

## E - 4

### L-J 이원계의 용융과 결정화에 대한 분자동역학 연구 (A Molecular Dynamics Study on Melting Point and Critical Quenching Rate of L-J Binary System)

김보찬, 김욱, 한혜원, 장현구  
성균관 대학교 재료공학과

주기적인 경계 조건을 따르는 500개 원자로 구성된 Lennard-Jones 이원계에서 용매 원자와 용질 원자의 조성이 동일한 조건일 때 원자크기 misfit이 CQR(critical quenching rate)에 미치는 영향과 원자크기 misfit을 고정했을 때 용질 원자의 농도 변화가 녹는점(melting point)에 미치는 영향을 정압 MD(molecular dynamics) 시뮬레이션을 통해 계산하였다. 또한 원자크기 misfit을 고정하고 농도를 변화시켜 가열과 냉각을 반복하였을 때 용융점의 변화를 조사하였고 이원계와 비교하기 위하여 동일한 계산을 단일계에서도 수행하였다. 원자 체적 및 엔탈피의 변화를 가열과 냉각 과정에 따라 온도의 함수로 나타내어 녹는점과 CQR을 결정하고 반경분포함수 및 Wendt-Abraham 비를 이용하여 결정 및 비정질 상태를 구분하였다. 결정상의 구조는 각도분포함수로 확인하였다. 초기의 완전한 FCC결정을 가열하여 액체상으로 만든 후 냉각 시에 원자크기 misfit이 커질수록 CQR는 점점 느려지는 경향을 나타내었다. 농도가 증가할수록 원자체적이 증가하였으며 처음 가열하였을 때보다 재가열 하였을 때 용융점이 낮아졌다.

#### 참고 문헌

1. H. K. Chang et al. *Metals and Material*, 4(6), 1143(1998)
2. F. Yonezawa, *Solid State Physics* 45, 179(1991)