20222660 이상훈

(i) no strain

1. (a) for regular solution model, $G_m = X_A G_A^\circ + X_B G_B^\circ + RT(X_A \ln X_A + X_B \ln X_B) + X_A X_B \Omega$

$$\frac{\partial G_m}{\partial X_A} = G_A^\circ + RT\left(\ln X_A - \ln(1-X_A)\right) + (1-2X_A)\Omega$$

$$\frac{\partial^2 G_m}{\partial X_A^2} = \underbrace{RT\left(\frac{1}{X_A} + \frac{1}{1-X_A}\right)}_{X_A = 0.5\text{일때 최소.}} - 2\Omega$$

이 값이 $0 < X_A < 1$ 범위에서 항상 0보다 크게 되는 T가 critical T.

$$\therefore T_c = 2 \times 15000\ \mathrm{J/mol} \times \frac{1}{8.314\ \mathrm{J/mol\cdot K}} \times \frac{1}{4} = \boxed{902.1\mathrm{K}}$$

(ii) strain을 고려하면, $f''(C_0) + \frac{2E\eta^2}{1-\nu} \geq 0$ 이 되어야함.

$$\left(\frac{G_m}{V_m}\right)'' = \left(\frac{G_m}{V_A X_A + V_B X_B}\right)'' = \frac{1}{V_A X_A + V_B X_B}\left[RT\left(\frac{1}{X_A} + \frac{1}{1-X_A}\right) - 2\Omega\right]$$

이것도 X_A, X_B가 들어가지만 constant 라고 가정?

$$V_A = \frac{M_A}{\rho_A} = \frac{195\ \mathrm{g\,mol^{-1}}}{21.5\ \mathrm{g\,cm^{-3}}} = 9.07\ \mathrm{cm^3\,mol^{-1}}$$

$$V_B = 10\ \mathrm{cm^3\,mol^{-1}}$$

똑같이 $f''(C_0)$는 $X_A = 0.5$일때 최소니까,

$$\frac{1}{10^{-6}\ \mathrm{cm^{-3}m^3}} \times \frac{2}{9.07\ \mathrm{cm^3\,mol^{-1}} + 10\ \mathrm{cm^3\,mol^{-1}}}\left[8.314\ \mathrm{J\,mol^{-1}K^{-1}} \times T \times 4 - 2 \times 15000\ \mathrm{J\,mol^{-1}}\right] + \frac{2 \times 10^{11}\ \mathrm{Pa} \times (0.06)^2}{1-0.3} = 0$$

$\Rightarrow T_c = \boxed{607.2\mathrm{K}}$

(b) ①-i) $X_B = 0.75,\ \eta = 0$

위에서 구한 식의 T_c보다 낮으면 됨. $\rightarrow RT_c\left(\frac{1}{0.25} + \frac{1}{0.75}\right) - 2\Omega = 0 \quad \therefore T_c = \boxed{676.6\mathrm{K}}$

①-ii) $X_B = 0.75,\ \eta = 0.06$

이때는 V_m도 새로 계산 해야함. (위에서는 미분하기 어려워서 constant 라고 가정했었는데 여기는 계산 가능) $\longrightarrow$

$$\frac{1}{V_A \times 0.25 + V_B \times 0.75}\left[RT_c\left(\frac{1}{0.25} + \frac{1}{0.75}\right) - 2\Omega\right] + \frac{2E\eta^2}{1-\nu} = 0$$

$\therefore T_c = \boxed{450.0\mathrm{K}}$

②-i) $X_B = 0.60,\ \eta = 0$

$RT_c\left(\frac{1}{0.4} + \frac{1}{0.6}\right) - 2\Omega = 0 \quad \therefore T_c = \boxed{866.0\mathrm{K}}$

②-ii) $X_B = 0.60,\ \eta = 0.06$

$$\frac{1}{V_A \times 0.4 + V_B \times 0.6}\left[RT_c\left(\frac{1}{0.4} + \frac{1}{0.6}\right) - 2\Omega\right] + \frac{2E\eta^2}{1-\nu} = 0 \quad \therefore T_c = \boxed{580.1\mathrm{K}}$$

20222660 이상훈

(c) ①-i), ii) 과 ②-ii)의 경우에는 주어진 온도 T 가 T_c보다 높음. ⇒ spinodal decomposition X
critical wavelength X

②-i) $X_B = 0.6$, $\eta = 0$, $T = 775K$

$$\lambda_c = \left[-\frac{8\pi^2 K}{f''(C_0) + \frac{2E\eta^2}{1-\nu}}\right]^{1/2} = \left[-\frac{8\pi^2 K}{f''(C_0)}\right]^{1/2} = \left[-\frac{8\pi^2 K}{\frac{1}{V_A \times 0.4 + V_B \times 0.6}\left[R \times 775K \times \left(\frac{1}{0.4} + \frac{1}{0.6}\right) - 2\Omega\right]}\right]^{1/2}$$

$$= 1.55 \times 10^{-8} m = \boxed{15.5 nm}$$

(d) 앞의 문제들에서, $X_A = X_B = 0.5$일 때가 T_c 값이 가장 높았음.

⇒ 가장 먼저 unstable 해지는 조성이기 때문에, 동일한 온도에서 가장 빠르게 반응 진행될 것임.

∴ 조성은 $X_A = 0.5$.

fastest growing wavelength $\lambda = \sqrt{2}\lambda_c$ 임.

i) $X_A = 0.5$, $\eta = 0$, $T = 775K$

$$\lambda = \sqrt{2} \cdot \left[-\frac{8\pi^2 K}{\frac{2}{V_A + V_B}\left[R \times 775K \times 4 - 2\Omega\right]}\right]^{1/2} = 1.89 \times 10^{-8} m = \boxed{18.9 nm}$$

ii) 의 경우 1.(a) 에서 구한 $T_c = 607.2K$ 으로 775K 보다 낮음.

⇒ 어떤 조성이든 spinodal decomposition X

(e) $R_{max} = \frac{1}{2} K M \beta_c^4 = \frac{1}{2} K M \left(\frac{2\pi}{\lambda_c}\right)^4$ (d) 에서 구한 λ_c

$$M \rightarrow X_A X_B (X_A D_B^* + X_B D_A^*) = \frac{1}{8} \times 2 \times 10^{-3} \times e^{-\frac{100000}{8.314 \times 775}} \ m^2 s^{-1}$$

이때도 $X_A = 0.5$일 때가 R 이 최대일 것임.

$$= \cancel{4.54}\ 4.55 \times 10^{-11} m^2 s^{-1}$$

$$\therefore R_{max} = \frac{1}{2} \times 10^{-9} \times 4.55 \times 10^{-11} \times \left(\frac{2\pi}{\frac{1.89 \times 10^{-8}}{\sqrt{2}}}\right)^4 = \boxed{4.48 \times 10^{12}}$$

ii) 의 경우 위와 동일한 이유로 spinodal decomposition X

20222660 이석준

2. (a) at R.T. $D_A = 10^{-4} \exp(-85000/8.314 \times 298) = 1.26 \times 10^{-19}\ m^2 s^{-1}$.

$$\begin{cases} C_A(x,10) = C_A(x,0) \exp\left(\dfrac{-\pi^2 \times (1.26\times10^{-19}) \times 10}{(10^{-8})^2}\right) = 0.883\, C_A(x,0) \\ C_A(x,100) = C_A(x,0) \exp\left(\dfrac{-\pi^2 \times (1.26\times10^{-19}) \times 100}{(10^{-8})^2}\right) = 0.288\, C_A(x,0) \end{cases}$$

$\times \boxed{0.33\text{배}}$.

(b) $C_A(x,100)_{\lambda=0.1\mu m} = C_A(x,0) \exp\left(\dfrac{-\pi^2 \times (1.26\times10^{-19}) \times 100}{(10^{-7})^2}\right) = 0.988\, C_A(x,0)$

$C_A(x,100)_{\lambda=0.01\mu m} = 0.288\, C_A(x,0)$

$\times \boxed{0.29\text{배}}$

(c) $D_A(T=398K) = 10^{-4} \exp(-85000/8.314\times298) = 6.98\times10^{-16} m^2 s^{-1}$

$C_A(x,100)_{T=298K} = 0.288\, C_A(x,0)$

$C_A(x,100)_{T=398K} = 0$

아예 $\boxed{\text{0이 되어버림}}$.

(d) temperature가 가장 영향을 크게 준다.