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

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

$$\frac{X_n^{B}}{X_n^{\phi}} = X_n^{B} \cdot \left(1 + \frac{1 - X_n^{\phi}}{X_n^{\phi}}\right) = X_n^{B}\left(1 + \frac{\sum_{i=1}^{n-1} X_i^{\phi}}{X_n^{\phi}}\right) \qquad \left(\sum_{i=1}^{n} X_i = 1\right)$$

$$= X_n^{B} + \frac{\sum_{i=1}^{n-1} X_n^{B} \cdot X_i^{\phi}}{X_n^{\phi}} = X_n^{B} + \frac{\sum_{i=1}^{n-1} X_i^{B} \cdot X_n^{\phi} \cdot \exp(-\Delta G_i^{seg}/RT)}{X_n^{\phi}} \qquad (\text{hint.})$$

$$= X_n^{B} + \sum_{i=1}^{n-1} X_i^{B} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)$$

$$= \left(1 - \sum_{i=1}^{n-1} X_i^{B}\right) + \sum_{i=1}^{n-1} X_i^{B} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) \qquad \left(\sum_{i=1}^{n} X_i = 1\right)$$

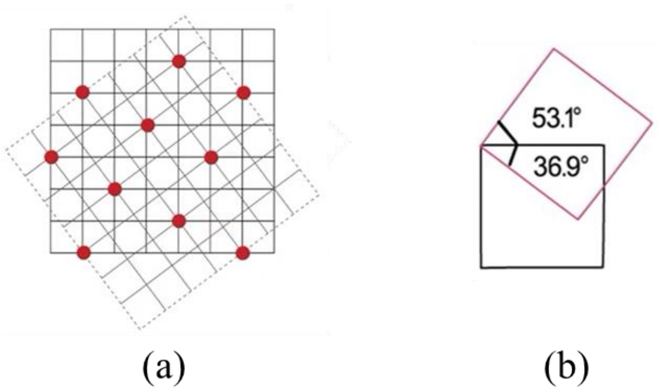
$$= 1 + \sum_{i=1}^{n-1} X_i^{B}\left(\exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) - 1\right)$$

$$\therefore X_i^{\phi} = \frac{X_i^{B} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G^{seg}}{RT}\right)}{\left(\frac{X_n^{B}}{X_n^{\phi}}\right)} = \frac{X_i^{B} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G^{seg}}{RT}\right)}{1 + \sum_{i=1}^{n-1} X_i^{B}\left(\exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) - 1\right)}$$

Coincidence Site Lattice boundary

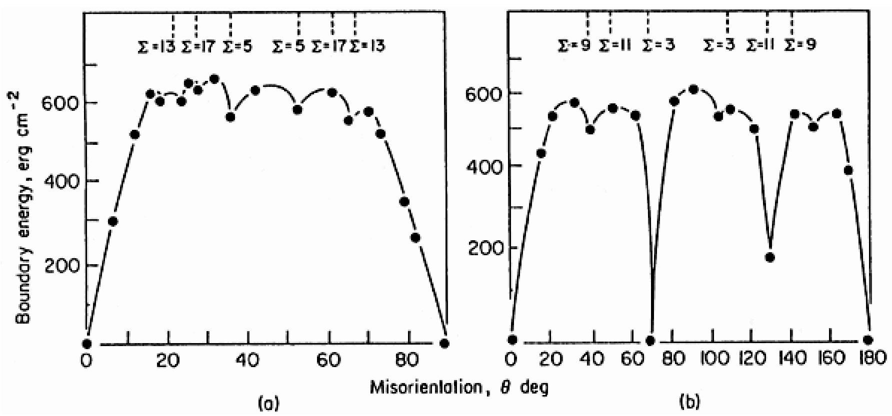
기계공학과 20212455 김범준

“Coincidence”라는 이름에서 알 수 있듯이, Coincidence Site Lattice는 동일한 두 개의 lattice들이 회전을 통해 겹쳐지면서 생기는 새로운 형태의 격자이다. 이로 인해 겹쳐지는 포인트들만을 이용해 Coincidence Site Lattice의 primitive cell을 만들 수 있다. 이 primitive cell의 안에 들어 있는 원자의 개수가 n개라면 Σn 격자로 이름지어 Coincidence Site Lattice를 구분하며, primitive cell의 안에 들어 있는 원자의 개수는 격자의 회전이 θ deg와 (90-θ) deg일 때가 동일하다.



(a) Coincidence Site Lattice의 형성(Σ5), (b) θ deg와 (90-θ) deg 회전의 동등함

이러한 현상이 발생한다면, 격자가 회전하여 Coincidence Site Lattice를 가질 때에 가장 에너지가 낮을 것이고, 특별히 Σn이 작을 때에 더욱 낮을 것이라고 추측할 수 있다. 아래의 Al의 (a) <100> 축과 (b) <110> 축을 회전시켰을 때의 boundary energy 계산 결과에서 알 수 있듯이, 대체적으로 Coincidence Site Lattice가 발생하는 각도에서 boundary energy가 감소하는 것을 확인했다. 특별히 <110> 축의 경우에는 Σ3와 실제로 Coincidence Site Lattice를 가지는 일부 경우에서 boundary energy가 크게 감소하는 것을 확인했으며, 이는 그 회전 각도에서 특별히 정렬이 잘 맞아서 변형이 거의 발생하지 않아 전체 에너지가 굉장히 작은 경우이다.



Al의 축 회전에 따른 Boundary energy 계산값, 회전한 축 : (a) <100> (b) <110>