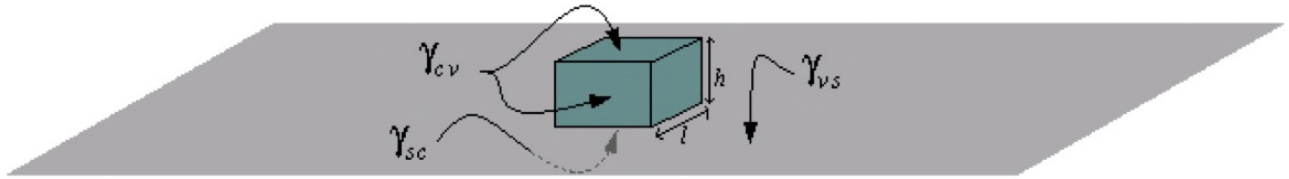


# Problem 4

20232994 최찬욱

- The following figure illustrates a nucleation of a completely faceted cubic particle on a flat substrate. Write down an expression for the energy change due to the formation of nuclei in a functional form of its size. Then, find the critical size ( $h^*$ ,  $l^*$ ) and energy barrier of nucleation.



[from MIT lecture note]

$$\Delta G = -\Delta G_v l^2 h + (4hl + l^2) \gamma_{cv} + \cancel{l^2 \gamma_{sc}} - \cancel{l^2 \gamma_{vs}}$$

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial h} = -l^{*2} \Delta G_v + 4l^* \gamma_{cv} = 0$$

$$\therefore l^* = \frac{4\gamma_{cv}}{\Delta G_v}$$

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial l} = -2l^* h^* \Delta G_v + (4h^* + 2l^*) \gamma_{cv} = -8\gamma_{cv} \cdot h^* + 4h^* \gamma_{cv} + 8 \frac{\gamma_{cv}^2}{\Delta G_v}$$

$$= -4\gamma_{cv} \left( h^* - 2 \frac{\gamma_{cv}}{\Delta G_v} \right) = 0$$

$$\therefore h^* = \frac{2\gamma_{cv}}{\Delta G_v}$$

$\Delta G^*$ : put  $l^*$  into  $l$ , put  $h^*$  into  $h$

$$\therefore \Delta G^* = \frac{16\gamma_{cv}^3}{\Delta G_v^2}$$

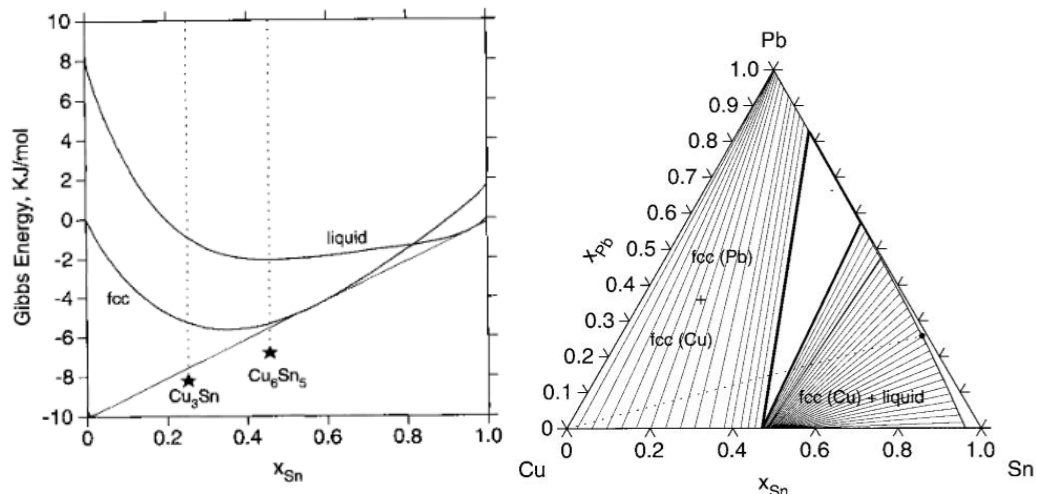
$$\therefore l^* = \frac{4\gamma_{cv}}{\Delta G_v}, \quad h^* = \frac{2\gamma_{cv}}{\Delta G_v}, \quad \Delta G^* = \frac{16\gamma_{cv}^3}{\Delta G_v^2}$$

## [Prediction of Interface Reaction Products between Cu and Various Solder Alloys by Thermodynamic Calculation]

20232994 최찬욱

Cu substrate위에서 substrate/solder interface의 intermetallic compound를 예측하는 것이 이 논문의 의의이다.

우선 예측을 위해 interface에서 diffusion controlled reaction이고, metastable local equilibrium이라고 가정하였다. Initial interface에서의 metastable local equilibrium상태를 찾기위해 driving force를 계산하였더니, Driving force of formation이 가장 높아 첫번째 형성 상임을 알 수 있었다. 새로운 interface마다 같은 작업을 반복하여 계산하였다.

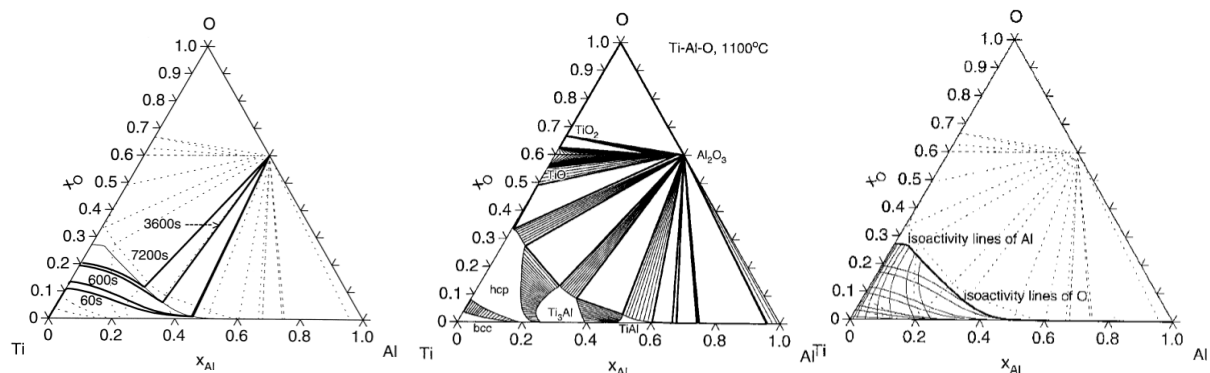


Cu/liquid alloy의 경우에는 diffusion simulation 할 필요 없이 liquid 내부에서 diffusion이 solid 내부보다 훨씬 빠르므로 liquid bulk에서의 조성 and liquid interface에서의 조성이 크게 다르지 않다. Interface에서의 조성은 저 tie line들 중 하나인데, 처음 liquid의 조성에서 pure Cu 쪽으로 그은 점선과 tie line과 만나는 점이 liquid interface에서의 조성이다. 그 tie line이 향하는 화합물이 가장 먼저 생기는 화합물이다.

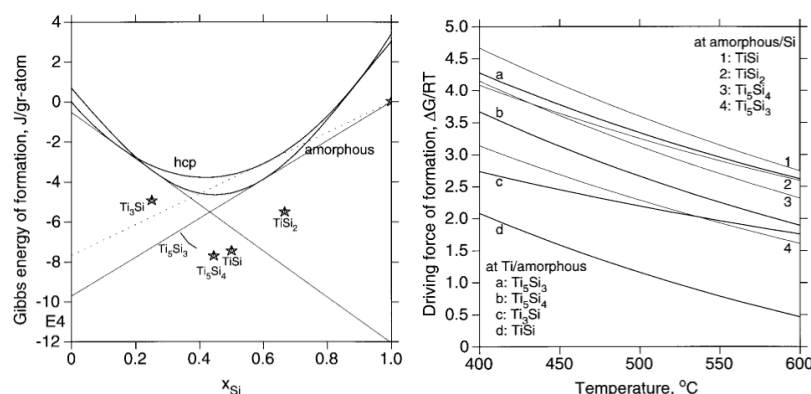
## [Prediction of Ti/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Interface Reaction Products by Diffusion Simulation]

서로 다른 solid/solid 물질을 붙여놓았을 때 interface에서 어떤 화합물이 생길지, 조성이 어떻게 될지 예측하는 것이 논문의 의의이다.

우선 interface에서 metastable phase끼리 local equilibrium이 형성되었고, interface에서 diffusion controlled reaction이라고 가정하였다. Interface에서의 조성은 두 phase의 chemical potential이 같아지게 만드는 조성이므로, 2원계에서는 Gibbs free energy curve의 공통 접선에서, 3원계에서는 metastable phase diagram에서 tie lines를 형성하게 된다.



Diffusion path를 상태도에 그려서 각 Ti/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 화합물마다 driving force를 구한다. Ti내부에서 산소의 diffusivity가 Al의 diffusivity 보다 빠르므로, 얼마 후 Ti는 산소로 saturation되고 diffusion path는 산소의 iso potential curve를 따라가게 된다. 산소의 iso potential curve가 향하는 곳이 TiAl이므로 TiAl이 가장 먼저 형성됨을 알 수 있다.



Metal/Si의 경우에는 diffusion simulation을 사용하여 interface 조성을 정확히 구할 필요 없이, 공통 접선 작도 상에서 interface의 조성이 두 상의 접점 사이의 범위라는 것을 알면, 여러 화합물이 경쟁하는 상황에서 그 범위 내의 조성에 들어가는 화합물이 생긴다는 식으로 예측하는 모델을 짤 수 있다.