김일성종합대학학보 JOURNAL OF **KIM IL SUNG** UNIVERSITY
(자연과학) (NATURALSCIENCE)
주체105(2016)년 제62권 제5호 Vol. 62 No. 5 JUCHE105(2016).

결정학적상변환에 관한 질서파라메터알고리듬연구

정은선, 최순철

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《기초과학에 대한 근시안적인 관점을 버리고 기초과학연구에 계속 힘을 넣어 첨단과학기술을 비롯한 과학기술발전의 원리적, 방법론적기초를 튼튼히 다져나가야 합니다.》

(《**김정일**선집》 증보판 제22권 22페지)

선행연구[1]에서는 상군방법에 기초하여 제1브릴루앙띠의 모든 대칭점에 해당한 공간군의 완전기약표현을 132개의 영상으로 분류하고 그것의 질서파라메터를 계산하였으나 그 구체적인 형태와 방법은 공개하지 않았다. 한편 상변환에서 고체의 대칭변화가 주어지면 모든 질서파라메터를 구하는 알고리듬[2]이 연구되였으며 어미상구조정보가 주어지면 어미공간군대칭의 기약표현에 의하여 유도된 질서파라메터를 리용하여 원자변위형태들을 생성하는 프로그람[3]이 개발되였다.

우리는 사영표현방법을 리용하여 얻은 완전기약표현에 의하여 질서파라메터를 구하는 알고리듬을 새롭게 연구하였다.

질서파라메터계산절차는 다음과 같다.

① 영상군(I군)의 모든 원소에 대하여 방정식

$$M_i\vec{\eta}=\vec{\eta} \qquad M_i\in \mathrm{I} \tag{1}$$

를 리용하여 고유벡토르 $\vec{\eta}$를 구한다. 이때 령아닌 동일하지 않은 벡토르들로 벡토르모임 V_1을 구성한다.

② 다음 V_1에 들어있는 벡토르들로 사귐조작을 실시하여 얻어진 새로운 벡토르들로 V_1을 보충한다. 이때 식

$$\left.\begin{aligned} M_i\vec{\eta}_k &= \vec{\eta}_k \\ M_j\vec{\eta}_k &= \vec{\eta}_k \end{aligned}\right\} \qquad M_i,\ M_j\in \mathrm{I} \tag{2}$$

를 리용할수 있다. 사귐조작은 임의로 2개씩 취하고 새로 얻어진 벡토르까지 포함하여 가능한 사귐조작을 진행하며 이 과정을 새로운 벡토르가 더 얻어지지 않을 때까지 계속 진행한다. 얻어진 벡토르들로 벡토르모임 V_2를 구성한다.

③ 서로 비등가인 벡토르들을 추출한다. I군의 매 행렬을 벡토르에 작용시킨다. 이때 식

$$M_j\vec{\eta}_i=\vec{\eta}_k \tag{3}$$

가 성립하면 $\vec{\eta}_i$와 $\vec{\eta}_k$는 서로 등가이다.

④ 우에서 얻어진 벡토르들이 불변벡토르모임에 들어가는가를 판정한다.

$$r=\frac{1}{[H]}\sum_{h\in H}\chi(h_i) \tag{4}$$

여기서 r는 성분수, h_i는 공간군에 속하는 매 회전원소, $\chi(h_i)$는 그 원소에 해당한 행렬의 지표, $[H]$는 부분군 H의 위수이다.

매 영상에 해당한 질서파라메터를 구하기 위한 알고리듬은 몇개의 생성행렬로부터 모든 표현행렬구하기, 매 표현행렬에 대하여 불변인 불변벡토르구하기, 그 벡토르들로 가능한 사귐벡토르구하기, 얻어진 벡토르들가운데서 서로 비등가인 벡토르찾기로서 4개의 부분알고리듬으로 이루어져있다.

① 생성행렬로부터 모든 표현행렬을 구한다.

생성원소를 입력한다. 여기서는 표현의 차원수, 고유병진에 해당한 대각선생성행렬수와 생성행렬, 비고유병진에 해당한 비대각선생성행렬수와 구체적인 행렬, 차수(표현행렬을 자기자체와 곱하여 단위행렬이 얻어질 때까지 곱하는 회수)를 입력한다.

대각선행렬자료는 지수값으로 처리된 문자렬형태로 주며 비대각선행렬자료는 행렬모양으로가 아니라 렬번호와 그에 해당한 원소값을 지수처리화한 형식으로 준다.

실례로 대각선행렬 $\begin{pmatrix} -1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$은 문자렬 (12 12 0 0)으로, 비대각선행렬 $\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & -1 \\ & & 1 & \end{pmatrix}$은 문자렬 (1 0 2 0 4 12 3 0)으로 한다. 표현행렬들의 자료가 지수로 표시되므로 행렬적은 문자렬로 표시된 지수들의 합으로 계산된다.

고유병진에 해당한 대각선행렬들을 모두 구한다.

우에서 입력한 몇개의 대각선생성행렬로부터 가능한 적(지수들의 합)을 계산하여 같은 행렬들을 소거하는 방법으로 서로 다른 행렬들만 구한다.

비고유병진에 해당한 비대각선생성행렬을 모두 구한다. 이때 비대각선생성행렬자료는 표현행렬의 원소의 위치번호(렬번호와 행번호)와 그것에 해당한 구체적인 표현행렬원소값으로 이루어졌으므로 이것을 고려하여 가능한 합을 계산한다.

② 매 표현행렬의 고유벡토르를 구한다.

③ 얻어진 벡토르들로 사귐조작을 실시한다.

벡토르비교는 먼저 첨수부터 하고 첨수가 같으면 결수를 비교한다. 비교하는 벡토르성분들이 같으면 그대로 남겨두고 다르면 첨수와 결수를 0으로 처리한다.

④ 추출된 벡토르들가운데서 서로 비등가인 벡토르들을 구한다.

독립적인 성분수에 따르는 불변벡토르모임을 현시한다.

우리는 우에서 새롭게 제기한 알고리듬에 기초하여 프로그람을 개발하여 132개 영상군의 1차질서파라메터 15 239개를 전부 구하였다.

실례로 공간군 T_d^6의 파동벡토르 $\vec{K}_9$에 해당한 완전기약표현 $T_d^6(\vec{K}_9/1)$이 속한 12차원 I군 G192a의 1차질서파라메터(불변벡토르모임)를 선행연구결과[1]와 비교해보면 질서파라

메터(불변벡토르)의 구체적인 모양은 다르지만 독립적인 성분수와 그것에 따르는 불변벡토르개수가 일치한다는것을 알수 있다. 불변벡토르의 모양이 다른것은 그것들이 기초하고있는 표현행렬의 형태가 다르기때문이다.

계산결과 얻어진 132개 영상군의 1차질서파라메터의 수는 표와 같다.

표. 영상군에 따르는 1차질서파라메터의 수

No.	I군	수	No.	I군	수	No.	I군	수
1	A1a	1	39	D48c	2	77	E192d	17
2	A2a	1	40	D48d	2	78	E192e	18
3	B3a	1	41	D48e	11	79	E192f	26
4	B4a	1	42	D64a	8	80	E192g	13
5	B6a	2	43	D64b	9	81	E192h	14
6	B6b	1	44	D64c	13	82	E192i	12
7	B8a	3	45	D64d	11	83	E192j	13
8	B8b	1	46	D72a	6	84	E384a	25
9	B12a	3	47	D72b	3	85	E384b	27
10	B12b	1	48	D72c	6	86	E384c	33
11	B16a	3	49	D72d	14	87	E384d	24
12	B24a	3	50	D96a	9	88	E768a	24
13	C12a	3	51	D96b	9	89	E768b	28
14	C24a	4	52	D96c	6	90	E768c	31
15	C24b	4	53	D96d	2	91	E1536a	33
16	C24c	4	54	D128a	12	92	F32a	2
17	C48a	6	55	D144a	11	93	F32b	6
18	D8a	1	56	D192a	9	94	F64a	15
19	D12a	1	57	D192b	10	95	F64b	8
20	D16a	2	58	D192c	9	96	F64c	8
21	D16b	2	59	D384a	11	97	F72a	4
22	D16c	4	60	E48a	4	98	F72b	4
23	D18a	3	61	E48b	5	99	F96a	9
24	D24a	2	62	E48c	3	100	F96b	5
25	D24b	1	63	E96a	16	101	F96c	7
26	D24c	3	64	E96b	12	102	F96d	4
27	D24d	3	65	E96c	7	103	F128a	69
28	D24e	3	66	E96d	18	104	F128b	31
29	D32a	6	67	E96e	11	105	F144a	14
30	D32b	9	68	E96f	14	106	F192a	33
31	D32c	16	69	E96g	8	107	F192b	8
32	D32d	7	70	E96h	4	108	F192c	18
33	D32e	3	71	E96i	7	109	F192d	12
34	D36a	2	72	E96j	8	110	F192e	10
35	D36b	4	73	E96k	4	111	F192f	7
36	D36c	7	74	E192a	31	112	F384a	29
37	D48a	5	75	E192b	22	113	F384b	51
38	D48b	3	76	E192c	20	114	F384c	25

No.	I군	수	No.	I군	수	No.	I군	수
115	G96a	8	121	G768a	27	127	G1536c	125
116	G192a	17	122	G768b	24	128	G1536d	74
117	G192b	28	123	G768c	43	129	H192a	12
118	G384a	26	124	G768d	53	130	H384a	51
119	G384b	32	125	G1536a	153	131	H384b	25
120	G384c	31	126	G1536b	27	132	K1536a	49

이것은 선행연구결과[4]와 잘 일치한다.

참 고 문 헌

[1] H. T. Stokes et al.; Isotropy Subgroups of the 230 Crystalographic Space Groups, World Scientific, 100～150, 1988.

[2] D. M. Hatch et al.; Phys. Rev., B 65, 014113, 2002.

[3] B. J. Campbell et al.; J. Appl. Cryst., 39, 607, 2006.

[4] H. T. Stokes; Isotropy Tutorial, http://www.physics.byu.edu/~stokesh/isotropy.html., 2013.

주체105(2016)년 1월 5일 원고접수

On the Algorithm for Obtaining the Primary Order Parameters for a Crystalline Phase Transition

Jong Un Son, Choe Sun Chol

We suggested an algorithm for obtaining the primary order parameters(OP) which is very important in the direct Landauproblem. And we found all 15 239's primary order parameters of 132's image-groups based on the above algorithm.

Key word: primary order parameter