

해석정밀형압입원자방법에 의한 Cr, Fe, Mo의 열팽창특성모의

진학선, 리혁철

금속결정을 연구할 때 금속원자들이 결정살창점에 있다고 보지만 사실상 금속결정에서 원자들은 고정되어있는것이 아니라 살창점을 평형위치로 하여 열운동을 한다. 이 열운동의 정도는 온도에 따라 변하며 온도가 그리 높지 않을 때 때 원자는 미소진동을 하게 된다. 이 미소진동을 살창진동이라고 하며 살창진동이 파동의 형식으로 결정살창을 따라 전파되는것을 살창파동이라고 한다. 살창진동에 의하여 금속에서 열용량, 열팽창, 열전도 등의 열력학적특성들이 나타난다.[5]

여기에서 열용량은 살창진동의 조화항과 관련되며 열팽창과 열전도는 살창진동의 비조화항과 관련된다. 정밀측정계기, 전자기술, 저온기술, 우주항공분야에서 리용되는 금속재료들의 열팽창특성은 이 재료들의 리용특성에 큰 영향을 준다.[6]

우리는 해석정밀형압입원자방법과 결정동력학적방법을 결합하여 열팽창특성을 모의계산하는 방법을 제기하고 해석정밀형압입원자방법포텐셜[4]을 리용하여 원자력공업에서 많이 리용되는 금속들인 Cr, Fe, Mo의 열팽창률을 결정하였다.

열팽창률에 대한 계산에서는 포논분산특성과 그뤼나이젠결수가 리용된다. 앞선 논문들에서 해석정밀형압입원자방법으로 포논분산특성을 계산하는 방법을 주었다.[1-3] 그뤼나이젠결수는 결정살창의 비조화진동과 관련되는 중요한 파라메터이다.[7] 이 파라메터는 무본량으로서 다음의 관계식으로 정의된다.

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

웃식을 살창상수에 관한 식으로 넘기면 다음과 같다.

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

여기서 V 는 체적, a 는 살창상수, q 는 파수벡토르이다.

우리는 $\omega_s(q)$ 를 해석정밀형압입원자방법포텐셜을 도입하여 결정동력학적방법으로 구한다. 밀첨자 s 는 주어진 파수벡토르에서 영년방정식을 풀어 얻어지는 포논주파수값들중의 하나를 가리키며 립방금속들에 대해서는 1부터 3, 조밀육방금속들에 대해서는 1부터 6사이의 옹근수값을 취한다. 계산에서는 체심립방금속들인 Cr, Fe, Mo에 대하여 $s=2$, $q=(2\pi/a 0 0)$ 을 취하였다. 해석정밀형압입원자방법포텐셜을 리용하여 계산된 Cr, Fe, Mo의 그뤼나이젠결수들은 각각 0.74, 1.23, 1.32이다.

결정동력학적방법으로 열팽창특성을 계산하기 위한 공식들은 다음과 같다.[6]

$$G = F + PV \quad (3)$$

$$F = F_0 + F_V \quad (4)$$

$$F_0 = U_0(V) \quad (5)$$

$$F_V = k_B T \sum_{qs} \left\{ \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{q})}{2k_B T} + \ln[1 - e^{-\hbar \omega_s(\mathbf{q})/(k_B T)}] \right\} \quad (6)$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = - \frac{dU_0}{dV} - \sum_{qs} \left[\frac{1}{2} \hbar \omega_s(\mathbf{q}) + \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{q})}{e^{\hbar \omega_s(\mathbf{q})/(k_B T)} - 1} \right] \frac{1}{V} \frac{d \ln \omega_s(\mathbf{q})}{d \ln V} \quad (7)$$

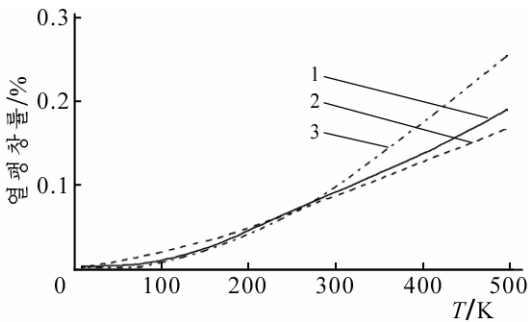
여기서 G, F 는 각각 계의 열력학적포텐셜과 자유에너르기이고 $U_0(V)$ 는 주어진 체적에서의 계의 호상작용포텐셜에너지이며 k_B 는 볼츠만상수, T 는 절대온도, \hbar 는 플랑크상수, $\omega_s(\mathbf{q})$ ($s=1 \sim 3$)는 주어진 파수벡토르에서 영년방정식의 풀이들이다.

우의 공식들에 기초하여 주어진 온도에서 계의 열력학적포텐셜이 최소로 되는 살창상수를 구하면 계의 열팽창특성을 얻게 된다. 식 (4)에서 첫항 즉 계의 립자들사이의 호상작용에너지는 살창상수의 증가에 따라 증가하며 둘째 항은 살창상수가 증가할 때 포논주파수가 작아지므로 감소한다.

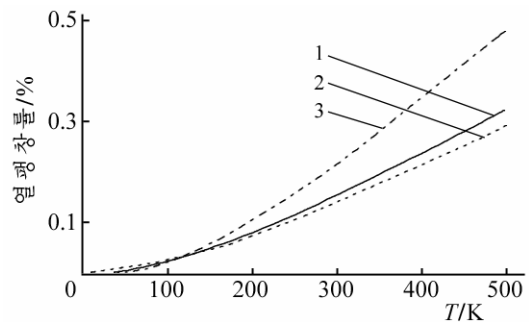
식 (3)의 둘째 항인 압력과 체적의 적은 살창상수가 커짐에 따라 증가한다. 식 (6)으로 표현되는 자유에너지의 온도관련항이 변화되면서 열력학적포텐셜에너지가 최소로 되는 살창상수값이 온도에 따라 증가하므로 열팽창특성을 나타내게 된다.

중요한것은 살창상수의 변화에 따라 포논분산특성을 매번 다시 계산하는것이 아니라 해석정밀형압입원자방법포텐셜의 입력파라미터로 들어가는 살창상수에서 계산된 포논분산특성으로부터 그뤼나이젠결수를 리용하여 계산시간을 단축한다는것이다. 압력을 계산하는 식 (7)에도 그뤼나이젠결수가 들어간다.

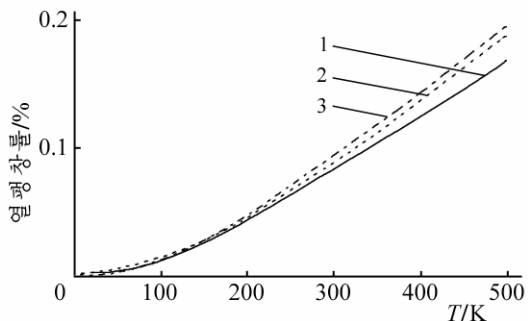
Cr, Fe, Mo에 대하여 온도에 따르는 열팽창률의 계산결과는 그림과 같다.



ㄱ)



ㄴ)



ㄷ)

그림. 온도에 따르는 열팽창률변화

ㄱ) Cr, ㄴ) Fe, ㄷ) Mo

1-계산결과, 2-선형계산결과[7],

3-실험결과[7]

Cr과 Fe에 대한 계산결과를 선행연구자료와 비교하여보면 0~500K의 온도구간에서 선행 계산결과[7]에 비하여 실험결과와 더 잘 일치한다. Mo에 대하여서는 0~150K까지의 온도구간에서 실험결과와 높은 정확도로 일치하며 200K보다 높은 온도에서는 선행계산결과보다 실험결과와의 차이가 심하다.

총체적으로 볼 때 우리의 계산결과들은 실험결과와의 일치정도에서 선행계산결과들에 비하여 많이 개선되었으며 특히 0~100K의 낮은 온도구간에서의 계산결과는 실험결과와 거의 일치한다.

이처럼 해석정밀형삽입원자방법과 결정동력학적방법을 결합적용하면 금속의 열팽창률과 같은 중요한 열력학적특성을 높은 정확도로 모의할수 있다.

맺 는 말

1) 해석정밀형삽입원자방법과 결정동력학적방법을 적용하여 금속들의 열팽창특성을 계산하는 방법을 제기하였다.

2) 제기한 방법에 의하여 계산한 Cr, Fe, Mo의 열팽창특성들은 0~100K의 낮은 온도구간에서 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] 王润 等; 金属材料物理性能, 冶金工业出版社, 5~36, 1993.
- [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, 290~295, 2003.

주체106(2017)년 3월 5일 원고접수

Simulation of Thermal Expansion Properties of Cr, Fe and Mo by Precise Analytic Embedded Atom Method

Jin Hak Son, Ri Hyok Chol

We suggested a calculation method of the thermal expansion properties of metals by combining the precise AEAM (analytic embedded atom method) and the lattice dynamics method. This method was applied to determining the thermal expansion for Cr, Fe, and Mo.

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