

분자동역학(MD) 시뮬레이션을 이용한 조암광물의 열팽창 계수 산정

Calculations of the Thermal Expansion Coefficient for Rock-Forming Minerals Using Molecular Dynamics (MD) Simulation

서 용 석 (Yong Seok Seo)
배 규 진 (Gyu Jin Bae)

한국건설기술연구원 토목연구부
한국건설기술연구원 토목연구부

요약 / ABSTRACT

MD 시뮬레이션을 이용하여 α -quartz, 백운모, 조장석의 열팽창계수를 산정하였다. MD 시뮬레이션에서 가장 중요한 포텐셜 함수로는 부분이온성 두입자간 포텐셜을 이용하였다. 열팽창계수는 격자구조의 온도에 따른 변화를 NPT-ensemble 시뮬레이션을 통하여 계산하여 산정하였으며 그 결과를 실험결과와 비교하였다. 시뮬레이션을 통하여 산정된 열팽창계수는 시험결과와 잘 일치하고 있으며, 유효한 수준의 결과를 보이고 있다.

주요어: MD 시뮬레이션, 포텐셜 함수, 조암광물, 열 팽창계수

We describe the calculation of thermal expansion coefficients of α -quartz, muscovite and albite using a MD simulation method. The selection of interatomic potentials is important for the MD calculation, and we used the 2-body interatomic potential function. The coefficients are calculated using a differential operation of the temperature dependence of the lattice constant obtained from the NPT-ensemble molecular dynamics simulation. Reasonable agreement is found between the analytical results and measured data.

Key words: MD simulation, potential function, rock-forming minerals, thermal expansion coefficient

1. 서 론

물성 과학에서는 연구대상 물질의 거시적 성질이 나 변화를 원자, 분자, 이온, 전자 등과 같은 구성 입자의 거동으로부터 이해하려는 움직임이 있다. 그러나 광물 등은 입자간에 복잡하게 상호 작용하는 다 입자간의 문제로서, 온도, 압력, 시간의 변화와 함께 그 성질이 변화하므로 해석적으로 해를 구하는 것이 그다지 간단한 문제는 아니다. 최근 컴퓨터의 발달에 힘입어서 분자시뮬레이션 방법 중 하나인 분자동역학(Molecular Dynamics, MD)시뮬레이션이 물성과학연구에 많이 활용되고 있다. 이 방법은 원자 또는 이온간 상호작용을 바탕으로, 각 입자에 대하여 매 시간에서의 위치와 속도를 구하고, 통계 열역학을 이용하여 각종 물성치를 계산하는 방법이다. 또한, 계의 온도, 압력, 원자간 상호작용 등의 모든 조건을 임의로 선택할 수 있기 때문에 실험적으로 실현하기 곤란한 극한 상황, 즉, 초고온, 초저온 또는 초고압 등의 상태를 계산기 안에서 재현하고, 각종 거시적 물성치를 구하는 것이 가능하다.

암석의 열적 성질은 방사성 폐기물 처분장, 저온 액화가스 저장고 또는 지하 식품저장고 등과 같은 지하공간 건설 시에 꼭 검토해야 하는 중요한 물리적 성질 중하나이다. 이러한 암석의 열적 특성을 밝히는데 있어서 다양한 종류의 암석을 구성하고 있는 조암광물의 역학적 성질을 MD 시뮬레이션을 이용하여 측정하고 이를 수치해석에 적용하여 고온 하에서 변화되는 암석의 역학적 성질을 파악하는 것도 좋은 방법론중의 하나이다. Seo et al.(2000, 2001)은 암석구성요소의 탄성 및 시간의존성 역학치를 균질화법 수치해석에 적용하여 화강암의 거시적인 역학성을 측정한다. Miyazaki and Shiozaki(1996)는 MD 시뮬레이션을 이용하여 α -Fe의 탄성계수와 열팽창계수를 밝힌 바 있으며, Matsui and Price(1992)는 지구심부 구성물질인 MgSiO₃의 고온·고압하에서의 체적 열팽창율을 계산한 바 있다. 서용석 외(2000)는 α -quartz의 압축강도를 MD 시뮬레이션으로 구하고 압축시험결과와 비교함으로써 그 강도이방성을 밝힌 바 있다.

본 연구에서는 이러한 배경을 바탕으로 암석을 구성하는 조암광물 중, α -quartz, 백운모, 조장석

을 대상으로 MD 시뮬레이션을 이용하여 열팽창계수를 계산하고, 이를 실험결과와 비교함으로써 본 연구에 적용한 각 광물의 원자간 상호작용 포텐셜을 검증하고 MD 시뮬레이션 결과의 유효성을 검토하였다.

2. MD 시뮬레이션

MD 시뮬레이션은 Newton의 운동방정식을 따르는 n 개의 입자로부터 구성되는 가상적인 계에 대하여, 그 운동방정식을 수치적분을 통하여 매시간에서의 모든 입자의 위치와 속도를 구하고, 시뮬레이션 결과를 해석하여 필요한 물리적 양을 계산함으로써 계의 거시적인 성질 또는 계에 일어난 현상의 특징을 조사하는 해석적 방법이다. 본 장에서는 MD 시뮬레이션에서 입자(원자) 운동의 궤적을 구하기 위해서 본 논문에서 적용된 원자의 운동법칙, 원자간에 작용하는 힘, 경계조건 및 운동방정식의 시간적분법에 대하여 설명한다.

2.1 원자의 운동

고전역학의 법칙(뉴턴의 운동방정식)을 따라서 운동하는 n 개의 원자로 구성되는 가상적인 계를 계산영역으로 가정한다. 여기서 원자의 질량을 m_i , 매시간 t 에서의 원자 i 의 위치벡터를 \mathbf{r}_i , 원자 i 에 작용하는 힘을 \mathbf{F}_i 라 하면 운동방정식은 다음과 같다.

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i \quad (1)$$

이 미분방정식을 수치적분 하기 위하여 미분방정식을 차분방정식으로 나타내고, Verlet의 방법을 적용하여 다음과 같이 입자 i 의 위치 \mathbf{r}_i 와 속도 \mathbf{v}_i 를 구했다.

$$\mathbf{r}_i(t+\Delta t) = 2 \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t-\Delta t) + (\Delta t)^2 \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \quad (2)$$

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{\mathbf{r}_i(t+\Delta t) - \mathbf{r}_i(t-\Delta t)}{2\Delta t} \quad (3)$$

($t + \Delta t$)에서의 좌표를 사용하여 t 에서의 속도를 계산하므로 좌표와 속도는 Δt 의 시간차를 가지며 $n\Delta t$ ($n=1, 2, 3, \dots$)에서의 입자의 위치와 속도를 구하게 된다.

2.2 원자간 상호작용 모델

설정계 내에서 원자간에 상호 작용하는 포텐셜은 경험적 포텐셜, 모델 포텐셜 및 전자론적 계산에 의한 포텐셜로 크게 구분된다. 원자수가 많고 고체에 해당하는 결정의 경우 경험적 포텐셜을 많이 사용한다. 이때 계의 탄성계수, 격자정수, 결정구조 등 실험치의 재현성으로부터 포텐셜을 결정하게 된다. 경험적 포텐셜에는 두 입자간 포텐셜과 세 입자 이상에 적용되는 다입자간 포텐셜이 있으며, 본 연구에서는 두입자간 포텐셜(Kawamura, 1992)이 이용되었다. 포텐셜을 이루는 변수들은 상온의 결정구조를 안정하게 유지할 수 있도록 MD 시뮬레이션에 의한 반복적인 계산에 의하여 결정되었다. 식 (4)는 부분이온쌍 두 입자간 포텐셜을 나타낸 것이다.

$$U_{ij}(r_{ij}) = \frac{z_i z_j e^2}{r_{ij}} + f_0(b_i + b_j) \exp\left(\frac{a_i + a_j - r_{ij}}{b_i + b_j}\right) - \frac{c_i c_j}{r_{ij}^6} + D_{ij} \left[\exp\{-2\beta_{ij}(r_{ij} - r_{ij}^*)\} - 2 \exp\{-\beta_{ij}(r_{ij} - r_{ij}^*)\} \right] \quad (4)$$

여기서, 오른쪽 제 1항은 쿨롱 상호작용이며, r_{ij} 는 이온 i 와 j 사이의 거리, z_i 는 이온의 전하를 나타낸다. 제 2항은 단거리 반발 상호작용을 나타내며, f_0 는 단위화산을 위한 정수로서 $6.9478 \times 10^{-11} \text{N}$ 이다. a, b 는 에너지 인자로서 이온의 크기와 소프트니스에 관계된다. 제 3항은 van der Waals 상호작용으로 거리의 6승에 반비례하는 함수이며, c_i 는 분극되기 쉬운 정도를 의미한다. 제 4항은 Morse 형 함수로 표시되는 공유결합 포텐셜이다. D_{ij} 는 포텐셜의 깊이, β_{ij} 는 형상요소이며, r_{ij}^* 는 진공중에 분포하는 이온쌍의 평행거리를 의미한다. 본 연

구에서는 쿨롱항의 에너지 계산을 위하여 일반적으로 널리 알려진 Ewald법을 적용하였다.

본 연구에서 수행된 α -quartz, 백운모, 조장석의 MD 시뮬레이션에 이용된 포텐셜 요소들을 Table 1, 2 및 3에 나타내었다.

Table 1. Potential Parameters for α -quartz.

Morse term	D (kJmol ⁻¹)	β (nm ⁻¹)	γ^* (nm)
Si-O	310	20.00	0.151

* ω is atomic weight.

Ion	* ω (gmol ⁻¹)	z (e)	a (nm ⁻¹)	b (nm ⁻¹)	c (kJ ^{1/2} nm ³ mol ^{-1/2})
O	16.00	-1.2000	0.1926	0.0160	0.0409
Si	28.09	2.4000	0.0945	0.0090	0.0000

Table 2. Potential Parameters for muscovite.

Morse term	D (kJmol ⁻¹)	β (nm ⁻¹)	γ^* (nm)
Si-O	310	20.00	0.151
Al-O	147	20.00	0.164
H-O	314	27.60	0.082

Ion	* ω (gmol ⁻¹)	z (e)	a (nm ⁻¹)	b (nm ⁻¹)	c (kJ ^{1/2} nm ³ mol ^{-1/2})
O	16.00	-1.3025	0.1907	0.0150	0.0450
Si	28.09	2.4000	0.0890	0.0080	0.0000
Al	26.98	2.2500	0.0957	0.0080	0.0000
K	39.10	1.0000	0.1573	0.0120	0.0327
II	1.01	0.3400	0.0053	0.0044	0.0000

Table 3. Potential Parameters for albite.

Morse term	D (kJmol ⁻¹)	β (nm ⁻¹)	γ^* (nm)
Si-O	310	20.00	0.151
Al-O	167	20.00	0.164

Ion	* ω (gmol ⁻¹)	z (e)	a (nm ⁻¹)	b (nm ⁻¹)	c (kJ ^{1/2} nm ³ mol ^{-1/2})
O	16.00	-1.2886	0.1926	0.0160	0.0409
Si	28.09	2.4000	0.0945	0.0090	0.0000
Al	26.98	2.1090	0.1066	0.0090	0.0000
Na	22.99	1.0000	0.1260	0.0080	0.0205

2.3 주기경계조건

물체에는 표면이 존재하며 물체의 표면부근과 내부에서 나타나는 성질은 서로 다르다. 물체가 표면의 영향을 받지 않는 내부에서 나타나는 성질을 bulk상태에서의 성질이라고 한다. MD에서는 원자·분자의 bulk상태를 다루므로, 대상물질은 10^{23} 개 정도의 원자·분자로 구성되어 최신 컴퓨터로도 계산할 수 없는 계가 된다. 따라서 그 일부를 취하여 기본셀로 나타내며, 그 주위를 이미지셀로 반복해서 표현하고 두 셀의 경계부분을 주기경계조건을 적용하여 계산한다. Figure 1은 주기경계조건을 만족하며 운동하는 입자들을 모식적으로 나타낸 것이다. 그림에서 보는 바와 같이 기본셀 내의 입자의 운동은 이미지셀에서 똑같이 반복되고, 시뮬레이션 중에 기본셀의 밖으로 튀어나오는 입자는 내칭되는 상대 면으로부터 같은 속도로 유입된다. 이러한 시뮬레이션 계를 구축함으로써 기본셀내의 입자 수가 작을지라도 이미지셀에 존재하는 입자 수만큼 시뮬레이션하는 효과를 얻을 수 있다.

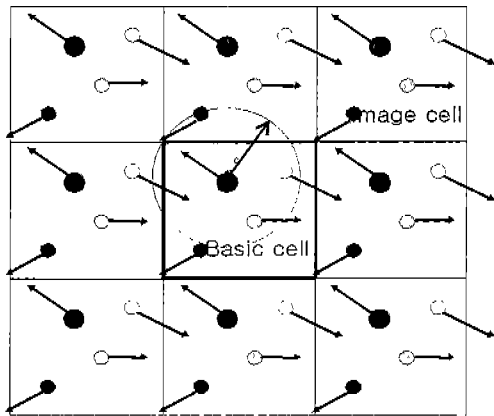


Fig. 1. Periodic boundary condition.

2.4 온도와 압력의 제어

MD 시뮬레이션에서는 계의 입자수 N , 체적 V , 압력 P , 화학적 퍼텐셜 μ 그리고 전 에너지 E 를 선별적으로 일정하게 유지함으로써 다음과 같이 크게 4개의 조합으로 계산이 이루어진다. 예를들어 NPT-ensemble은 입자수, 압력, 온도를 시뮬레이션

중에 일정하게 유지하는 방법이다.

1) NPT-ensemble: 정온, 정압의 계는 다른 계들보다 보다 현실적으로 실험에 이용되는 계이다.

2) NVT-ensemble: 외계와 에너지(열)의 교환을 허용하여 열평형을 이루면서 온도와 체적을 일정하게 유지한다.

3) NVE-ensemble: 외력이 작용하지 않는 경우 입자수와 체적을 일정하게 두면 쉰 에너지는 일정하게 유지된다.

4) μ VT-ensemble: 화학퍼텐셜을 일정하게 유지하는 계이다. 상평형이나 화학평형을 연구하는데 이용된다.

본 연구에서는 입자수, 온도와 압력을 일정하게 유지하는 NPT-ensemble을 이용하여 시뮬레이션을 수행하였다. MD 시뮬레이션에서 입자수는 동일 계를 사용할 경우 일정하게 유지된다. 온도를 일정하게 유지하기 위하여 많이 사용되는 방법으로 입자의 속도를 조정하는 속도 스케일링법(Velocity scaling method)이 있으며, 이를 간단히 소개하면 다음과 같다.

통계 열역학에서 계의 운동에너지는 다음 식으로 계산된다.

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_i^N m_i v_i^2 = \frac{3}{2} N k_B T \quad (5)$$

여기서, N 은 입자수, m_i 는 입자의 질량, v_i 는 입자의 속도, k_B 는 Boltzmann상수이다. 온도 T 는 입자속도를 이용하여 식(6)으로 계산된다.

$$T = \frac{\sum_i^N m_i v_i^2}{3Nk_B} \quad (6)$$

새로운 설정 온도는 설정 온도 T_{set} 와 매시간에서의 온도 T 의 비의 평방 근을 계수로 하는 다음 식으로 계산된다.

$$v_i = \left(\frac{T_{set}}{T} \right)^{1/2} v_i \quad (7)$$

즉, 온도의 제어는 $T < T_{set}$ 일 경우 계에 포함된 모든 입자속도를 일제히 빠르게 하고, $T > T_{set}$ 일 경우에는 느리게 함으로써 이루어진다.

다음으로 압력의 계산과 제어방법에 대하여 살펴

보면 다음과 같다. 입자간 상호작용이 존재할 때 압력은 Virial (Ueda, 1996)정리를 이용하여 다음과 같이 구할 수 있다.

$$P = \frac{Nk_B T}{V} - \frac{1}{3V} \langle \sum_i \sum_j (-\mathbf{F}_{ij}) \cdot \mathbf{r}_{ij} \rangle \quad (8)$$

여기서 \mathbf{F}_{ij} 는 거리 \mathbf{r}_{ij} 에 존재하는 입자 i 와 j 사이의 힘이다. 본 시뮬레이션에서는 단위 면적 당 압력을 사용하므로 압력을 응력과 동일한 의미로 사용한다. 압력은 다음과 같은 행렬로 표시되며,

$$\begin{bmatrix} P_{xx} & P_{xy} & P_{xz} \\ P_{xy} & P_{yy} & P_{yz} \\ P_{xz} & P_{yz} & P_{zz} \end{bmatrix} \quad (9)$$

각 압력성분은 다음 식에 의하여 산정된다.

$$P_{xy} = \frac{1}{V} (Nk_B T_{xy} - \langle \sum_i \sum_j F_x^{ij} \cdot r_y^{ij} \rangle) \quad (10)$$

여기서 x 와 y 는 직교좌표계를 따르며, i, j 는 입자를 의미한다. 단 (10)식에서 총화규약 (summation convention)은 적용하지 않는다. 또한 T_{xy} 는 다음 식으로 표현된다.

$$T_{xy} = \frac{\sum_i m_i v_{ix} v_{iy}}{Nk_B} \quad (11)$$

또한 본 MD 시뮬레이션에서는 각 시각에서의 압력을 설정 압력으로 조정하기 위하여 강제 스케일링에 의한 압력 제어법을 사용하였다. 계산된 압력 P_{ij} 가 설정압력 P_{ij}^{set} 이 되도록 (10)식을 따라서 기본셀의 형상(변의 길이 L_i 와 주축 사이의 각도 A_{ij})을 변화시킴으로써 압력을 일정하게 유지할 수 있다.

$$L_x = L_x [1 + k_L (P_{xx} - P_{xx}^{set})] \quad (12)$$

$$A_{xy} = A_{xy} + k_A (P_{xy} - P_{xy}^{set}) \quad (13)$$

여기서 k_L 과 k_A 는 압력의 변동에 따라 자동적으로 조정되는 상수이다.

2.5 시뮬레이션 모델 및 방법

본 시뮬레이션의 모델을 α -quartz(SiO_2), 조장석($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$), 백운모($\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$)의 순으로 Fig. 2-4에 나타내었다. 각 결정의 초기구조를 이루는 격자요소를 살펴보면 다음과 같다. 석영

은 $a=b=0.4913\text{nm}$, $c=0.5405\text{nm}$, $\gamma=120^\circ$ (Wright and Lehmann, 1981); 조장석은 $a=0.8152\text{nm}$, $b=1.2784\text{nm}$, $c=0.7165\text{nm}$, $\alpha=94.28^\circ$, $\beta=116.67^\circ$, $\gamma=87.74^\circ$ (Guggenheim et al., 1987); 백운모는 $a=0.5200\text{nm}$, $b=0.9021\text{nm}$, $c=2.0070\text{nm}$, $\beta=95.71^\circ$ (Winter et al., 1977)이다. 또한 석영의 기본셀은 주기적 환경조건을 갖는 단위격자의 100배($5a \times 5b \times 4c$, 900원자, Fig. 2)를 이용하였으며, 조장석은 단위격자의 18배($3a \times 2b \times 3c$, 936원자, Fig. 3), 그

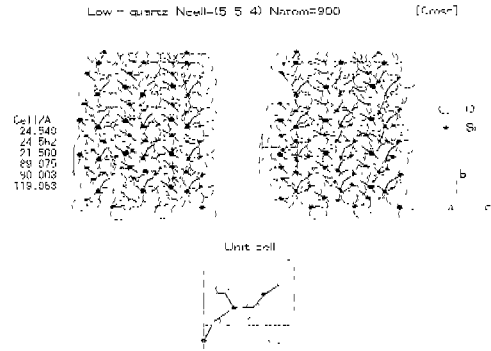


Fig. 2. Stereoscopic pair-view of basic cell in α -quartz.

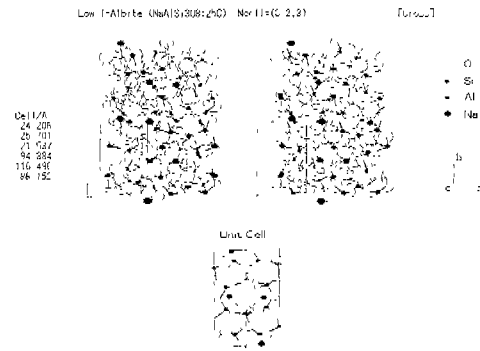


Fig. 3. Stereoscopic pair-view of basic cell in albite.

리고 백운모는 단위격자의 18배($6a \times 3b \times 1c$, 1512 원자, Fig. 4)를 이용하였다. 본 연구에 적용된 시간간격은 1 time step이 2.0fs (2×10^{-15} second)이며, 3차원 주기경계조건이 적용되었다.

본 시뮬레이션의 계산과정은 다음과 같다. 먼저 결정 초기구조를 평형화시키는 과정으로서 300°K , 0 GPa의 조건 하에서 NPT-ensemble을 이용하여

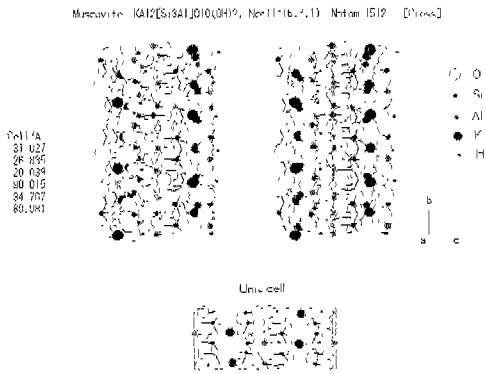


Fig. 4. Stereoscopic pair-view of basic cell in muscovite.

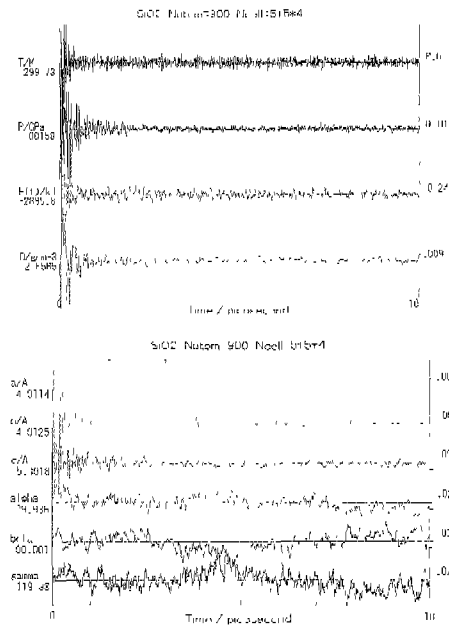
5,000 time step을 계산하여 모델 변수의 최적화를 실시한다. 최적화된 모델을 가지고 열팽창계수를 산정하기 위하여 원하는 온도에서 각각 5,000 time step의 초기강화를 실시한 후 20,000 time step 이상의 계산을 수행함으로써 그 ensemble 평균으로부터 열팽창계수를 산정하였다.

3. 결과 및 고찰

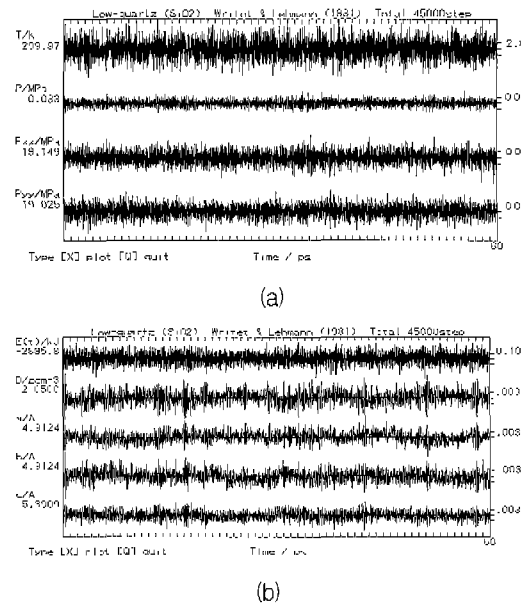
3.1 MD 시뮬레이션의 결과

Figure 5는 α -quartz의 초기 최적화 과정 5000 time step의 결과를 표시한 것이다. 여기서 T는 온도, P는 단위 면적당 압력, E는 에너지, D는 밀도이며, a, b, c는 결정축의 길이, α, β, γ 는 결정축간의 각도를 의미한다. 시뮬레이션의 결과를 보면 대부분의 요소에서 약 500 time step까지는 급격한 변동을 보이다가 그 이후 일정치를 유지하는 것을 볼 수 있다. 또한 결정축간의 각도보다는 결정축의 길이가 좀 더 안정된 계산결과를 보여주고 있다.

Figure 6, 7, 8은 300K, 0GPa 조건하에서 NPT-ensemble로 실시된 α -quartz, 조장석, 백운모의 시뮬레이션 결과 중 온도, 압력, 에너지, 밀도, 축의 길이를 나타낸 것이다. 대부분 ensemble 평균을 취하기에 충분한 정도로 안정되어 있음을 잘 보여주고 있다. 특징적인 것은 백운모 결정축의 길이를 시뮬레이션 한 결과인 Fig. 8(b) 중 c축의 유동을

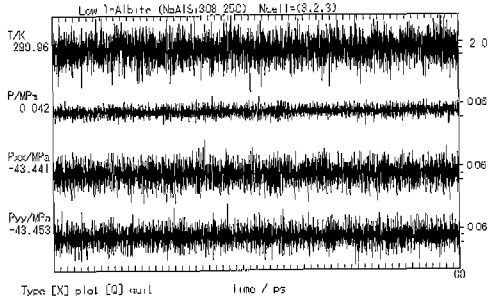


(b) Fig. 5. MD simulation of α -quartz for equilibration under the condition of 300° K and 0 GPa

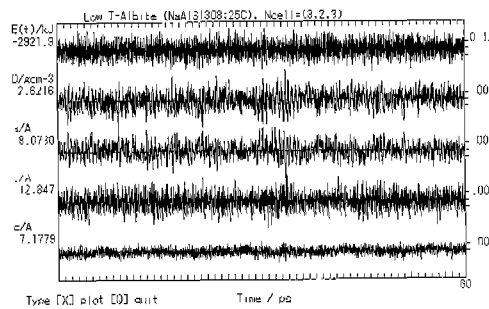


(a) (b) Fig. 6. MD simulation of α -quartz for under the condition of 300° K and 0 GPa by using the NPT -ensemble.

by using the NPT-ensemble.



(a)



(b)

Fig. 7. MD simulation of albite for under the condition of 300° K and 0 GPa by using the NPT -ensemble.

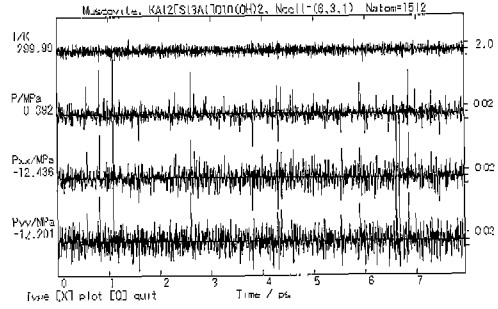
이 a 및 b축의 결과보다 심하다는 것이다. 이는 c 축이 백운모의 벽개면에 수직되는 방향(Fig. 4)으로서 입자간 포텐셜 관계가 상대적으로 불안정함에 기인하는 것이다. 하지만 본 연구에서 필요로 하는 열팽창률을 계산하기 위한 포텐셜로는 ensemble 계산을 충분히 길게 취하면 충분한 것으로 보인다.

3.2 열팽창 계수의 산정

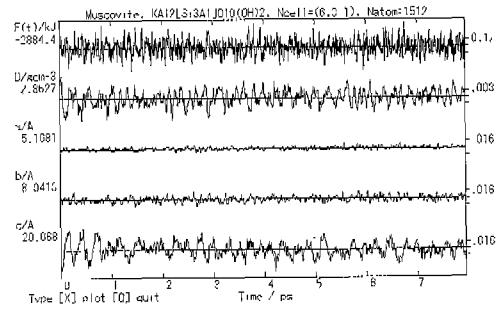
열팽창계수 α 는 a축에 대하여 다음 식에 의하여 산정된다.

$$\alpha = \frac{1}{a} \left[\frac{da}{dT} \right]_{p=constant} \quad (14)$$

각 시뮬레이션 결과를 확인하기 위하여 α -quartz, 백운모, 조장석의 순으로 Ackermann and Sorrel(1974), Guggenheim et al.(1987), Winter et al.(1977)가 X선 회절분석기를 이용하여 측정된 각 광물의 열팽창계수 측정 결과와 비교하였다. α



(a)



(b)

Fig. 8. MD simulation of muscovite for under the condition of 300° K and 0 GPa by using the NPT -ensemble.

quartz의 경우 분석시 타겟으로 Cu-K α , 백운모와 조장석은 Mo-K α radiation을 이용하였다. 자세한 실험내용은 각 참고문헌에 자세히 언급되어 있다. Figures 9-11은 실험에 의한 측정치와 시뮬레이션에 의한 측정치를 나타낸 것이다. 실험에서의 측정범위는 상기 그림에 나타난 모든 범위에서 일괄적으로 측정되었다. 시뮬레이션은 각 광물이 상전이될 일으키지 않는 범위 내에서 동일한 포텐셜과 모델을 사용하여 측정되었다. 단, Fig. 9에서 보는 바와 같이 α -quartz의 경우 773K를 경계로 시뮬레이션 결과와 실험 결과에서 차이를 보이고 있는데, 이는 이 온도에서 α -quartz가 β -quartz로 상전이 하기 때문에 일어난 현상이다. 즉, 본 시뮬레이션에 적용된 포텐셜 함수는 α -quartz에 맞추어 설정되었기 때문에 β -quartz의 영역에서는 맞지 않는다. 또한 실험에 의한 측정치의 측정 결과는 측 길이의 경우 약 10⁻⁴nm까지 측정하였으나,

측간 각도는 10^{-2} degree까지 측정되었다. 시뮬레이션의 결과는 실험의 정밀도에 맞추어서 계산되었다.

서 실시되는 실험의 경우 시뮬레이션 기법을 도입하는 것이 유리하다는 것을 보여 주고 있다.

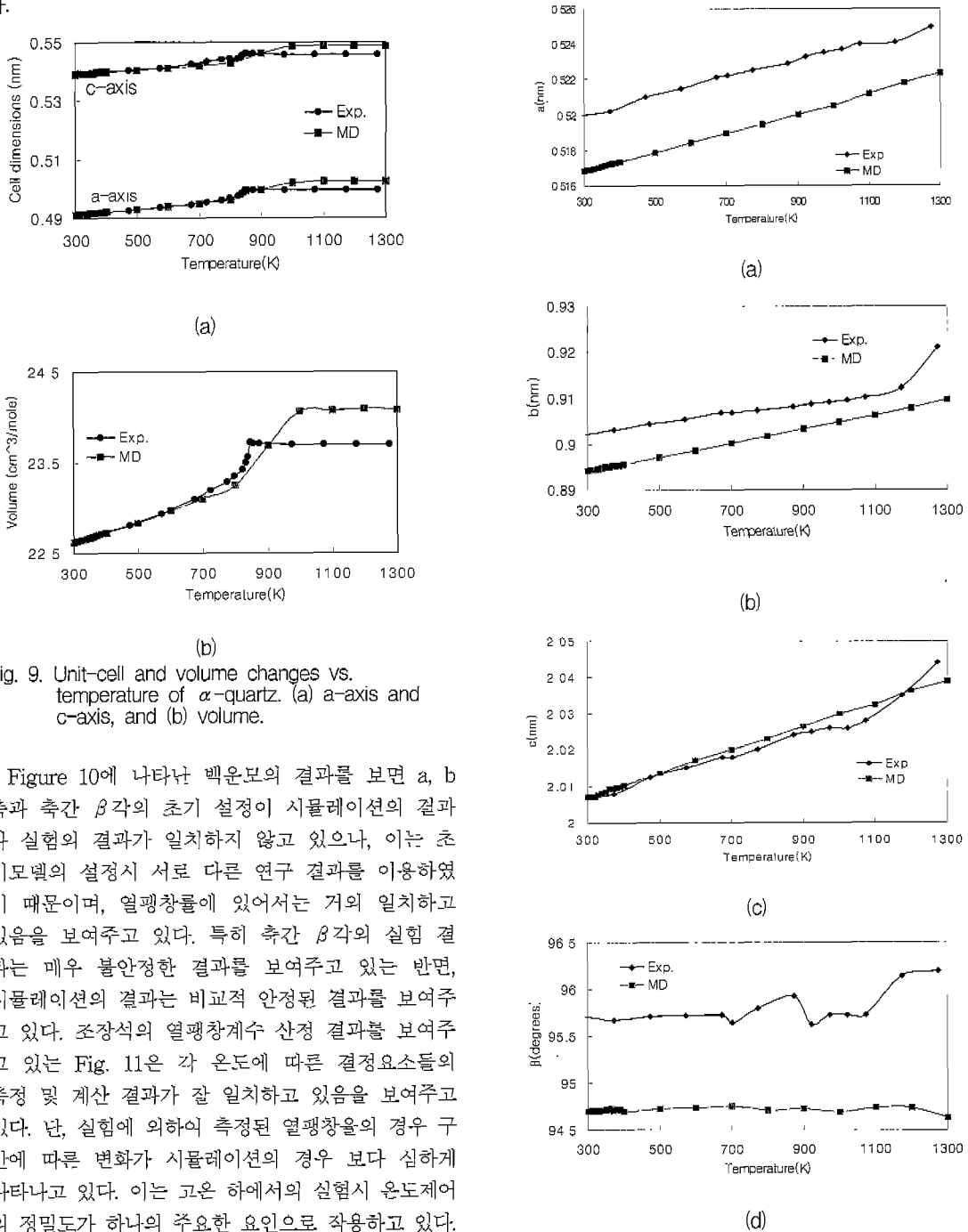


Fig. 9. Unit-cell and volume changes vs. temperature of α -quartz. (a) a-axis and c-axis, and (b) volume.

Figure 10에 나타난 백운모의 결과를 보면 a, b 축과 측간 β 각의 초기 설정이 시뮬레이션의 결과와 실험의 결과가 일치하지 않고 있으나, 이는 초기모델의 설정시 서로 다른 연구 결과를 이용하였기 때문이며, 열팽창률에 있어서는 거의 일치하고 있음을 보여주고 있다. 특히 측간 β 각의 실험 결과는 매우 불안정한 결과를 보여주고 있는 반면, 시뮬레이션의 결과는 비교적 안정된 결과를 보여주고 있다. 조장석의 열팽창계수 산정 결과를 보여주고 있는 Fig. 11은 각 온도에 따른 결정요소들의 측정 및 계산 결과가 잘 일치하고 있음을 보여주고 있다. 단, 실험에 의하여 측정된 열팽창률의 경우 구간에 따른 변화가 시뮬레이션의 경우 보다 심하게 나타나고 있다. 이는 고온 하에서의 실험시 온도제어의 정밀도가 하나의 주요한 요인으로 작용하고 있다. 따라서 서론에서도 언급한 바와 같이 고온, 고압하에

4. 결론 및 연구과제

본 연구에서는 부분이온성 두입자간 포텐셜을 이용하여 α -quartz, 조상석, 백운모를 대상으로 MD 시뮬레이션을 이용하여 그 열팽창계수를 계산하고, 이를 실험의 결과와 비교해 봄으로서 다음과 같은 결론을 얻었다.

MD 시뮬레이션에 있어서 중요한 포텐셜의 선정은 부분이온성 두입자간 포텐셜을 이용함으로써 조암광물의 결정구조를 재현할 수 있었다.

고온하에서의 조암광물의 열팽창계수를 MD 시뮬레이션을 이용하여 산정할 수 있었으며, 이를 실험결과와 비교해 본 결과 유효한 수준의 열팽창계수임을 알 수 있었다. 이를 통하여 고온, 고압과 같은 실험실에서 구현하기 어려운 환경하에서 MD 시뮬레이션을 이용함으로써 조암광물의 물리적 또는 역학적 특성을 실험을 대신하여 얻을 수 있는 토대를 마련하였다.

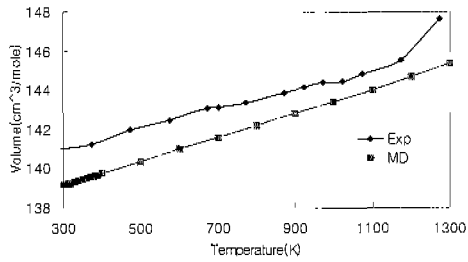
본 연구에 적용된 포텐셜을 이용하여 앞으로 다양한 압력하에서의 열팽창계수, 탄성계수 등의 산정을 시도해 볼 필요가 있으며, 현재 실험이 거의 불가능한 것으로 알려져 있는 광물간의 입간(grain boundary)에서의 역학적 성질을 밝히기 위하여 본 연구를 기초로 하여 포텐셜을 수정하는 연구가 필요할 것이다.

참고 문헌

서용석, 이진국, 市川康明, 河村雄行, 정교철, 김교원, 2000, 분자동역학 시뮬레이션과 일축압축 강도시험을 이용한 α -quartz의 길정축에 따른 강도이방성 검토, 터널과 지하공간, 10, 70-79.

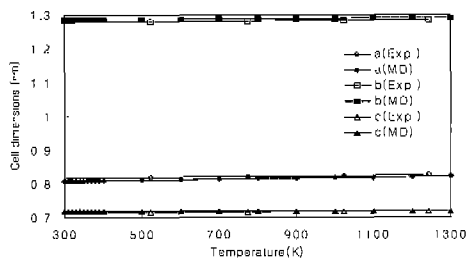
Ackermann, R. J. and Sorrel, C. A., 1974, Thermal expansion and the high-low transformation in quartz, I. High-temperature X-ray studies, J. Appl. Cryst., 7, 461-467.

Guggenheim, S., Chang, Y. and Koster van Groos, A., 1987, Muscovite dehydroxylation: High-temperature studies, Amer. Mineralogist, 72, 537-550.

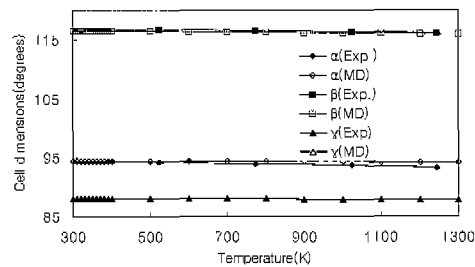


(e)

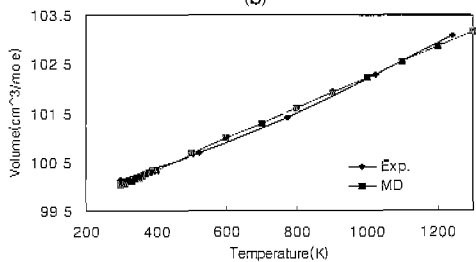
Fig. 10. Unit-cell and volume changes vs. temperature of muscovite. (a) a-axis (b)b-axis, (c) c-axis (d) cell angel β and (e) volume.



(a)



(b)



(c)

Fig. 11. Unit-cell and volume changes vs. temperature of albite. (a) cell-dimensions, (b) cell angles and (c) volume.

- Kawamura, K., 1992, Molecular dynamics simulations, Springer, Tokyo. E-mail:gjbac@kict.re.kr
- Matsui, M. and Price, G. D., 1992, Computer simulation of the MgSiO₃ Polymorphs, Phys. Chem. Minerals, 18, 365-372.
- Miyazaki, N. and Shiozaki, Y., 1996, Calculation of mechanical properties of solids using molecular dynamics method, Japan, Soc. Mech. Eng., A62.594, 430-436.
- Seo, Y. S., Fujii, N., Sciki, T. and Ichikawa, Y., 2000, Viscoelastic behavior of granite and the homogenization analysis, Mater. Sci. Res. Int., 6, 203-211.
- Seo, Y. S., Jeong, G. C., Kim, J. S. and Ichikawa, Y., 2001, Microscopic observation and contact stress analysis of granite under compression, Engineering Geology, In press.
- Ueda, A., 1996, Computer simulation, Asakura, Tokyo, 54-57.
- Winter, J, Ghose, S. and Okamura, F., 1977, A high-temperature study of the thermal expansion and the anisotropy of the sodium atom in low albite, amer. Mineralogist, 62, 921-931.
- Wright, A. and Lehmann, M., 1981, J. Solid State Chemistry, 36, 371-380.

서용석

한국건설기술연구원 토목연구부 지반구조물그룹
경기도 고양시 일산구 대화동 2311번지
Tel: 031-910-0225
Fax: 031-910-0211
E-mail:ysseo@kict.re.kr

배규진

한국건설기술연구원 토목연구부
경기도 고양시 일산구 대화동 2311번지
Tel: 031-910-0162
Fax: 031-910-0211