1. CSL (coincidence site lattice) boundary

서로 다른 방향성을 가진 두 결정은 misorientation에 의해 어긋난 grain boundary를 가지지만, 격자점들 중 일부가 우연히 일치하는 경우가 생기며 이 점들의 집합을 CSL (Coincidence site lattice)라고 한다. CSL은 주기적으로 반복되며 주기적으로 반복되는 집합을 CSL Boundary라 부른다. CSL Boundary는 다른 grain boundary에 비해 낮은 에너지를 가지며, degree of fit를 (Σ) 통해 파악한다. 서로다른 두 grain에 Σ는 전체 site의 수 대비 일치하는 site의 비율의 역수로 정의된다.

2

$$\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi} x_n^{B} = \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} x_n^{\phi} e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} \quad \text{(Hint)}$$

$$\Rightarrow x_n^{B} \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi} = x_n^{\phi} \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}$$

$$\Rightarrow \frac{x_n^{\phi}}{x_n^{B}} = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi}}{\sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}}$$

$$\frac{x_i^{\phi}}{x_n^{B}} \times \frac{x_n^{\phi}}{x_i^{\phi}} = \frac{x_i^{\phi}}{\cancel{x_n^{B}}} \times \frac{\cancel{x_n^{B}}}{x_i^{B} e^{-\Delta G^{seg}/RT}} = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi}}{\sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}}$$

$$x_i^{\phi} = \frac{x_i^{B} e^{-\Delta G^{seg}/RT} \times \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi}}{\sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} e^{-\Delta G^{seg}/RT}}$$

$$= \frac{x_i^{B} e^{-\Delta G^{seg}/RT} \times (1 - x_n^{\phi})}{\sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} e^{-\Delta G^{seg}/RT}}$$

$$x_i^{\phi} \times \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} e^{-\Delta G/RT} = x_i^{B} e^{-\Delta G/RT} - x_n^{\phi} x_i^{B} e^{-\Delta G/RT}$$

By $\frac{x_i^{\phi}}{x_n^{\phi}} = \frac{x_i^{B}}{x_n^{B}} e^{-\Delta G/RT}$

$$= x_i^{B} e^{-\Delta G/RT} - x_i^{\phi} x_n^{B}$$

$$x_i^{\phi} \Big(\sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} e^{-\Delta G/RT} + \underbrace{x_n^{B}}_{1-\sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B}} \Big) = x_i^{B} e^{-\Delta G/RT}$$

$$x_i^{\phi} \Big(1 + \sum_{j=1}^{n-1} \big(x_j^{B} e^{-\Delta G/RT} - x_j^{B} \big) \Big) = x_i^{B} e^{-\Delta G/RT}$$

$$\therefore x_i^{\phi} = \frac{x_i^{B} e^{-\Delta G/RT}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} \left(e^{-\Delta G/RT} - 1 \right)}$$