

## 해석정밀형삽입원자방법에 의한 체심립방금속들의 포논상태밀도에 대한 연구

진 학 선

원자력을 동력으로 리용하기 위한 연구사업을 끊임없이 강화해나가는데서 각종 금속 및 금속간화합물핵재료의 물성에 대한 연구를 새로운 과학적기초우에 올려세우는것은 중요한 의의를 가진다.

체심립방구조를 가지는 Fe는 원자로용기재료, 원자로설비재료로 많이 쓰이며 합금의 형태로 연료외피재료, 집합체부분품재료, 안내관재료, 반사재료로 널리 쓰인다. 또한 Cr, Mo 등 금속원소들은 Fe와 함께 원자로구조재료용강재를 이루는 합금원소로 쓰인다. W는 로심구조재료 특히 연료외피재료로 많이 쓰인다. 이런 금속재료들의 포논분산특성을 전면적으로 반영하는 포논상태밀도를 계산하면 리용된 모형포텐샬의 정확성을 더 잘 검증할수 있고 비열, 데바이온도, 열팽창계수들을 비롯한 재료의 물성들을 계산할수 있다.[4]

본문에서는 해석정밀형삽입원자방법과 결정동력학적방법을 결합하여 체심립방금속들의 포논상태밀도를 계산하는 한가지 방법을 제기하고 실지 대상들에 적용하였다.

결정동력학적방법으로 체심립방구조에 대하여 포논상태밀도를 계산하는 기본관계식들은 다음과 같다.

$$D_{\alpha\beta}\left(\frac{\vec{q}}{kk'}\right) = (m_k m_{k'})^{-1/2} \sum_{l'} \phi_{\alpha\beta}\left(\frac{l l'}{k k'}\right) \exp\left\{i\vec{q}\left[\vec{r}\left(\frac{l'}{k'}\right) - \vec{r}\left(\frac{l}{k}\right)\right]\right\} \quad (1)$$

$$\left|D_{\alpha\beta}\left(\frac{\vec{q}}{kk'}\right) - \delta_{\alpha\beta} \delta_{kk'} \omega^2(\vec{q})\right| = 0 \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}) = \frac{\partial^2 E}{\partial r_{i\alpha} \partial r_{j\beta}} = & \left\{ \frac{r_{ij\alpha} r_{ij\beta}}{r_{ij}^2} \left[ \phi''(r_{ij}) - \frac{\phi'(r_{ij})}{r_{ij}} \right] + \delta_{\alpha\beta} \frac{\phi'(r_{ij})}{r_{ij}} - \right. \\ & - \sum_{k \neq i, j} F''(\rho_k) f'(r_{jk}) f'(r_{ik}) \frac{r_{ik\alpha} r_{jk\beta}}{r_{ij}^2} + F''(\rho_i) f'(r_{ij}) \frac{r_{ij\beta}}{r_{ij}} \sum_{k \neq i} f'(r_{ik}) \frac{r_{ik\alpha}}{r_{ik}} - \\ & - F''(\rho_j) f'(r_{ij}) \frac{r_{ij\alpha}}{r_{ij}} \sum_{k \neq j} f'(r_{jk}) \frac{r_{ik\beta}}{r_{jk}} - 4 \sum_{k \neq i, j} M''(P_k) f(r_{jk}) f'(r_{jk}) f(r_{ik}) f'(r_{ik}) \frac{r_{ik\alpha} r_{jk\beta}}{r_{ij}^2} + \\ & + 4M''(P_i) f(r_{ij}) f'(r_{ij}) \frac{r_{ij\beta}}{r_{ij}} \sum_{k \neq i} f(r_{ik}) f'(r_{ik}) \frac{r_{ik\alpha}}{r_{ik}} - \\ & \left. - 4M''(P_j) f(r_{ij}) f'(r_{ij}) \frac{r_{ij\alpha}}{r_{ij}} \sum_{k \neq j} f(r_{jk}) f'(r_{jk}) \frac{r_{ik\beta}}{r_{ij}} \right\} \quad (3) \end{aligned}$$

이로부터 동력학적행렬  $D$ 를 구하고 살창진동의 주파수( $\omega$ )와 파수벡토르( $\vec{q}$ )사이의 관

계를 얻을수 있다.

파수벡토르의 값은 평등분포이고 립방구조의 대칭성을 고려하면 계산해야 할 부분은 전체 첫째 띠구역의  $1/8 \times 1/3 \times 1/2 = 1/48$ 이며 공간적으로 보면 (100), (110), (111)방향사이의 3면각부분이다.

체심립방금속에 대한 해석정밀형압입원자방법의 기본방정식, 포텐셜형식과 모형파라미터계산에 리용되는 기본관계식들은 다음과 같다. [1, 2]

$$E = \sum_{i=1}^n E_i \quad (4)$$

$$E_i = F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_j \phi(r_{ij}) + M(P_i) \quad (5)$$

$$\rho_i = \sum_j f(r_{ij}) \quad (6)$$

$$\phi(r) = \begin{cases} \sum_{j=1}^3 k_j \left( \frac{r}{r_1} \right)^j & r \leq r_2 \\ \sum_{j=0}^7 l_j \left( \frac{r}{r_2} - 1 \right)^j & r_2 < r \leq r_c \\ 0 & r > r_c \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \phi(r_c) = 0, \quad \phi'(r_c) = 0, \quad \phi''(r_c) = 0, \quad \phi'''(r_c) = 0, \\ \phi_1(r_2) = \phi_1'(r_2), \quad \phi_1''(r_2) = \phi_1''(r_2), \quad \phi_1'''(r_2) = \phi_1'''(r_2), \quad \phi_1''''(r_2) = \phi_1''''(r_2) \end{aligned} \quad (8)$$

$$l_0 = \sum_{j=-1}^3 k_j s^j, \quad l_1 = \sum_{j=-1}^3 j k_j s^j, \quad l_2 = \frac{1}{2} \sum_{j=-1}^3 j(j-1) k_j s^j, \quad l_3 = \frac{1}{6} \sum_{j=-1}^3 j(j-1)(j-2) k_j s^j \quad (9)$$

$$s = \frac{r_4}{r_1}, \quad d = \frac{r_c}{r_4} - 1, \quad r_c = r_2 + 0.6(r_3 - r_2), \quad r_{cf} = r_5 + \frac{3}{4}(r_6 - r_5) \quad (10)$$

식 (4), (5)로 표현되는 에너지를 식 (3)에 대입하면 해석정밀형압입원자방법과 결정동력확방법이 결합된다. 모형포텐셜의 파라미터계산에 리용된 입력파라미터들은 표 1, 계산된 모형파라미터값들은 표 2와 같다.

입력파라미터들은 살창상수  $a$ , 응집에너지  $E_c$ , 단빈살창점의 형성에너지  $E_{1f}$ , 독립적인 3개의 탄성상수들  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ 와 조밀립방구조와 체심립방구조사이의 에너지차  $E_{bf}$ 로서 선행연구들[1, 3]에서 계산된 정확성이 높은 실험값들과 계산값들로 선택되었다.

표 1. 체심립방금속들의 입력파라미터

금속	$a/\text{nm}$	$E_c/\text{eV}$	$E_{1f}/\text{eV}$	$C_{11}/\text{GPa}$	$C_{12}/\text{GPa}$	$C_{44}/\text{GPa}$	$E_{bf}/\text{eV}$
Cr	0.288 46	4.10	1.80	346	66	100	Cr
Fe	0.286 64	4.28	1.79	230	135	117	Fe
Mo	0.314 68	6.82	3.10	459	168	111	Mo
W	0.315 60	8.90	3.95	517	203	157	W

표 2. 체심립방금속들의 모형파라미터

파라미터	Cr	Fe	Mo	W
$k_0/\text{eV}$	-202.616 4	-183.137 8	-494.104 2	-1 181.861 5
$k_1/\text{eV}$	281.058 2	229.417 3	685.091 2	1 631.331 0
$k_2/\text{eV}$	-178.014 9	-129.480 3	-427.906 9	-1 005.490 3
$k_3/\text{eV}$	43.311 7	27.930 6	101.470 4	233.443 3
$k_{-1}/\text{eV}$	56	55	135	322
$\alpha/\text{eV}$	-0.297	0.056 2	-0.203 2	-0.224 4
$n$	0.8	0.56	0.90	0.77
$F_0/\text{eV}$	2.30	2.49	3.72	4.95

해석정밀형압입원자모형포텐셜로 계산한 Cr, Fe, Mo, W의 포논상태밀도들은 각각 그림 1-4와 같다.

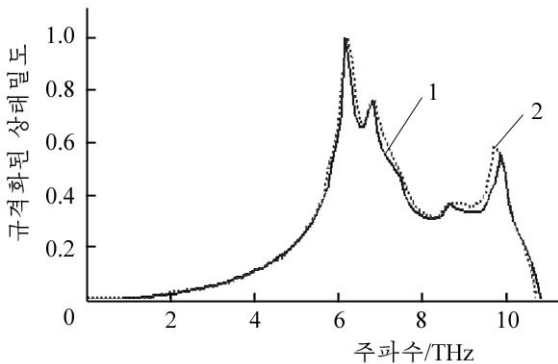


그림 1. 체심립방금속 Cr의 포논상태밀도  
1—계산결과, 2—선행연구결과[4]

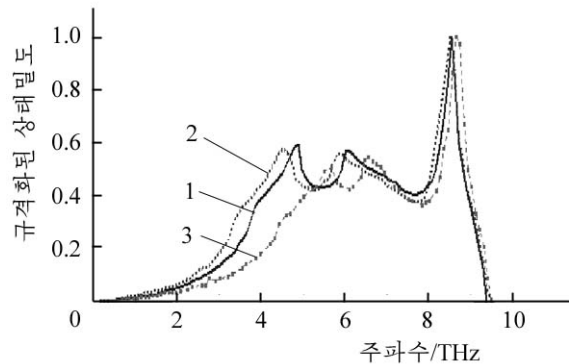


그림 2. 체심립방금속 Fe의 포논상태밀도  
1—계산결과, 2—선행연구결과[4], 3—실험값

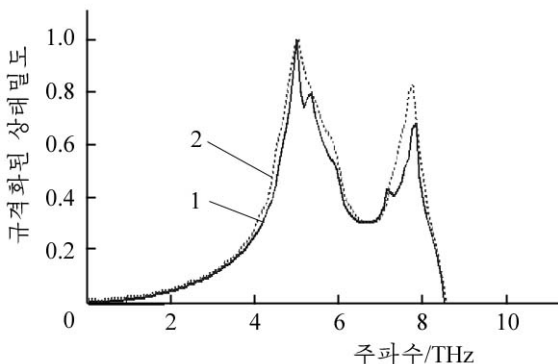


그림 3. 체심립방금속 Mo의 포논상태밀도  
1—계산결과, 2—선행연구결과[4]

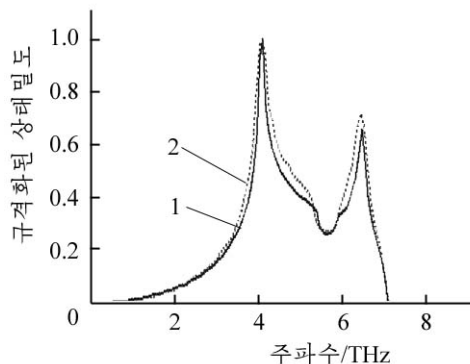


그림 4. 체심립방금속 W의 포논상태밀도  
1—계산결과, 2—선행연구결과[4]

Fe에 대한 결과는 실험결과와 매우 비슷하며 선행연구의 계산결과에 비하여 실험결과에 더 접근하였다. 기타 금속들에서는 선행연구의 계산결과와 거의 일치한다. 다만 봉우리의 폭과 높이, 세부적인 형태에서 조금 차이가 있다.

Mo에서는 선행연구결과와 다르게 4개의 봉우리가 나타난다. 다른 금속들의 포논상태 밀도곡선의 형태와 Fe에 대한 계산결과가 실험결과와 더 잘 일치하므로 Mo에 대한 계산 결과가 믿음성이 있다고 평가할수 있다.

## 맺 는 말

해석정밀형압입원자방법과 결정동력학을 결합하여 체심립방금속의 포논상태밀도를 계산하는 방법을 제기하였다. 제기한 방법에 의하여 계산된 체심립방금속인 Fe의 포논상태밀도곡선은 선행연구의 계산결과보다 실험값에 더 접근하였으며 다른 금속들에서는 선행연구의 계산결과와 거의 일치한다.

## 참 고 문 헌

- [1] 김일성 종합대학학보(자연과학), 59, 5, 70, 주체102(2013).
- [2] 진학선 등; 물리, 1, 20, 주체102(2013).
- [3] H. Jin et al.; Advanced Materials Research, 424, 568, 2012.
- [4] 张邦维 等; 嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用, 湖南大学出版社, 299~326, 2003.

주체103(2014)년 10월 5일 원고접수

## On the Phonon DOS of BCC Metals by Precise AEAM

*Jin Hak Son*

We suggested a calculation method of the phonon DOS (density of state) for BCC metals by combining the precise AEAM (analytic embedded atom method) and the lattice dynamics method, and applied it to Cr, Fe, Mo and W.

Key words: precise AEAM, lattice dynamics, BCC metal, phonon DOS