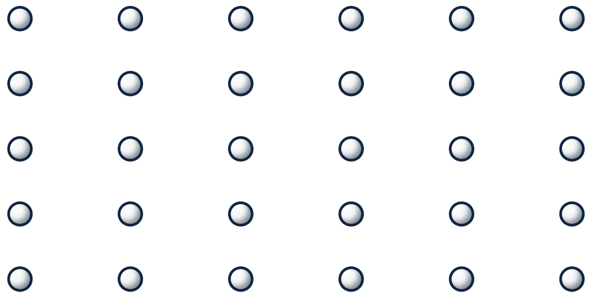
蒸発速度---界面律速のモデル

結晶格子の振動数

結晶の格子振動



結晶の格子振動の
周波数を概算する

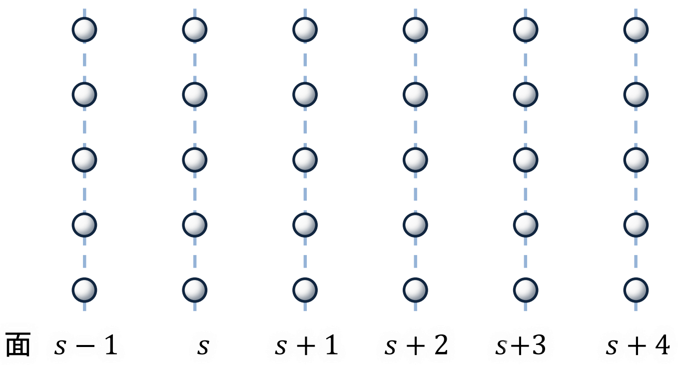
分子の振動

音速から求めたい

参考：

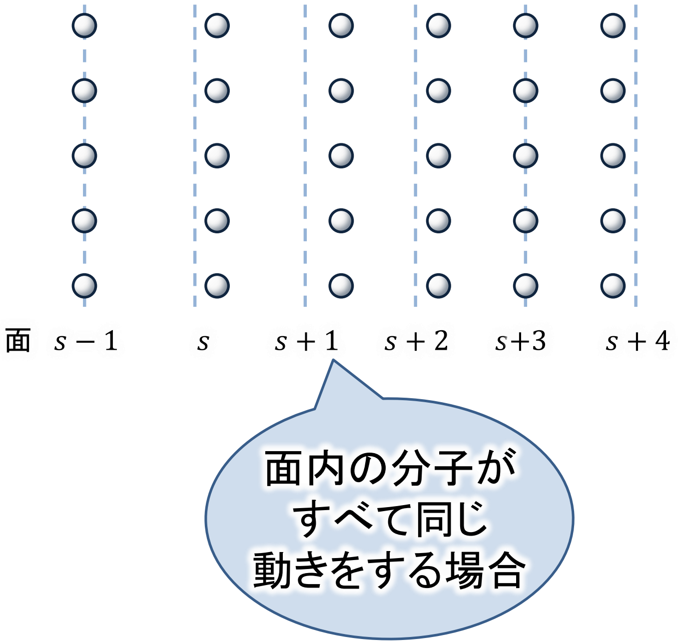
フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

結晶を面の集合と考える



参考：

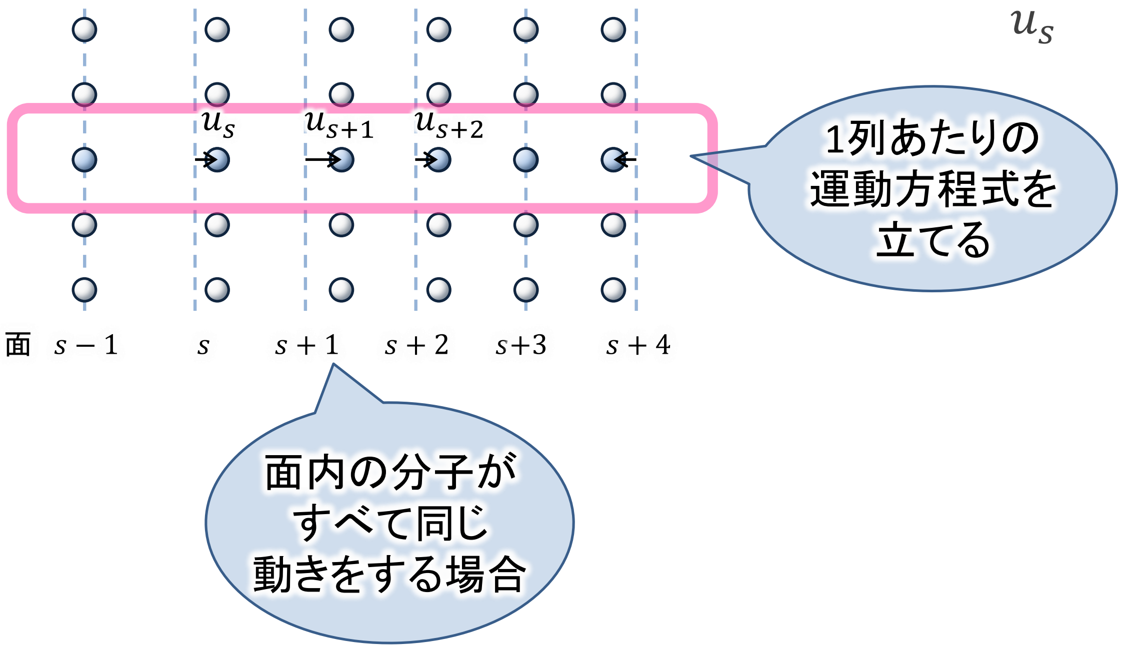
結晶を面の集合と考える



参考：

フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

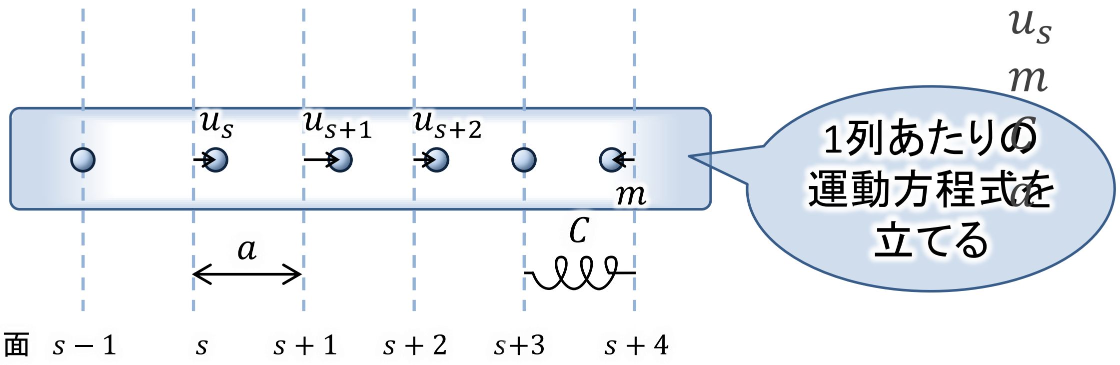
結晶面の変位（1列あたり）



u_s　：面sの変位

参考：

運動方程式



u_s : 面sの変位
m : 1分子の質量
C : 結合のばね定数
a : 格子定数

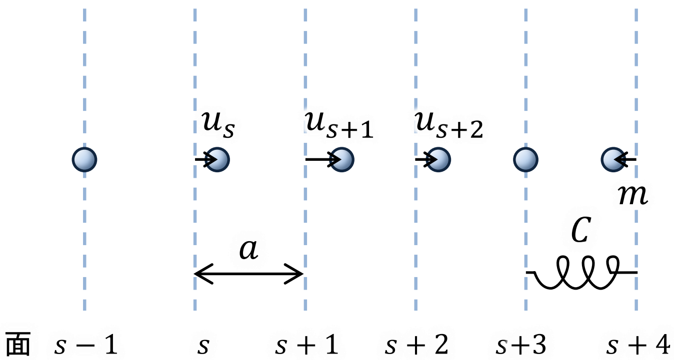
各面、1分子あたりの運動方程式

$$m\frac{d^2u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s)$$

参考:

フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

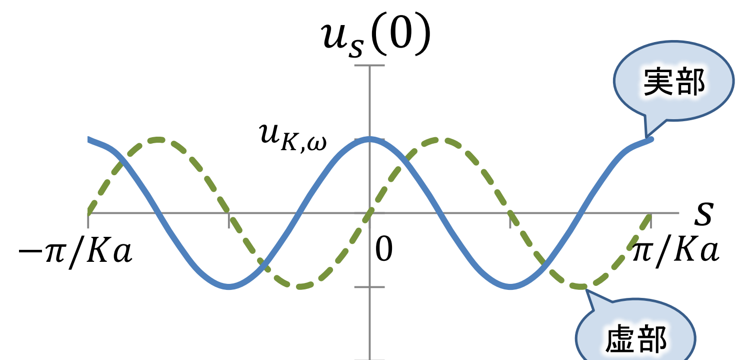
運動方程式の解



u_s	:面sの変位
m	:1分子の質量
C	:結合のばね定数
a	:格子定数
K	:波数
ω	:振動数

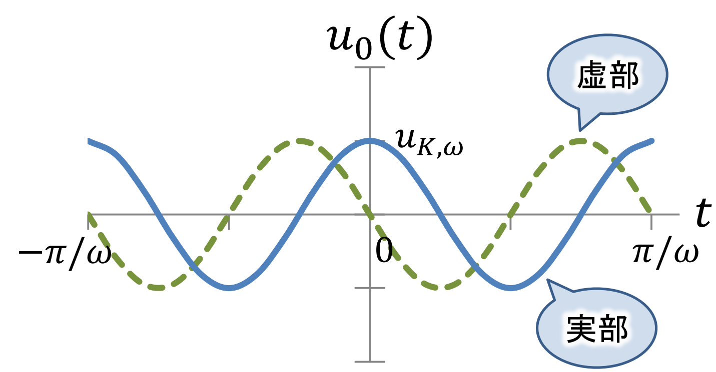
各面、1分子あたりの運動方程式

$$m\frac{d^2u_s}{dt^2} = C(u_{s+1}-u_s) + C(u_{s-1}-u_s)$$



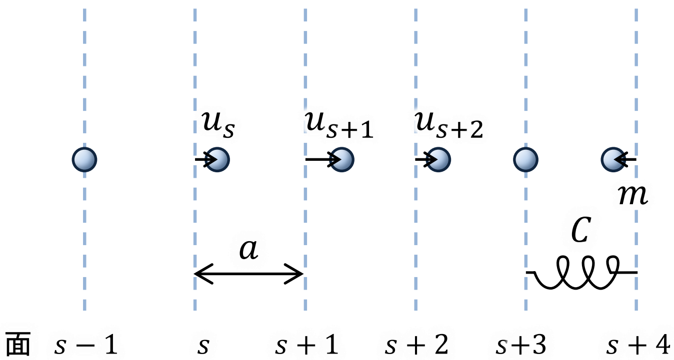
波数 K 、振動数 ω の解

$$u_s(t) = \underbrace{u_{K,\omega}\exp(iKsa)}_{\text{面}s\text{の振幅}}\,\underbrace{\exp(-i\omega t)}_{\text{時間変化}}$$



参考:
フォノン キッテル固体物理学第6版上p.87

運動方程式の解



u_s	: 面sの変位
m	: 1分子の質量
C	: 結合のばね定数
a	: 格子定数
K	: 波数
ω	: 振動数

各面、1分子あたりの運動方程式

$$m\frac{d^2u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s)$$

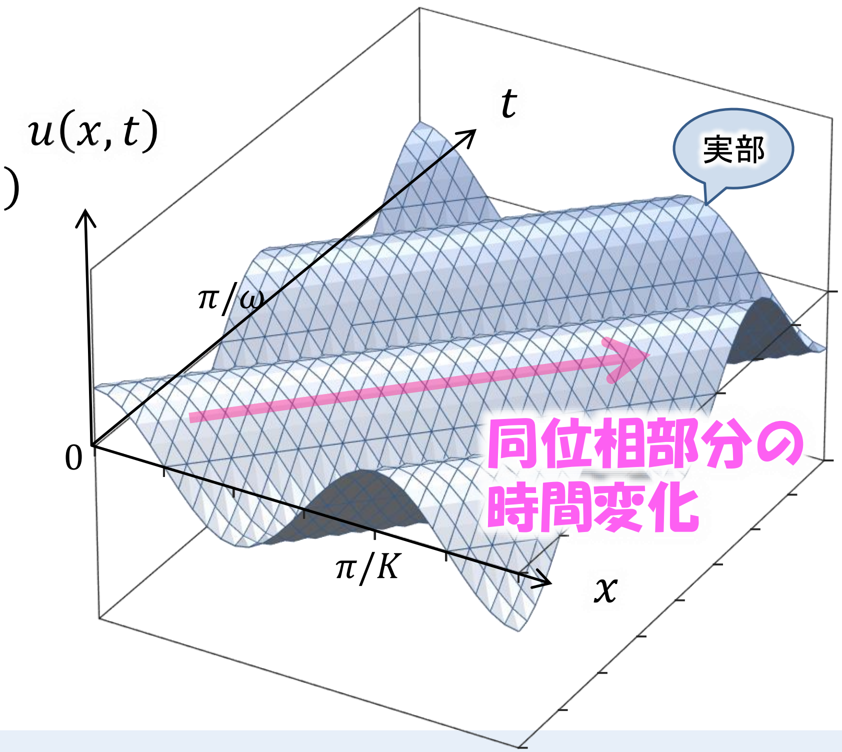
波数 K 、振動数 ω の解

$$u_s(t) = u_{K,\omega}\exp(iKsa)\exp(-i\omega t)$$

$x = sa$

$$= u_0\exp(i(Kx - \omega t))$$

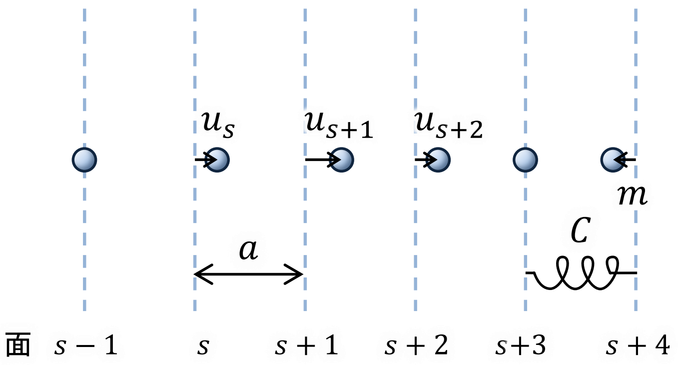
一定のとき同位相



参考:

フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

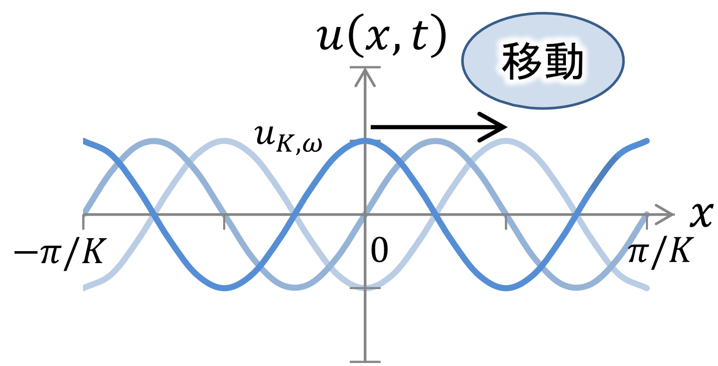
音速



u_s : 面sの変位
m : 1分子の質量
C : 結合のばね定数
a : 格子定数
K : 波数
ω : 振動数
v : 音速

各面、1分子あたりの運動方程式

$$m\frac{d^2u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s)$$



波数 K 、振動数 ω の解

$$u_s(t) = u_{K,\omega}\exp(iKsa)\exp(-i\omega t)$$

$x = sa$

$$= u_0\exp(i(Kx - \omega t))$$

一定のとき同位相

$\Rightarrow$

音速は

$$v = \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\omega}{K}$$

参考:

フォノン キッテル固体物理学第6版上p.87

音速

各面、1分子あたりの運動方程式

$$m\frac{d^2u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s)$$

u_s : 面sの変位
m : 1分子の質量
C : 結合のばね定数
a : 格子定数
K : 波数
ω : 振動数
v : 音速

波数 K 、振動数 ω の解

$$u_s(t) = u_{K,\omega}\exp(iKsa)\exp(-i\omega t)$$

$x = sa$

$$= u_0\exp(i(Kx - \omega t))$$

一定のとき同位相

$\Rightarrow$

音速は

$$v = \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\omega}{K}$$

参考：
フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

結晶面の振動モード

各面、1分子あたりの運動方程式

$$m\frac{d^2u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s)$$

代入

波数 K 、振動数 ω の解

$$u_s(t) = u_{K,\omega}\exp(iKsa)\exp(-i\omega t)$$

u_s	: 面sの変位
m	: 1分子の質量
C	: 結合のばね定数
a	: 格子定数
K	: 波数
ω	: 振動数
v	: 音速

参考:

フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

結晶面の振動モード

各面、1分子あたりの運動方程式

$$m\frac{d^2u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s)$$

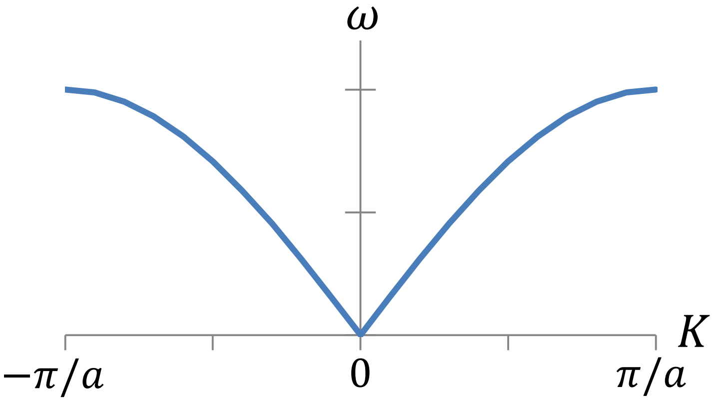
u_s	: 面sの変位
m	: 1分子の質量
C	: 結合のばね定数
a	: 格子定数
K	: 波数
ω	: 振動数
v	: 音速

波数 K 、振動数 ω の解

$$u_s(t) = u_{K,\omega}\exp(iKsa)\exp(-i\omega t)$$

結晶面の振動モード

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{m}}\left|\sin\left(\frac{1}{2}Ka\right)\right|$$



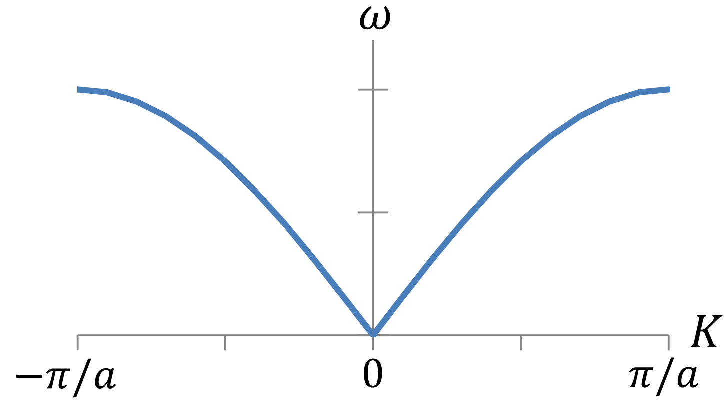
参考:

フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

結晶面の振動モード

結晶面の振動モード

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{m}}\left|\sin\left(\frac{1}{2}Ka\right)\right|$$



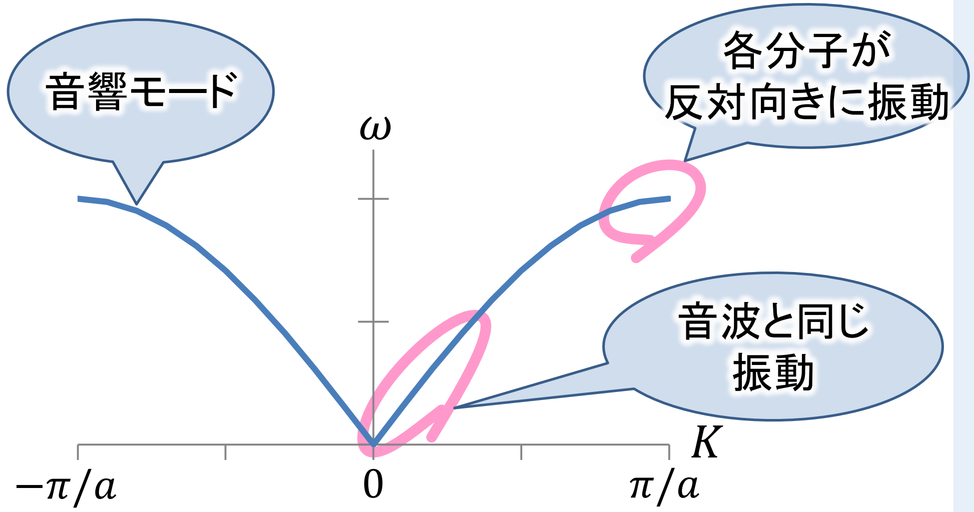
参考：

フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

結晶面の振動モード

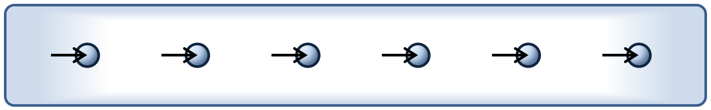
結晶面の振動モード

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{m}}\left|\sin\left(\frac{1}{2}Ka\right)\right|$$



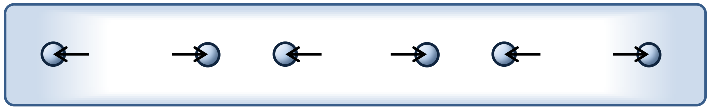
$K \to 0$ （長波長の変位）

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{C}{m}}Ka$$



$K \to \pi/a$ （各面が反対向きに振動）

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{4C}{m}}$$



参考：

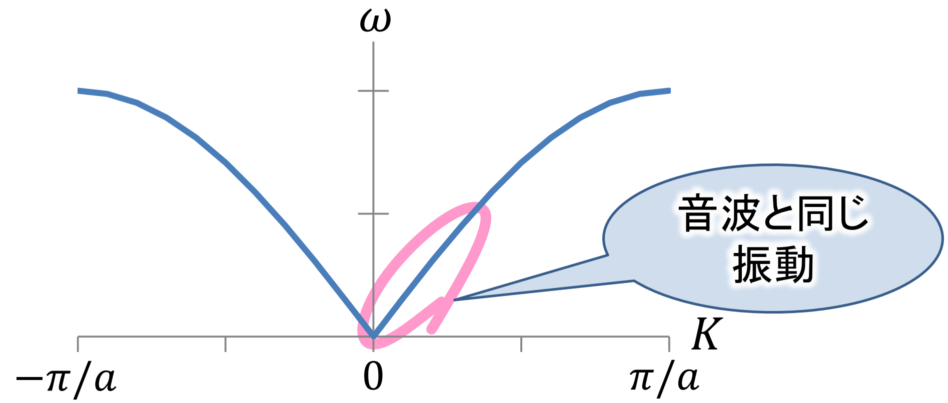
フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

長波長振動と音波

結晶面の振動モード

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{m}}\left|\sin\left(\frac{1}{2}Ka\right)\right|$$

$$= \frac{2v}{a}\left|\sin\left(\frac{1}{2}Ka\right)\right|$$



代入

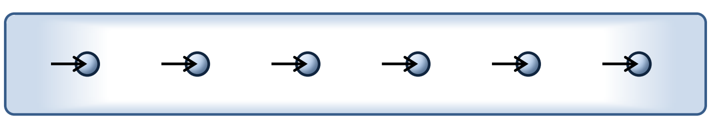
$K \to 0$ （長波長の変位）

長波長は音波と同じ

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{C}{m}}Ka$$

$$\simeq Kv$$

代入



$$v = \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\omega}{K}$$

$$= \sqrt{\frac{C}{m}}a$$

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{C}{m}} = \frac{v}{a}$$

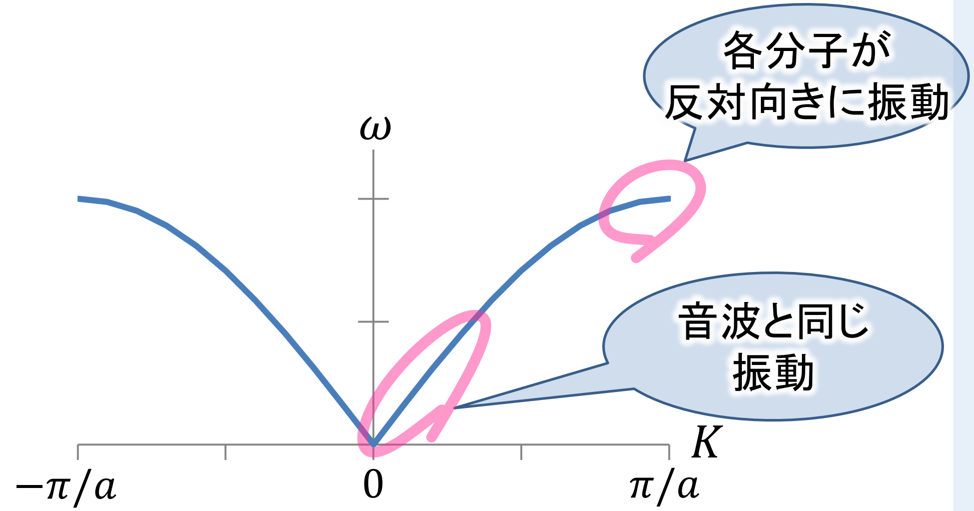
結合のばね定数Cは音速vで決められる！

参考：
フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

結晶分子の振動と音速

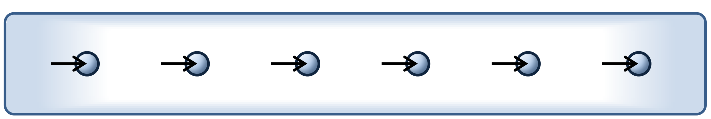
結晶面の振動モード

$$\omega = \frac{2v}{a}\left|\sin\left(\frac{1}{2}Ka\right)\right|$$



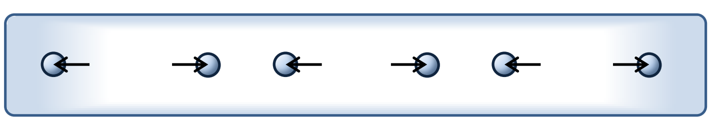
$K \to 0$ （長波長の変位）

$$\omega \simeq Kv$$



$K \to \pi/a$ （各面が反対向きに振動）

$$\omega \simeq \frac{2v}{a}$$



$$\sqrt{\frac{C}{m}} = \frac{v}{a}$$

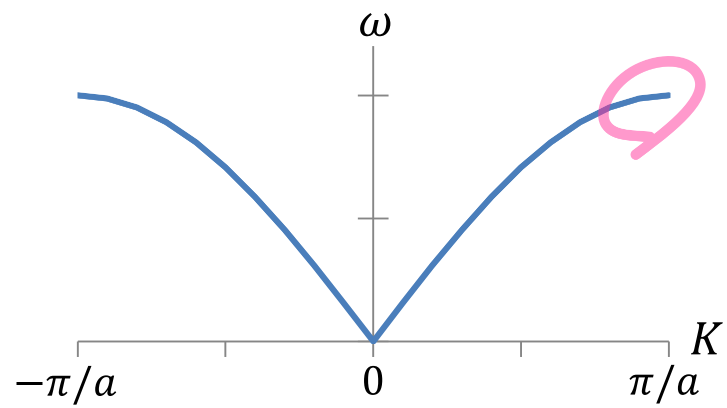
結合のばね定数Cは音速vで決められる！

参考：
フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

結晶分子の振動と音速

結晶面の振動モード

$$\omega = \frac{2v}{a}\left|\sin\left(\frac{1}{2}Ka\right)\right|$$



結晶の格子振動を
音速で示せた！

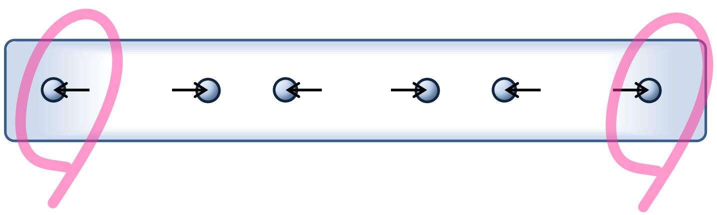
$K \to \pi/a$ （各面が反対向きに振動）

$$\omega \simeq \frac{2v}{a}$$

この式を使う

結晶から
飛び出す方向に
振動

最大振動数は
波数によらない



参考：

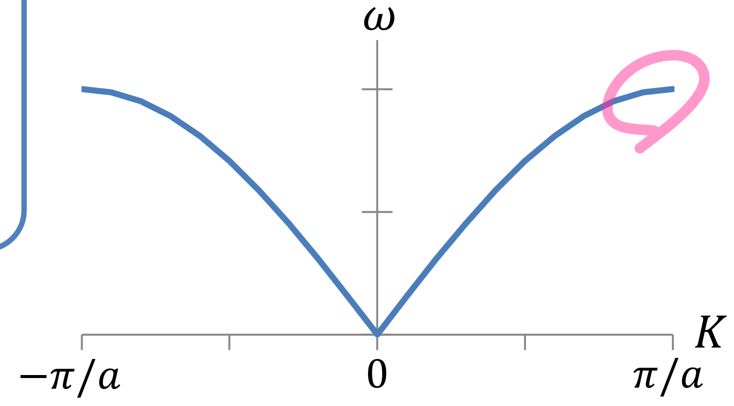
フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

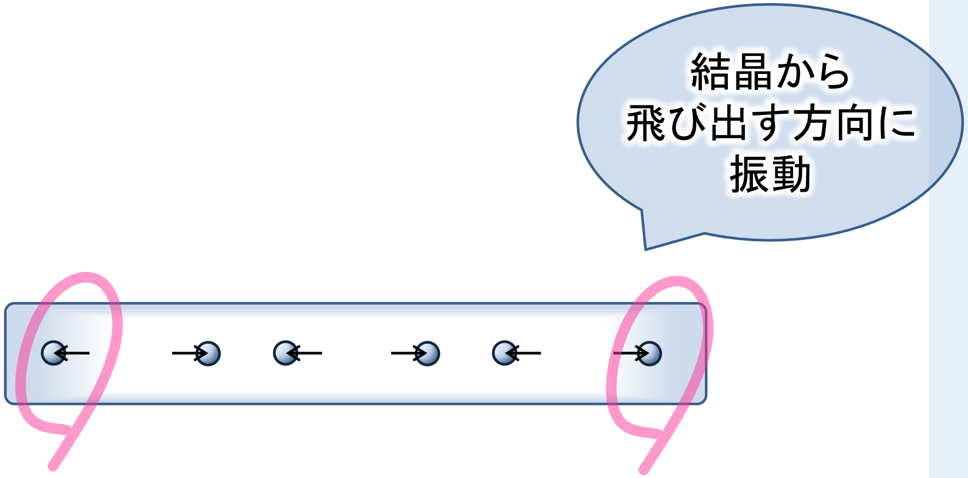
表面から飛び出す振動数

結晶から飛び出す振動数

$K \to \pi/a$

$$\omega = \frac{2v}{a}$$





参考:

フォノン　キッテル固体物理学第6版上p.87

氷から飛び出す振動数

結晶から飛び出す振動数

$K \to \pi/a$

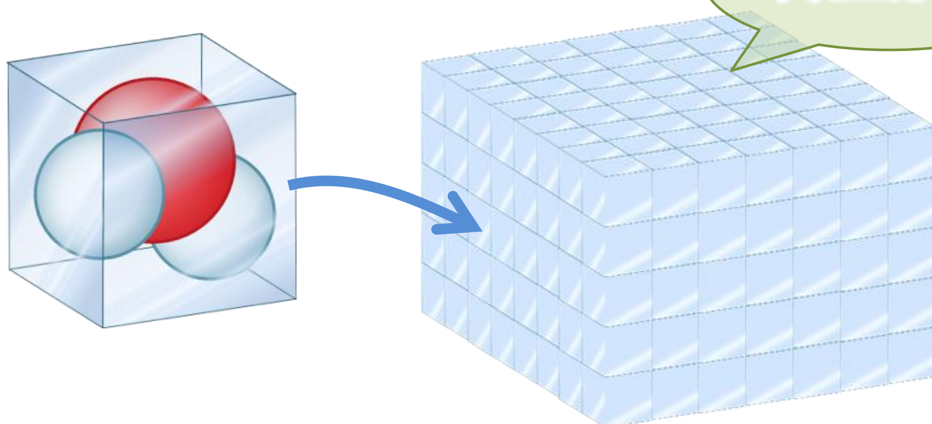
$$\omega = \frac{2v}{a}$$

a ：格子定数

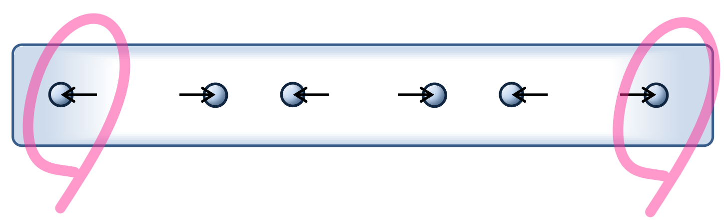
v ：音速

オーダー計算

単純立方格子



結晶から
飛び出す方向に
振動



計算

0℃氷の数密度

$$n = \rho N_A / M$$
$$= (916.2 \times 6.02 \times 10^{23})/(18.0 \times 10^{-3})$$

単純立方格子の場合、

$$a = n^{-1/3} = 3.20 \times 10^{-10} [\mathrm{m}]$$

参考：（参照日2019年08月29日）

氷の密度　The Engeenering ToolBox – Ice – Thermal Properties
アボガドロ定数　Wikipedia – アボガドロ定数
水のモル質量　モル質量 – Wikipedia

※このイラストは結晶構造が不正確

氷から飛び出す振動数

結晶から飛び出す振動数

$K \to \pi/a$

$$\omega = \frac{2v}{a}$$

氷のパラメータを代入

$$\omega = 2.02 \times 10^{13}[\mathrm{s}^{-1}]$$

氷(0℃)、単純立方格子を仮定

$$a \simeq 3.20 \times 10^{-10}[\mathrm{m}]$$
$$v = 3230[\mathrm{m/s}]$$

縦波の場合

計算

0℃氷の数密度

$$n = \rho N_A/M$$
$$= (916.2 \times 6.02 \times 10^{23})/(18.0 \times 10^{-3})$$

単純立方格子の場合、

$$a = n^{-1/3} = 3.20 \times 10^{-10}[\mathrm{m}]$$

参考:(参照日2019年08月29日)

氷の密度 The Engeenering ToolBox – Ice – Thermal Properties
アボガドロ定数 Wikipedia – アボガドロ定数
水のモル質量 モル質量 – Wikipedia
氷の音速 2019:固体中の音速 - 理科年表

水から飛び出す振動数

結晶から飛び出す振動数

$K \to \pi/a$

$$\omega = \frac{2v}{a}$$

氷のパラメータを代入

$$\omega = 2.02 \times 10^{13}[\mathrm{s}^{-1}]$$

水のパラメータを代入

$$\omega = 9.69 \times 10^{12}[\mathrm{s}^{-1}]$$

計算

30℃水の数密度

$$n = \rho N_A/M$$
$$= (995.65 \times 6.02 \times 10^{23})/(18.0 \times 10^{-3})$$

単純立方格子の場合、

$$a = n^{-1/3} = 3.11 \times 10^{-10}[\mathrm{m}]$$

氷(0℃)、単純立方格子を仮定

$$a \simeq 3.20 \times 10^{-10}[\mathrm{m}]$$
$$v = 3230[\mathrm{m/s}]$$

水(30℃)、単純立方格子を仮定

$$a \simeq 3.11 \times 10^{-10}[\mathrm{m}]$$
$$v = 1507[\mathrm{m/s}]$$

液体は音速が小さい

オーダー計算

単純立方格子

参考：(参照日2019年08月29日)

水の密度　The Engeenering ToolBox – Water – Density, Specific Weight and Thermal Expansion Coefficient
アボガドロ定数　Wikipedia – アボガドロ定数
水のモル質量　モル質量 – Wikipedia
水の音速　The Engeenering ToolBox – Speed of Sound in Water

表面から飛び出す振動数

結晶から飛び出す振動数

$K \to \pi/a$

$$\omega = \frac{2v}{a}$$

縦波の場合

各種、単純立方格子を仮定

a ：格子定数（桁のみ有効）

ω ：振動数　（桁のみ有効）

オーダー計算

温度　θ　[°C]	（氷）0	0	20	30	40
密度 ρ[kg/m^3]	916.2	999.84	998.21	995.65	992.22
格子定数 a [m]	3.20E-10	3.10E-10	3.11E-10	3.11E-10	3.11E-10
音速　v　[m/s]	3230	1403	1481	1507	1526
振動数　ω[s^{-1}]	2.02E+13	9.04E+12	9.54E+12	9.70E+12	9.81E+12

計算

数密度

$n = \rho N_A / M$

$= (n \times 6.02 \times 10^{23})/(18.0 \times 10^{-3})$

単純立方格子

$a = n^{-1/3}$

格子振動から求めた
分子の飛び出す回数

参考：（参照日2019年08月29日）

水の密度　The Engeenering ToolBox – Water – Density, Specific Weight and Thermal Expansion Coefficient

水の密度　理科年表プレミアム – 水の密度(液相だけの単相)

アボガドロ定数　Wikipedia – アボガドロ定数

水のモル質量　モル質量 – Wikipedia

水の音速　The Engeenering ToolBox – Speed of Sound in Water

表面から飛び出す振動数

結晶から飛び出す振動数

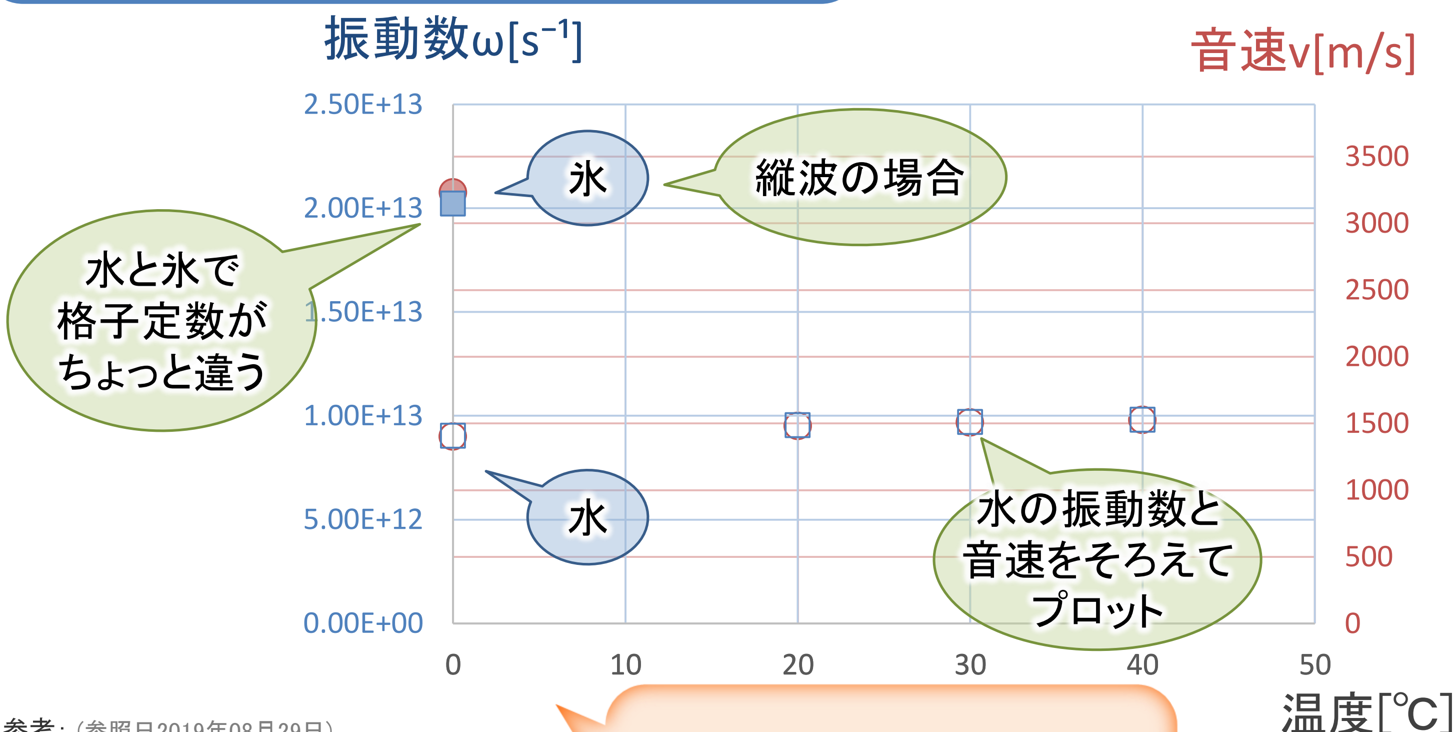
$K \to \pi / a$

$$\omega = \frac{2v}{a}$$

各種、単純立方格子を仮定

a ：格子定数（桁のみ有効）

ω ：振動数　（桁のみ有効）



氷の振動数は

水の約2倍

参考：（参照日2019年08月29日）

水の密度　The Engeenering ToolBox – Water – Density, Sp

水の密度　理科年表プレミアム – 水の密度(液相だけの単相

アボガドロ定数　Wikipedia – アボガドロ定数

水のモル質量　モル質量 – Wikipedia

水の音速　The Engeenering ToolBox – Speed of Sound in W

目次へ