Problem Set #7 2021200000 철강·에너지계 조영근

1. (a) $\frac{\partial C}{\partial t} = R(\beta)(12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \cos\beta x$ ... ①

$\frac{\partial C}{\partial x} = -\beta (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \sin\beta x$

$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = -\beta^2 (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \cos\beta x$ ... ②

Fick's second law에 ①, ② 대입

$R(\beta)(12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \cos\beta x = -\hat{D}\beta^2 (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \cos\beta x$

$R(\beta) = -\hat{D}\beta^2$ ... ③

한편, $-1 \le \cos\beta x \le 1$ 이므로 $C_{max}(x,t) = (38\text{at\% Au}) + (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t]$

$C_{min}(x,t) = (38\text{at\% Au}) - (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t]$

최대 농도 차이 $C_{max} - C_{min} = (24\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t]$

$= (2\text{at\% Au})$ ... ④

③을 대입하면 $(24\text{at\% Au}) e^{-\hat{D}\beta^2 t} = 2\text{at\% Au}$

$e^{-\hat{D}\beta^2 t} = \frac{1}{12}$

$\rightarrow \underline{t = 251.7\text{ s}}$

(b) $\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} = \beta^3 (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \sin\beta x$

$\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} = \beta^4 (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \cos\beta x$ ... ⑤

Cahn's modified diffusion eq에 ①, ②, ⑤ 대입.

$R(\beta)(12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \cos\beta x = -\hat{D}\beta^2 (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \cos\beta x - \frac{2K\hat{D}}{f''}\beta^4 (12\text{at\% Au}) \exp[R(\beta)t] \cos\beta x$

$R(\beta) = -\hat{D}\beta^2 - \frac{2K\hat{D}}{f''}\beta^4$ ... ⑥

④에 ⑥ 대입하면 $(24\text{at\% Au}) e^{\left(-\hat{D}\beta^2 - \frac{2K\hat{D}}{f''}\beta^4\right)t} = (2\text{at\% Au})$

$e^{\left(-\hat{D}\beta^2 - \frac{2K\hat{D}}{f''}\beta^4\right)t} = \frac{1}{12}$

$\rightarrow \underline{t = 28.05\text{ s}}$

(C) (a)와 (b)에서 차이는 $\frac{2k\tilde{\sigma}}{f\sigma}$ term의 Interfacial energy에 관한 항이다. 따라서 interfacial energy가 크게 영향을 끼치는 non classical nucleation (spinodal decomposition)인 경우 (a)와 (b)의 값의 차가 클 것이다.

그런데 Ag-Au system은 ordering을 선호함으로 composition fluctuation 생성이 unfavorable하여 spinodal decomposition이 일어나지 않는다. 따라서 (a)와 (b)의 값 차가 크지 않다.

2.

(a) Initial 64000 grains, 500 steps (t)

초기 grain의 부피를 1로 가정.

→ 단위 grain 부피 : $\frac{64000}{\text{grain 수}}$

→ 〃 크기 (R) : $\left(\frac{64000}{\text{grain 수}}\right)^{1/3}$ (큐브가정)

$\bar{R} = k t^n$

$\ln \bar{R} = \ln k + n \ln t$

(b) Growth rate

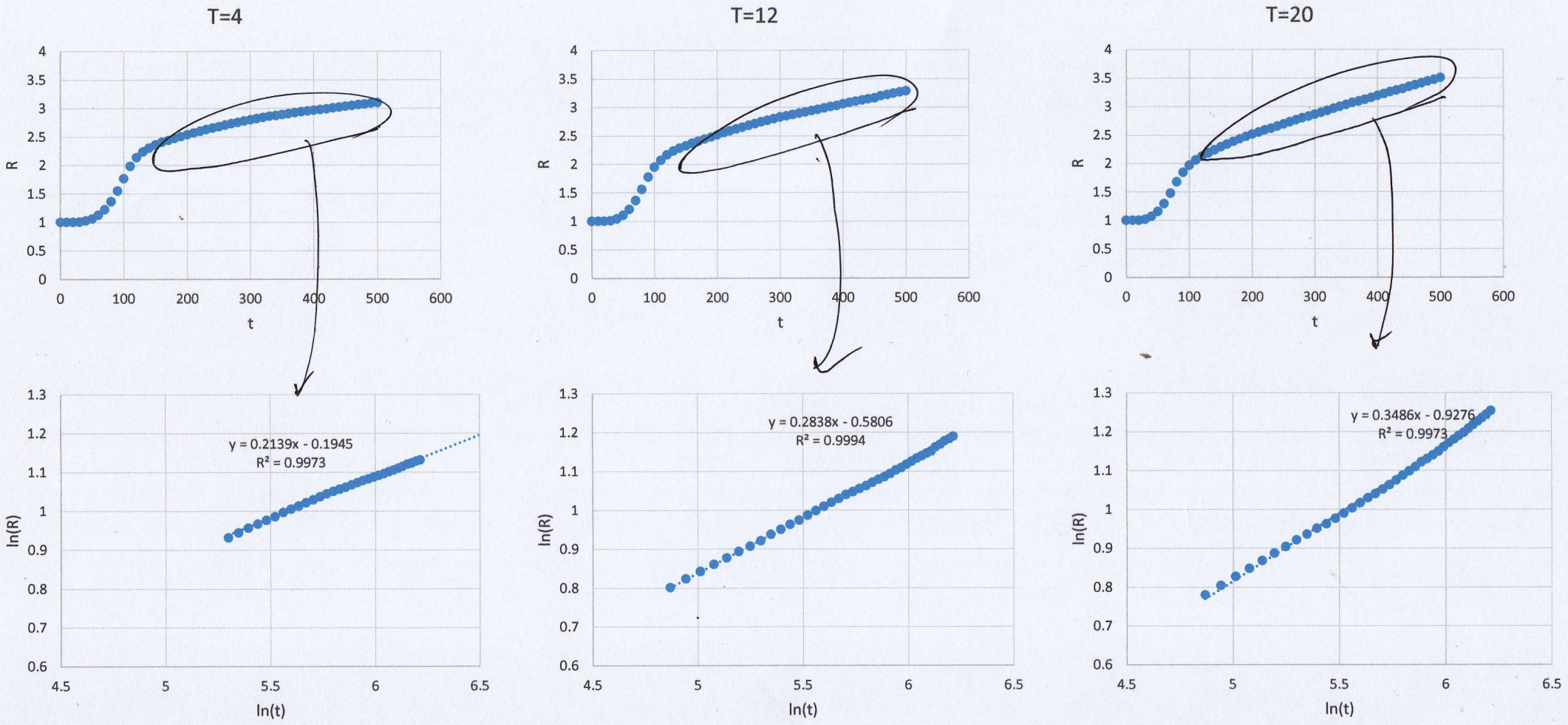
$$\begin{cases} u = \lambda v \\ \quad = \lambda V_0 \frac{\Delta G_{diff}}{RT} \exp(-\Delta G^*/RT) \\ u = \frac{d\bar{R}}{dt} = n k t^{n-1} = \frac{n\bar{R}}{t} \end{cases}$$

→ $\frac{n\bar{R}}{t} = \underbrace{\lambda V_0 \frac{\Delta G_{diff}}{R}}_{C} \exp(-\Delta G^*/RT)$

→ $\ln\left(\frac{n\bar{R}}{t}\right) = \ln C - \underbrace{\frac{\Delta G^*}{R}} \frac{1}{T}$

($T = 4, 12, 20$ 일 때 n 값) 사용하여 plot.
($t = 500$ 일 때 $\bar{R}$ 값

2. (a)



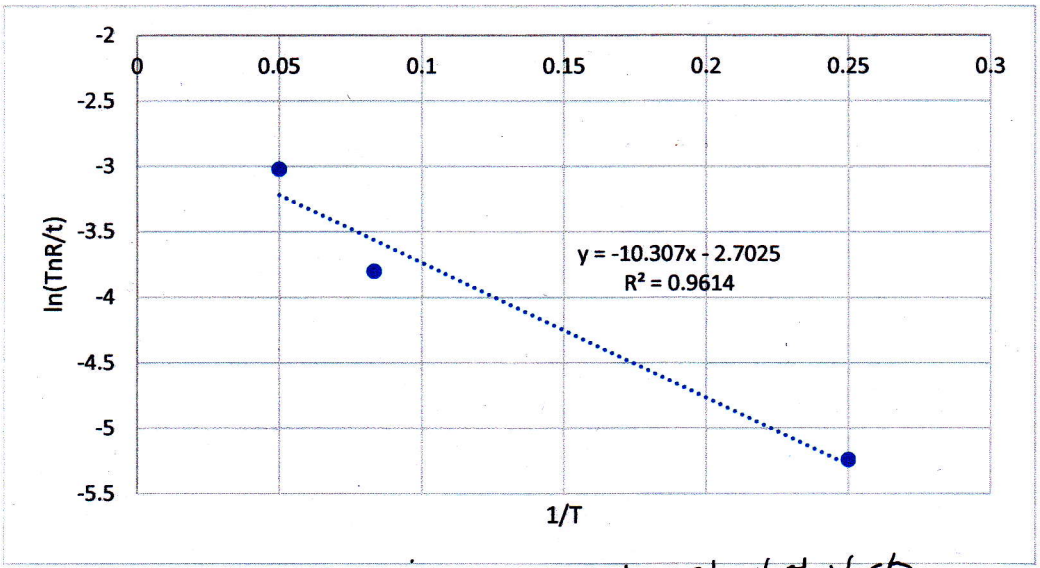
T=4 → $n = 0.2139$ T=12 → $n = 0.2838$ T=20 → $n = 0.3486$

Time dependence는 n 값으로 나타난다.

온도가 높을수록 n이 커지며 대체로 grain size가 커진다.

2. (b)

T	n	R	1/T	
4	0.2139	3.098702	0.25	-5.23958
12	0.2838	3.284637	0.083333	-3.79993
20	0.3486	3.502906	0.05	-3.01911



온도가 높을수록 grain growth가 잘 일어난다.

Temperature dependence 는 $\ln\left(\frac{TnR}{t}\right) = \ln c - \frac{\Delta G^*}{R}\frac{1}{T}$ 에서

$\frac{\Delta G^*}{R}$ 로 나타낸다

T= 4, 12, 20 에서의 값들을 이용해 구한 activation energy

$\frac{\Delta G^*}{R} = 10.307$ (T의 [K] 단위 값을 오리에서에 $\frac{\Delta G^*}{R}$ 로 나타냄)