phase transformations Problem Set #2

20222102 이마태

$$x_i^\phi = \frac{x_n^\phi}{x_n^B} \cdot x_i^B e^{-\Delta G_i^{seg}/RT} \qquad - \text{①}$$

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

$$\Rightarrow \underbrace{\sum_{i=1}^{n-1} x_i^\phi x_n^B + x_n^\phi x_n^B = x_n^B}_{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^\phi = 1\right)} = x_n^\phi \sum_{j=1}^{n-1} x_j^B e^{-\Delta G_j^{seg}/RT} + x_n^\phi x_n^B$$

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

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

① 에 대입

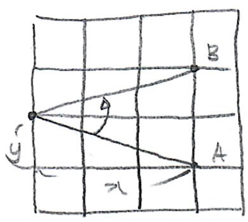
$$\Rightarrow x_i^\phi = \frac{x_n^\phi}{x_n^B} x_i^B e^{-\Delta G_i^{seg}/RT}$$

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

CSL boundary (coincidence site boundary)

CSL boundary는 grain이 만나 grain boundary를 생성할 때 일부 격자점이 일치하여 생성되는 특별한 grain boundary이다. 일부 격자점이 일치하기 때문에 일치하지 않는 보통의 grain boundary 보다 상대적으로 작은 grain boundary energy를 가진다.

두개의 면이 있고 서로 같은 방향을 가지고 있다고 해보자. 이 때는 서로 격자점들이 일치하므로 boundary가 없다고 할 수 있다. 두 면중 하나를 고정하고 다른 하나를 회전 시키게 되면 특정 각도에서 우연히 격자점이 일치하는 경우가 생긴다. 이때 두 면 간의 boundary를 CSL boundary라고 할 것이다.



오른쪽 그림을 보면 A점이 있는 하나의 면만 돌려서 다른 면에 있는 B 점과 일치하게 할 수 있다. 다른 점들에 대해서도 돌려서 일치하게 하는 점들이 있으며 이를 구분하기 위해 Σ를 사용한다.

$$\Sigma = \begin{cases} x^2+y^2 & (\text{홀수}) \\ \frac{1}{2}(x^2+y^2) & (\text{짝수}) \end{cases}$$

로 정의되며 위의 그림은 수식에 따라 Σ5에 해당한다.

Σ에서 값이 작을수록 겹치는 격자점이 많아 grain boundary가 낮다는 특징도 있다.