HW 2

20212284 화학과 손예림

1.

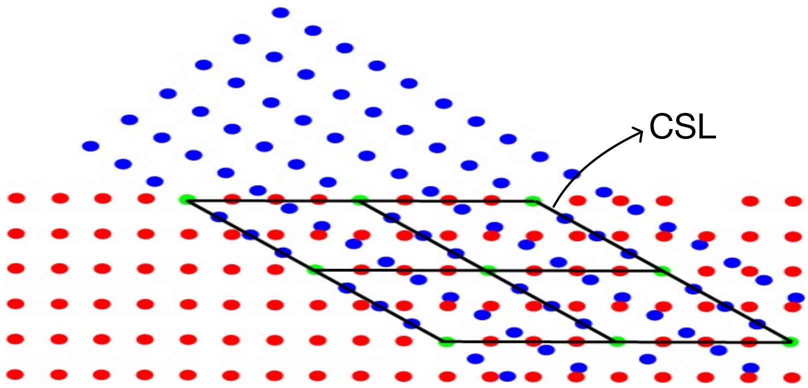
Grain boundary는 다른 orientation으로 인접한 두 결정 사이의 계면을 의미한다. 두 grains이 특정한 각도로 만날 때, 한 grain의 일부 격자점은 다른 grain의 일부 격자점과 완벽하게 우연히 일치한다(coincide exactly). 이러한 격자점들은 주기적으로 반복되며 이들의 집합을 coincidence site lattice (CSL)이라고 부른다. 이러한 CSL을 갖는 grain boundary가 CSL grain boundary이며, 대개 다른 grain boundary보다 grain boundary energy가 낮다.

CSL grain boundary의 기하학을 표현하기 위해, [001]을 따라 회전한 전체 unit cell의 부피(rotated unit cell volume)와 CSL에 둘러싸인 unit cell의 부피(coincidence unit cell volume)의 관계를 나타낸 Σ (sigma) 가 사용된다. 이때, Σ는 홀수 값 만을 가진다.

$$\Sigma = \frac{\text{coincidence unit cell volume}}{\text{rotated unit cell volume}}$$

다만 rotation axis **o** [*uvw*]에 대해 다음과 같이 표현할 수도 있다.

$$\Sigma = \frac{\text{coincidence unit cell volume}}{\text{conventional unit cell volume} \times (u^2 + v^2 + w^2)}$$



2.

$$\sum_{i=1}^{n-1} X_i^{\phi} X_n^{B} = \sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} X_n^{\phi} e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}$$

X_n^B와 X_n^{ϕ}는 각각 i, j에 독립이므로 $X_n^{B} \sum_{i=1}^{n-1} X_i^{\phi} = X_n^{\phi} \sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}$

$$\Rightarrow \frac{X_n^{B}}{X_n^{\phi}} = \frac{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}}{\sum_{i=1}^{n-1} X_i^{\phi}} \quad \cdots \text{①}$$

$$\frac{X_i^{\phi}}{X_n^{\phi}} = \frac{X_i^{B}}{X_n^{B}} e^{-\Delta G^{seg}/RT}$$

where $\Delta G^{seg} = [{}^{\circ}G_i^{\phi} - {}^{\circ}G_i^{B}] - [{}^{\circ}G_n^{\phi} - {}^{\circ}G_n^{B}] + RT \ln \frac{\gamma_i^{\phi} \gamma_n^{B}}{\gamma_n^{\phi} \gamma_i^{B}}$

$$\Rightarrow \frac{X_n^{B}}{X_n^{\phi}} = \frac{X_i^{B}}{X_i^{\phi}} e^{-\Delta G^{seg}/RT} \quad \cdots \text{②}$$

④에 ② 대입.

$$\frac{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}}{\sum_{i=1}^{n-1} X_i^\phi} = \frac{X_i^B}{X_i^\phi} e^{-\Delta G^{seg}/RT} \quad \cdots ③$$

이때 $\sum_{i=1}^{n-1} X_i^\phi + X_n^\phi = 1$ 이므로, $\sum_{i=1}^{n-1} X_i^\phi = 1 - X_n^\phi$

이를 ③에 대입

$$\frac{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}}{1 - X_n^\phi} = \frac{X_i^B}{X_i^\phi} e^{-\Delta G^{seg}/RT}$$

$$\Rightarrow X_i^\phi = \frac{(1 - X_n^\phi) X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT}}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}}$$

$$= \frac{X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT} - X_n^\phi X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT}}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}}$$

$$= \frac{X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT} - X_n^B X_i^\phi}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}} \qquad \left(\because X_n^\phi = X_n^B \cdot \frac{X_i^\phi}{X_i^B} e^{\Delta G^{seg}/RT}\right)$$

$$\Rightarrow X_i^\phi \left[\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} + X_n^B\right] = X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT}$$

$$\Rightarrow X_i^\phi = \frac{X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT}}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} + X_n^B}$$

$$= \frac{X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT}}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} + \left[1 - \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B\right]} \qquad \left(\because X_n^B = 1 - \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B\right)$$

$$\therefore X_i^\phi = \frac{X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B \left[e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} - 1\right]}$$