AMSE502 Phase Transformations 상변태론 HW #2

신소재공학과 20222244 조 우 택

1 One atomic surface layer. equilibrium bulk & surface.

$$\frac{X_i^\phi}{X_n^\phi} = \frac{X_i^B}{X_n^B} e^{-\Delta G^{seg}/RT} \quad \text{where} \quad \Delta G^{seg} = [\,^\circ G_i^\phi - \,^\circ G_i^B] - [\,^\circ G_n^\phi - \,^\circ G_n^B] + RT \ln \frac{\gamma_i^\phi \gamma_n^B}{\gamma_n^\phi \gamma_i^B}$$

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

Sol)

$$X_i^\phi = X_n^\phi \frac{X_i^B}{X_n^B} e^{-\Delta G^{seg}/RT} \quad \cdots \; ①$$

$$\sum_{i=1}^{n-1} x_i^\phi x_n^B = \sum_{j=1}^{n-1} x_j^B x_n^\phi e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}$$

i) $$\sum_{i=1}^{n-1} X_i^\phi X_n^B = (X_1^\phi + X_2^\phi + \cdots + X_{n-1}^\phi) X_n^B$$
$$= (1 - X_n^\phi) X_n^B \qquad (\because \; X_1^\phi + X_2^\phi + \cdots + X_{n-1}^\phi + X_n^\phi = 1)$$

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

i) & ii), $$(1 - X_n^\phi) X_n^B = X_n^\phi \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT}$$

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

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

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

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

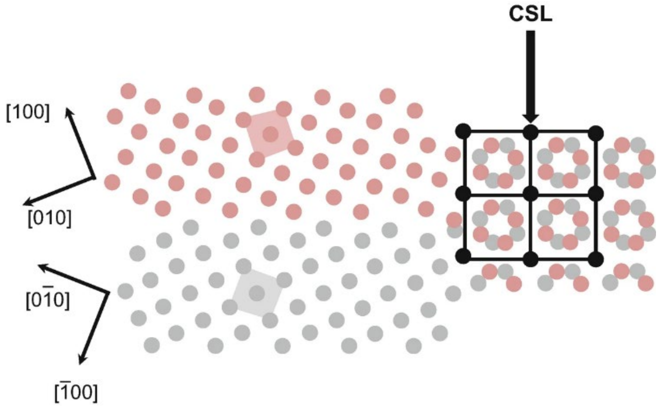
$$\frac{X_n^\phi}{X_n^B} = \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B (e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} - 1)}$$

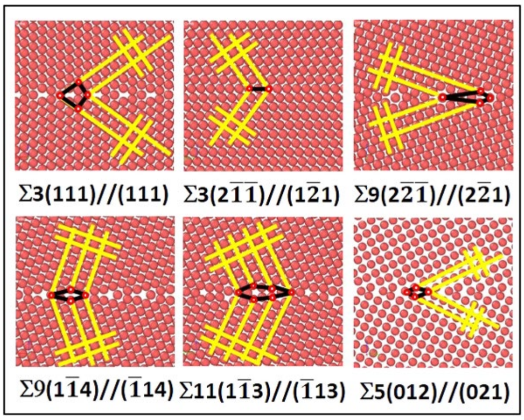
① 에 대입.

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

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

서로 다른 배향을 가진 두 grain이 접합될 때 grain boundary가 생기게 된다. 이때, 두 grain 사이의 각도가 커짐에 따라 특정 각도에서 lattice site가 일치하는 경우가 존재한다. 이 site의 집합을 coincidence site lattice(CSL)라고 한다.



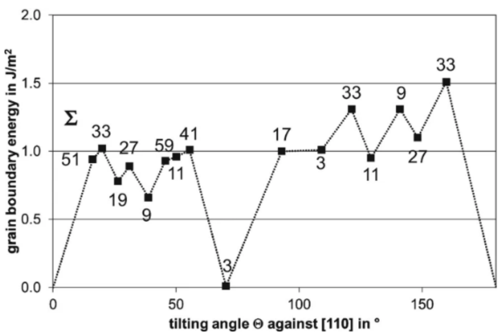


CSL boundary는 Σ로 표현할 수 있는데, 일반적으로 grain boundary는 5개의 변수로 표현해야 하지만 CSL boundary같은 경우 Σ 하나로만 설명할 수 있다는 장점이 있다. Σ의 정의는 다음과 같다.

$$\Sigma = \frac{the\ number\ of\ lattice\ sites\ within\ the\ unit\ cell\ of\ the\ coincidence\ lattice}{the\ unit\ cell\ of\ the\ crystal}$$
$$= \frac{volume\ of\ the\ unit\ cell\ of\ the\ coincidence\ lattice}{the\ volume\ of\ the\ unit\ cell}$$

이 정의에 따르면 Σ는 항상 홀수이다. Σ=1인 경우 CSL과 기존의 결정이 완벽하게 일치하며, 아주 작은 각도의 grain boundary에서 Σ는 거의 1에 가깝다. Σ=3일 때는 완벽히 대칭 구조인 fist order twin boundary가 만들어진다.

두 grain 사이의 각도에 따라 grain boundary energy에도 차이가 있다. 각도가 증가함에 따라 lattice site가 일치할 때 CSL boundary가 만들어지고, 그 결과 grain boundary energy는 낮아지게 된다.



참고문헌

1. Trempa, Matthias, et al. "Grain boundaries in multicrystalline silicon." Handbook of Photovoltaic Silicon (2019): 589-636.

2. Zhou, Xuyang, et al. "Grain boundary specific segregation in nanocrystalline Fe (Cr)." Scientific reports 6.1 (2016): 1-14.