김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제2호

분광법에 의한 물분자들의 결합상태평가가능성

최창호, 리경수

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학자, 기술자들은 현실에 튼튼히 발을 붙이고 사회주의건설의 실천이 제기하는 문제들을 연구대상으로 삼고 과학연구사업을 진행하여야 하며 연구성과를 생산에 도입하는데서 나서는 과학기술적문제들을 책임적으로 풀어야 합니다.》(《**김정일**선집》 증보판 제15권 492페지)

물의 상태는 적외선스펙트르에 의하여 고찰[1−4]하고있으며 물분자들의 회합도는 양성자의 자기공명이나 산소의 동위원소 ^{17}O 에 의한 핵자기공명으로 평가하고있다.[5]

우리는 분광법으로 물의 결합상태를 평가할수 있는 가능성을 고찰하였다.

이 가능성의 원리적기초는 빛스펙트르에서 스펙트르선의 너비에 물의 상태 즉 결합상태가 반영된다는것이다. 물에 입사되는 빛(적외선)은 클라스터(물분자로 이루어진 결합체)들에서 흡수되거나 산란된다.

산란되거나 투과되는 빛의 복사세기는 다음과 같이 표시된다.

$$I = I_0 e^{-\gamma t} \tag{1}$$

여기서 I_0은 입사하는 빛의 세기, γ는 클라스터에 흡수되는 빛(적외선)의 흡수결수이다.

한편 빛의 전기마당에 의하여 려기된 전자들의 진동은 식 (1)을 고려하면 다음과 같이 표시된다.

$$f(t) = \begin{cases} 0 & (t < 0) \\ Ae^{-\frac{1}{2}\gamma t} \cdot e^{i\omega_0 t} & (t \ge 0) \end{cases} \tag{2}$$

여기서 A는 상수, ω_0 은 입사빛의 각진동수이다. 이때 려기된 전자들의 스펙트르진폭은 다음과 같다.

$$a(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{-\frac{1}{2}\gamma - i(\omega - \omega_0)} \tag{3}$$

이로부터 스펙트르선의 세기분포 $|a(\omega)|^2$ 은

$$|a(\omega)|^2 = \frac{A^2}{2\pi} \frac{1}{\frac{1}{4}\gamma^2 + (\omega - \omega_0)^2} \tag{4}$$

이다. 식 (4)는 공진형의 곡선인데 그것의 최대세기는 $\omega - \omega_0 = 0$ 에서 $|a(\omega)|^2_{최대} = \frac{2A^2}{\pi\gamma^2}$ 이다. 스펙트르선의 세기너비가 $|a(\omega)|^2 = \frac{1}{2}|a(\omega_0)|^2_{최대}$ 이 만족되는 $2(\omega - \omega_0)$ 과 같다는것을 고려하면

$$\Delta\omega = 2(\omega - \omega_0) = \gamma . \tag{5}$$

이러한 고찰은 물분자나 클라스터들이 정지한 경우에 대한것이다. 만일 물분자나 클라스터들이 끊임없이 운동한다면 물분자들의 빛스펙트르너비에는 응당 이러한 운동상태가 반영될것이다. 문제를 간단히 하기 위하여 임의의 물분자클라스터를 선택하자.

이때 클라스터에서 2차복사되는 전자기파의 전기마당세기는 다음과 같다.

$$E(r,\ r',\ t) = E_0 e^{-i[\omega_0 t - q(r-r')]} \tag{6}$$

여기서 E_0은 전기마당세기의 진폭, ω_0은 전기마당세기의 각진동수, r는 공간자리표, r'는 r에 대한 물분자클라스터의 자리표이다. 클라스터가 브라운운동한다고 하면 이 마당을 클라스터의 위치 r'에 따라 평균화하여야 한다. 즉

$$E(r,\ t) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(r,\ r',\ t) W(r',\ t) dr' . \tag{7}$$

여기서 $W(r',\ t)$는 t순간 클라스터가 위치 r'에 있을 확률이다. 이때 식 (6)을 고려하면

$$E(r,\ t) = \int_{-\infty}^{+\infty} E_0 e^{-i\omega_0 t + iqr} \cdot e^{-iqr'} W(r',\ t) dr' = E_0 e^{-i(\omega_0 t - qr)} f(t) \tag{8}$$

를 얻는다. 여기서 $f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iqr'} W(r',\ t) dr'$, $\int_{-\infty}^{+\infty} W(r',\ t) dr' = 1$, $f(0) = 1$이다.

이제 $f(t)$의 구체적형태를 보자.

클라스터가 브라운운동을 한다고 가정하였으므로 그것의 확산운동은 확산방정식

$$\frac{\partial W}{\partial t} = D \frac{\partial^2 W}{\partial r'^2} \tag{9}$$

를 만족시켜야 한다. 여기서 D는 클라스터의 확산결수이다.

한편 $f(t)$를 시간에 관하여 미분한 다음 식 (9)를 대입하면 그 풀이는 다음과 같다.

$$f(t) = e^{-Dq^2 f} \tag{10}$$

이 식을 평균전기마당의 세기에 대한 식 (8)에 넣으면 다음과 같다.

$$E(r,\ t) = E_0 e^{iqr - i\omega_0 t} \cdot e^{-Dq^2 t} \tag{11}$$

식 (11)을 리용하여 스펙트르의 진폭분포를 고찰할수 있다. 이제 식 (11)을

$$E(r,\ t) = E(r) \cdot E(t)$$

로 놓으면($E(r) = e^{iqr}$, $E(t) = E_0 e^{-i\omega_0 t} \cdot e^{-Dq^2 t}$) 전기마당의 진동형태는

$$E(t) = \begin{cases} 0 & (t < 0) \\ E_0 e^{-i\omega_0 t} \cdot e^{-Dq^2 t} & (t \ge 0) \end{cases} \tag{12}$$

과 같다. 그러므로 스펙트르선의 진폭 $a(\omega)$는

$$a(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} E(t) e^{i\omega t} dt = \frac{E_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{Dq^2 - i(\omega - \omega_0)} \tag{13}$$

이고 스펙트르선의 세기분포가 $|a(\omega)|^2$에 비례하므로 즉 $I(\omega) \approx |a(\omega)|^2$이므로

$$I(\omega) \approx |a(\omega)|^2 = \frac{E_0^2}{2\pi} \frac{1}{(Dq^2)^2 + (\omega - \omega_0)^2} \tag{14}$$

이다. 이 식은 $\omega = \omega_0$ 일 때 최대세기

$$I(\omega)|_{\max} \approx \frac{E_0^2}{2\pi}\frac{1}{(Dq^2)^2} \tag{15}$$

을 주는 공진형의 곡선이다. 이 곡선의 너비는 $I(\omega) = \frac{1}{2}I(\omega = \omega_0)$ 가 만족되는 ω 에 대하여

$$\Delta\omega = 2(\omega - \omega_0) = 2Dq^2 . \tag{16}$$

이제 주어진 진동수의 빛(각진동수 ω, 파수 $q = \frac{\omega}{c}$)을 매질클라스터에 쪼였을 때 2차복사되는 빛의 스펙트르를 얻는다면 클라스터의 확산결수와 확산결수에 영향을 주는 인자들을 평가하거나 결정할수 있을것이다.

물속에서 운동하는 물분자들의 클라스터들이 받는 류체력학적힘을 고려하여 확산결수를 구하면

$$D = \frac{k_B T}{6\pi R\eta} \tag{17}$$

이다. 여기서 k_B 는 볼츠만상수, T는 절대온도, b는 이동도, $\eta = \frac{2}{3\pi^{3/2}R^2}\sqrt{Mk_B T}$ 는 클라스터의 류체력학적점성결수, M은 클라스터의 질량이다. 따라서

$$D = \frac{\pi^{1/2}}{4}\sqrt{\frac{k_B T}{M}}R \tag{18}$$

이다. 식 (18)은 물분자의 클라스터가 구이고 구의 밀도가 균일할 때 성립한다.

그런데 물분자들의 클라스터는 구가 아니며 프락탈구조로 되여있다. 이를 고려하는 경우 클라스터의 질량 M은

$$M \approx R^D \tag{19}$$

으로 표시되는데 D는 물분자클라스터의 프락탈차원수이다.

그리고 물분자의 질량을 m_0 이라고 하면

$$m_0 \approx \gamma_0^{D'} . \tag{20}$$

식 (19)와 (20)의 비례결수를 각각 γ_R, γ_{r_0} 으로 표시하면

$$M = m_0\frac{\gamma_R}{\gamma_{r_0}}\frac{R^D}{\gamma_0^{D'}},\quad \frac{M}{m_0} = \frac{\gamma_R}{\gamma_{r_0}}\frac{R^D}{\gamma_0^{D'}} = n,\quad M = nm_0,\ R = R_0^{1/D}\left(\frac{\gamma_{r_0}}{\gamma_R}\right)^{1/D} n^{1/D}$$

이며 따라서 식 (18)은

$$D = \frac{\pi^{1/2}}{4}\sqrt{k_B T}\, m_0^{-1/2} r_0^{D'/D}\left(\frac{\gamma_{r_0}}{\gamma_R}\right)^{1/D} n^{1/D-1/2} \tag{21}$$

으로 된다. 이제 n=1 즉 단분자이라면 $D_0 = \pi^{1/2}\sqrt{k_B T}\, m_0^{-1/2} r_0 / 4$ 이므로 식 (21)은

$$D = D_0 r_0^{D'/(D-1)}\left(\frac{\gamma_{r_0}}{\gamma_R}\right)^{1/D} n^{1/D-1/2} \tag{22}$$

과 같게 된다. 만일 프락탈계의 자기상사성을 고려한다면

$$\gamma_R = \gamma_{r_0},\quad D' = D$$

이므로 확산곁수는 다음과 같아진다.

$$D = D_0 n^{1/D-1/2} \tag{23}$$

식 (23)을 식 (16)에 대입하면

$$\Delta\omega = 2D_0 q^2 n^{1/D-1/2}\,. \tag{24}$$

단분자상태의 물(n=1)일 때 스펙트르선의 너비는 $n^{1/D-1/2}=1$이고 $\Delta\omega(1)=2D_0q^2$과 같다. 그러나 n>1이면 $2\le D\le 3$이므로 $n^{(2-D)/2D}<1$이다. 결국 $\Delta\omega$는 줄어든다. 줄어든 정도는 최대로 $n^{-1/6}$배이다.

맺 는 말

물분자나 클라스터에서 복사되는 빛스펙트르선의 너비에 주는 물분자나 클라스터의 운동상태와 결합상태의 영향을 고찰하고 다음과 같은 결과를 얻었다.

첫째로, 정지하고있는 물분자나 클라스터에서 복사되는 빛의 스펙트르에서 스펙트르선의 너비는 복사되는 빛세기의 감쇠곁수와 같다.

둘째로, 브라운운동하는 물분자나 클라스터에서 복사된 빛의 스펙트르에서 스펙트르선의 너비는 확산곁수 D와 파수의 2제곱에 비례한다.

셋째로, 브라운확산운동하는 물분자나 클라스터에서 복사된 빛의 스펙트르에서 스펙트르선의 너비는 그것들의 결합상태에 관계되는데 그것은 결합된 물분자의 수가 많을수록 줄어든다.

참 고 문 헌

[1] **김일성**종합대학학보(자연과학), 61, 10, 67, 주체104(2015).

[2] **김일성**종합대학학보(자연과학), 47, 12, 14, 주체90(2001).

[3] 최창호 등; 물리, 4, 13, 주체93(2004).

[4] 최창호 등; 물리, 4, 2, 주체105(2016).

[5] Yunyue Ye et al.; Applied Mechanism and Materials, 416－417, 1056, 2013.

주체107(2018)년 12월 5일 원고접수

Possibility of Connection State of Water Molecules by Spectroscopic Method

Choe Chang Ho, Ri Kyong Su

We suggested a possibility to examine the connection state of water molecules using emission spectra of the water molecules or clusters. The width of spectral line reflects the diffusion coefficient of the water molecule or clusters in Brownian motion state, while the diffusion coefficient reflects the connection state of water molecules as well as fractal dimension of the system.

Key words: water molecule, cluster, connection state