

## 조밀육방결정살창의 제 1 브릴루앵구역에 대한 연구

리혁철, 진학선

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학기술을 발전시켜야 나라의 경제를 빨리 추켜세울수 있으며 뒤떨어진 기술을 앞선 기술로 갱신하여 생산을 끊임없이 높여나갈수 있습니다.》(《김정일선집》 증보판 제20권 62페이지)

마그네슘합금은 원자로에서 연료봉의 외피재료로 쓰이는데 여기에는 조밀육방금속인 Mg, Be와 함께 면심립방금속인 Al이 들어가며 어떤 마그네슘합금에는 조밀육방금속인 Mg와 함께 Zr 혹은 Mn이 들어간다. 연료외피재료로 많이 쓰이는 지르칼로이합금에서는 Zr가 기본 성분으로 된다. 이외에도 원자로에서 Be는 감속재료와 반사체재료로, Hf는 조종봉재료로 쓰인다.

브릴루앵구역은 고체에서 같은 에너지를 주는 파수벡터공간의 구역이다. 즉 서로 다른 여러개의 에너지를 파수벡터공간의 서로 다른 구역에 대응시킬수 있다. 이때 매개 구역은 점(1차원) 혹은 선(2차원), 면(3차원)으로 둘러싸이게 된다.[4, 6]

살창상수가  $a$ 인 2차원단순정방살창의 경우 브릴루앵구역들은 평면의 구역들에 대응되는데 제1브릴루앵구역은 파수벡터공간의 원점을 중심으로 한 바른4각형모양이고 그 밖의 구역들은 차례로 제2, 제3브릴루앵구역들이다. 서로 다른 결정구조들에서 제1브릴루앵구역을 확정하는것은 결정의 동력학적특성과 열력학적특성연구에서 중요한 의의를 가진다.[1, 2]

조밀육방결정살창의 브릴루앵구역에 대하여 연구된 자료들은 소개된것이 없다. 우리는 조밀육방결정살창의 제1브릴루앵구역을 결정하고 그에 기초하여 해석정밀형압입원자방법 [3, 5]으로 원자로구조재료로 많이 리용되는 조밀육방금속들의 동력학적특성들과 열력학적특성들을 계산하였다.

살창상수가  $a$ 인 조밀육방결정살창(그림 1)의 토대벡터는 다음과 같다.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= -a\mathbf{e}_1 \\ \mathbf{a}_2 &= a\left(\frac{1}{2}\mathbf{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_2\right) \\ \mathbf{a}_3 &= c\mathbf{e}_3 \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

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

파수벡터공간에서 조밀육방결정살창에 대응하는 거울살창의 토대벡터들은 다음과 같다.

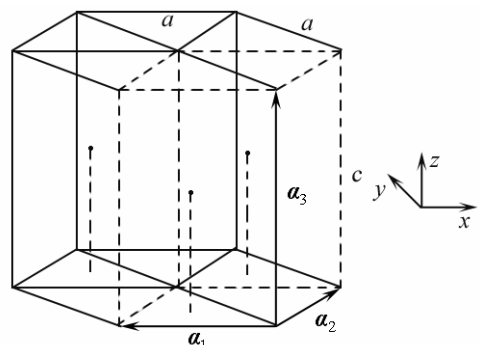


그림 1. 조밀육방결정살창과 그것의 단위포

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= 2\pi \cdot \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot [a_2 \times a_3]} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2} e_1 + \frac{1}{2} e_2 \right) \\ b_2 &= 2\pi \cdot \frac{a_3 \times a_1}{a_2 \cdot [a_3 \times a_1]} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} e_2 \\ b_3 &= 2\pi \cdot \frac{a_1 \times a_2}{a_3 \cdot [a_1 \times a_2]} = \frac{2\pi}{c} e_3 \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

식 (2)의 첫 식과 둘째 식에서  $e_1$  대신에  $-e_1$ 을 대입한 다음 첨자 1과 2를 서로 바꾸면

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= -\frac{4\pi}{\sqrt{3}a} e_1 \\ b_2 &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left( \frac{1}{2} e_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} e_2 \right) \\ b_3 &= \frac{2\pi}{c} e_3 \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

으로 된다. 식 (3)과 식 (1)의 조밀육방결정살창의 토대벡터들을 비교하면 이 거꼴살창이 살창상수들이  $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$ 와  $\frac{2\pi}{c}$ 인 조밀육방결정살창이라는것을 알수 있다.(그림 2의 점선) 이때 한

살창점을 중심으로 하여 같은  $xy$ 평면우에 배치된 6개의 린점살창점들과  $z$ 축우에 배치된 2개의 우아래린점살창점들, 중심으로 선정된 살창점을 맺는 선분들의 수직2등분면들을 그리는 방법으로 이 거꼴살창에서 제1브릴루앵구역을 그리면 그림 2에서 실선으로 표시된다. 제1브릴루앵구역을  $z$ 축을 중심으로  $30^\circ$  회전이동하고 비가약구역을 그리면 그림 3과 같이 된다. 거꼴살창과 제1브릴루앵구역을 리용하여 해당 결정살창에 대한 동력학적특성들과 열력학적특성들을 연구할수 있다. 이때 결정살창들에 배치된 원자들사이의 호상작용포텐셜을 주어야 한다.

우리는 선행연구들에서 우리가 제기한 해석정밀형압입원자방법[3, 5]을 리용하여 이 호상작용포텐셜을 주었다.

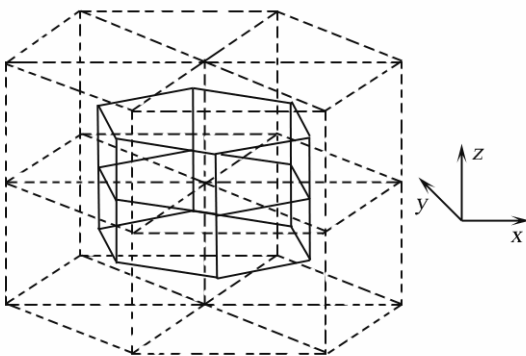


그림 2. 조밀육방결정살창의 거꼴살창과 제1브릴루앵구역

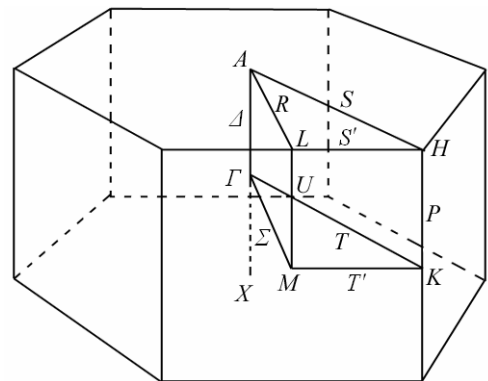


그림 3. 조밀육방결정살창에 대한 제1브릴루앵구역과 비가약구역

해석정밀형압입원자방법으로 조밀육방금속인 마그네시움(Mg)에 대하여 동력학적특성들인 포논분산곡선과 포논상태밀도를 계산한 결과들은 각각 그림 4, 5와 같다.

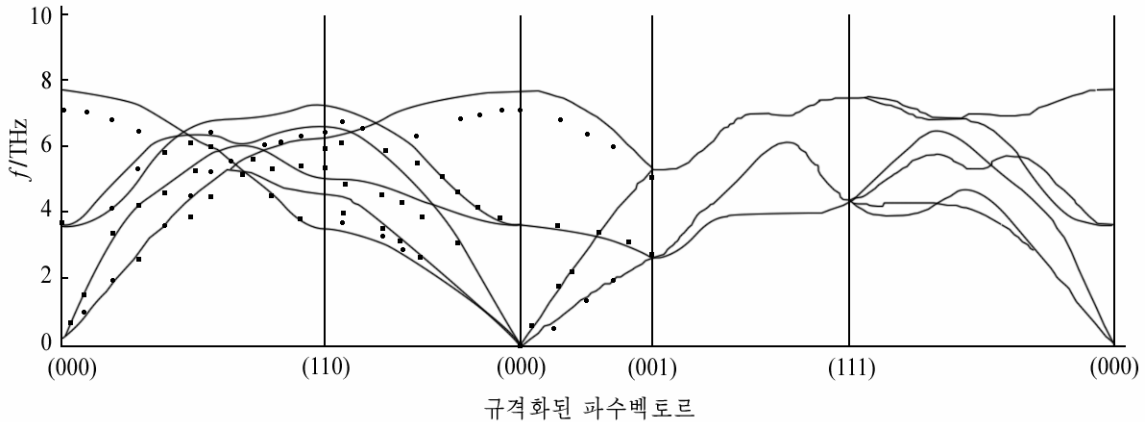


그림 4. 조밀 룩방 금속 Mg의 포논 분산 곡선  
실선은 논문 계산 결과, 기타 표식들은 선행 연구 결과[7]

그림 4에서 보는바와 같이 낮은 주파수 대역에서 포논 분산 곡선에 대한 논문 계산 결과들은 선행 연구 결과[7]와 잘 일치하지만 높은 주파수 근방에서는 잘 일치하지 않는다. 이것은 살창진동 주파수가 커지면 살창진동에 에너지가 커지면서 살창진동의 비조화 특성이 더 크게 나타나는 것과 관련된다.

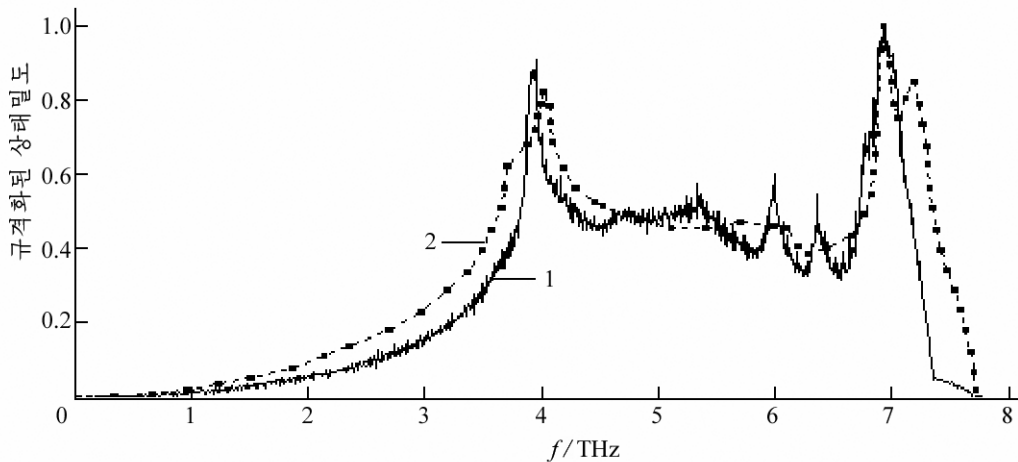


그림 5. 조밀 룩방 금속 Mg의 포논 상태 밀도  
1-계산 결과, 2-선행 연구 결과[7]

그림 5에서 보는바와 같이 포논 상태 밀도에 대한 계산 결과는 실험 결과와 거의 일치하지만 큰 봉우리들의 폭에서 차이가 있으며 계산 결과에서는 큰 봉우리들 사이에 몇 개의 작은 봉우리들이 나타난다.

얻어진 포논 상태 밀도에 기초하여 계산된 Mg의 온도에 따르는 정적 비열 변화 곡선은 그림 6과 같다.

그림 6에서 보는바와 같이 조밀 룩방 금속인 Mg에 대한 논문의 계산 결과와 실험 결과[7]는 거의 일치한다. 온도의 증가에 따라 조밀 룩방 금속인 Mg의 비열은 증가하여  $25.1 \text{ J/(K} \cdot \text{mol)}$

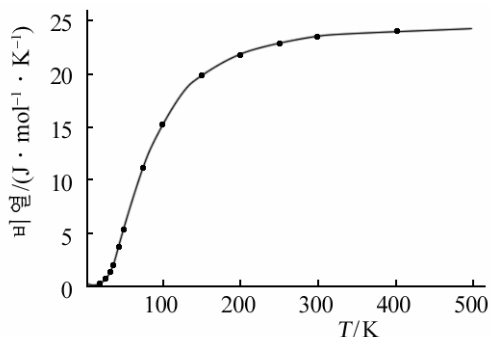


그림 6. 조밀육방금속 Mg의 온도에  
따르는 정적비열변화곡선  
실선은 계산결과, 점들은 실험값

로 다가가며 이것은 들롱-쁘띠의 법칙과 일치한다. 또한 그 변화특성도 실험값의 변화특성과 일치하며 데바이리론의 결과와도 일치한다. 이로부터 리용된 해석정밀형삽입원자포텐샬의 정확성이 검증되며 결정동력학적방법에 의한 살창진동특성에 대한 모의도 정확히 진행되었다는 것을 알수 있다.

조밀육방금속들인 Be, Co, Hf, Mg, Re, Ru, Sc, Ti, Y, Zr에 대하여 포논상태밀도에 기초하여 계산한 데바이온도와 실험값[7]은 표와 같다.

표. 조밀육방금속들의 데바이온도의 계산값과 실험값

금속	Be	Co	Hf	Mg	Re	Ru	Sc	Ti	Y	Zr
론문계산값	1 082	413	199	330	338	398	352	356	224	264
실험값[7]	1 031		213	330	275	415	476	380	214	250
선행계산값[7]	1 110		206	331	341	420	333	337	220	249

표에서 보는바와 같이 Re와 Sc에 대한 결과를 제외한 다른 모든 계산결과들은 실험결과와 거의 일치한다. 특히 Mg에 대한 계산결과는 실험값과 완전히 일치한다. 계산결과에 의하면 데바이온도는 Be, Co, Ru, Ti, Sc, Re, Mg, Zr, Y, Hf의 순서로 감소한다.

## 맺 는 말

1) 조밀육방결정살창의 거꿀살창과 제1브릴루앵구역, 이 구역의 비가약구역을 결정하였다.

2) 결정된 제1브릴루앵구역과 그 비가약구역에서 해석정밀형삽입원자방법을 리용하여 조밀육방금속들의 동력학적특성들과 열력학적특성들을 계산하여 실험값 및 선행연구결과들과 거의 일치하는 결과를 얻었다.

## 참 고 문 헌

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

## **On The First Brillouin Zone of HCP Lattice**

*Ri Hyok Chol, Jin Hak Son*

We determined the first Brillouin zone of the HCP structures and calculated the lattice dynamical properties and the thermodynamic properties of the HCP metals by the precise analytic embedded atom method(PAEAM) based on it.

Key words: Brillouin zone, PAEAM, HCP metal, phonon, specific heat, Debye temperature