Problem 2

20232994 최찬욱

1. Assuming a one atomic layer surface phase and considering equilibrium between bulk and surface phases, one can derive the following relation between surface composition and bulk composition. (B means "bulk" and ϕ means "surface". i means arbitrary solute elements while n means solvent element)

$$\frac{X_i^\phi}{X_n^\phi} = \frac{X_i^B}{X_n^B} e^{-\Delta G^{seg}/RT} \qquad \text{where} \quad \Delta G^{seg} = [{}^oG_i^\phi - {}^oG_i^B] - [{}^oG_n^\phi - {}^oG_n^B] + RT \ln \frac{\gamma_i^\phi \gamma_n^B}{\gamma_n^\phi \gamma_i^B}$$

Change the above equation into the following, more general multicomponent form:

$$X_i^\phi = \frac{X_i^B e^{-\Delta G_i^{seg}/RT}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B (e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} - 1)} \qquad \text{Hint: use } \sum_{i=1}^{n-1} x_i^\phi x_n^B = \sum_{j=1}^{n-1} x_j^B x_n^\phi e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}$$

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

$$X_i^\phi = \frac{X_n^\phi}{X_n^B} \cdot X_i^B e^{-\Delta G^{seg}/RT}$$

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

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

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

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

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

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

2. Study and summarize CSL(coincidence site lattice) boundary on one A4 paper.

20232994 최찬욱

물질내에서 다른 방향성을 가진 두 격자가 만날 때 결정립계가 형성된다. 이때, 특정 각도내에서 우연하게도 두 격자 간에 격자점이 일치하는 원자들이 존재한다. 이러한 두 격자 사이의 경계를 coincidence site lattice (CSL) boundary라고 한다. CSL 경계는 다른 결정립계에 비해 에너지가 낮고 기계적 강도 및 전기 전도성과 같은 재료의 특성에 영향을 줄 수 있다.

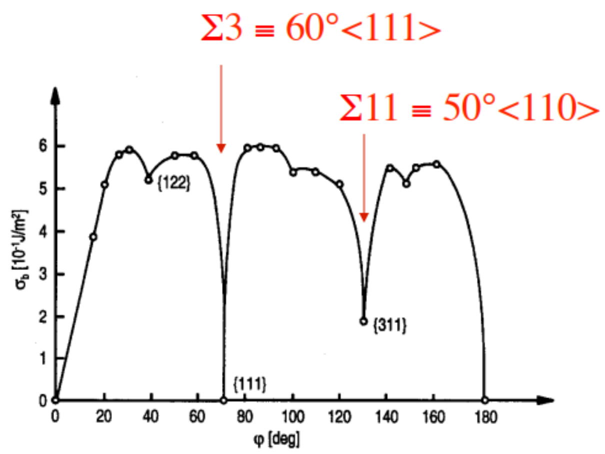

Figure 1. Dependence of the energy of symmetrical <110> tilt boundaries in Al on the tilt angle φ. The indices given in the figure are Miller indices of the corresponding grain boundary planes.

Goux, C. (1974)., Canadian Metallurgical Quarterly 13: 9-31.

CSL 단위 셀의 격자점 수 대비 전체 단위 셀의 격자점 수를 Σ라고 정의한다. 즉, 겹치는 격자점이 많을수록 Σ값은 작아진다. Σ값이 작은 경우, 일반적으로 더 낮은 결정립계 에너지를 가지고 있다. 위의 Figure 1은 낮은 Σ값을 가진 CSL일 때 더 낮은 결정립계 에너지를 가지고 있음을 보여준다.