1.

from the ppt of ~~Inte~~ Inter forces the Gibbs energy which include surface energy is following equation

$$\Delta G = -\frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \gamma \quad -①$$

volume of single atom $= v$

구를 이루고 있는 부피는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{4}{3}\pi r^3 = n \cdot v$$

$$\Rightarrow r^3 = \frac{3}{4\pi} n v, \quad r^2 = \left(\frac{3}{4\pi} n v\right)^{\frac{2}{3}}$$

이를 ①식에 대입하면,

$$\Delta G = -\frac{4}{3}\pi \cdot \frac{3}{4\pi} n v \Delta G_v + 4\pi \left(\frac{3}{4\pi} n v\right)^{\frac{2}{3}} \gamma$$

$$= -n v \Delta G_v + n^{\frac{2}{3}} v^{\frac{2}{3}} \gamma \cdot 3^{\frac{2}{3}} \cdot 4\pi^{\frac{1}{3}}$$

$$= -n v \Delta G_v + (3^2 \cdot 4\pi)^{\frac{1}{3}} \cdot n^{\frac{2}{3}} \cdot v^{\frac{2}{3}} \gamma$$

$$= -n v \Delta G_v + (36\pi)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{2}{3}} \cdot v^{\frac{2}{3}} \gamma$$ 증명 끝.

2.

ⓐ $\Delta G = -n v \Delta G_v + (36\pi)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{2}{3}} v^{\frac{2}{3}} \gamma$

ⓑ . at critical number of atom $\frac{d\Delta G}{dn} = 0$

$$\frac{d\Delta G}{dn} = \frac{d\Delta G}{dn} - v\Delta G_v + \frac{2}{3}(36\pi)^{\frac{1}{3}} \cdot v^{\frac{2}{3}} \gamma \cdot n_c^{-\frac{1}{3}} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt[3]{n_c}} = \frac{+v\Delta G_v +}{\frac{2}{3}(36\pi)^{\frac{1}{3}} v^{\frac{2}{3}} \gamma} \Rightarrow \frac{1}{n_c} = \frac{v^3 \Delta G_v^3}{\frac{2^3}{3^3} 36\pi v^2 \gamma^3}$$

$$n_c = \frac{32\pi \quad \gamma^3}{3 v^3 \Delta G_v^3} = \boxed{\frac{32}{3v}\pi \left(\frac{\gamma}{v \Delta G_v}\right)^3}$$

이 때의 에너지 $\Delta G(n_c)$는 계산해보면

$$\Delta G(n_c) = -\frac{32}{3}\pi \frac{\gamma^3}{v^2 \Delta G_v^2} + \pi^{\frac{1}{3}} \left(\frac{32}{3v}\right)^{\frac{2}{3}} \cdot (36)^{\frac{1}{3}} \frac{\gamma^2}{v \Delta G_v} v^{\frac{2}{3}} \gamma$$

$$= -\frac{32}{3}\pi \frac{\gamma^3}{\Delta G_v^2} + \frac{3 \cdot 16\pi}{3} \frac{\gamma^3}{\Delta G_v^2}$$

$$= \boxed{\frac{16}{3}\pi \frac{\gamma^3}{\Delta G_v^2}}$$

ⓒ 먼저 diamond과 graphite의 Gibbs energy 식을 써보면 다음과 같다.

$$\Delta G_{diamond} = -n(G_v - G_{dia}) + (36\pi)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{2}{3}} V_{dia}^{\frac{2}{3}} \gamma_{dia}$$

$$\Delta G_{Graphite} = -n(G_v - G_{graphite}) + (36\pi)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{2}{3}} V_{gra}^{\frac{2}{3}} \gamma_{gra}$$

* Stability of diamond become the same as that of graphite 조건에 의해

$\Delta G_{diamond} = \Delta G_{graphite}$ 라고 하면

다음과 같이 정리가능하다.

$$0 = -n(G_{graphite} - G_{dia}) + (36\pi)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{2}{3}} \left(\gamma_{dia} V_{dia}^{\frac{2}{3}} - \gamma_{graphite} V_{graphite}^{\frac{2}{3}}\right)$$

여기서 atomic number n에 대해 정리하면

$$n = 36\pi \frac{\gamma_{dia}^3 V_{dia}^2 - \gamma_{graphite}^3 V_{graphite}^2}{(G_{graphite} - G_{dia})^3}$$

주어진 값을 대입해 계산해보면

$\gamma_{dia} = 3.6 \qquad n = 464$

$\gamma_{dia} = 3.65 \qquad n = 145$

$\gamma_{dia} = 3.7 \qquad n = 21$

d) 안정해진 조건을 써보면,

$\Delta G_{gra} > \Delta G_{dia}$

$\rightarrow \Delta G_{gra} - \Delta G_{dia} > 0.$

$$\Rightarrow 36\pi \frac{\gamma_{dia}^3 V_{dia}^2 - \gamma_{gra}^3 V_{gra}^2}{(G_{v\,graphite} - G_{v\,dia})^3} < n_{지름}$$

$\gamma_{dia} = 3.6$ 이면 $\quad n < 464$

$\gamma_{dia} = 3.65 \quad n < 145$ 이어야 한다.

$\gamma_{dia} = 3.7 \quad n < 21$

e) $n_c = 100$ 이므로

$$n_c = \frac{32\pi}{3v}\left(\frac{\gamma}{\Delta G_v}\right)^3 \Rightarrow \Delta G_v = \frac{1}{\left(\frac{3 v n_c}{32\pi}\right)^{\frac{1}{3}}} \cdot \gamma.$$

$$\Delta G_v = \left(\frac{3 \cdot 8 \frac{(10^{-10})^3 m^3}{atom} \cdot 100}{32\pi}\right)^{-\frac{1}{3}} \cdot 3.1\ J/mol$$

$= 1.08\ J/m^3.$

f) $I = A \cdot \exp(-\Delta G^* / kT)$. A가 같다는 가정으로 봤을

$$I_{gra}/I_{dia} = \exp\left(\frac{-\Delta G_{gra} + \Delta G_{dia}}{kT}\right).$$

$$= \exp\left[\frac{1}{kT}\left(\frac{16}{3}\pi\left(\frac{\gamma_{dia}^3}{\Delta G_{v\,dia}^2} - \frac{\gamma_{gra}^3}{\Delta G_{v\,gra}^2}\right)\right)\right]$$

온도가 안나와 있으므로 300K 으로 계산.

$\gamma_{dia} = 3.6$ 이면,

$J_{gra}/J_{dia} = 3.9 \times 10^{-23}.$

$\gamma_{dia} = 3.65. \quad J_{gra}/ = 5 \times 10^{-5}.$

$\gamma_{dia} = 3.7 \quad \Rightarrow 2.3 \times 10^{14}.$

0.05 차이마다 $10^{19} \sim 10^{19}$ 정도 차이가 난다.

g) nucleation rate

γ_{dia}에 민감하게 바뀐다.

γ_{dia}가 작을 수록 diamond phase가 안정해지고, rate도 급격하게 증가한다.

h)

$CH_4 \rightarrow C + 2H_2$ 이 반응에서 C의 농도가 증가함으로, 이를 통해 graphite가 생성되는 쪽으로 반응이 진행된다. (= graphite가 더 안정해진다.)

driving force는 CH_4가 분해되면서 생기는 C (gas)의 pressure 일 것이다.