

$$1. \frac{X_i^\phi}{X_n^\phi} = \frac{X_i^B}{X_n^B} e^{-\Delta G_i^\circ / RT} \Leftrightarrow \frac{X_n^\phi}{X_n^B} = \frac{X_1^\phi}{X_1^B e^{-\Delta G_1^\circ / RT}} = \frac{X_2^\phi}{X_2^B e^{-\Delta G_2^\circ / RT}} = \dots = \frac{X_{n-1}^\phi}{X_{n-1}^B e^{-\Delta G_{n-1}^\circ / RT}}$$

$$\frac{1}{\text{for}} \frac{b_1}{a_1} = \frac{b_2}{a_2} = \frac{b_3}{a_3} = \dots = \frac{b_n}{a_n}, \quad \frac{b_1 + b_2 + \dots + b_n}{a_1 + a_2 + \dots + a_n} = \frac{b_1}{a_1} = \frac{b_2}{a_2} = \dots = \frac{b_n}{a_n}$$

$$\Rightarrow \frac{X_i^\phi}{X_i^B e^{-\Delta G_i^\circ / RT}} = \frac{X_1^\phi + X_2^\phi + \dots + X_n^\phi}{X_n^B + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^\circ / RT}} = \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B (e^{-\Delta G_j^\circ / RT} - 1)}$$

$\frac{X_1^\phi + X_2^\phi + \dots + X_n^\phi}{X_n^B + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B e^{-\Delta G_j^\circ / RT}} = 1$
 \parallel
 $1 - \sum_{k=1}^{n-1} X_k^B$

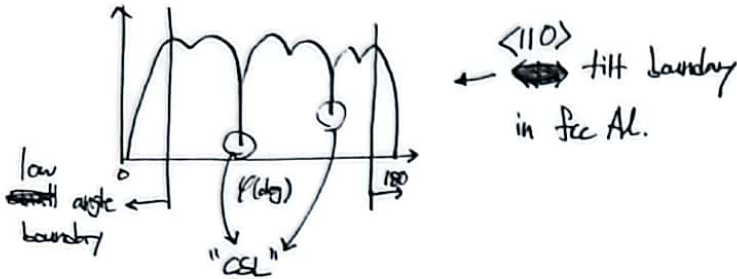
$$\therefore X_i^\phi = \frac{X_i^B e^{-\Delta G_i^\circ / RT}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} X_j^B (e^{-\Delta G_j^\circ / RT} - 1)}$$

2. - Pure tilt, 혹은 pure twist boundary 이서 발생하는 coincident site lattice (CSL)은 두 lattice 면의

lattice site들의 일부가 서로 겹쳐 하나의 lattice 같은 모습을 보이는 것을 의미한다.
(실제로 겹쳐지는 것이 아님)

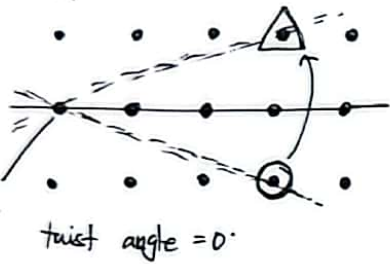
- 많은 양의 lattice point가 겹치게 되어서 atomic fit 이 잘 되는 에너지를 가지는 special grain boundary 이다.

ex) Gottstein & Quinlan (1974)



- twist angle는 다음과 같음. (pure twist boundary의 경우)

ex)

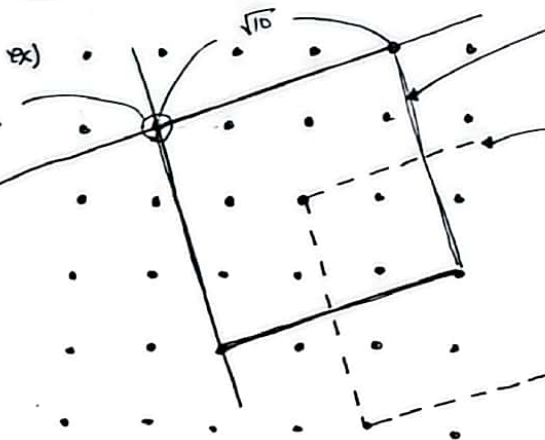


▶ 위의 lattice의 lattice site O가 minor plane 기울기의 여태 lattice site Δ 와 겹쳐서 돌리면 됨.

▶ 이때 돌리는 각도는 기울기 (회전각) θ 가 되도록 겹쳐지는 lattice site가 (m, n) 에 있다면, $\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{n}{m}$ 으로 표현 가능함. 보여준 예시에서 $\theta = 2 \tan^{-1}\left(\frac{1}{3}\right) = 36.9^\circ$

▶ 이렇게 만들어진 CSL은 σ 를 사용하여 부른다. σ 는 각쌍의 CSL ~~unit~~ cell size가 기존 unit cell 의 size 대비 얼마나 큰지를 보여주는 값인데, 이 값이 작을수록 CSL이 작아진다는 뜻이며 lattice site가 작아진다는 뜻이다.

- σ 를 구하는 방법.



이 예시에서 CSL unit cell 한 번의 길이는 $\sqrt{m^2 + n^2} = \sqrt{10}$ 이기 때문에 cell의 넓이는 10 일.

하지만 이 경우는 unit cell이 겹쳐서 4개짜리 때문에 넓이가 $\frac{1}{2}$ 이므로 $\sigma = 5$ 인 것이다.