zr<sup>7)</sup> 및  $\beta$ -Hf<sup>8)</sup> 단결정의 phonon 분산에 관한 최근의 상세한 연구결과에 의하면,  $LA^{2/3}<111>$  phonon은 현저한 완화현상을 나타내지만 완화정도에 미치는 온도의 의존성은 무시할 수 있을 정도로 매우 적다. 한편, 횡음향파(Transverse Acoustic, 이하 TA로 표시함)  $TA^{1/2}<111>$  phonon의 경우 전체적인 완화정도가  $LA^{2/3}<111>$  phonon 보다 적지만, 완화정도에 미치는 온도의 영향은 매우 크며 온도가 감소함에 따라 완화정도가 증가함을 보여주고 있다. 따라서 이러한 실험결과는 Köhler와 Herzing<sup>2)</sup>에 의하여 제시된 원자이동기구를 강력하게 뒷받침하여 주는 강력한 실험적 근거가 된다.

더우기 Köhler와 Herzig<sup>9)</sup>는 위와같은 두종류의 phonon 완화의 영향이 원자이동에 미치는 효과를 다음과 같이 보강하였다. 원자의 도약방향으로 격자면의 변위가 발생하는 것외에도 삼각형을 이루는 saddle point 위치의 원자들도 동시에 변위하여 이들의 기여가 원자이동을 용이하게 한다는 점이

다. 즉, saddle point에 위치하는 원자들이 확산원자의 도약방향과 수직방향으로 확장운동을 하여 확산원자의 도약을 위한 potential 장벽을 감소시키는 효과를 발휘한다. 이러한 “breathing” 발생은  $LA^{2/3}<111>$  phonon이 일부 기여하고 일부는  $TA^{1/2}<111>$  phonon이 기여하기 때문이며, 따라서  $LA^{2/3}<111>$  phonon 및  $TA^{1/2}<111>$  phonon의 완화정도는 확산을 위한 활성화에너지 값에 관계하게 된다.

$\beta$  - Ti중의 불순물 확산에 관한 연구는 천이원소 Cr, Pd<sup>12)</sup>. I b족 원소 Cu, Ag<sup>13)</sup>, III b족 원소 Ga, In<sup>14)</sup> 및 IVb족 원소 Si, Ge, Sn<sup>14)</sup>에 대하여 연구가 행하여졌으며, 이에 의하면 불순물 확산계수의 온도의존성은 식(2)에 잘 적용됨을 알 수 있고, 더우기  $\beta$  - Ti중의 자기확산 및 불순물확산을 위한 활성화에너지는 확산원자반경의 제곱에 비례하고 있음을 나타내고 있다. 따라서  $\beta$  - Ti 중 Au 확산의 경우에도 원자반경의 크기효과가 적용되는지를 규명하기 위하여 본 연구를 행하였으며, 실험방법은 (순 Ti) - (희박농도의 Ti - Au 합금)의 확산쌍을 사용한 상호확산법을 이용하였고, 상호확산계수의 농도의존성으로 부터 상호확산계수 영(zero)으로 외삽한 값을  $\beta$  - Ti 중의 Au 불순물확산계수로 취하였다.

## 2. 실험방법

순Ti시료는 일본 Kobe steel Ltd.로부터 제공된 직경 160mm의 환봉을 가공하여 얻은 직경 12mm의 Ti환봉을 사용하였다. 화학성분중 주요불순물의 함량은 Fe : 0.046 mass%, N : 0.0032 mass%, O : 0.041 mass%이다. 환봉의 Ti시료를 화학연마한 후, 석영관중에 넣고 진공상태로 한 후 고순도아르곤가스를 취입하고 봉입하였다. 순Ti의 결정립 조대화를 위하여 1373 K에서 48h 열처리 하였다. 이때 시료와 석영관과의 접촉에 의한 반응을 피하기 위하여 시료의 양단에 알루미나(순도 99%이상) 링을 끼웠다. 이렇게하여 얻어진 결정립의 평균입도는 3mm이상이었다. 결정립조대화 처리한 순 Ti 환봉으로부터 두께 5mm의 원반상으로 절단한 시료를 연마 및 알루미나정마하여 평평한 평면을 얻었다.(Ti - 1.26at.%Au) 합금은 순Ti과 순도 99.999%의 Au를 평량한 후 아르곤아크용해하여 button형태로 제작하였다. 이 때 균질화된 합금을 얻기위해 아르곤 아크용액를 수 회 반복하여 실시하였다. 얻어진 button상의 시료를 최종적으로 보트상의 수냉 copper주형을 사용하여 직경 10mm, 길이 80mm의 환봉상으로 제작하였다. 합금의 경우도 순 Ti시료와 같은 동일한 결정립조대화처리를 하였으며 연마 및 정마하여 평면의 시료를 얻었다

반무한길이의 상호확산쌍을 만들기 위하여, 원반상의 순 Ti과 Ti - Au합금을 나사구멍이 뚫어져 있는 스트인레스강제의 접합용 훌더 속에 넣고 볼트로서 압착고정시켰다. 이 때 산화방지를 위해 시료의 주변을 바나듐박막으로 일단 둘러싸고, 그 위에 스폰지 Ti으로 시료부위를 채차 둘러쌓았다.

확산용접은 1073K에서 3.6ks동안 고순도 아르곤가스 기류중에서 가열하였으며 가열후 가접된 상호확산쌍의 시료를 일단 알루미나튜브속에 넣고, 이것을 다시 석영관 속에 넣어서 진공처리한 후, 고순도 아르곤가스를 봉입하여 확산열처리용의 시료로 하였다. 확산열처리는 1173K부터 1823K까

지 50K 간격의 각각의 확산온도에서, 최저 3.6ks에서 부터 최고 21.16Ms동안 유지하였다. 특히 1673K 이상의 범위에서는 시료가 들어가 있는 알루미나 튜브를 이중의 석영관으로 봉입하였고, 내부석영관과 외부석영관사이에는 적당한 압력의 아르곤가스로 충전시켜서 내부석영관의 열변형에 의한 파열을 방지시켰다.

확산온도의 조절범위는 1173 - 1473K에서  $\pm 1\text{K}$ , 1673 - 1823K에서  $\pm 3\text{K}$ 이었다. 확산이 끝난 확산 쌍의 시료를 확산방향으로 평형하게 절단한 후, 절단면을 정마하여 거리에 따른 농도 변화를 조사하기 위하여 Shimadzu사제 모델 ARL - II의 EPMA(Electron Probe Microanalyzer)을 사용하여 X선분석을 하였다. Ti합금 중 Au의 농도는 회박농도이므로 Au - La X선 강도는 Au의 농도에 직선적으로 비례하며, Ti - Au합금의 부분 물체적도 일정한 값을 갖는 것으로 추정하여도 무방하다.

따라서 단위체적당 차지하는 Au의 mol함수로서 Matano법<sup>15)</sup>를 사용하여 상호확산계수를 결정하였다.

### 3. 실험결과 및 고찰

Fig. 1은 Ti - Au합금증 상호확산계수의 농도의 존성을 표시한다. 동일한 확산온도에서 확산시간을 달리하여 결정된 상호확산계산을 구별표시하기 위하여 Fig. 1중에 ○, ● 및 △로 표시하였다. 각

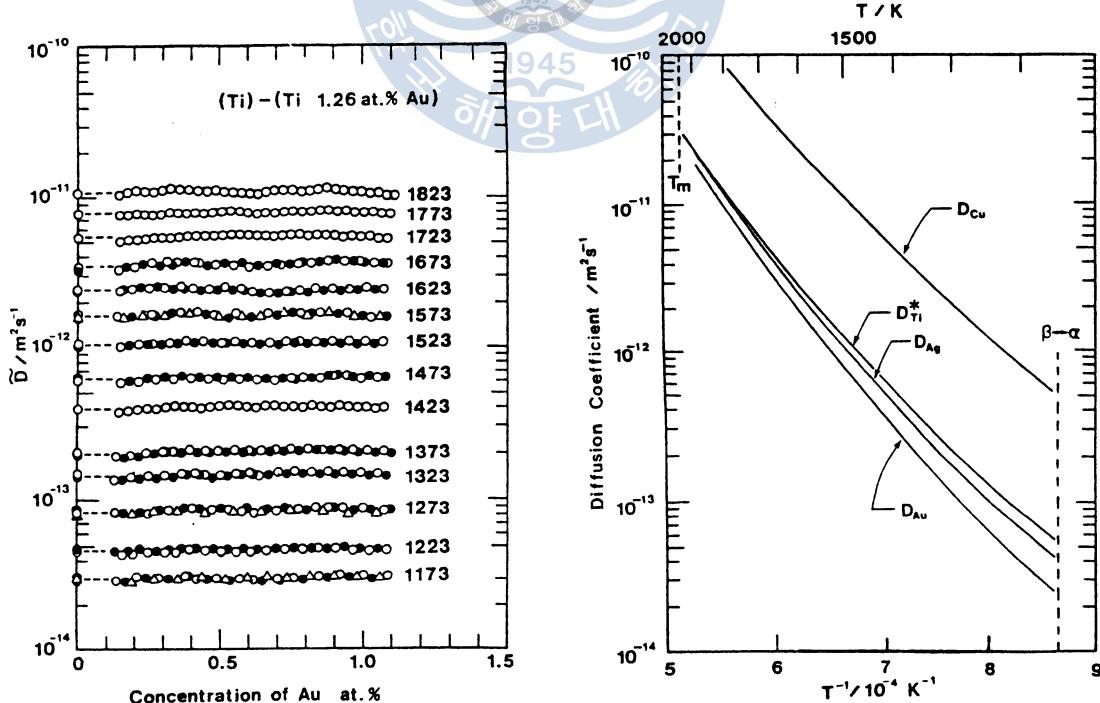


Fig. 1 Concentration dependence of interdiffusion coefficient  $\bar{D}$  in Ti - Au alloys

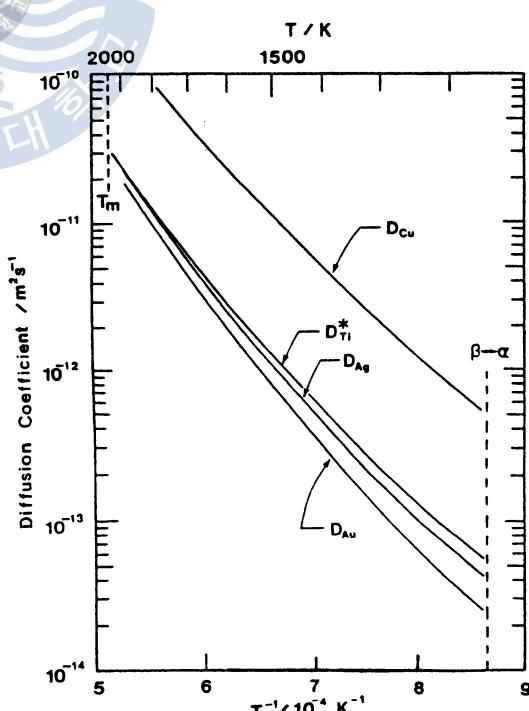


Fig. 2 Temperature dependence of diffusion coefficient of Au,  $D_{\text{Au}}$ , in  $\beta$ -Ti in comparison with those of self-diffusion coefficient  $D^*_{\text{Ti}}$  and diffusion coefficients of Cu,  $D_{\text{Cu}}$ , and Ag,  $D_{\text{Ag}}$ , in  $\beta$ -Ti

Table 1. Impurity diffusion coefficient of Au in  $\beta$ -Ti

T/K	t/s	$D_{Au}/m^2s^{-1}$	Mark	T/K	t/s	$D_{Au}/m^2s^{-1}$	Mark
1823	$5.40 \times 10^3$	$(1.08 \pm 0.04) \times 10^{-11}$	○	1423	$1.44 \times 10^5$	$(3.96 \pm 0.10) \times 10^{-13}$	○
1773	$7.20 \times 10^3$	$(7.78 \pm 0.29) \times 10^{-12}$	○	1373	$3.46 \times 10^5$	$(2.01 \pm 0.08) \times 10^{-13}$	○
1723	$7.20 \times 10^3$	$(5.41 \pm 0.15) \times 10^{-12}$	○	1373	$5.18 \times 10^5$	$(1.96 \pm 0.07) \times 10^{-13}$	●
1673	$7.20 \times 10^3$	$(3.57 \pm 0.08) \times 10^{-12}$	○	1323	$4.32 \times 10^5$	$(1.44 \pm 0.50) \times 10^{-13}$	○
1673	$1.08 \times 10^4$	$(3.56 \pm 0.14) \times 10^{-12}$	●	1323	$6.91 \times 10^5$	$(1.35 \pm 0.49) \times 10^{-13}$	●
1623	$9.00 \times 10^3$	$(2.42 \pm 0.09) \times 10^{-12}$	○	1273	$6.05 \times 10^5$	$(8.55 \pm 0.32) \times 10^{-14}$	○
1623	$1.44 \times 10^4$	$(2.39 \pm 0.08) \times 10^{-12}$	●	1273	$9.50 \times 10^5$	$(8.63 \pm 0.32) \times 10^{-14}$	●
1573	$1.44 \times 10^4$	$(1.65 \pm 0.05) \times 10^{-12}$	○	1273	$1.30 \times 10^6$	$(7.99 \pm 0.29) \times 10^{-14}$	△
1573	$2.16 \times 10^4$	$(1.58 \pm 0.04) \times 10^{-12}$	●	1223	$8.64 \times 10^5$	$(4.61 \pm 0.11) \times 10^{-14}$	○
1573	$2.88 \times 10^4$	$(1.62 \pm 0.06) \times 10^{-12}$	△	1223	$1.47 \times 10^6$	$(4.77 \pm 0.14) \times 10^{-14}$	●
1523	$3.78 \times 10^4$	$(1.07 \pm 0.04) \times 10^{-12}$	○	1173	$8.64 \times 10^5$	$(3.03 \pm 0.10) \times 10^{-14}$	○
1523	$6.48 \times 10^4$	$(1.03 \pm 0.04) \times 10^{-12}$	●	1173	$1.47 \times 10^6$	$(2.97 \pm 0.13) \times 10^{-14}$	●
1473	$5.76 \times 10^4$	$(6.06 \pm 0.19) \times 10^{-13}$	○	1173	$2.16 \times 10^6$	$(2.98 \pm 0.11) \times 10^{-14}$	△
1473	$8.64 \times 10^4$	$(6.25 \pm 0.04) \times 10^{-13}$	●				

각의 확산온도에서 상호확산계수  $\tilde{D}$ 는 확산시간에 무관하며, Au의 농도에도 거의 의존하지 않음을 나타내고 있다. Darken의 관계식<sup>16)</sup>으로부터,  $\tilde{D}$ 를 Au의 무한회석농도로 외삽한 값을  $\beta$ -Ti중의 Au의 불순물확산계수,  $D_{Au}$ 로 간주할 수 있다. 이러한 방법으로 결정된  $D_{Au}$ 의 값을 Table 1에 표시하였으며, Table 1중의 각각의 표시로 나타낸  $D_{Au}$ 는 Fig. 1에 해당하는 표식의 값이다.

Fig. 2는 본 연구에서 결정된  $\beta$ -Ti중의  $D_{Au}$ 의 온도의 존성을 표시하고 있으며, Köhler와 Herzig<sup>2)</sup>에 의해 결정된 추적자 자기확산계수  $D^{*}_{Ti}$  및 본 연구와 관련되는 연구결과<sup>12)</sup>인  $\beta$ -Ti중 Cu의 불순물 확산계수  $D_{Cu}$ 와 Ag의 불순물확산계수  $D_{Ag}$ 도 함께 표시하고 있다.

$\beta$ -Ti의 모든 영역에서  $D_{Au}$ 는  $D^{*}_{Ti}$ 의 거의 절반이며,  $D_{Cu} \gg D^{*}_{Ti} > D_{Ag} > D_{Au}$ 의 순서임을 알 수 있다.  $\beta$ -Ti중의 자기확산계수  $D^{*}_{Ti}$ 뿐만 아니라 모든 불순물확산계수의 Arrhenius plot가 위로 오목한 형태의 곡선을 나타낸다. 실험적으로 결정된  $D_{Au}$ 의 값을 식(2)에 적용하여 결정한 각각의 parameter에 대한 값은 다음과 같다.

$$D_0 = (9.32 \pm 1.38) \times 10^{-4} m^2 s^{-1}, Q = (348 \pm 21) \text{ kJ mol}^{-1} \text{ 및 } G^M_0 T_0 = (132 \pm 14) \text{ MJ mol}^{-1} \text{ K이다.}$$

한편, Q는 단공공형성을 위한  $H^F_0$ 와 공공이동을 위한 엔탈피  $H^M_0$ 의 합이므로  $G^M_0 T_0$ 는 다음과 같이 표현된다.

$$G^M_0 T_0 = (H^M_0 - TS^M_0 T_0) = (Q - H^F_0) T_0 - T_0 S^M_0 T \quad (3)$$

여기서,  $S^M_0$ 은 단공공이동의 엔트로피이다. Sanchez<sup>7)</sup>에 의하면  $T_0 S^M_0$ 의 값은  $H^M_0 (= Q - H^F_0)$ 의 값에 비해 매우 작다.  $T_{\beta \rightarrow \alpha} (= 1155 \text{ K}) < T < T_m (= 1943 \text{ K})$  온도범위의  $\beta$ -Ti중의 확산에 대하여 취급을 하

므로  $T_0$ 는 다음과 같이 구하였으며, 그 값은 650K이다. 그리고 식(3)의 우변 중  $T_0S^{f_0}T_0$ 의 값은  $(Q - H^{f_0})T_0$ 의 값에 비해 매우 작다. 따라서  $G^{m_0}T_0$ 의 값은  $Q$ 가 증가함에 따라 증가하게 된다. Fig. 3에 표시된  $\Delta K$ 와 같이 본 연구와 관련된 12종의 원소의 불순물확산에 관하여 조사한 결과와 똑같이 Au의 경우에도  $G^{m_0}T_0$ 와  $Q$ 의 직선관계가 성립하며,  $\beta$ -Ti중의 원자확산에 대하여 종합적으로 식(4)의 직선적인 관계가 얻어진다. 그리고  $H^{f_0}$ 는 원소의 종류에 관계없이 일정한 값을 갖는다.

$$G^{m_0}T_0(MJmol^{-1}K) = 0.650\{Q(kJmol^{-1}) - 139\} \quad (4)$$

식(3)과 (4)에 의하여  $H^{f_0}$  및  $T_0$ 의 값은 각각  $(139 \pm 15)kJmol^{-1}$ ,  $(650 \pm 3)K$ 로 구해지며,  $\beta$ -Ti중의 불순물확산을 위한 활성화에너지  $Q$ 는  $H^{f_0}$ 보다  $H^{m_0}$ 에 의해 지배를 받게 된다. 그리고  $H^{m_0}$ 의 크기는 saddle point 위치원자의 소위 “breathing” 운동의 영향을 받을 것으로 추정되므로 확산원자의 크기에 관련된다.

한편, Sanchez와 de Fontaine<sup>4)</sup>에 의하면,  $\omega$  embryo(또는 활성화된 복합체)형성의 자유에너지  $G_\omega$ 는  $\beta$ 상에서  $\omega$ 상으로의 변태 과정에 있어서 다음과 같은 parameter로서 표시된다.

$$G_\omega = A(T, p)\epsilon^2 - B(T, p)\epsilon^3 \quad (5)$$

$A(T, p)$  및  $B(T, p)$ 은 온도  $T$ 와 압력  $p$ 의 함수이며,  $\epsilon$ 은  $\omega$  embryo 형성에 따른  $\beta$ 상 격자종의 격자면 원자의 변위에 비례한다<sup>19)</sup>. 한편,  $\epsilon$ 의 값은 b. c. c구조에서는  $\epsilon=0$ 이지만, 변태된 격자( $\omega$ 상)의 경우  $\epsilon=1$ 이다. 식(5)로 표시되는 변태를 위한 구동력의 항 중에서  $B(T, p)\epsilon^3$ 은 고온에서 무시할 수 있는 정도의 값이며 저온일수록 증가한다. 반면에,  $\omega$ 상만이 존재할 수 있는 최고온도보다 높은 고온에서는  $A(T, p)\epsilon^2$ 이 역할을 하며, 통상의 단공공확산이 확산기구로서 역할을 하게 되어 식(6)과 같이 표시된다.

$$G_\omega(T \gg T_\omega) \approx A\epsilon^2 = H^{m_0} - TS^{m_0}$$

그리고 이론적 고찰에 의하면<sup>17)</sup>,  $T_{\beta \rightarrow \alpha} > T_\omega > T_0$ 인 것으로 추정되고 있다.

b.c.c의  $\beta$ -Ti의  $<111>$  방향으로 격자면 변위에 의해 육방정구조의  $\omega$ 상이 생성하는 과정에서 변태에 기여하는 활성화상태의 원자배열로 인해  $\beta$ 상의  $[1\bar{2}\bar{1}]$  방향으로 약 3.4%의 변위가 발생하게 된다. 그러나  $\omega$ 상 중의 격자점에 위치하는 원자의 원자반경이 용매원자보다 1.7%보다 큰 용질원자가 존재하면,  $\omega$ 상 형성에 따른  $\beta$ 상의  $[1\bar{2}\bar{1}]$  방향으로 발생하는 고유변위가 제거되고  $\epsilon=1$ 이 된다. 따라서 b. c. c. 구조의 활성화된 원자배열은 불안정하므로 불순물확산의 원자반경  $r_i$  용매원자반경  $r_m$ 의 1.07배 보다 작다면 parameter  $\epsilon$ 는 다음과 같이 표시 할 수 있다.

$$\epsilon = r / 1.017r_m \quad (r \leq 1.071r_m) \quad (7)$$

한편, 불순물확산의 원자반경이 1.017r<sub>m</sub> 보다 큰 경우는 식(8)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\epsilon = 1 - (r - 1.017r_m) / 1.017r_m \quad (r \geq 1.071r_m) \quad (8)$$

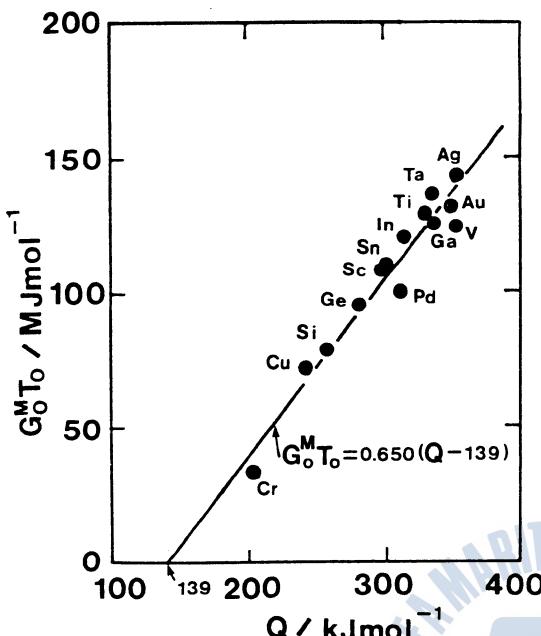


Fig. 3 Plot of  $G_m^M T_0$  versus  $Q$  for in  $\beta$ -Ti

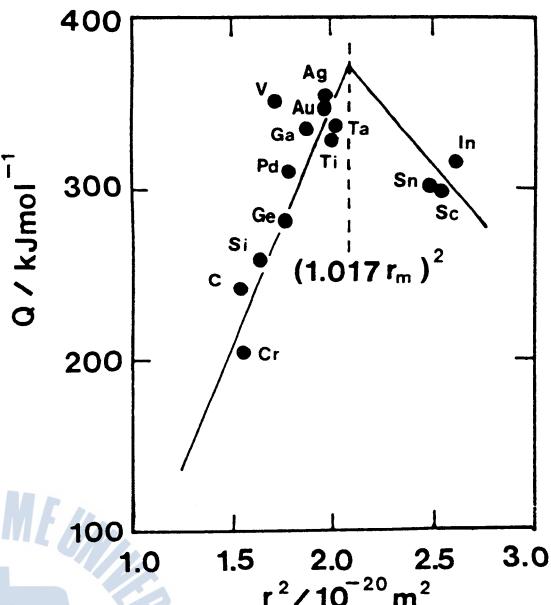


Fig. 4 Plot of the activation energy  $Q$  versus the square of radius  $r^2$  of diffusing atom.

식(6)~(8)로부터 얻을 수 있는 결과는 불순물원자의 이동을 위한 엔탈피는 불순물원자 반경의 제곱에 비례한다는 점이다. 여기서 사용하는 불순물 확산원자의 원자반경의 값은 다음과 같은 점을 고려하여야 한다. 즉,  $\beta$ -Ti의 b. c. c. 격자구조는 배위수가 8이므로 b. c. c.의 구조를 갖지 않는 금속의 원자반경 값은 변환관계식<sup>19)</sup>에 의해 배위수 8에 대한 값으로 변환하여 사용하여야 한다. Fig. 4에 표시한 바와 같이  $r < 1.017r_m$ 인 경우  $Q$ 는  $r^2$ 증가에 따라 직선적으로 증가하지만,  $r > 1.017r_m$ 인 경우  $Q$ 는  $r^2$ 증가에 따라 감소한다.

$\beta$ -Ti중의 불순물 확산에 관한 실험으로부터 얻어진 Fig. 4의  $Q$ 와  $r^2$ 과의 결과는 식(6)~식(8)로부터 얻어진  $H_m^M (=Q - H_f^0)$ 와  $r^2$ 와의 직선적 비례관계와 잘 일치하고 있다.

따라서  $\beta$ -Ti중의 불순물 확산의 경우 원자반경의 크기가 주된 인자임을 알 수 있다.

#### 4. 결론

1173K에서 1823K의 온도범위에서 (순Ti) - (Ti - 1.26wt% Au합금)의 확산쌍을 사용하여 상호확산법으로 결정한  $\beta$ -Ti중의 Au불순물 확산 계수로부터 얻어진 결과는 다음과 같다.

(1)  $\beta$ -Ti중의 Au불순물 확산계수  $D_{\text{Au}}$ 의 온도 의존성은 Arrhenius plot의 직선성으로부터 편기하여 위로 오목한 형태의 곡선성을 나타내며, 온도 의존성은 아래와 같이 표시된다.

$$D_{\text{Au}} = D_0 \exp(-Q/RT) \exp(G_m^M T_0/RT^2) \quad (\text{m}^2\text{s}^{-1})$$

여기서,  $D_0$ 는  $(19.32^{+12.74}_{-5.38}) \times 10^{-4} \text{m}^2\text{s}^{-1}$ ,  $Q$ 는  $(348 \pm 21) \text{ kJ mol}^{-1}$  및  $G_m^0 T_0$ 는  $(132 \pm 14) \text{ MJ mol}^{-1} \text{ K}$ 이다.

(2)  $\beta$ -Ti중의 Au의 불순물 확산의 경우 Au원자 이동을 위한 엔탈피  $H_m^0$ 는  $(209 \pm 21) \text{ kJ mol}^{-1}$ 이고,  $\beta$ -Ti의 공공형성을 위한 에탈피  $H_f^0$ 는  $(139 \pm 15) \text{ kJ mol}^{-1}$ 이다.

(3)  $\beta$ -Ti중 Au의 Au불순물 확산을 비롯한 다른 원소들의 불순물 확산계수의 온도의 존성을 종합한 결과, 격자진동에 의한  $\beta$ -Ti의 b. c. c. 구조가 가장 불안정하기 시작하는 온도  $T_0$ 는  $(650 \pm 3) \text{ K}$ 이다.

(4)  $\beta$ -Ti중의 Au의 불순물 확산의 경우에도 Au의 원자반경이 중요하게 작용한다.

### 참고 문헌

- 1) Le Claire, A.D. : Diffusion in Body Centered Cubic Metals, Metals Park, Ohio, Institute for Metals, 1965, p. 3
- 2) Köhler, U., and Herzig, C. : Phys. Stat. Sol.(b), 144(1989), 243.
- 3) Stassis, C., Zaresky, J. and Wakabayashi, N. : Phys. Rev. Lett., 41(1978), 1726.
- 4) Sanchez, J. M. and de Fontaine, D. : Phys. Rev. Lett., 35(1975), 227.
- 5) Petry, W., Flottmann, T., Heiming, A., Trampenau, J., Alba, M. and Vogl, G. : Phys. Rev. Lett., 61(1988), 722.
- 6) Petry, W., Heiming, A., Trampenau, J., Alba, M., Herzig, C., Schober, H. R. and Vogl, G. : Phys. Rev. B, 43(1991), 10933.
- 7) Heiming, A., Petry, W., Trampenau, J., Alba, M., Herzig, C., Schober, H. R. and Vogl, G. : Phys. Rev. B, 43(1991), 10948.
- 8) Trampenau, J., Heiming, A., Petry, W., Alba, M., Herzig, C., Miekeley, W. and Schober, H. R. : Phys. Rev. B, 43 (1991), 10963.
- 9) Köhler, U., and Herzig, C. : Phil. Mag. A, 58(1988), 769.
- 10) Herzig, C. : Ber. Bunsenges. Phys. Chem., 93(1989), 1247.
- 11) Petry, W., Heiming, A., Herzig, C., and Trampenau, J. : Defect and Diffusion Forum, 75(1991), 211.
- 12) Lee, S. Y., Iijima, Y., Taguchi, O. and Hirano, K. : J. Japan Inst. Metals, 54(1990), 502.
- 13) Lee, S. Y., Iijima, Y. and Hirano, K. : Mater. Trans. JIM, 32(1991), 451.
- 14) Lee, W. Y., Iijima, Y. and Hirano, K. : unpublished
- 15) Matano, C. : Japan J. Phys., 8(1933), 109.
- 16) Darken, L. S. : Trans. AIME, 175(1948), 148.
- 17) Sanchez, J. M. : Phil. Mag. A, 43(1981), 1407.
- 18) Cook, H. E. : Acta Metall., 21(1973), 1431.
- 19) Pearson, W. B. : The Crystal Chemistry and Physics of Metals and Alloys, New York, John Wiley & Sons, Inc., 1972, p. 135.