Subject
Date

۹۸,۷,۶

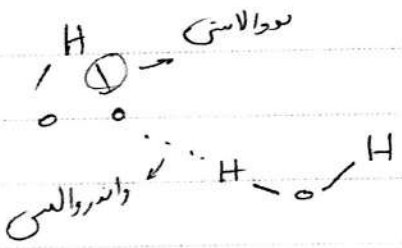
property → خواص
compound → ترکیب
اغلب یون ← فلز + نافلز

bond → پیوند
overlap → منطبق
alloy → آلیاژ

$\underset{+}{N}H_4\underset{-}{Cl}$ → مثلاً استثنا

homework : چرا وقتی انرژی sp^3 بیشتر از sp^2 است پایدارتره؟ (پایداری الماس و گرافیت)

۹۸,۷,۱۳ Dipole → دوقطبی
Induced → القایی
H_2 ← متقارنه و دوقطبی نیست



دوقطبی‌ها
- القایی
- دائمی ← $\overset{\delta^+}{H}F - \overset{\delta^-}{H_2O}$

دوقطبی
- القایی - القایی
- القایی - دائمی
- دائمی - دائمی

→ واندروالس ضعیف

Subject
Date

دوقطبی دائمی ـ القایی :

$\underbrace{H-Cl}_{\text{دوقطبی دائمی}} + (\text{اتم}) \rightarrow$ القایی

دوقطبی دائمی ـ دائمی :

(پیوند هیدروژنی بین H و O و N و F) بین دو تا مولکول ← قوی‌ترین واندروالس و نوعی دوقطبی ـ دوقطبی محسوب می‌شه.

H:F:

۹۸/۷/۲۰

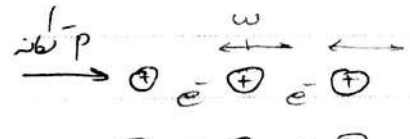
ارتعاشات بلوری (ارتعاش اتم‌ها در شبکه‌ی بلور)

دینامیک بلور : در یک بلور به صورت توزیع منظم از اتم‌های سالن ← این فرض نمی‌تواند کاملاً صحیح باشه بلورشناسی

(اصل عدم قطعیت) حتی در دمای صفر مطلق اتم‌های بلور حول مکان‌های تعادل خود ارتعاش دارند.

ماهیت حرکت‌های اتمی (ارتعاش‌های شبکه) :

ارتعاشات کم دامنه شبکه : تقریب بورن ـ اپن‌هایمر (اوپنهایمر) (هدف : ساده‌سازی مدل)
حرکت الکترون و هسته در یک مولکول جداشدنی است. در یک مولکول یعنی در شبکه بلوری جایگاه یون‌ها را ثابت فرض می‌کنیم و الکترون‌ها اجازه حرکت دارند.



ω = فرکانس ω برحسب k (عدد موج) ← رابطه پاشندگی

P4PCO

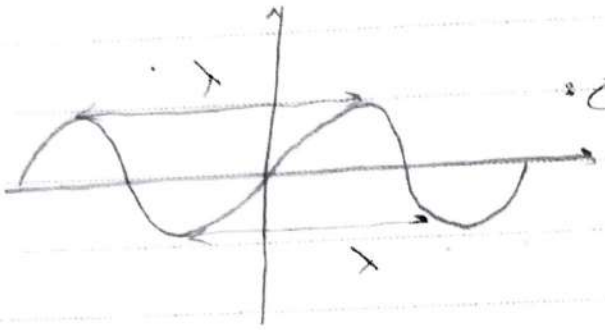
Subject
Date

فرکانس ← تعداد ارتعاشات در ثانیه -

$$f = \frac{1}{t}$$

$$f = \frac{c}{\lambda}$$ ← سرعت موج / ← طول موج

طول موج :



عدد موج : تعداد موج‌های موجود در واحد طول $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

ارتعاشات شبکه در بلورهای یک بعدی :

حالت ۱ ← زنجیر ابعدی از اتم‌های یکسان (حالت تک اتمی) :

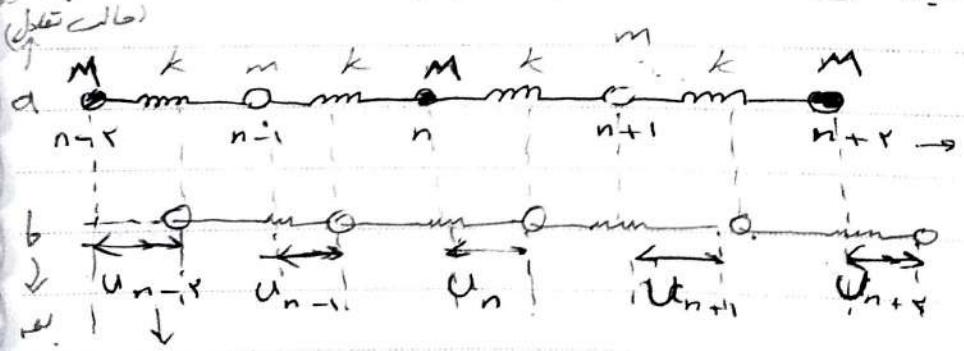
فرض ۱) حرکت اتم‌ها موازی با زنجیر

فرض ۲) از طریق پتانسیل بین اتمی برهم‌کنش دارند.

فرض ۳) فقط نزدیک‌ترین اتم‌ها به هم تاثیر می‌گذارند.

فرض ۴) اتم‌ها هم‌جنس هستند.

فرض ۵) فاصله‌ی بین اتمی a است (ثابت شبکه)



شکل ۲-۶

PAPCO

Subject
Date

نیروی وارد بر اتم n ام :

① $k(u_n - u_{n-1})$ ← نیروی با فنر سمت چپ

② $k(u_{n+1} - u_n)$ ← نیرو با فنر سمت راست

قانون دوم نیوتون : $F = ma = k\Delta x$

$$\Rightarrow \underbrace{M\ddot{u}}_{\text{جرم}} = \underbrace{k}_{\text{ثابت فنر}} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \quad *$$

برای حل معادلات * جواب موج پونده‌ای را در آن تمام اتم‌ها با دامنه یکسان A نوسان می‌کنند؟ می آزماییم:

برای اتم $x = n$

$$u_n = A \exp[i(kna - wt)] \quad **$$

شکل کلی تابع موج مانند ψ به صورت زیر است :

$$\psi(x,t) = A \sin(kx - wt) = A \cos(kx - wt) = A \exp[i(kx - wt)]$$

تابع احتمال $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ مزدوج تابع

$$\ddot{u} \text{ در } * \text{ و } ** \text{ جایگزین} : \quad -w^2 M A e^{i[kna - wt]}$$

$$= kA\left[e^{i(k(n+1)a - wt)} - 2e^{i(kna - wt)} + e^{i(k(n-1)a - wt)}\right]$$