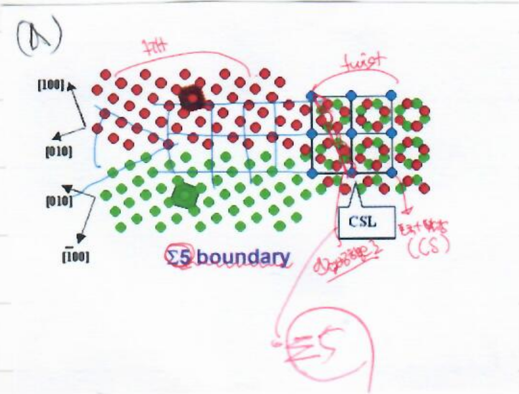
20192731 이승우

POHANG UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
77, Cheongam-ro, Nam-gu, Pohang-si, Gyeongsangbuk-do, 37673, Korea

1.



정의: Tilt 또는 twist가 발생할 때 서로 다른 grain이 특정 tilt or twist angle에서 특정 lattice point가 겹치게 됨과 동시에 겹친 lattice point를 기준으로 규칙성을 되는 lattice를 형성하게 되고 이를 Coincidence lattice라고 한다. 형성된 격자 내 몇 개의 lattice point가 있는지를 Σ#로 표기한다.

그림 (a)에서 보이는 twist boundary를 기준으로 특정 각도에서 lattice point가 겹치고 겹친 lattice point를 기준으로 lattice가 형성되며 해당 CSL 내에는 5개의 격자점이 존재한다. 따라서 Σ5로 표기한다.

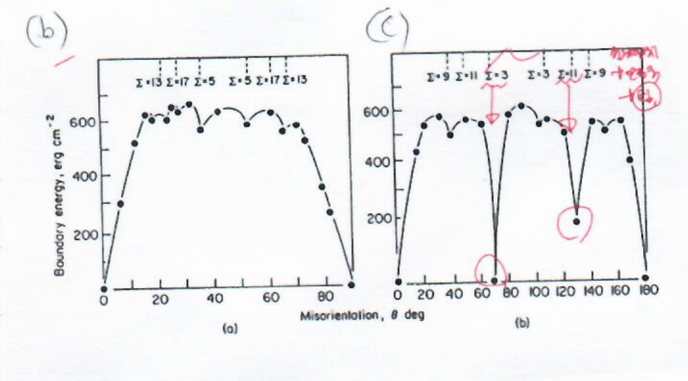
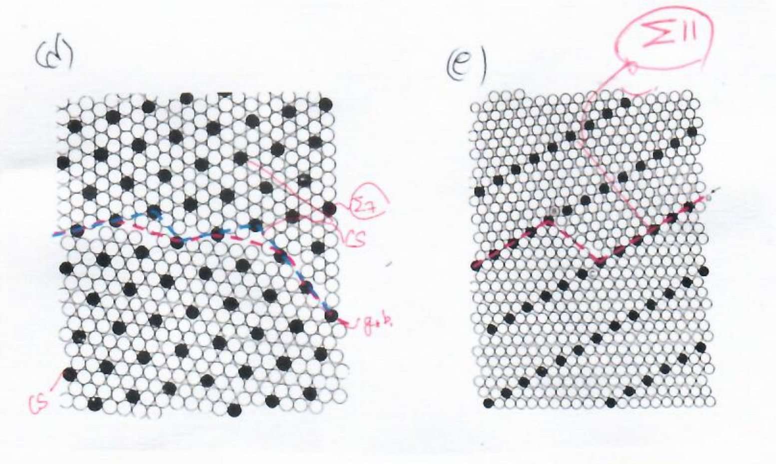
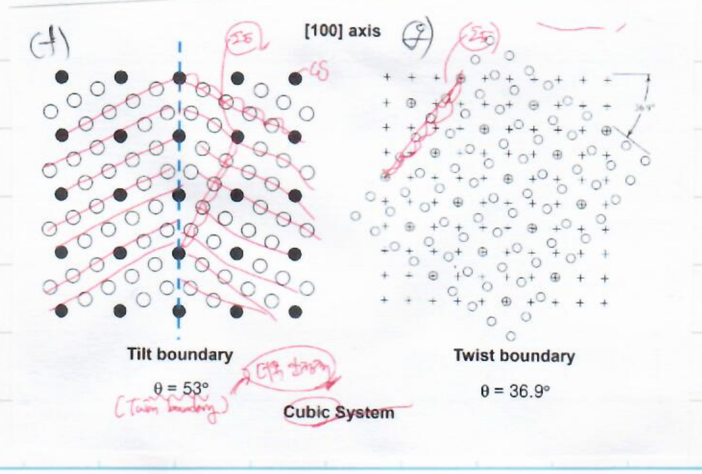


그림 (b)와 (c)는 Misorientation angle에 따른 CSL boundary로 인한 boundary energy를 나타낸 그림으로서 각 CSL에서 lattice의 형성으로 즉 규칙성을 갖기에 boundary energy 값이 감소하는 것을 볼 수 있다. 그림 (C)에서 70°의 Misorientation 각도에서는 우연히 온전히 lattice로 맞춰짐으로서 boundary energy가 0이 됨을 볼 수 있다. ~0 (거의)



(d)와 (e)는 grain boundary가 CSL을 따라서 형성되는 것을 보여주는 그림으로서 가장 boundary energy를 최소화하기 위한 안정적인 site를 따라서. 즉 CSL을 따라서 grain boundary가 형성됨을 보여주는 그림이다. (d)는 Σ7, (e)는 Σ11 boundary.



(f)는 대표적인 tilt boundary. 즉 Σ5 boundary를 보여주고 있고. (g)는 Σ5 twist boundary를 보여준다.

2. $\frac{X_i^{\phi}}{X_n^{\phi}} = \frac{X_i^{B}}{X_n^{B}} e^{-\Delta G^{sol}/RT} \Rightarrow \frac{X_n^{B}}{X_n^{\phi}} = \frac{X_i^{B}}{X_i^{\phi}} e^{-\Delta G^{sol}/RT}$.

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

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

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

$\sum_{i=1}^{n-1} X_i^{\phi} = 1 - X_n^{\phi}$

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

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

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

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

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

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

$$= \frac{X_i^{B} e^{-\Delta G^{sol}/RT}}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT} + X_n^{B}} = \frac{X_i^{B} e^{-\Delta G^{sol}/RT}}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT} + [1 - \sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B}]}$$

$$\Rightarrow \boxed{\therefore X_i^{\phi} = \frac{X_i^{B} e^{-\Delta G^{sol}/RT}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} (e^{-\Delta G_j^{sol}/RT} - 1)}} \quad //$$