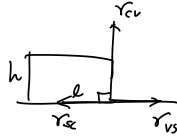
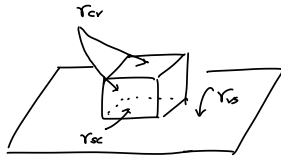


1



$$\gamma_{\Sigma} = \gamma_{vs}$$

$$\Delta G = -V \Delta G_v + \Sigma A_i \gamma_i$$

$$= -l^2 h \Delta G_v + l^2 \gamma_{cv} + 4hl \gamma_{cv} + l^2 \gamma_{sc} - l^2 \gamma_{vs}$$

$$= -l^2 h \Delta G_v + (l^2 + 4hl) \gamma_{cv}$$

\* Critical size

find  $l^* \cdot h^*$

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial l} \Big|_{l=l^*, h=h^*} = -2l^* h^* \Delta G_v + (2l^* + 4h^*) \gamma_{cv} = 0 \quad \dots \textcircled{1}$$

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial h} \Big|_{l=l^*, h=h^*} = -l^{*2} \Delta G_v + 4l^* \gamma_{cv} = 0 \quad \dots \textcircled{2}$$

$$\textcircled{2} \text{ or } l^* (-l^* \Delta G_v + 4 \gamma_{cv}) = 0$$

$$l^* \neq 0 \rightarrow \underline{l^* = \frac{4 \gamma_{cv}}{\Delta G_v}} \quad \dots \textcircled{3}$$

$\textcircled{2}$ 을  $\textcircled{1}$ 에 대입.

$$- \frac{8 \gamma_{cv}}{\Delta G_v} h^* \Delta G_v + \frac{8 \gamma_{cv}}{\Delta G_v} \gamma_{cv} + 4h^* \gamma_{cv} = 0$$

$$h^* (-8 \gamma_{cv} + 4 \gamma_{cv}) + \frac{8 \gamma_{cv}^2}{\Delta G_v} = 0$$

$$h^* (4 \gamma_{cv}) = \frac{8 \gamma_{cv}^2}{\Delta G_v}$$

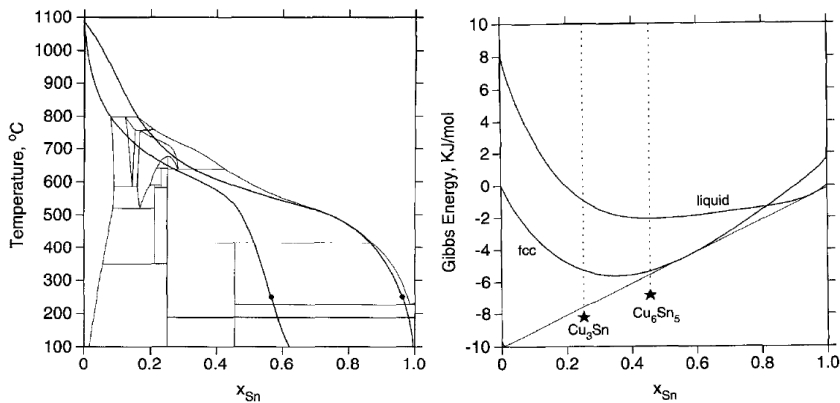
$$\underline{h^* = \frac{2 \gamma_{cv}}{\Delta G_v}}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \Delta G^* &= -l^{*2} h^* \Delta G_v + (l^{*2} + 4h^* l^*) \gamma_{cv} \\ &= -\frac{16 \gamma_{cv}^2}{\Delta G_v^2} \cdot \frac{2 \gamma_{cv}}{\Delta G_v} \cdot \Delta G_v + \left( \frac{16 \gamma_{cv}^2}{\Delta G_v^2} + 4 \cdot \frac{2 \gamma_{cv}}{\Delta G_v} \cdot \frac{4 \gamma_{cv}}{\Delta G_v} \right) \gamma_{cv} \\ &= -\frac{32 \gamma_{cv}^3}{\Delta G_v^2} + \frac{48 \gamma_{cv}^3}{\Delta G_v^2} \\ &= \underline{\underline{\frac{16 \gamma_{cv}^3}{\Delta G_v^2}}} \end{aligned}$$

$$\therefore l^* = \frac{4 \gamma_{cv}}{\Delta G_v} \quad h^* = \frac{2 \gamma_{cv}}{\Delta G_v} \quad \Delta G^* = \frac{16 \gamma_{cv}^3}{\Delta G_v^2}$$

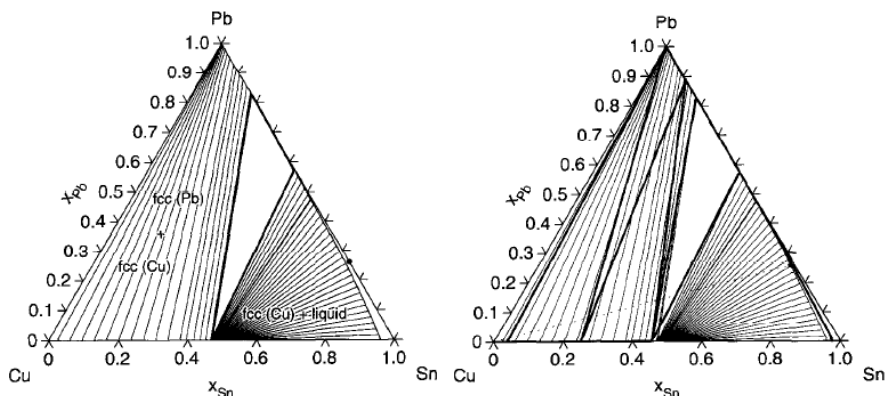
## 2.1 Prediction of interface reaction products between Cu and various solder alloys by thermodynamic calculation

가장 먼저 생성되는 compound가 soldering 공정에서 wettability를 결정짓기 때문에 어떤 compound가 먼저 생성되는지 예측하는 것은 매우 중요했지만, 기존의 모델로는 알 수 없었다. 해당 연구에서는 생성되는 compound의 driving force를 기반으로 기판과 liquid solder phases 사이의 metastable equilibria를 계산하여 기판과 solder 사이의 조성을 예측한다.



Pure Cu와 pure Sn 사이 metastable phase diagram을 그린 후, Gibbs energy를 계산하여 250도에서 driving force를 예측하였다. 계산 결과,  $Cu_3Sn$ 과  $Cu_6Sn_5$ 가 가장 먼저 형성될 것이라는 것을 예측할 수 있었고, 가장 큰 driving force를 갖는 compound가 먼저 형성될지는 알 수 없지만 phase transformation 초기 단계에서 좋은 예측 방법이 될 수 있다.

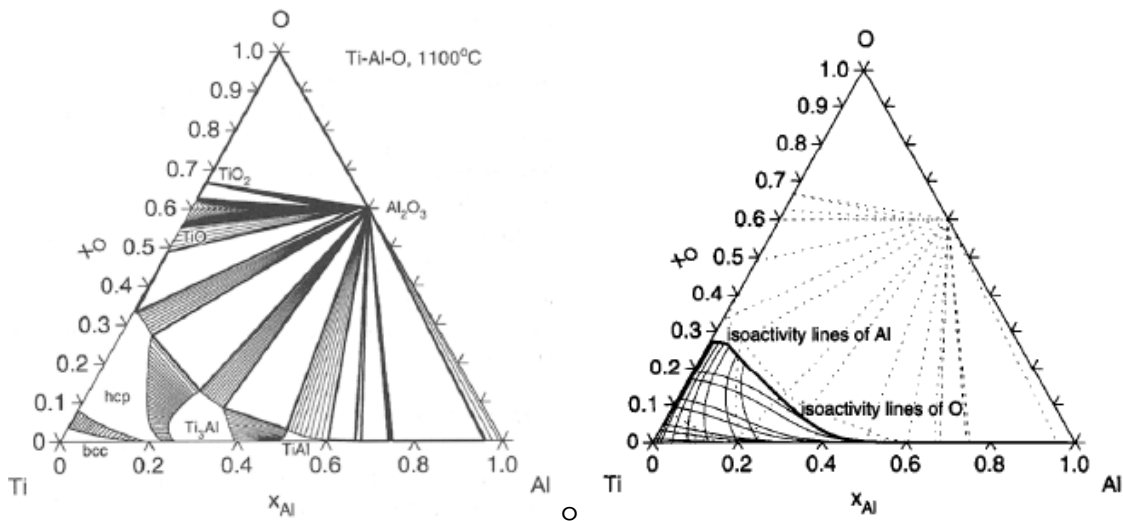
해당 방법은 pure Cu와 Sn-Pb, Sn-Bi, Sn-Zn, Sn-Ag binary eutectic solder alloy에도 적용될 수 있다. 일반적으로 계면의 조성을 파악하기 위해서는 ternary diffusion equation을 풀어야 하고, diffusion coefficient 같은 model parameter가 더 필요하다. 해당 논문에서는 diffusion equation을 풀지 않고도 두 phase 간의 diffusion 속도 차이가 크게 나는 점을 이용하여 계면 조성을 추측했다. Liquid에서 Sn과 Pb의 self-diffusion coefficient가 Cu에서의 tracer diffusion coefficient보다 훨씬 크기 때문에 liquid에서의 concentration gradient는 Cu에 비해서 무시할 수 있다. Pure Cu와 liquid solder의 초기 조성을 연결하는 선과, metastable phase diagram에서 metastable Cu + liquid/liquid phase boundary가 만나는 부분이 계면의 조성이라고 볼 수 있고, tie line을 따라서 compound의 조성을 알 수 있으며, driving force를 예측할 수 있게 된다.



## 2.2 Prediction of TiAl2O3 interface reaction products by diffusion simulation

해당 논문은 pure Ti와 alumina의 계면에서 어떠한 compound가 먼저 생성되는지 규명하였고, 초기에 TiAl이 먼저 생성된 후 Ti<sub>3</sub>Al이 생성된다고 밝혔다.

계산을 통해 1100도의 Ti-Al-O ternary system에서 metastable phase boundary, isopotential curve를 그렸고, Ti, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 사이의 metastable phase boundary를 그렸다.



Diffusion path에서, 초기에는 oxygen의 diffusion coefficient가 aluminium에 비해 크기 때문에 Ti matrix는 oxygen이 먼저 saturation된다. 따라서 어느 곳에서든 oxygen potential이 일정하게 된다. 반응 시작 후 600초가 경과하면 거의 saturation되어 60s와 interface 조성이 동일한 것을 확인할 수 있다. 3600초가 넘어가는 경우 metastable phase boundary와 두 초기 조성을 봤을 때 계면의 조성은 Al이 적어지고 O가 많아지는 방향으로 변화한다. 그 영향으로 계면에서 TiAl은 줄어들고 Ti<sub>3</sub>Al이 안정화된다. 따라서, 초기에는 TiAl이 먼저 만들어지고 시간이 지나면 Ti<sub>3</sub>Al이 만들어진다고 결론지을 수 있다.

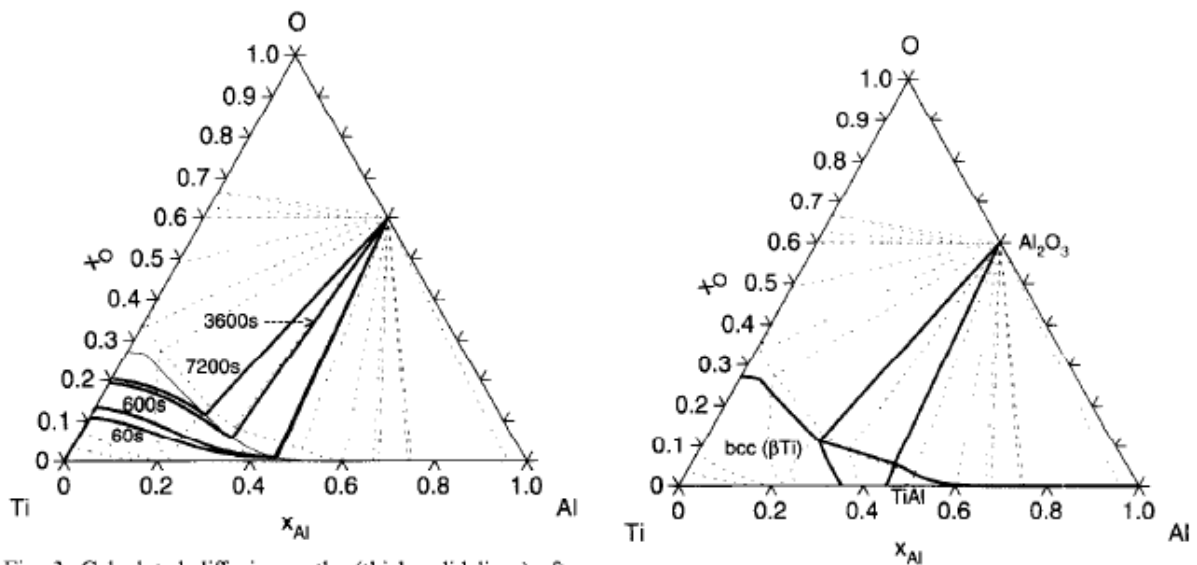


Fig. 3 Calculated diffusion paths (thick solid lines) after