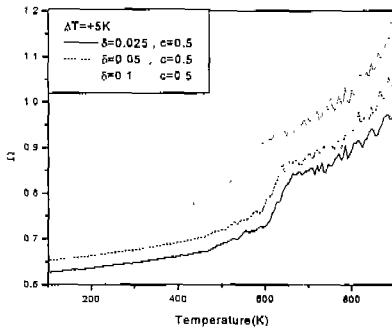


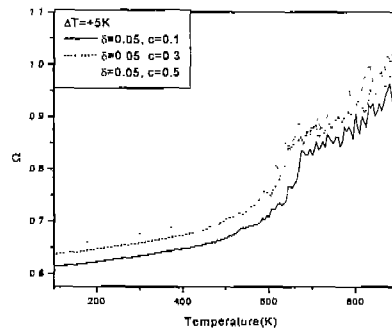
**L-J 이원계의 용융과 결정화에 대한  
분자동역학 연구: 자유표면효과**  
(A Molecular Dynamics Study on Melting Point and Critical  
Quenching Rate in a L-J Binary System : Free Surface Effects)

한혜원, 김봉찬, 김욱, 장현구  
성균관 대학교 재료공학과

자유표면을 가진 이원계의 용융과 냉각시의 상전이에 관하여 연구하였다. 용질과 용매원자의 크기와 농도를 변화시켰을 때의 용융과 결정화를 원자체적( $\Omega$ )의 변화로 살펴보았으며, 용질-용질, 용매-용매, 용매-용질원자의 반경분포함수와 원자 배열을 조사하여 상전이 전·후의 원자분포 변화를 관찰하였다. 주기적 경계조건을 갖는 계와 비교하여 자유표면이 있는 경우에는 용융과 결정화가 낮은 온도에서 용이하게 일어나는 결과를 나타내었다. 그림 a)와 b)는 가열시 용매와 용질원자의 크기와 용질원자의 농도가 증가할수록 용융점이 감소한 결과를 나타낸 그림이다.



a) 용매와 용질원자 크기에 따른 용융점변화



b) 용질원자농도에 따른 용융점변화

참고 문헌

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