

## 해석정밀형삽입원자방법에서 조밀립방구조의 제 1 브릴루앵구역의 적용

홍권룡, 진학선

결정살창의 결정동력학적연구에서는 거꿀살창과 브릴루앵구역[3, 6] 특히 해당 결정구조에 대응하는 제1브릴루앵구역[1, 4]을 확정하는것이 중요하다. 결정살창의 진동은 고체의 거시적 및 미시적성질을 연구하는 기초로 되는데 결정체의 전기적, 광학적, 자기적성질과 초전도성, 결정상변환 등이 모두 결정살창의 진동과 연관되어있다.

우리는 조밀립방구조의 제1브릴루앵구역을 결정하고 해석정밀형삽입원자방법[2, 5]으로 조밀립방금속들의 결정동력학적특성들과 열력학적특성들을 계산하였다.

살창상수가  $a$ 인 조밀립방살창의 토대벡토르는 다음과 같다.

$$\alpha_1 = a(e_1 + e_2)/2, \alpha_2 = a(e_2 + e_3)/2, \alpha_3 = a(e_1 + e_3)/2 \quad (1)$$

여기서  $e_1, e_2, e_3$ 는 직각자리표계의 토대벡토르들이다.

파수벡토르공간에서 조밀립방살창에 대응하는 거꿀살창의 토대벡토르는 다음과 같다.

$$b_1 = 2\pi \frac{\alpha_2 \times \alpha_3}{\alpha_1 \cdot [\alpha_2 \times \alpha_3]} = \frac{2\pi}{a} (e_1 + e_2 - e_3), \quad b_2 = 2\pi \frac{\alpha_3 \times \alpha_1}{\alpha_2 \cdot [\alpha_3 \times \alpha_1]} = \frac{2\pi}{a} (-e_1 + e_2 + e_3),$$

$$b_3 = 2\pi \frac{\alpha_1 \times \alpha_2}{\alpha_3 \cdot [\alpha_1 \times \alpha_2]} = \frac{2\pi}{a} (e_1 - e_2 + e_3) \quad (2)$$

살창상수가  $a$ 인 체심립방살창의 토대벡토르들은 다음과 같다.

$$\alpha_1 = a(e_1 + e_2 - e_3)/2, \alpha_2 = a(-e_1 + e_2 + e_3)/2, \alpha_3 = a(e_1 - e_2 + e_3)/2 \quad (3)$$

식 (2), (3)을 비교하면 조밀립방살창에 대응하는 거꿀살창이 살창상수가  $4\pi/a$ 인 체심립방살창이라는것을 알수 있다.(그림 1) 이때 중심원자주위에 8개의 체심원자들이 중심원자의 제1린접원자로 된다.

매개 제1린접원자와 중심원자사이의 수직2등분면에 의하여 한변의 길이가  $3\sqrt{2}\pi/a$ 인 바른8면체가 생긴다.(그림 2) 또한 중심원자를 지나는  $x$ 축에서 2개의 살창점,  $y$ 축에서 2개의 살창점,  $z$ 축에서 2개의 살창점들이 중심원자의 제2린접원자로 되는데 제2린접원자들과 중심원자사이의 수직2등분면에 의하여 이미 생긴 바른8면체의 6개의 정점들이 그림 3과 같이 잘리워 조밀립방구조에 대하여 14면체의 제1브릴루앵구역이 결정된다. 이때 자를면들은 각각  $x, y, z$ 축에 수직이며 중심으로부터 정점까지의 선분을 2:1로 나눈다.

조밀립방구조의 거꿀살창과 제1브릴루앵구역을 리용하여 해당 결정살창에 대한 결정동력학적, 열력학적특성들을 연구할수 있다. 이때 결정살창들에 배치된 원자들사이의 호상작용포텐셜을 계산하여야 하는데 우리는 해석정밀형삽입원자방법으로 계산하였다.

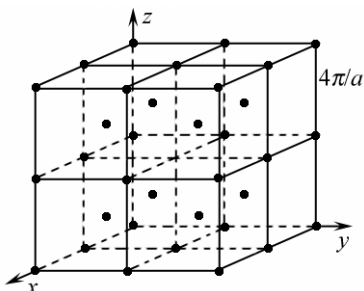


그림 1. 조밀립방살창의 거꿀살창

그림 1. 조밀립방살창의 거꿀살창

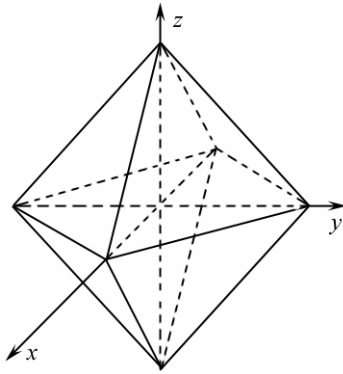


그림 2. 중심원자와 제1린접원자에 의하여 결정되는 바른8면체

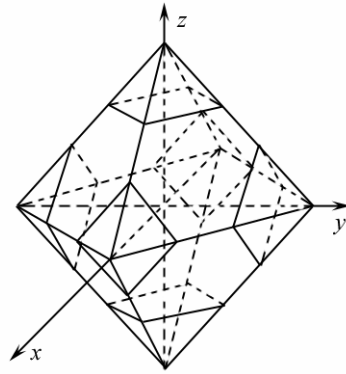


그림 3. 조밀립방구조의 제1브릴루앵구역

해석정밀형압입원자방법으로 조밀립방금속인 니켈의 포논분산곡선과 포논상태밀도를 계산한 결과들은 각각 그림 4, 5와 같으며 얻어진 포논상태밀도에 기초하여 계산한 Ni의 온도에 따르는 정적비열변화곡선은 그림 6과 같다.

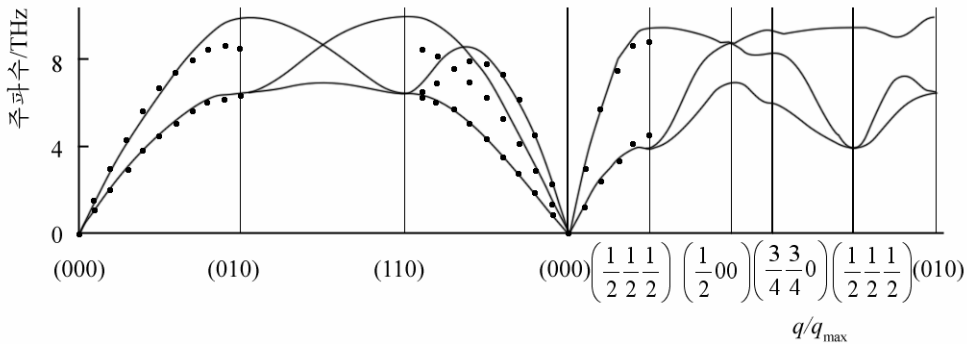


그림 4. 조밀립방금속 Ni의 포논분산곡선  
실선은 논문계산결과, 점들은 실험값[7]

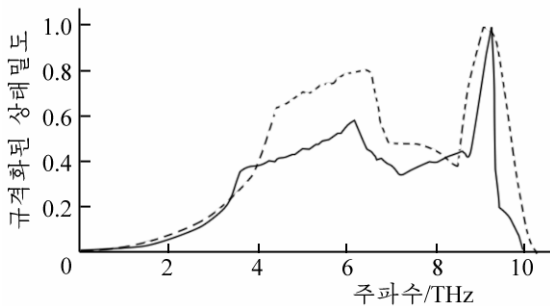


그림 5. 조밀립방금속 Ni의 포논상태밀도  
실선은 논문계산결과, 점선은 선행연구결과[7]

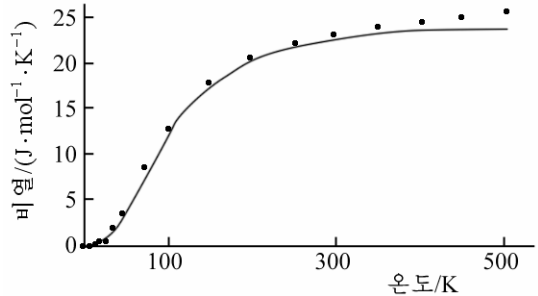


그림 6. 온도에 따르는 정적비열변화곡선  
실선은 논문계산결과, 점들은 실험값[7]

그림 4에서 보는바와 같이 포논분산곡선에 대한 논문계산결과는 실험값[7]과 잘 일치하지만 높은 주파수에서는 잘 일치하지 않는다. 이것은 살창진동의 주파수가 커지면 살창진동에너기가 커지며 따라서 살창진동의 비조화특성이 더 크게 나타나는것과 관련된다.

그림 5에서 보는바와 같이 포논상태밀도는 선행연구결과[7]와 대체로 일치하며 봉우리 부분에서 봉우리들의 높이와 폭이 차이난다. 해석정밀형압입원자방법으로는 살창점결합과

구조안정성을 비롯한 조밀립방금속들의 물성을 해석수정형삽입원자방법보다 더 정확히 계산할수 있다.

그림 6에서 보는바와 같이 론문계산결과와 실험값[7]이 거의 일치한다. 온도가 높아짐에 따라 비열값은 증가하여  $25.1\text{J}/(\text{K} \cdot \text{mol})$ 로 다가가며 이것은 들롱-쁘띠의 법칙과 일치한다. 실험값과 계산결과사이의 차이는 온도가 높아질수록 더 뚜렷하게 나타난다. 그것은 온도가 높을수록 살창진동의 비조화특성이 더 크게 나타나기때문이다.

이로부터 해석정밀형삽입원자포텐셜이 정확하며 결정동력학적방법에 의한 살창진동특성에 대한 모의도 정확히 진행되었다는것을 알수 있다.

조밀립방금속들인 Ag, Al, Au, Cu, Ir, Ni, Pd, Pt, Rh의 데바이온도를 포논상태밀도로 계산한 값들은 표와 같다.

표. 조밀립방금속들의 데바이온도(K)

금속	Ag	Al	Au	Cu	Ir	Ni	Pd	Pt	Rh
론문계산값	223	399	170	333	359	421	285	228	417
실험값[7]	221	390	178	310	228	345	275	225	350
선행연구결과[7]	226	356	167	344	370	415	274	223	417

표에서 보는바와 같이 Ni와 Rh를 제외한 계산결과들이 실험값들과 거의 일치한다. Al, Cu, Ir에 대한 계산결과는 선행연구결과[7]보다 실험값들과 더 잘 일치한다.

계산결과에 의하면 조밀립방금속들의 데바이온도는 Ni, Rh, Al, Ir, Cu, Pd, Ag, Au의 순서로 감소하는데 이것은 Ni와 Rh, Ir를 제외한 실험값[7]과 일치한다.

## 참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 61, 1, 53, 주체104(2015).
- [2] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 5, 70, 주체102(2013).
- [3] 안천수 등; 고체물리학, 김일성종합대학출판사, 173~195, 주체97(2008).
- [4] 진학선 등; 물리, 1, 20, 주체102(2013).
- [5] Journal of Kim Il Sung University(Natural Science), 3, 3, 57, Juche103(2014).
- [6] 黄昆; 固体物理学, 高等教育出版社, 153~235, 2008.
- [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, 268~289, 2003.

주체105(2016)년 8월 5일 원고접수

## Application of the First Brillouin Zone of FCC Structures to the Precise Analytic Embedded Atom Method

Hong Kwon Ryong, Jin Hak Son

We determined the first Brillouin zone of the FCC structures. On the basis of the first Brillouin zone, we can calculate the lattice dynamical and thermodynamic characteristics of the FCC metals by the precise analytic embedded atom method(PAEAM).

Key words: Brillouin zone, PAEAM, FCC metal, specific heat, Debye temperature