20222389 김창현, 신소재공학부 HW#1

Fe-M-C ternary FCC solution, $(\underbrace{\text{Fe, M}}_1, \underbrace{\text{vac, C}}_2)_{\sigma_{\text{V-C}}}$ carbon chemical potential μ_{C}

$$G_m = y_{\text{Fe}} (y_{\text{vac}} G_{\text{Fe:vac}} + y_{\text{C}} G_{\text{Fe:C}}) + y_{\text{M}} (y_{\text{vac}} G_{\text{M:vac}} + y_{\text{C}} G_{\text{M:C}}) + RT (y_{\text{vac}} \ln y_{\text{vac}} + y_{\text{C}} \ln y_{\text{C}}) \\ + RT (y_{\text{Fe}} \ln y_{\text{Fe}} + y_{\text{M}} \ln y_{\text{M}}) + y_{\text{Fe}} \cdot y_{\text{M}} (y_{\text{C}} \cdot L_{\text{Fe,M:C}} + y_{\text{vac}} \cdot L_{\text{Fe,M:vac}}) + y_{\text{C}} \cdot y_{\text{vac}} \cdot (y_{\text{Fe}} \cdot L_{\text{vac,C:Fe}} + y_{\text{M}} \cdot L_{\text{vac,C:M}})$$

$$\langle y_{\text{vac}} + y_{\text{C}} = 1, y_{\text{Fe}} + y_{\text{M}} = 1 \rangle$$

$$\mu_{\text{C}} = \frac{\partial G_m}{\partial y_{\text{C}}} = y_{\text{Fe}} (G_{\text{Fe:C}} - G_{\text{Fe:vac}}) + y_{\text{M}} (G_{\text{M:C}} - G_{\text{M:vac}}) + RT (-\ln(1-y_{\text{C}}) - 1 + \ln y_{\text{C}} + 1)$$

$$+ y_{\text{Fe}} \cdot y_{\text{M}} (L_{\text{Fe,M:C}} - L_{\text{Fe,M:vac}}) + (1-2y_{\text{C}}) (y_{\text{Fe}} \cdot L_{\text{vac,C:Fe}} + y_{\text{M}} \cdot L_{\text{vac,C:M}})$$

$$= y_{\text{Fe}} \cdot G_{\text{Fe:C}} - y_{\text{Fe}} \cdot G_{\text{Fe:vac}} + y_{\text{M}} \cdot G_{\text{M:C}} - y_{\text{M}} \cdot G_{\text{M:vac}} - RT \ln(1-y_{\text{C}}) + RT \ln y_{\text{C}}$$

$$+ y_{\text{Fe}} \cdot y_{\text{M}} \cdot L_{\text{Fe,M:C}} - y_{\text{Fe}} \cdot y_{\text{M}} \cdot L_{\text{Fe,M:vac}} + (1-2y_{\text{C}}) (y_{\text{Fe}} \cdot L_{\text{vac,C:Fe}}) + (1-2y_{\text{C}}) (y_{\text{M}} \cdot L_{\text{vac,C:M}})$$

“ μ_{C} 증명 완료”

< Thermodynamic analysis for the size-dependence of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ nanowire composition grown by a vapor-liquid-solid method > 요약

20222389 김창훈

[Introduction]

Optoelectronics, sensing 및 field emission 분야에서 사용하는 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 나노와이어 물질은 조성 변화에 따라 Electronic 성질이 달라진다. 이에, 조성 변화를 조절하여 원하고자 하는 성능을 얻는것이 매우 중요하다. 이 논문에서는 열역학 계산을 이용하여 특정 환경에서 Si, Ge의 조성 변화에 따른 나노와이어의 크기가 어떻게 얻어지는가에 대해 기술 하였으며, 이러한 현상이 Gibbs-Tompson effect에서 기인 하는지 파악하였다.

[Discussion and Result]

Vaper-Liquid-Solid(VLS) 합성 방식으로, Vaper($\text{SiH}_4, \text{GeH}_4$)-liquid(Au)-solid(wire) , 2 가지 계면으로 나누어서 보았다. Gibbs-Thomson 방정식은 $\Delta G_{(G-T)} = \alpha\gamma/rV_m$ 으로 표면에너지에 곡률의 반경과 몰 부피를 나누어 표현한다. 표면에너지와 몰 부피는 나노와이어의 크기와 연관이 없다고 생각하여 독립적으로 생각한다. Vapor 와 Liquid 의 평형 상태를 찾기 어렵기에, 초기 액체 조성을 결정한 뒤에 기체상태에서의 활동도를 계산하였다. 그후 Capillarity effect를 통해 액체 상태의 조성을 결정하게되며 Solid의 조성 또한 결정 할 수 있다.

[Fig.9]를 참고하여 Capillarity effect로 인해 Si, Ge-rich side에서 Au-rich side로 이동하는 것을 확인 할 수 있다. Au-rich, Au 함량이 증가할 때 Au-Si, Au-Ge 의 깃스에너지를 비교하면 Au-Si liquid에서 깃스에너지가 더 급격하게 줄어드는 것을 확인 할 수있다. 이는 Au의 함량이 증가하면 Au-Si 조성이 Au-Ge binary에 비해 더 안정하다는 것을 의미한다.