

HW 2

김윤아

1. 다른 crystal orientation을 갖는 두 grain의 lattice들이 특정 각도에서 무연히 완벽하게 일치할 때, 이때 공통의 격자점들을 CSL 이라고 한다. 이러한 격자점들 (CSL)은 주기적으로 반복이 되는데, 이들의 집합을 CSL (coincidence site lattice) boundary 라고 칭한다. CSL boundary는 다른 grain boundary에 비해 보통 misfit이 적고 낮은 에너지를 갖는다

$$2. \frac{X_i^\phi}{X_n^\phi} = \frac{X_i^B}{X_n^B} e^{-\Delta G_i^{CSL}/RT}$$

$$\Leftrightarrow X_i^\phi = \frac{X_i^B}{X_n^B} \cdot X_n^\phi \cdot e^{-\Delta G_i^{CSL}/RT} = \frac{X_n^\phi}{X_n^B} \cdot X_i^B \cdot e^{-\Delta G_i^{CSL}/RT}$$

$$\text{From the hint, } \left(\sum_{i=1}^{n-1} X_i^\phi X_n^\phi \right) + X_n^\phi X_n^B = \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B X_n^\phi e^{-\Delta G_j^{CSL}/RT} + X_n^\phi X_n^B$$

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

$$\text{Since } \sum_{i=1}^n X_i^\phi = 1, \quad \frac{X_n^\phi}{X_n^B} = \frac{1}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B (e^{-\Delta G_j^{CSL}/RT} - 1) + X_n^B + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B} = \frac{1}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B (e^{-\Delta G_j^{CSL}/RT} - 1) + 1}$$

$$\begin{aligned} \therefore X_i^\phi &= \frac{X_i^B}{X_n^B} \cdot X_n^\phi \cdot e^{-\Delta G_i^{CSL}/RT} \\ &= \frac{X_i^B e^{-\Delta G_i^{CSL}/RT}}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B (e^{-\Delta G_j^{CSL}/RT} - 1) + 1} \end{aligned}$$