

HW#2 신소재공학과 20222571 최찬식

1. Using $\sum_{i=1}^{m-1} X_i^\phi X_m^B = \sum_{j=1}^{m-1} X_j^B X_m^\phi \exp(-\Delta G_j^{\text{sep}}/RT)$.

$$\sum_{i=1}^{m-1} \frac{X_i^\phi}{X_m^B} = \sum_{j=1}^{m-1} \frac{X_j^B}{X_m^B} \exp(-\Delta G_j^{\text{sep}}/RT) = \frac{1}{X_m^\phi} - 1.$$

$$\left(\sum_{i=1}^{m-1} X_i^\phi = 1 - X_m^\phi \right)$$

$$X_m^\phi = \frac{1}{\sum_{j=1}^{m-1} \frac{X_j^B}{X_m^B} \exp(-\Delta G_j^{\text{sep}}/RT) + 1} = \frac{X_m^B}{\sum_{j=1}^{m-1} X_j^B \exp(-\Delta G_j^{\text{sep}}/RT) + X_m^B}$$

$$(X_m^B = 1 - \sum_{j=1}^{m-1} X_j^B)$$

$$X_m^\phi = \frac{X_m^B}{\sum_{j=1}^{m-1} X_j^B [\exp(-\Delta G_j^{\text{sep}}/RT) - 1] + 1}, \quad X_i^\phi = X_m^\phi \cdot \frac{X_i^B}{X_m^B} \exp(-\Delta G_i^{\text{sep}}/RT)$$

$$\therefore X_i^\phi = \frac{X_i^B \exp(-\Delta G_i^{\text{sep}}/RT)}{\sum_{j=1}^{m-1} X_j^B [\exp(-\Delta G_j^{\text{sep}}/RT) - 1] + 1}$$

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

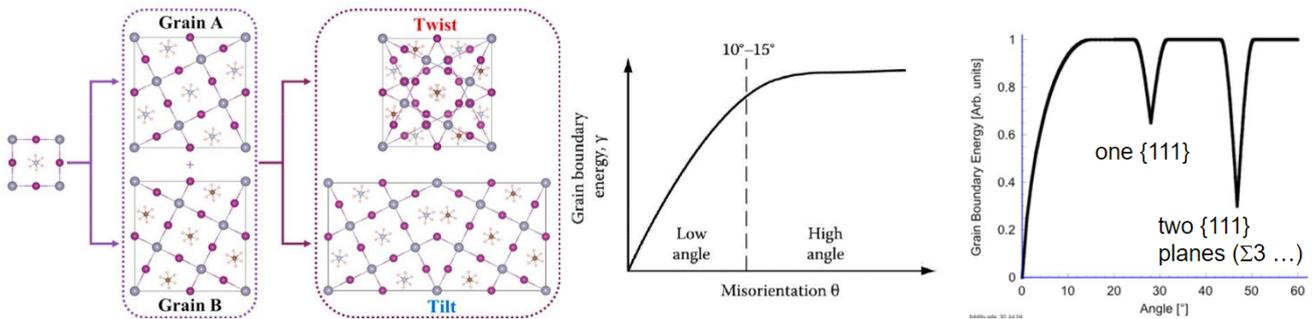


그림 1. 결정구조가 동일한 결정립 A, B가 다른 배향을 가지고 겹치면 보이는 새로운 초격자 구조의 예시(좌) 및 배향각도 차이에 의한 결정립계 에너지 그래프(우)

CSL은 동일한 결정 구조를 갖는 결정립 두 개가 배향이 다르게 접할 때 특정 각도에서 나타나는 새로운 초격자의 격자점을 말한다. 위 상황을 2차원 구조로 가정했을 때, 결정립의 평면과 수직인 방향일 때는 twist, 수평일 때는 tilt라고 구분한다(그림 1). 두 결정립 사이의 각도가 작을 때는 이러한 현상이 일어나지 않는데, 이는 두 결정립 사이에 초격자가 만들어지지 않음을 의미한다. CSL 이론으로 특정 각도에서 결정립계 에너지가 낮아지는 현상을 설명할 수 있다. 각도가 커짐에 따라 규칙적으로 반복되는 높은 대칭성의 초격자가 나타날 때, 이러한 결정립계 에너지가 감소하게 된다. 이 상황에서 다시 각도가 증가하면, 초격자 구조가 사라지게 되고 결정립계 에너지가 급격히 상승한다.

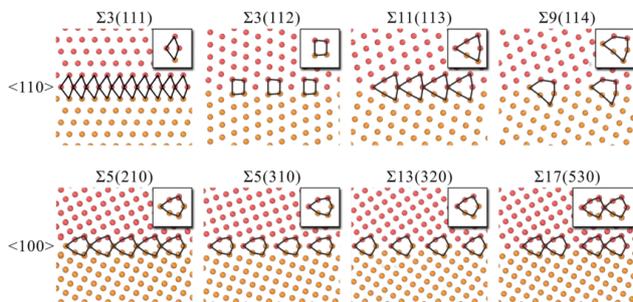


그림 2. 배향 각도에 따른 Σ 값의 예시

이러한 CSL을 정량적으로 평가하기 위해 Σ를 도입한다.

$$\Sigma = \frac{(\text{CSL 단위격자의 부피})}{(\text{원래 단위격자의 부피})}$$

이 값은 홀수만 가질 수 있다. $\Sigma = 1$ 경우 완전한 단결정, $\Sigma = 3$ 은 쌍정립계 (twin boundary)이다.

일반적으로 CSL에서 Σ의 값이 작을수록 작은 결정립계 에너지를 가진다. 또한, 그림 2와 같이 동일한 Σ 값을 갖는 여러가지 CSL 내에서도 결정립계 에너지는 서로 다를 수 있다.

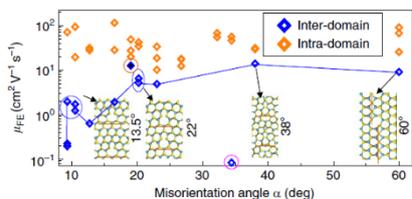


그림 3. CSL의 전기적 특성 변화 연구 예시

CSL은 물질의 기계적, 전기적 특성에도 영향을 줄 수 있다. 그 예시로 배향각도에 따라 전자의 이동도가 달라지는 연구가 있다. 이는 특정 배향각을 가지는 결정립계에서 에너지 장벽이 낮아지기 때문이라는 설명이 존재하며 다른 해석의 여지도 있을 것으로 보인다.

참조

- [1] J. Cheng et al. *Computational Materials Science* **155** 92-103 (2018)
- [2] T. Cao et al. *Journal of Materials Science* **55** 7883-7893 (2020)
- [3] T. Ly et al. *Nature Communications* **7** 10426 (2016)