Phase transformation 2019274z 손수정

1. Grain은 특정한 orientation을 지니기 때문에 Grain과 grain이 만나는 Grain boundary에서는 두 orientation의 차이로 인해 misorientation이 발생한다.

이때 특정 misorientation 각도에서 두 grain의 격자점이 주기적으로 일치할때 coincidence site lattice, CSL이라고한다.

CSL은 misfit이적어 grain boundary의 에너지가 낮다.

이때, $\Sigma = \frac{\text{The number of lattice points in a unit cell}}{\text{The number of lattice points in the unit cell of CSL}}$ 로 정의하고

Σ가 낮을수록 일치하는 lattice point가 많음을의미하고 해당 CSL의 에너지는 더욱 낮다

2 B : bulk ϕ : surface

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

$$X_i^{\phi} = \left(\frac{X_n^{\phi}}{X_n^{B}}\right) X_i^{B} \exp(-\Delta G^{seg}/RT)$$

$$\sum_{i=1}^{n-1} X_i^{\phi} X_n^{B} = \sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} X_n^{\phi} \exp(-\Delta G^{seg}/RT)$$

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

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

$$= \frac{1}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} \exp(-\Delta G_j^{seg}/RT) + X_n^{B} + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} - \sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B}}$$

$$= \frac{1}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} \{\exp(-\Delta G_j^{seg}/RT) - 1\} + 1}$$

$$\therefore X_j^{\phi} = \frac{X_i^{B} \exp(-\Delta G_i^{seg}/RT)}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^{B} \{\exp(-\Delta G_j^{seg}/RT) - 1\}}$$