

해석정밀형압입원자방법과 결정동력학적방법에 의한 Nb, Ta, V, W의 열팽창특성에 대한 연구

정광별, 진학선

경애하는 최고령도자 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《정보기술, 나노기술, 생물공학을 비롯한 핵심기초기술과 새 재료기술, 새 에너지기 기술, 우주기술, 핵기술과 같은 중심적이고 견인력이 강한 과학기술분야를 주라격방향으로 정하고 힘을 집중하여야 합니다.》(《조선로동당 제7차대회에서 한 중앙위원회사업총화보고》 단행본 39페이지)

고체결정에서는 결정살창의 진동특성에 의하여 열용량, 열팽창, 열전도 등의 열력학적 특성들이 결정된다.[5] 열용량은 살창진동의 조화항과 련관되며 열팽창과 열전도는 살창진동의 비조화항과 련관된다. 정밀측정계기와 우주항공분야를 비롯한 여러 분야에서 리용되는 금속재료들의 열팽창특성은 이 재료들의 사용특성에 중요한 영향을 준다.[6]

론문에서는 해석정밀형압입원자방법과 결정동력학적방법을 결합하여 열팽창특성을 모의계산하는 방법을 제기하고 해석정밀형압입원자방법포텐셜[4]을 리용하여 원자력공업에서 많이 리용되는 금속들인 Nb, Ta, V, W의 열팽창률을 결정하였다.

열팽창에 대한 계산에서는 포논분산특성과 그뤼나이젠결수가 리용된다. 선행연구[1-3]들에서 해석정밀형압입원자방법으로 포논분산특성을 계산하는 방법을 주었다. 그뤼나이젠결수는 결정살창의 비조화진동과 관련되는 중요한 파라메터이다.[7] 이 파라메터는 무분량으로서 다음의 관계식으로 정의된다.

$$\gamma = -\frac{d \ln \omega_s(q)}{d \ln V} \quad (1)$$

웃식을 살창상수에 관한 식으로 넘기면 다음과 같다.

$$\gamma = -\frac{1}{3} \cdot \frac{d \ln \omega_s(q)}{d \ln a} \quad (2)$$

여기서 V 는 체적, a 는 살창상수, q 는 파수벡토르이다.

론문에서는 포논분산관계 $\omega_s(q)$ 를 해석정밀형압입원자방법포텐셜을 도입하여 결정동력학적방법으로 구하였다. 밀첨자 s 는 주어진 파수벡토르에서 영년방정식을 풀어 얻어지는 포논주파수값들중의 하나를 가리키며 립방금속들에 대해서는 1부터 3, 조밀육방금속들에 대해서는 1부터 6사이의 옹근수값을 취한다.

체심립방금속들인 Nb, Ta, V, W에 대하여 $s=2$, $q=(2\pi/a \ 0 \ 0)$ 을 취하였다. 해석정밀형압입원자방법포텐셜[4]을 리용하여 계산된 Nb, Ta, V, W의 그뤼나이젠결수들은 각각 2.44, 1.91, 1.61, 1.53이다.

그림 1과 2에 Nb에 대하여 해석정밀형압입원자방법포텐셜을 도입하여 결정동력학적방법으로 계산한 포논분산곡선과 포논상태밀도를 각각 보여주었다. 포논분산곡선에서는 제 1브릴루앵구역의 3개의 고대칭방향 (000)→(001), (000)→(111), (000)→(1/2 1/2 0)과 2개의 저

대칭방향들인 $(1/2 \ 1/2 \ 0) \rightarrow (1/2 \ 1/2 \ 1)$, $(1/2 \ 1/2 \ 1) \rightarrow (0 \ 0 \ 1)$ 들을 따라 파수벡토르와 포논주파수사이의 관계를 주었다.

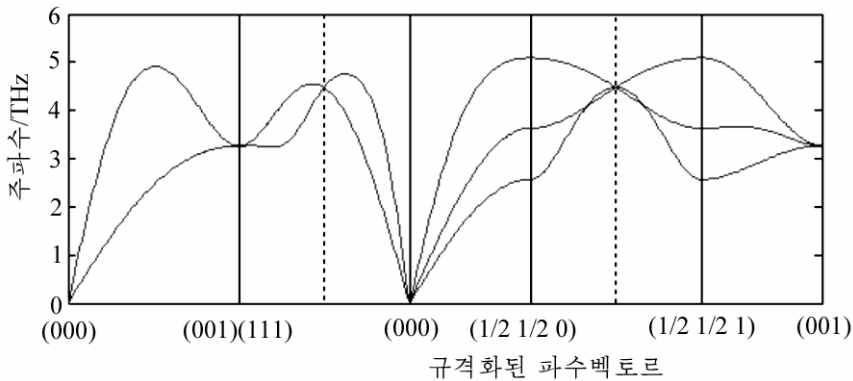


그림 1. Nb의 포논분산곡선

포논상태밀도를 계산할 때 파수벡토르 q 가 취할수 있는 값은 평등분포이고 체심립방구조의 대칭성을 고려하면 계산해야 할 부분은 전체 제1브릴루앙구역의 $1/8 \times 1/3 \times 1/2 = 1/48$

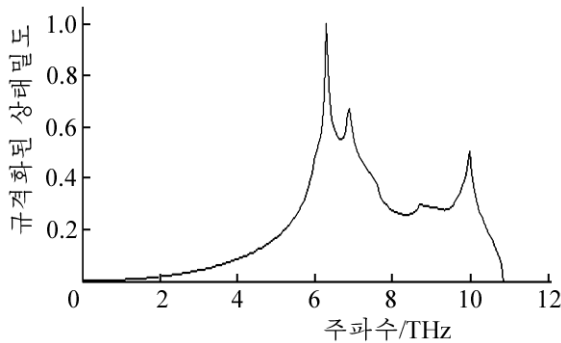


그림 2. Nb의 포논상태밀도

이며 공간적으로 보면 결정의 $[100]$, $[110]$, $[111]$ 방향사이의 3면각부분이다. 이 비가약구역에 $2\pi/a$ 의 $1/300$ 의 간격으로 균일하게 분포된 1 159 076개의 점들에 대한 포논주파수값들을 통계적처리하여 포논상태밀도곡선을 얻는다. 이때 매 점에 대응하는 포논주파수값들이 3개라는것을 고려할 때 통계적처리를 하는 포논주파수값의 개수는 매 금속에 대하여 $3 \cdot 1 \ 159 \ 076$ 개이다.

결정동력학적방법으로 열팽창특성을 계산하기 위한 공식들은 다음과 같다.[6]

$$G = F + PV \quad (3)$$

$$F = F_0 + F_V \quad (4)$$

$$F_0 = U_0(V), \quad F_V = U_V(T, V) - TS \quad (5)$$

$$F_V = \kappa_B T \sum_{qs} \left\{ \frac{\hbar \omega_s(q)}{2\kappa_B T} + \ln[1 - e^{-\hbar \omega_s(q)/\kappa_B T}] \right\} \quad (6)$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = - \frac{dU^0}{dV} - \sum_{qs} \left[\frac{1}{2} \hbar \omega_s(q) + \frac{\hbar \omega_s(q)}{e^{\hbar \omega_s(q)/\kappa_B T} - 1} \right] \frac{1}{V} \frac{d \ln \omega_s(q)}{d \ln V} \quad (7)$$

웃식들에서 G , F 는 각각 계의 열력학적포텐셜과 자유에너르기이고 $U_0(V)$ 는 주어진 체적에서의 계의 호상작용포텐셜에너르기이며 κ_B 는 볼츠만상수, T 는 절대온도, \hbar 는 플랑크상수, $\omega_s(q)$ ($s=1 \sim 3$)는 주어진 파수벡토르에서 영면방정식의 풀이들이다. 위의 공식들에 기초하여 주어진 온도에서 계의 열력학적포텐셜이 최소로 되는 살창상수를 구하면 계의 열팽창특성을 얻게 된다. 식 (4)에서 첫 항 즉 계의 립자들사이의 호상작용에너르기는 살창

상수의 증가에 따라 증가하며 둘째 항은 살창상수가 증가할 때 포논주파수가 작아지므로 함께 작아진다.

식 (3)의 둘째 항인 압력과 체적의 적은 살창상수가 커짐에 따라 커지게 된다. 온도에 따라 식 (6)으로 표현되는 자유에너지의 온도관련항이 변화되면서 열역학적포텐셜에너지가 최소로 되는 살창상수값이 온도에 따라 증가하게 되어 열팽창특성을 나타내게 된다. 중요한것은 살창상수의 변화에 따라 포논분산특성을 매번 다시 계산하는것이 아니라 그뤼나이젠계수를 리용하여 계산시간을 단축한다는것이다. 압력을 계산하는 식 (7)에도 그뤼나이젠계수가 들어간다.

Nb, Ta, V, W에 대하여 온도에 따르는 열팽창특성의 변화를 그림 3에 보여주었다. 여기서 론문계산결과와 실선, 선행계산결과는 점선[7], 실험결과[7]는 점실선으로 표시되었다. 수직축에는 온도에 따르는 살창상수의 열팽창률을 %로 주었다.

Nb에 대한 계산결과를 선행연구자료와 비교하여보면 론문결과는 선행계산결과에 비하여 실험결과와 0~500K의 온도구간에서 훨씬 더 잘 일치한다. Ta에 대한 론문계산결과는 0~50K까지의 온도구간에서 실험결과와 높은 정확도로 일치하며 그보다 높은 온도구간에서도 선행계산결과에 비하여 실험값과의 일치정도가 높다.(150K보다 높은 온도구간에서 선행계산결과와 거의 일치한다.)

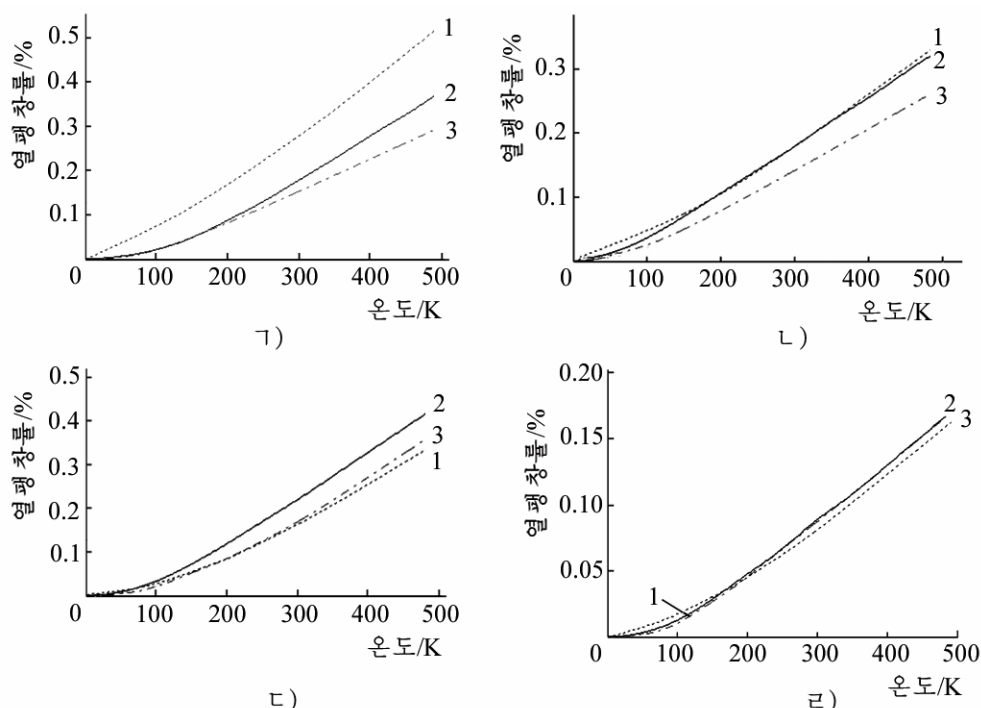


그림 3. 온도에 따르는 열팽창특성의 변화

ㄱ) Nb, ㄴ) Ta, ㄷ) V, ㄹ) W, 1-선행계산결과, 2-계산결과, 3-실험결과

V에 대한 계산결과는 0~50K까지의 온도구간을 제외하고 선행계산결과에 비하여 실험결과와의 일치정도가 떨어진다. W에 대한 계산결과는 0~500K까지의 온도구간에서 실험결과와 선행계산결과보다 더 잘 일치한다.

계산된 네가지 금속에 대하여 총체적으로 볼 때 계산결과들은 실험결과와의 일치정도에서 선행계산결과들에 비하여 많이 개선되었으며 특히 0~100K의 낮은 온도구간에서 계산결과들은 실험결과와 높은 정확도로 일치한다.

이처럼 해석정밀형삽입원자방법과 결정동력학적방법을 결합하면 금속의 열팽창특성과 같은 중요한 열력학적특성을 높은 정확도로 모의할수 있다.

맺 는 말

해석정밀형삽입원자방법과 결정동력학적방법을 결합하여 체심립방금속들의 열팽창특성을 계산하는 방법을 제기하고 Nb, Ta, V, W의 열팽창특성들을 계산하였다. 계산결과들은 실험결과들과 거의 일치한다.

참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 2, 75, 주체102(2013).
- [2] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 2, 80, 주체102(2013).
- [3] 진학선 등; 물리, 1, 20, 주체102(2013).
- [4] H. Jin et al.; Applied Physics, A 120, 189, 2015.
- [5] 黄昆 等; 固体物理学, 高等教育出版社, 78~152, 2008.
- [6] 王润 等; 金属材料物理性能, 冶金工业出版社, 5~36, 1993.
- [7] 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, 290~295, 2003.

주체107(2018)년 3월 5일 원고접수

Thermal Expansion Properties of Nb, Ta, V and W by Precise Analytic Embedded Atom Method and Lattice Dynamic Method

Jong Kwang Byol, Jin Hak Son

We suggested a method to calculate the thermal expansion properties of metals by combining the precise analytic embedded atom method(PAEAM) and the lattice dynamics method. And we determined the thermal expansion properties of Nb, Ta, V and W using this method.

Key words: precise analytic embedded atom method, lattice dynamic method, thermal expansion