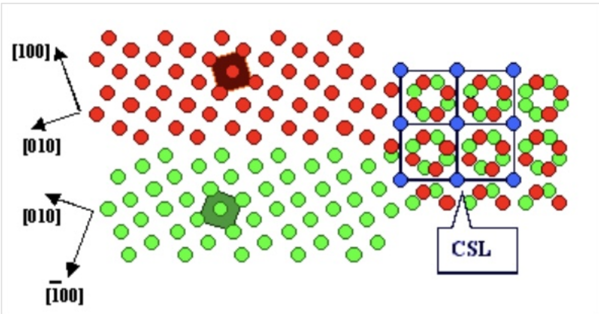
HW2

1. Lattice sites 의 유한한 부분이 두 격자 사이에 우연히 일치하면 Coinsident site lattice로 정의할 수 있다.

CSL 에서 고밀도 격자 점을 포함하는 경계는 atomic fit이 우수하기 때문에 낮은 에너지를 가질것으로 예상된다.



CSL은 crystallography 에서 굉장히 중요한데, 이는 crystal 의 grain boundaries 를 묘사하기 때문이다.

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

$$\Rightarrow \frac{X_n^{B}}{X_n^{\phi}} = \frac{X_i^{B}}{X_i^{\phi}} e^{-\Delta G^{ses}/RT}$$

where $\Delta G^{ses} = [{}^0G_{T_i}^{\phi} - {}^0G_{T_i}^{B}] - [{}^0G_{T_n}^{\phi} - {}^0G_{T_n}^{B}] + RT \ln \frac{\gamma_i^{\phi} \gamma_n^{B}}{\gamma_n^{\phi} \gamma_i^{B}}$

and from Hint

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

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

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

Therefore, $$\frac{X_i^B}{X_i^\phi} = \frac{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B \, e^{-\Delta G_j^{ses}/RT}}{\sum_{i=1}^{n-1} X_i^\phi}$$

$$* \left(\sum_{i=1}^{n-1} X_i^\phi + X_n^\phi = 1 \right) \quad \& \quad \left(\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B + X_n^B = 1 \right)$$

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

$$\Rightarrow X_i^\phi = \frac{X_i^B \, e^{-\Delta G^{ses}/RT}}{\sum_{j=1}^{n-1} X_j^B \, e^{-\Delta G_j^{ses}/RT} + X_n^B}$$

$$= \frac{X_i^B \, e^{-\Delta G^{ses}/RT}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B \left(e^{-\Delta G_j^{ses}/RT} - 1 \right)}$$