Phase Transformation #2

2019 2259 신소재 왕재민

1. Study and summarize CSL (coincidence site lattice) boundary.

Grain boundary 는 grain 과 grain 이 만나는 면인데, 각 grain 은 특정한 orientation 을 가지므로, grain boundary 에서는 접하는 grain 들이 똑같은 orientation 을 갖지 않는 이상 misorientation 이 발생한다. 이때, 각 grain 의 orientation 들이 어떤 특별한 각도를 가지고 있을때, Grain boundary 의 일부 격자점들이 주기적으로 일치하여 Boundary energy 가 낮아지는 때의 grain boundary 를 CSL boundary 라고 한다. Σ, degree of fit, 이라는 값으로 grain 들간의 관계를 나타낼 수 있는데, Σ1 은 완전히 같은 orientation 의 grain 들간의 관계를 나타내고, Σ 가 낮을수록 일치하는 격자점이 많아지고, 높을수록 misorientation 이 심하다. 따라서, CSL boundary 의 경우 Σ 값이 낮다.

(Σ = 전체 격자점 / 일치하는 격자점)

2. $$\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi} x_n^{\beta} = \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\beta} x_n^{\phi} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)$$

$$\Leftrightarrow \quad x_n^{\beta} \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi} = x_n^{\phi} \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{x_n^{\beta}}{x_n^{\phi}} = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi}}$$

$$\frac{x_i^{\phi}}{x_n^{\phi}} = \frac{x_i^{\beta}}{x_n^{\beta}} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)$$

$$\frac{x_n^{\beta}}{x_n^{\phi}} = \frac{x_i^{\beta}}{x_i^{\phi}} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)$$

$$\frac{x_i^{\beta}}{x_i^{\phi}} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi}}$$

여기서, $\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi} = (x_1^{\phi} + x_2^{\phi} + \cdots + x_{n-1}^{\phi} + x_n^{\phi}) - x_n^{\phi} = 1 - x_n^{\phi}$

$$x_i^{\phi} = \frac{(1-x_n^{\phi})\, x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)} = \frac{x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) - x_n^{\beta} x_i^{\phi}}{\sum x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}$$

$$\Leftrightarrow \quad x_i^{\phi} \left(\sum x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) + x_n^{\beta} \right) = x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)$$

$$\Leftrightarrow \quad x_i^{\phi} = \frac{x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) + x_n^{\beta}} = \frac{x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right)}{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\beta} \exp\left(-\frac{\Delta G_i^{seg}}{RT}\right) + \left(1 - \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\beta}\right)}$$

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

$$\therefore \quad x_i^{\phi} = \frac{x_i^{B} e^{-\Delta G_i^{seg}/RT}}{1 + \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{B} \left(e^{-\Delta G_i^{seg}/RT} - 1\right)}$$