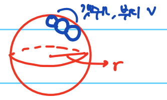
HW #5 신소재공학부 20222149 김창윤

1.

(a) For sphere.

$\Delta G = -V_s \cdot \Delta G_v + A \cdot \gamma = -\frac{4}{3}\pi r^3 \cdot \Delta G_v + 4\pi r^2 \cdot \gamma$ $\frac{4}{3}\pi r^3 = n \cdot v$



$\left(\rightarrow r^3 = \frac{3nv}{4\pi},\ r^2 = \left(\frac{3nv}{4\pi}\right)^{2/3} \right)$ ↗ 대입

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

(b) n^*, G^* 구하기

$$\left.\frac{d\Delta G}{dn}\right|_{n=n^*} = 0 = -v \cdot \Delta G_v + \frac{2}{3} \cdot (36\pi)^{1/3} \cdot n^{-\frac{1}{3}} \cdot v^{2/3} \cdot \gamma \rightarrow (n^*)^{1/3} = \frac{\frac{2}{3} \cdot (36\pi)^{1/3} \cdot v^{2/3} \cdot \gamma}{v \cdot \Delta G_v}$$

$$n^* = \frac{32}{3}\pi \cdot \frac{1}{v} \cdot \left(\frac{\gamma}{\Delta G_v}\right)^3 \xrightarrow{\Delta G\text{ 대입}} \Delta G^* = \frac{16}{3}\pi \cdot \frac{\gamma^3}{(\Delta G_v)^2}$$

(c) $\Delta G^{dia} = \Delta G^{gra}$; (a) 식에 대입

$$n = 36\pi \cdot \left(\frac{V_{gra}^{2/3} \cdot \gamma_{gra} - V_{dia}^{2/3} \cdot \gamma_{dia}}{\underbrace{-\Delta G_v^{dia} + \Delta G_v^{gra}}} \right)^3 = 36\pi \cdot \left(\frac{V_{gra}^{2/3} \cdot \gamma_{gra} - V_{dia}^{2/3} \cdot \gamma_{dia}}{{}^oG^{dia} - {}^oG^{gra}} \right)^3$$

문제조건처럼 변형하기위해 gas를 ref로 바꿈

① $\gamma_{dia} = 3.6\ J/m^2$ ⟶ ≃ 464 atoms

② $\gamma_{dia} = 3.65\ J/m^2$ ⟶ ≃ 145 atoms

③ $\gamma_{dia} = 3.7\ J/m^2$ ⟶ ≃ 21 atoms

(d) $\Delta G_{dia} < \Delta G_{gra}$ 이어야 하기에 $n < 36\pi \cdot \left(\frac{V_{gra}^{2/3} \cdot \gamma_{gra} - V_{dia}^{2/3} \cdot \gamma_{dia}}{{}^oG^{dia} - {}^oG^{gra}} \right)^3$

(e) If $n^* = 100$, $100 = \frac{32}{3}\pi \cdot \frac{1}{v} \cdot \left(\frac{\gamma}{\Delta G_v}\right)^3 \rightarrow \Delta G_v^3 = \frac{32}{300}\pi \cdot \frac{1}{v} \cdot \gamma^3$

$\therefore G_v^{gra} = 1.08 \times 10^{10}\ J/m^3$

(f) $I^{gra}/I^{dia} = \exp\left[\frac{\Delta G^*_{dia} - \Delta G^*_{gra}}{k \cdot T}\right]$, (b) 식을 이용하여 ΔG^*를 먼저 구해야 함

$\Delta G^*_{gra} = 4.3 \times 10^{-18} J$

① $\gamma_{dia} = 3.6\ J/m^2$ ⟶ $\Delta G^*_{dia} = 4.10 \times 10^{-18}\ J$

② $\gamma_{dia} = 3.65\ J/m^2$ ⟶ $\Delta G^*_{dia} = 4.28 \times 10^{-18}\ J$

③ $\gamma_{dia} = 3.7\ J/m^2$ ⟶ $\Delta G^*_{dia} = 4.46 \times 10^{-18} J$

최종적으로 ① $\gamma_{dia} = 3.6\ J/m^2 \longrightarrow I_{gra}/I_{dia} \fallingdotseq 3.42\times10^{-21}$

② $\gamma_{dia} = 3.65\ J/m^2 \longrightarrow I_{gra}/I_{dia} \fallingdotseq 5.29\times10^{-3}$

③ $\gamma_{dia} = 3.7\ J/m^2 \longrightarrow I_{gra}/I_{dia} \fallingdotseq 2.61\times10^{16}$

작은 γ 차이 에도
값이 dramatic 하게 바뀜

(g) bulk에서는 diamond가 graphite 보다 불안정함.
그러나 고려하고자하는 scale이 작아지게 되면 capillary effect 에 의해 계면 효과를 고려하여야 한다. (f) 문제를 통해 작은 γ 값의 변화에도 nucleation 에 큰 영향을 줌을 파악했다.
diamond의 surface energy가 감소하게 되면 dia의 nucleation rate가 증가하는 것 또한 확인할 수 있다.