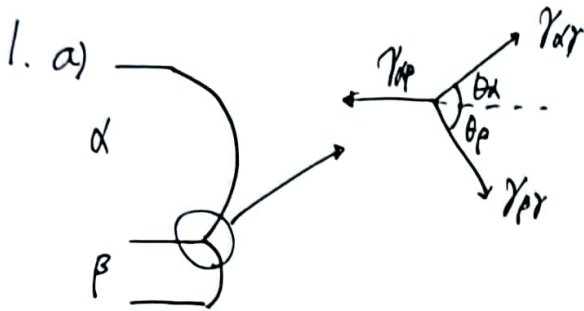
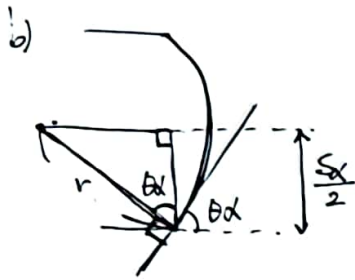




$\gamma_\alpha \neq \gamma_\beta$ 인 상황에서 force balance를 맞추기 위해 curvature가 반드시 생긴다.



$$r_\alpha = \frac{S_\alpha}{2\cos\theta_\alpha} \quad \text{동일하게} \quad r_\beta = \frac{S_\beta}{2\cos\theta_\beta}$$

$\cos\theta_\alpha$ 와 $\cos\theta_\beta$ 를 γ 에 대한 식으로 나타내기 위해, force balance 4 연결.

$$\begin{cases} \gamma_{\alpha\beta} = \gamma_\alpha \cos\theta_\alpha + \gamma_\beta \cos\theta_\beta \Leftrightarrow \gamma_\alpha^2 (1 - \sin^2\theta_\alpha) = \gamma_\alpha^2 - 2\gamma_\alpha \gamma_\beta \cos\theta_\beta + \gamma_\beta^2 (1 - \sin^2\theta_\beta) \\ \gamma_\alpha \sin\theta_\alpha = \gamma_\beta \sin\theta_\beta \end{cases}$$

$$\sin^2\theta_\alpha = \frac{\gamma_\beta^2}{\gamma_\alpha^2} \sin^2\theta_\beta$$

$$\therefore \cos\theta_\beta = \frac{-\gamma_\alpha^2 + \gamma_\beta^2 + \gamma_\alpha^2}{2\gamma_\alpha \gamma_\beta}, \quad \cos\theta_\alpha = \frac{-\gamma_\beta^2 + \gamma_\alpha^2 + \gamma_\beta^2}{2\gamma_\alpha \gamma_\beta}$$

$$\therefore r_\alpha = \frac{S_\alpha \gamma_\alpha \gamma_\beta}{\gamma_\alpha^2 + \gamma_\beta^2 - \gamma_\alpha^2}, \quad r_\beta = \frac{S_\beta \gamma_\alpha \gamma_\beta}{\gamma_\alpha^2 + \gamma_\beta^2 - \gamma_\alpha^2}$$

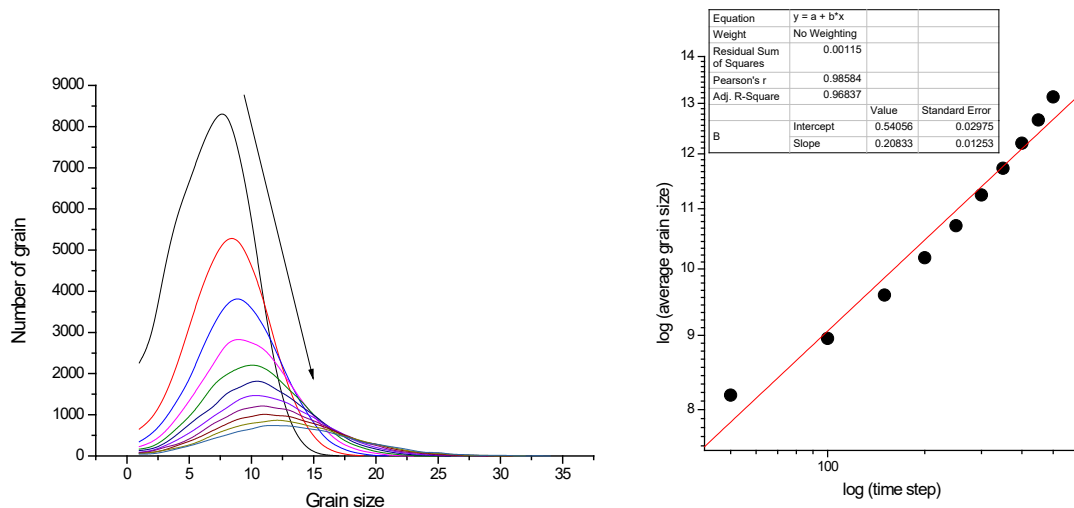
c) all energy change due to capillarity effect. $\rightarrow \frac{\gamma_\alpha V_{\alpha\beta}}{r_\alpha}, \quad \frac{\gamma_\beta V_{\beta\alpha}}{r_\beta} \quad V_m^L \approx \frac{S}{2}$

$$\therefore \Delta G = \frac{\gamma_\alpha^2 + \gamma_\beta^2 - \gamma_\alpha^2}{S \gamma_\alpha \gamma_\beta} \times \frac{\gamma_\alpha S V_m^L}{S} + \frac{\gamma_\beta^2 + \gamma_\alpha^2 - \gamma_\beta^2}{S \gamma_\alpha \gamma_\beta} \times \frac{\gamma_\beta S V_m^L}{S} \Rightarrow V_{\alpha\beta} = \frac{S_\alpha}{S} V_m^L, V_{\beta\alpha} = \frac{S_\beta}{S} V_m^L$$

$$= \frac{V_m^L}{S \gamma_\alpha \gamma_\beta} \left[\gamma_\alpha^2 + \gamma_\beta^2 - \gamma_\alpha^2 + \gamma_\alpha^2 + \gamma_\beta^2 - \gamma_\beta^2 \right] = \left[\frac{2 \gamma_\alpha \gamma_\beta V_m^L}{S} \right]$$

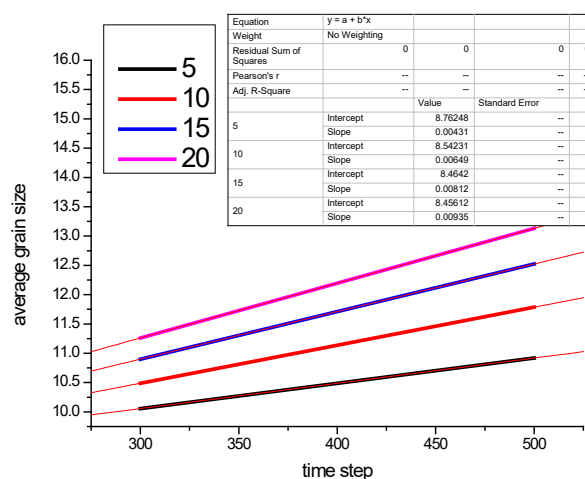
2. 시뮬레이션은 T=20으로 100 time step을 진행시킨 샘플을 initial 샘플로 사용하였음.

a) 아래 왼쪽 그래프는 time step 50 간격으로 grain size distribution을 나타낸 것임. 시간이 진행함에 따라 작은 grain은 줄어들고 점점 큰 grain들이 생기는 것을 확인할 수 있음. 이를 수식에 피팅하기 위하여 log (time step)과 log(average grain size)로 플랏하면 아래 오른쪽 그래프가 나옴.



결정 성장에 대한 수식 $R=Kt^n$ 에 맞추어 생각해보았을 때, $\log K = 0.541$, $n=0.208$ 임을 확인가능함.

b) 아래의 왼쪽 그래프를 통해 300에서 500 time step 사이에서의 온도에 따른 growth rate를 구할 수 있다.



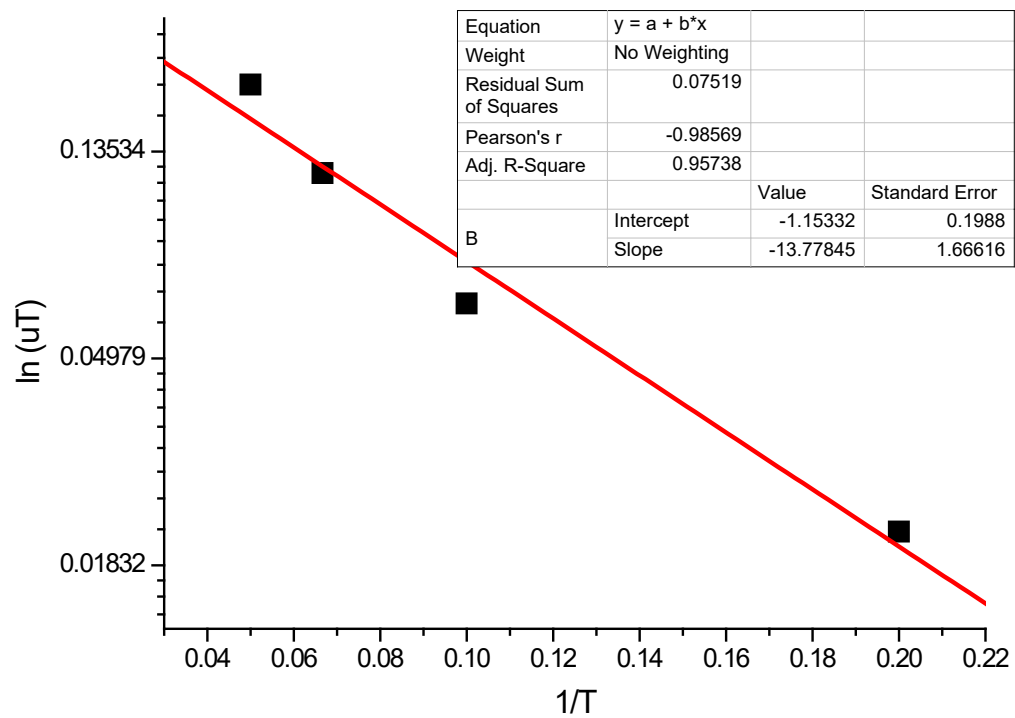
composition 변화가 없는 polycrystalline solid에서의 growth rate는 아래 식과 같이 표현 가능함.

$$u = \frac{dR}{dt} = nKt^{n-1} = \frac{\lambda \Delta G_{df}}{RT} v_0 \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{RT}\right) = A * \frac{1}{T} * \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{RT}\right) \quad (A \text{는 그냥 나머지 보기편하게 묶은거})$$

$$uT = A * \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{RT}\right)$$

$$\ln(uT) = \ln(A) - \frac{\Delta G^*}{RT}$$

마지막에 얻어진 식과, 위의 그래프에서 얻은 온도에 따른 growth rate를 사용하여 activation energy를 기울기를 통해 구할 수 있음. (아래그래프)



Activation energy는 $(13.78 \text{ K}) * (8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) = 114.6 \text{ J mol}^{-1}$ 이다.