20202238 권지혜

1. Study and summary CSL.

: Grain들 간의 orientation 차이에 기인하여 Grain Boundary에 MISorientation이 존재한다. 이는 ΣN boundary라고도 표현가능하다.

이때, lattice point 들간의 (일부) 일치성에 의해 grain boundary에서의 Energy가 낮아지는 지점을 CSL boundary라고 한다.

cubic system에서 홀수 값을 가지는 N값은 작을수록 높은 일치성을 의미한다.

2. $X_i^{\phi} = \frac{X_i^{\phi}}{X_i^{B}} e^{-\Delta G_i^{seg}/RT}$ (Fowler-Guggenheim) $\sum x_i^{\phi}$ $1-x_i^{\phi}$

cubic system에서 같은 값을 가지는 N값은 작을수록 높은 일치성을 의미한다.

2. $X_i^{\phi} = \frac{X_n^{\phi}}{X_n^{B}} X_i^{B} e^{-\Delta G_i^{sol}/RT}$ (Fraction) , $\frac{X_n^{\phi}}{X_n^{B}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^{\phi}}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT}} = \frac{1 - x_n^{\phi}}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT}}$

$$= \frac{\cancel{X_i^{B}} e^{-\Delta G_i^{sol}/RT} - X_i^{B} X_n^{\phi} e^{-\Delta G_i^{sol}/RT}}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT}}$$

(주어진 식에서 $X_i^{B} X_n^{\phi} = X_i^{\phi} X_n^{B} e^{\Delta G_i^{sol}/RT}$.)

$$= \frac{X_i^{B} e^{-\Delta G_i^{sol}/RT}}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT}} - \frac{X_i^{\phi} X_n^{B}}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT}}$$

<X_i^{ϕ}끼리 묶어주고>

$$X_i^{\phi} \left(1 + \frac{X_n^{B}}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT}} \right) = \frac{X_i^{B} e^{-\Delta G_i^{sol}/RT}}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{B} e^{-\Delta G_j^{sol}/RT}}$$

$$X_i^{\phi} \left(\sum_{j=1}^{n} x_j^{B} e^{-\Delta G_i^{sol}/RT} + X_n^{B} \right) = X_i^{B} e^{-\Delta G_i^{sol}/RT} \quad \left(X_n^{B} = 1 - \sum_{j=1}^{n} x_j^{B} \right)$$

$$\Rightarrow X_i^{\phi} = \frac{X_i^{B} e^{-\Delta G_i^{sol}/RT}}{1 + \sum_{j=1}^{n} X_j^{B} \left(e^{-\Delta G_i^{sol}/RT} - 1 \right)}$$