

1. grains의 어떤 특정 direction은 갖고있는데
crystallite 다. 새 다른 grain들은
각각 다른 orientation을 갖고있기 때문에
중첩 부분인 grain boundary는 misorientation을
갖고있다. 이 misorientation은 여러 possible한.

중첩이 존재하는(1). 2중. 특정 angle이
same lattice point가 다른 lattice point와
coincide한 point를 coincidence point라 하고.
이 coincidence point가 periodic
pattern을 이루는 것은 CSL이라 한다.

2D에서는 CSL concept은 간단한 rotation을
설명하기 쉽지만 이를 3D로 extend 하기위해서
I 개념은 도입해 2번타해야 한다.

$I = \frac{\text{number of lattice points in a unit cell of the generating lattice}}{\text{number of lattice points in a unit cell of a CSL.}}$

Σ 의 정의에 의해 Σ 가 낮은수록, coincide하는

lattice points의 fraction이 커지므로,

misorientation 정도가 작아서 grain boundary energy가

작다. twin boundary의 경우 $\Sigma 3$, perfect crystal은

$\Sigma 1$ 이고, square lattice가 tilt되어 있는 boundary는

$\Sigma 5$ 이다.

$$2. \sum_{i=1}^{n-1} x_i^B x_n^B = \sum_{j=1}^{n-1} x_j^B x_n^B \exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right)$$

$$\Leftrightarrow x_n^B \sum_{i=1}^{n-1} x_i^B = x_n^B \sum_{j=1}^{n-1} x_j^B \exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right)$$

$$\therefore \frac{x_n^B}{x_n^B} = \frac{\sum_{j=1}^{n-1} x_j^B \exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right)}{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^B}$$

분자의 2번타해서

$$\frac{x_n^B}{x_n^B} = \frac{x_i^B}{x_i^B} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) \text{ 이고}$$

$$\frac{x_i^B}{x_i^B} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) = \frac{\sum_{j=1}^{n-1} x_j^B \exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right)}{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^B}$$

$$x_i^B = \frac{x_i^B \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) \cdot \left(\sum_{j=1}^{n-1} x_j^B\right)}{\sum_{j=1}^{n-1} x_j^B \exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right)}$$

$$\left(\sum_{i=1}^{n-1} x_i^B = x_1^B + x_2^B + \dots + x_{n-1}^B = 1 - x_n^B\right)$$

$$\Rightarrow x_i^B \left\{ \sum_{j=1}^{n-1} x_j^B \exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right) + x_n^B \right\}$$

$$= x_i^B \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)$$

$$x_i^B = \frac{x_i^B \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}{\sum_{j=1}^{n-1} x_j^B \exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right) + x_n^B}$$

$$\Rightarrow x_i^B = \frac{x_i^B \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^B \left(\exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right) - 1\right)}$$

$$x_i^B = \frac{x_i^B \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^B \left(\exp\left(-\frac{\Delta G_j^{seg}}{RT}\right) - 1\right)}$$