

## 해석정밀형압입원자방법에 의한 Al, Ni, Ir 의 열팽창특성에 대한 연구

전충국, 진학선, 황철준

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《새로운 과학기술분야를 개척하기 위한 사업도 전망성있게 밀고나가야 합니다. 나라의 과학기술을 세계적수준에 올려세우자면 발전된 과학기술을 받아들이는것과 함께 새로운 과학기술분야를 개척하고 그 성과를 인민경제에 적극 받아들여야 합니다.》(《김정일선집》 증보판 제11권 138~139페이지)

론문에서는 해석정밀형압입원자방법과 살창동력학적방법을 결합하여 면심립방금속들의 열팽창특성을 모의계산하는 방법을 제기하고 해석정밀형압입원자방법포텐셜[4]을 리용하여 면심립방금속들인 Al, Ni, Ir의 열팽창률을 결정하였다.

열팽창에 대한 계산에서는 포논분산특성과 그뤼나이젠결수가 리용된다.[1-3] 그뤼나이젠결수는 결정살창의 비조화진동과 관련되는 중요한 파라메터로서 다음의 관계식으로 정의된다.[6]

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

웃식을 살창상수에 관한 식으로 넘기면

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

가 얻어지며 이로부터 다음과 같은 근사식이 얻어진다.

$$\omega_s(q)|_{a=a_2} \approx \omega_s(q)|_{a=a_1} \left( \frac{a_2}{a_1} \right)^{3\gamma} \quad (3)$$

웃식들에서  $V$ 는 체적,  $a$ 는 살창상수,  $q$ 는 파수벡토르이다. 그리고 식 (3)에서  $a_1$ 과  $a_2$ 는  $a$ 가 가질수 있는 값들로서 그 차이가 크지 말아야 한다.

론문에서는 면심립방금속들인 Al, Ni, Ir에 대하여 포논분산관계  $\omega_s(q)$ 를 해석정밀형압입원자포텐셜[4]을 도입하여 살창동력학적방법[5]으로 구한다. 밀첨자  $s$ 는 주어진 파수벡토르에서 살창진동방정식을 풀어 얻어지는 포논주파수값들중의 하나를 가리키며 립방금속들에 대해서는 1~3, 조밀육방금속들에 대해서는 1~6사이의 옹근수값을 취한다. 그뤼나이젠결수에 대한 계산에서 면심립방금속들인 Al, Ni, Ir에 대하여  $s=2$ ,  $q=(0, 2\pi/a, 0)$ 을 취하였다. 해석정밀형압입원자방법포텐셜[4]을 리용하여 계산된 Al, Ni, Ir의 그뤼나이젠결수들은 각각 3.29, 2.60, 2.30이다.

그림 1과 2에 Al에 대하여 해석정밀형압입원자방법포텐셜을 도입하여 살창동력학적방법으로 계산한 포논분산곡선과 포논상태밀도를 각각 보여주었다. 포논분산곡선에서는 제1브릴루앵구역의 4개의 고대칭방향 (000)→(010), (010)→(110), (110)→(000), (000)→(1/2 1/2 1/2)과 4개의 저대칭방향들인 (1/2 1/2 1/2)→(1/2 1 0), (1/2 1 0)→(3/4 3/4 0), (3/4 3/4 0)→(1/2 1/2 1/2), (1/2 1/2 1/2)→(010)들을 따라 파수벡토르와 포논주파수사이의 관계를 주었다.

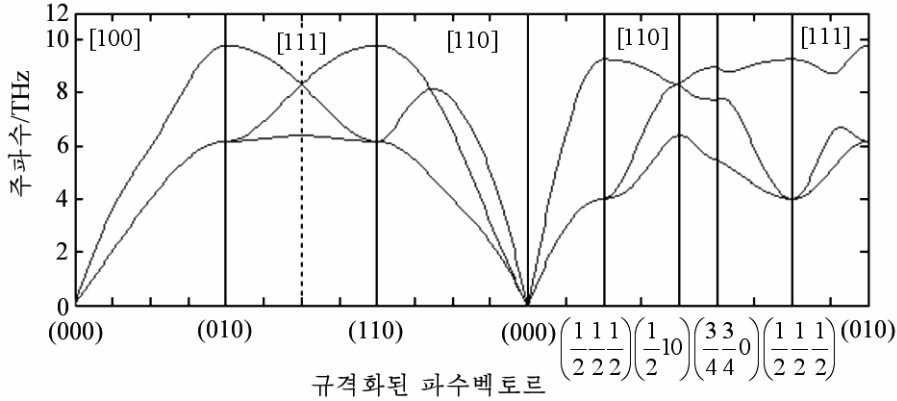


그림 1. Al의 포논분산곡선

포논상태밀도를 계산할 때 파수벡터  $q$ 가 취할수 있는 값은 평등분포이고 체심립방 구조의 대칭성을 고려하면 계산해야 할 부분은 전체 제1브릴루앵구역의  $1/8 \cdot 1/3 \cdot 1/2 = 1/48$ 이며 공간적으로 보면 [100], [110], [111]방향사이의 3면각부분이다. 이 비가약구역에  $2\pi/a$ 의  $1/300$ 간격으로 균일하게 분포된 2 296 843개의 점들에 대한 포논 주파수값들을 통계적처리하여 포논상태밀도곡선을 얻는다. 이때 매 점에 대응하는 포논주파수값들이 3개라는것을 고려할 때 통계적처리를 하는 포논주파수값의 개수는 매 금속에 대하여 2 296 843의 3배이다.

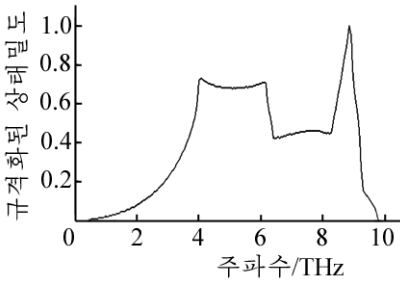


그림 2. Al의 포논상태밀도

살창동력학적방법으로 열팽창특성을 계산하기 위한 공식들은 다음과 같다.[6]

$$G = F + PV \quad (4)$$

$$F = F_0 + F_V \quad (5)$$

$$F_0 = U_0(V), F_V = U_V(T, V) - TS \quad (6)$$

$$F_V = \kappa_B T \sum_{q,s} \left\{ \frac{\hbar \omega_s(q)}{2\kappa_B T} + \ln[1 - e^{-\hbar \omega_s(q)/\kappa_B T}] \right\} \quad (7)$$

$$P = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = - \frac{dU^0}{dV} - \sum_{q,s} \left[ \frac{1}{2} \hbar \omega_s(q) + \frac{\hbar \omega_s(q)}{e^{\hbar \omega_s(q)/\kappa_B T} - 1} \right] \frac{1}{V} \frac{d \ln \omega_s(q)}{d \ln V} \quad (8)$$

여기서  $G$ ,  $F$ 는 각각 계의 열력학적포텐셜과 자유에너르기이고  $U_0(V)$ 는 주어진 체적에서 계의 호상작용포텐셜에너르기이며  $\kappa_B$ 는 볼츠만상수,  $T$ 는 절대온도,  $\hbar$ 는 플랑크상수,  $\omega_s(q)$  ( $s=1 \sim 3$ )는 주어진 파수벡터에서 살창진동방정식의 풀이들이다.

우의 공식들에 기초하여 주어진 온도에서 계의 열력학적포텐셜이 최소로 되는 살창상수를 구하면 계의 열팽창특성을 얻게 된다. 식 (4)에서 첫 항 즉 계의 립자들사이호상작용에너기는 살창상수가 커짐에 따라 증가하며 두번째 항은 살창상수가 증가할 때 포논주파수가 작아지므로 함께 작아진다.

식 (4)의 두번째 항인 압력과 체적의 적은 살창상수가 커짐에 따라 커지게 된다. 온도에 따라 식 (7)로 표시되는 자유에너르기의 온도관련항이 변화되면서 열력학적포텐셜에

르기가 최소로 되는 살창상수값이 온도에 따라 증가하게 되어 열팽창특성을 나타내게 된다. 중요한것은 살창상수의 변화에 따라 포논분산특성을 매번 다시 계산하는것이 아니라 이미 계산된 그뤼나이젠결수와 식 (3)을 리용하여 계산시간을 단축하는것이다. 압력을 계산하는 식 (8)에도 그뤼나이젠결수가 들어간다.

Al, Ni, Ir에 대하여 온도에 따르는 열팽창특성의 계산결과들을 그림 3에 보여주었다.

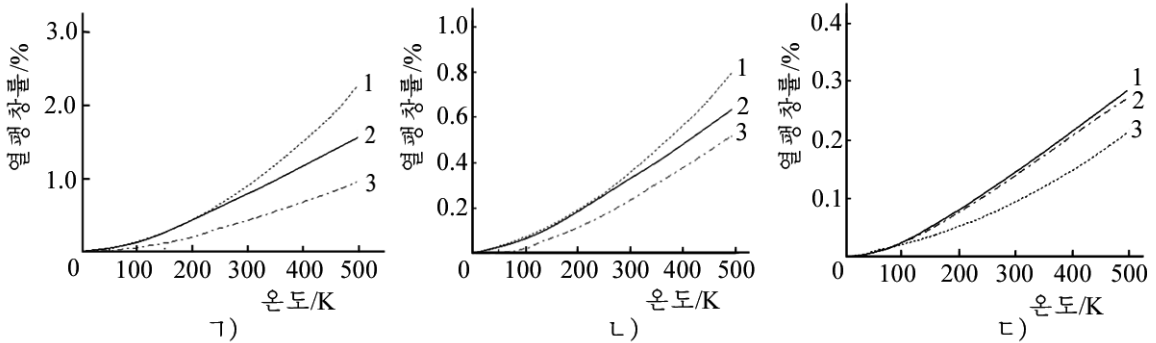


그림 3. 온도에 따르는 열팽창특성의 계산결과  
 ㄱ) Al, ㄴ) Ni, ㄷ) Ir, 1-선행연구결과[5], 2-계산결과, 3-실험결과[6]

그림 3에서 수직축에는 온도에 따르는 살창상수의 상대적변화를 %로 준다.

Al과 Ni에 대한 계산결과를 선행연구결과와 비교하여보면 이 계산결과는 선행연구결과에 비하여 실험결과와 200~500K의 온도구간에서 더 잘 일치한다. 0~200K의 온도구간에서는 선행연구결과와 거의 일치한다. Ir에 대한 계산결과는 0~500K까지의 온도구간에서 실험결과와 높은 정확도로 일치하며 선행연구결과에 비하여 실험값과의 일치정도가 훨씬 높다. 이처럼 해석정밀형삽입원자방법과 살창동력학적방법을 결합적용하면 면심립방금속들의 열팽창특성과 같은 중요한 물성을 높은 정확도로 모의할수 있다.

## 맺 는 말

해석정밀형삽입원자방법과 살창동력학적방법을 적용하여 면심립방금속들의 열팽창특성을 계산하는 방법을 제기하였다. 이 방법에 의하여 계산된 Al, Ni, Ir의 열팽창특성들은 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] 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.

## **Precise Analytic Embedded Atom Method for Thermal Expansion of Al, Ni and Ir**

*Jon Chung Guk, Jin Hak Son and Hwang Chol Jun*

We suggested a calculation method of the thermal expansion properties of FCC metals by combining the PAEAM(precise analytic embedded atom method) and the lattice dynamics method, and determined the thermal expansion properties for Al, Ni and Ir.

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