

해석정밀형삽입원자방법에 의한 체심립방금속들의 비열계산

리영민, 진학선

위대한 수령 김일성동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《기초과학부문들에 대한 연구사업을 강화하여야 하겠습니다.》(《김일성전집》 제72권 292페이지)

원자의 진동은 결정에서 열현상과 밀접한 련관을 가지므로 이에 대한 연구를 통하여 고체의 여러가지 열력학적특성량들을 결정할수 있다. 돌롱—쁘띠의 실험법칙에 의하면 높은 온도에서 모든 고체의 정적비열은 $25.1\text{J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ 이며 이것은 이론적으로 에네르기균등분배법칙으로 설명된다. 낮은 온도에서 고체의 열용량은 원자의 진동을 량자화하여 설명할수 있으며 이와 관련한 이론들로는 아인슈타인의 이론과 데바이의 이론이 있다.[3]

우리는 해석정밀형삽입원자방법[1, 2]과 결정동력학적방법[4]을 결합하여 체심립방금속들의 비열을 계산하는 한가지 방법을 제기하였다.

결정에서 원자의 진동을 량자화하면 주파수가 ω 인 진동자의 평균에네르기는 다음과 같다.[5]

$$\bar{E} = \hbar\omega(1/2 + 1/(\exp(\hbar\omega/kT) - 1)) \quad (1)$$

고체에서 원자들은 독립적으로 진동하지 않고 집단적인 련관속에서 진동한다. 결정살창진동자(포논)의 분산관계를 결정동력학적방법으로 계산하여 포논분산곡선과 포논상태밀도를 얻을수 있다. 모든 주파수에 대하여 포논에네르기합을 결정하여 결정의 총에네르기를 구하고 이것의 온도 T 에 대한 도함수를 계산하면 정적비열을 구할수 있다.[5]

$$c_V(T) = \sum_{q,j} \left(\frac{\hbar\omega_j(q)}{kT} \right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega_j(q)/kT)}{(\exp(\hbar\omega_j(q)/kT) - 1)^2} \quad (2)$$

여기서 q 는 파수벡토르이고 k 는 볼츠만상수, T 는 절대온도이다.

포논분산관계 $\omega_j(q)$ 는 해석정밀형삽입원자포텐살을 리용하여 결정동력학적방법으로 계산할수 있다.

체심립방금속들인 Cr, Fe, Mo, Ta, W의 해석정밀형삽입원자포텐살모형파라메터들은 표와 같다.[4]

표. 체심립방금속들의 해석정밀형삽입원자포텐살모형파라메터

| 금속 | k_0/eV | k_1/eV | k_2/eV | k_3/eV | k_{-1}/eV | α/eV | n | F_0/eV |
|----|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------------------|--------------------|------|-----------------|
| Cr | -202.616 4 | 281.058 2 | -178.014 9 | 43.311 7 | 56 | -0.297 3 | 0.87 | 2.30 |
| Fe | -183.137 8 | 229.417 3 | -129.480 3 | 27.930 6 | 55 | -0.056 2 | 0.56 | 2.49 |
| Mo | -494.104 2 | 685.091 2 | -427.906 9 | 101.470 4 | 135 | -0.203 2 | 0.90 | 3.72 |
| Ta | -459.003 8 | 619.317 4 | -374.160 1 | 85.412 8 | 128 | -0.013 8 | 0.65 | 5.15 |
| W | -1 181.862 5 | 1 631.331 0 | -1 005.490 3 | 233.443 3 | 322 | -0.224 4 | 0.77 | 4.95 |

Ta에 대하여 대칭방향에 따르는 포논분산곡선계산결과는 그림 1, 포논상태밀도곡선계산결과는 그림 2와 같다.

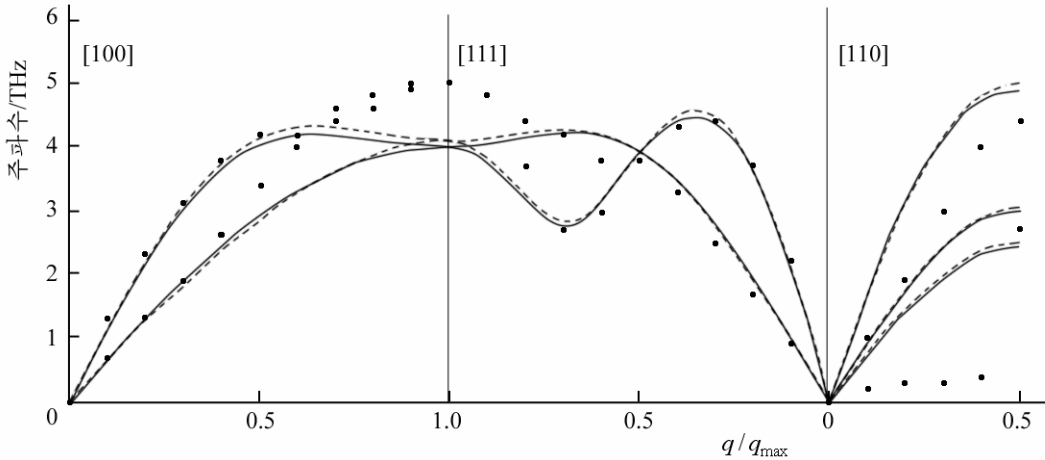


그림 1. 체심립방금속 Ta의 포논분산곡선
실선은 론문계산결과, 점선은 선행연구결과[5], 점들은 실험값[5]

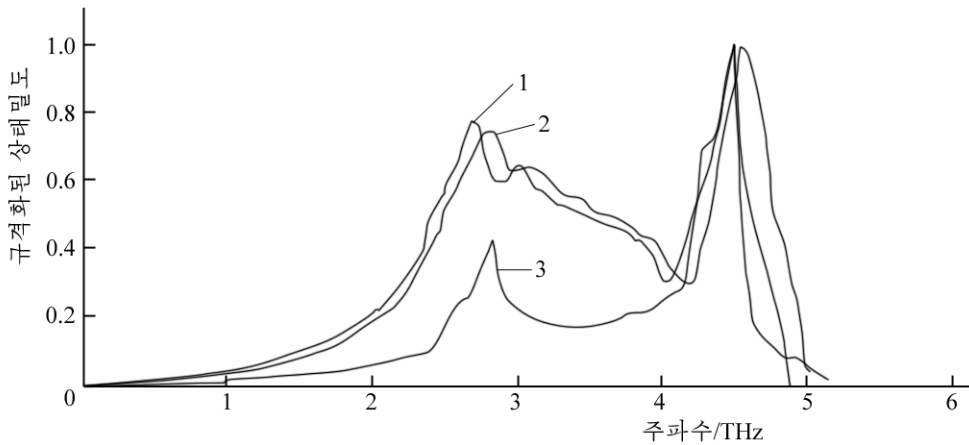


그림 2. 체심립방금속 Ta의 포논상태밀도
1-론문계산결과, 2-선행연구결과[6], 3-실험값[6]

그림 1, 2에서 보는바와 같이 포논분산곡선과 포논상태밀도계산결과들은 선행연구결과 [5, 6]와 거의 비슷하며 약간 개선되었다.

다른 체심립방금속들인 Cr, Fe, Mo, W의 포논분산관계에 대한 결정동력학적모의는 선행연구결과[2, 3]에서 발표되었다.

모든 체심립방금속들에 대하여 높은 주파수근방에서 포논분산특성에 대한 계산결과가 실험값과 잘 일치하지 않는다. 이것은 살창진동주파수가 커지면 살창진동의 에너기가 커지며 따라서 살창진동의 비조화특성이 더 크게 나타나는것과 관련된다.

얻어진 포논분산관계를 리용하여 식 (2)로부터 온도에 따르는 비열의 변화곡선을 얻을 수 있다.

500K이하의 온도구간에서 Cr, Fe, Mo, Ta, W의 비열변화를 계산한 결과는 그림 3과 같다.

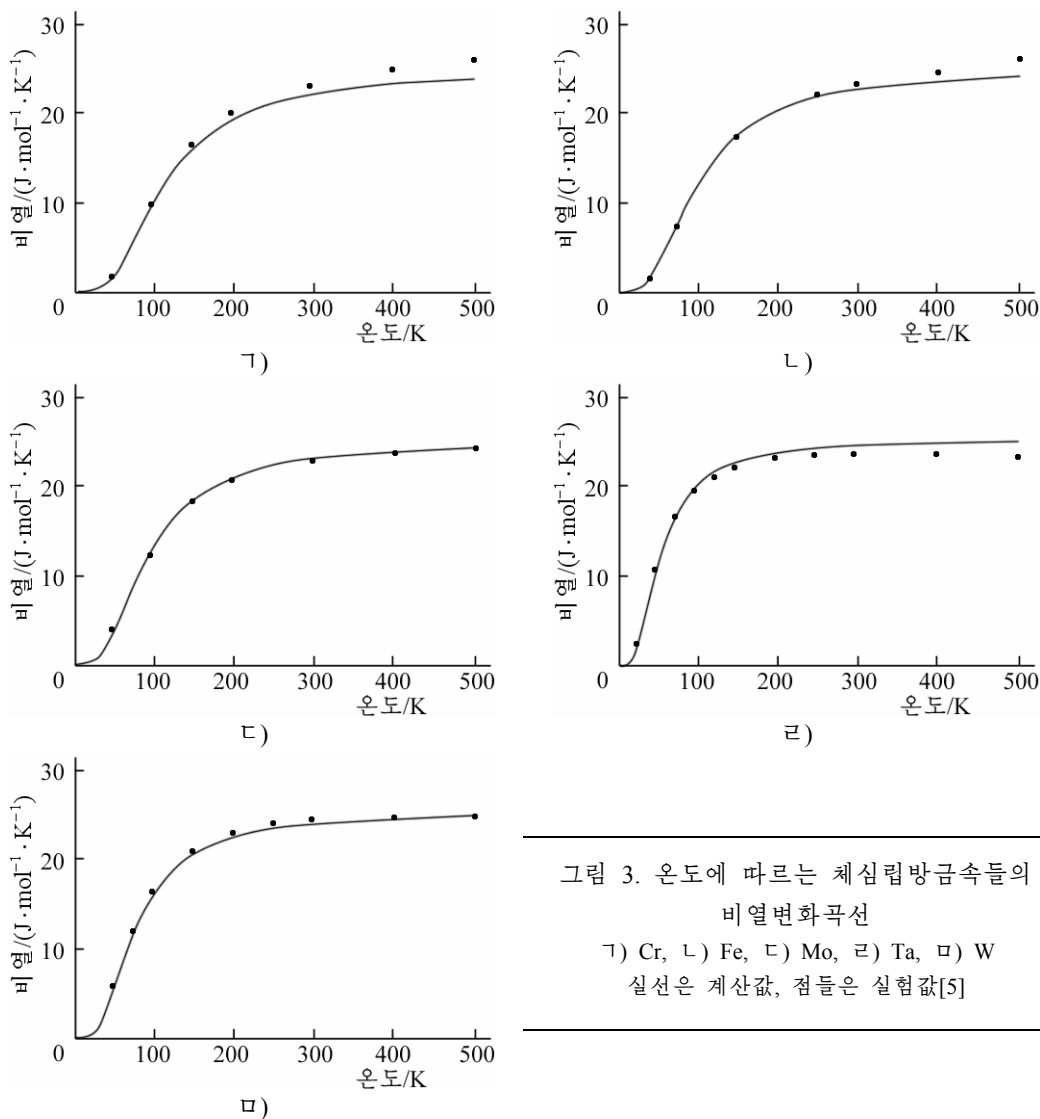


그림 3. 온도에 따르는 체심립방금속들의 비열변화곡선

ㄱ) Cr, ㄴ) Fe, ㄷ) Mo, ㄹ) Ta, ㅁ) W

실선은 계산값, 점들은 실험값[5]

그림 3에서 보는바와 같이 Mo에 대한 비열계산결과와 실험결과[5]는 거의 일치하였다. 다른 체심립방금속들에서는 실험값과 계산결과사이에 약간의 차이가 있으며 그 차이는 온도가 커질수록 더 뚜렷하게 나타난다. 그것은 온도가 올라갈수록 결정살창의 진동에서 비조화특성이 더 크게 나타나는데 계산에서 이 효과를 고려하지 못했기때문이다.

모든 금속들에서의 비열계산결과는 데바이온도보다 낮은 온도구간에서 실험값과 거의 일치하였다.

계산결과에 의하면 온도가 높아짐에 따라 체심립방금속들의 비열은 커지며 25.1J/(mol·K)에로 다가간다. 이것은 돌롱-쁘띠의 법칙과 일치한다.

또한 그 변화특성도 실험값의 변화특성과 일치하며 데바이리론의 결과와도 일치한다. 이로부터 리용된 해석정밀형압입원자포텐셜이 정확하며 결정동력학적방법에 의한 살창진동 특성에 대한 모의도 정확히 진행되었다는것을 알수 있다.

실험결과로부터 체심립방금속들에 대하여 살창상수, 결합에너르기, 독립적인 탄성상수들, 단변살창점결합의 형성에너르기, 조밀립방구조와 체심립방구조사이의 결합에너르기차로부터 계산된 해석정밀형삽입원자포텐셜의 모형파라미터들과 결정동력학적방법을 리용하면 고체의 비열과 같은 거시적인 열력학적특성을 높은 정확도로 모의할수 있다는것을 알 수 있다.

맺 는 말

해석정밀형삽입원자방법과 결정동력학적방법을 결합하여 체심립방금속의 비열을 계산한 결과 온도에 따르는 비열변화곡선은 500K이하에서 실험결과와 거의 일치한다.

참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 2, 75, 주체102(2013).
- [2] 김일성종합대학학보(자연과학), 61, 2, 48, 주체104(2015).
- [3] 정근 등; 통계물리학, 김일성종합대학출판사, 161~170, 주체92(2003).
- [4] Journal of **Kim Il Sung** University(Natural Science), 3, 3, 57, Juche103(2014).
- [5] 孔毅 等; 计算物理, 20, 4, 364, 2003.
- [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, 268~289, 2003.

주체105(2016)년 4월 5일 원고접수

Calculation of the Specific Heat of BCC Metals by Precise Analytic Embedded Atom Method

Ri Yong Min, Jin Hak Son

The curves of the specific heats for BCC metals as functions of temperature calculated by combining the precise AEAM(analytic embedded atom method) and the lattice dynamics method nearly agree with the experimental results under 500K.

Key words: precise AEAM, lattice dynamics, BCC metal, specific heat