1.

주어진 식에서 $\dfrac{x_i^{\phi}}{x_n^{\phi}} = \dfrac{x_i^{B}}{x_n^{B}} \exp\left(-\Delta G_i^{seg}/RT\right)$

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

by using $\displaystyle\sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi} x_n^{B} = \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} x_n^{\phi} \exp\left(-\Delta G_j^{seg}/RT\right)$ & $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} x_i^{\phi} = 1,\ \sum_{j=1}^{n} x_j^{B} = 1$

$$(\text{좌변}) = \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi} x_n^{B} = x_n^{B} \sum_{i=1}^{n-1} x_i^{\phi}$$

$$= x_n^{B}\left(-x_n^{\phi} + \sum_{i=1}^{n} x_i^{\phi}\right)$$

$$= \left(1 - x_n^{\phi}\right) x_n^{B}$$

$$(\text{우변}) = \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} x_n^{\phi} \exp\left(-\Delta G_j^{seg}/RT\right)$$

$$= x_n^{\phi} \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} \exp\left(-\Delta G_j^{seg}/RT\right)$$

$$\therefore \left(1 - x_n^{\phi}\right) x_n^{B} = x_n^{\phi} \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} \exp\left(-\Delta G_j^{seg}/RT\right)$$

$$\frac{x_n^{B}}{x_n^{\phi}} - x_n^{B} = \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} \exp\left(-\Delta G_j^{seg}/RT\right)$$

$$\frac{x_n^{B}}{x_n^{\phi}} = x_n^{B} + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} \exp\left(-\Delta G_j^{seg}/RT\right)$$

$$= x_n^{B} + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B}\left[\exp\left(-\Delta G_j^{seg}/RT\right) - 1 + 1\right]$$

$$= x_n^{B} + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B}\left(\exp\left(-\Delta G_j^{seg}/RT\right) - 1\right)$$

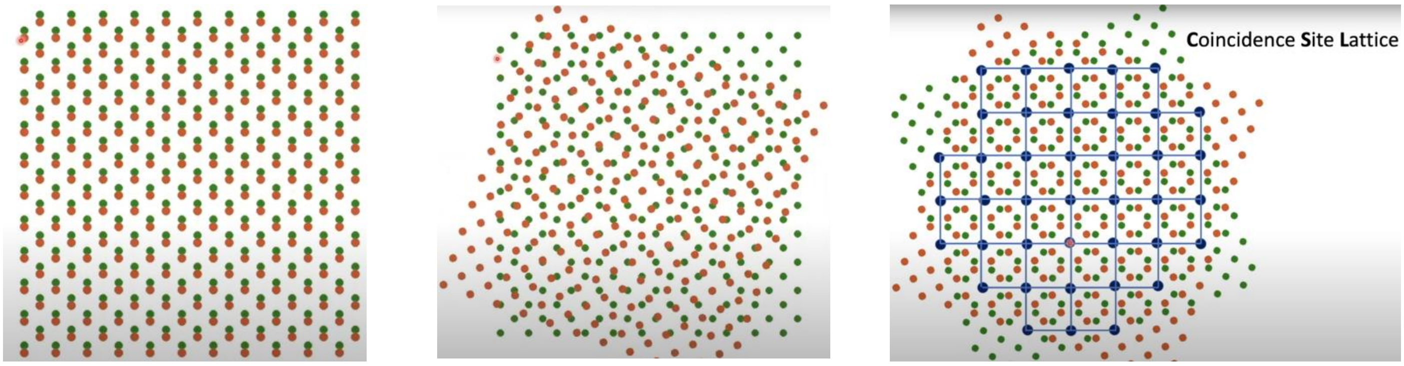
$$= 1 + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B}\left(e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} - 1\right)$$

$$\therefore \quad \frac{x_n^{\phi}}{x_n^{B}} = \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} x_j^{B} \left(e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} - 1 \right)}$$

$$\therefore \quad x_i^{\phi} = \frac{x_n^{\phi}}{x_n^{B}} x_i^{B} e^{-\Delta G_i^{seg}/RT}$$

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

2. Study and summarize CSL (coincidence site lattice) boundary on one A4 paper..



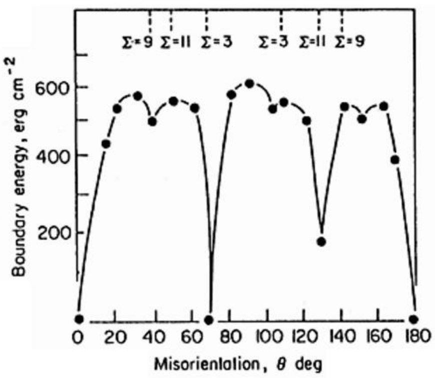
<Fig1. 왼쪽부터 **a, b, c**>

서로 다른 crystal orientation을 가진 두 grain이 만나는 상황을 생각해보자. 이때, 두 grain의 orientation 중 특정 각도에서는 두 grain의 lattice point 중 일부가 주기적으로 일치하는 경우가 생기는데, 이 점들의 집합을 Coincidence Site Lattice (CSL)이라 한다. CSL이 나타나는 상황은 위 figure1에서 표현되어 있다. 두 Orientation 사이의 각이 작은 상황 (**a**)에서는 일치하는 lattice point가 존재하지 않는다. 하지만, orientation 사이의 각이 커짐에 따라 (**b → c**) 녹색과 주황색 lattice point중 일치하는 경우가 발생한다. 이렇게 주기적으로 일치하는 lattice의 집합인 CSL을 **c** 에서 남색으로 표현했다.

CSL과 기존의 unit cell의 관계를 분석하기 위해, ∑ (sigma)를 도입한다. ∑의 정의는 다음과 같다.

$$\Sigma = \frac{number\ of\ lattice\ points\ in\ the\ CSL\ unit\ cell}{number\ of\ lattice\ points\ in\ the\ crystal\ unit\ cell}$$

예를 들어, 위 그림의 상황에서는 CSL unit cell안에 5개의 lattice point가 존재하므로, $\Sigma = 5$이다. 이때, ∑은 홀수값만 가지며, ∑이 낮을수록 두 grain 간 일치하는 lattice point가 많다는 점을 의미하며, $\Sigma = 1$ 은 완전히 동일한 orientation을 가진 grain, 즉 perfect crystal을, $\Sigma = 3$ 은 twin boundary의 관계를 가지고 있음을 의미한다.



Grain boundary energy 관점에서 보았을 때, CSL의 grain boundary에서, ∑이 낮을수록 비슷한 각의 high angle grain boundary보다 낮은 grain boundary energy를 가지는 경향을 나타낸다.

참고문헌

https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def_en/kap_7/backbone/r7_1_2.html, https://www.youtube.com/watch?v=IFMdrlOtS4k