

체심립방구조의 제 1 브릴루앵구역과 해석정밀형 삽입원자방법에 대한 연구

진학선, 홍권룡

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학과 기술이 매우 빨리 발전하고있는 오늘의 현실은 기초과학을 발전시킬것을 더욱 절실하게 요구하고있습니다.》(《김정일선집》 증보판 제11권 138페이지)

브릴루앵구역은 고체에서 같은 에네르기띠를 주는 파수벡토르공간의 구역이다. 즉 서로 다른 여러개의 에네르기띠를 파수벡토르공간의 서로 다른 구역에 대응시킬수 있다. 이때 매개 구역은 점(1차원)이나 선(2차원), 면(3차원)으로 둘러싸이게 된다.[1, 6] 실제로 살창상수가 a 인 2차원단순정방살창의 경우 브릴루앵구역들은 평면의 구역들에 대응되는데 제1브릴루앵구역은 파수벡토르공간의 원점을 중심으로 한 바른4각형모양이고 그밖의 구역들은 차례로 제2, 제3브릴루앵구역들이다.(그림 1)

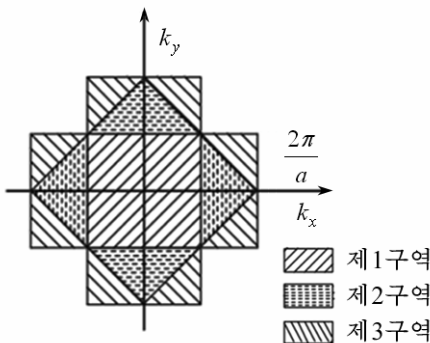


그림 1. 2차원단순정방살창의 브릴루앵구역

서로 다른 결정구조들에서 제1브릴루앵구역을 확정하는것은 결정의 살창동력학적특성과 열력학적 특성연구에서 중요한 의의를 가진다.[2, 3]

본문에서는 체심립방구조의 제1브릴루앵구역을 결정하고 그에 기초하여 해석정밀형삽입원자방법[4, 5]으로 원자로구조재료로 많이 리용되는 체심립방 금속들의 살창동력학적특성들과 열력학적특성들을 계산하였다.

살창상수가 a 인 체심립방살창의 토대벡토르는 다음과 같다.

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3), \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3), \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) \quad (1)$$

여기서 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ 은 직각자리표계의 토대벡토르들이다.

파수벡토르공간에서 이 체심립방살창에 대응하는 거꿀살창의 토대벡토르는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot [\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot [\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_1) \end{aligned} \quad (2)$$

살창상수가 a 인 조밀립방살창의 토대벡토르들은 다음과 같다.

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2), \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3), \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_1) \quad (3)$$

이 토대벡토르들과 식 (2)의 체심립방살창에 대응하는 거꼴살창의 토대벡토르들을 비교하면 이 거꼴살창이 살창상수가 $4\pi/a$ 인 조밀립방살창이라는 것을 알 수 있다.(그림 2) 이때 각각 x 축에 수직인 평면에 면중심원자가 4개, y 축에 수직인 평면에 면중심원자가 4개, z 축에 수직인 평면에 면중심원자가 4개로서 총 12개의 면중심원자들이 그림 2의 살창의 중심에 위치한 원자의 제1린접원자로 된다. 중심원자와 제1린접원자들을 맺는 선분들을 수직2등분하는 면들을 그리면 그림 2와 같은 12개의 바른4각형들로 둘러싸인 바른12면체로 된 체심립방결정의 제1브릴루앵구역이 얻어진다.

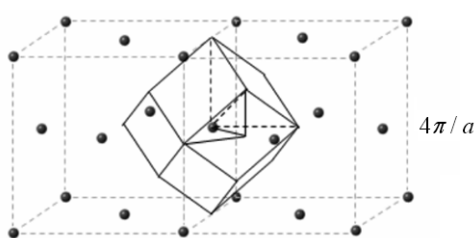


그림 2. 체심립방살창의 거꼴살창과 제1브릴루앵구역

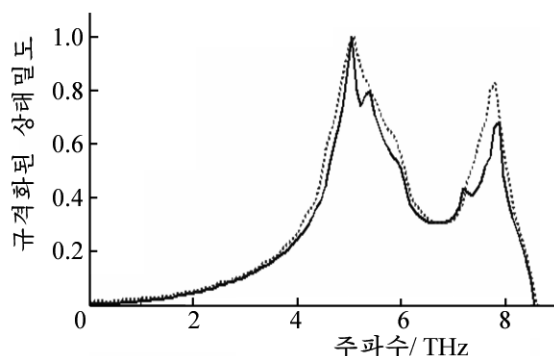


그림 3. 해석정밀형압입원자방법을 리용한 체심립방금속 Mo의 포논상태밀도계산결과
실선-계산결과, 점선-선행연구결과[7]

그림 3에서 포논상태밀도에 대한 계산결과는 선행연구결과와 거의 일치한다. 차이는 2개의 큰 봉우리부분에서 이 봉우리들옆에 작은 봉우리가 각각 하나씩 생겨나는것이다.

그림 4에서 체심립방금속인 Mo에 대한 본문의 계산결과와 실험결과[7]는 거의 일치한다. 온도가 증가함에 따라 체심립방금속들의 비열은 증가하여 $25.1\text{J}/(\text{K}\cdot\text{mol})$ 로 다가가며 이것은 돌롱-쁘띠(Dulong-Petit)의 법칙과 일치한다. 또한 그 변화특성도 실험값의 변화특성과 일치하며 데바이리론의 결과와도 일치한다. 이로부터 리용된 해석정밀형압입원자포텐샬이 정확하며 살창동력학적방법에 의한 살창진동특성에 대한 모의도 정확히 진행되었다는 것을 알 수 있다.

체심립방금속들인 Cr, Fe, Mo, Nb, Ta, V, W에 대하여 포논상태밀도로부터 결정 한 데바이 온도계산 및 실험결과들을 표에 주었다.

거꼴살창과 제1브릴루앵구역을 리용하여 해당 결정살창에 대한 살창동력학적특성들과 열력학적특성들을 연구할 수 있다. 이때 결정살창들에 배치된 원자들사이의 호상작용포텐샬을 주어야 한다. 논문에서는 해석정밀형압입원자방법포텐샬을 리용하였다.[4, 5]

해석정밀형압입원자방법을 리용한 체심립방금속 Mo의 포논상태밀도계산결과를 실험결과 및 선행연구결과와 비교하여 그림 3에 보여주었다.

또한 얻어진 포논상태밀도에 기초하여 계산된 Mo의 온도에 따르는 정적비열변화곡선을 그림 4에 보여주었다.

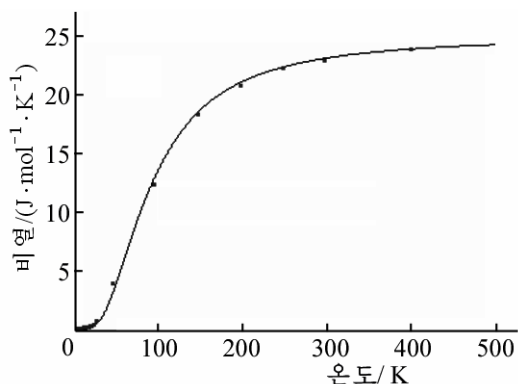


그림 4. 체심립방금속 Mo의 온도에 따르는 정적비열변화곡선
실선-계산결과, 점-실험값

표. 데바이온도계산 및 실험결과

금속	Cr	Fe	Mo	Nb	Ta	V	W
계산결과	469	412	378	237	227	327	314
실험결과	424	373	377	260	225	390	312
선행연구결과	477	437	393	246	239	339	325

Cr와 V에 대한 결과를 제외한 다른 모든 계산결과들은 실험결과들과 거의 일치한다. 특히 Mo와 Ta, W에 대한 계산결과는 실험값과 매우 잘 일치한다. Cr, Fe, V에 대한 계산결과는 초기의 포텐셜로 얻은 결과보다 실험값들과 더 잘 일치한다. 계산결과에 의하면 데바이온도는 Cr, Fe, Mo, V, W, Nb, Ta의 순서로 차례로 감소한다. Fe와 Mo를 제외하고 실험값들과 이 순서는 일치한다.

맺 는 말

체심립방구조의 제1브릴루앵구역을 결정하고 해석정밀형삽입원자방법으로 체심립방금속들의 살창동력학적특성들과 열력학적특성들을 계산하여 실험값과 거의 일치되는 결과를 얻었다.

참 고 문 헌

- [1] 안천수 등; 고체물리학, 김일성종합대학출판사, 173~195, 주체97(2008).
- [2] 김일성종합대학학보(자연과학), 61, 2, 48, 주체104(2015).
- [3] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 2, 75, 주체102(2013).
- [4] 김일성종합대학학보(자연과학), 59, 2, 80, 주체102(2013).
- [5] Jin Hak Son; 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.

주체106(2017)년 12월 5일 원고접수

The First Brillouin Zone and the Precise Analytic Embedded Atom Method of BCC Structure

Jin Hak Son, Hong Kwon Ryong

We determined the first Brillouin zone of BCC structure and calculated the phonon density of state and the thermodynamic properties of the BCC metals by the precise analytic embedded atom method.

Key words: Brillouin zone, PAEAM, BCC structure