حالت جامد

۱۳۹۲/۱/۲۷

درحالت کوانتومی

$$\begin{cases} \langle U \rangle = \frac{3}{2}\hbar\omega \; : \; (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \\ \langle U \rangle = \frac{1}{2} M\omega^2 \langle u^2 \rangle \end{cases} \qquad \langle u^2 \rangle = \frac{3\hbar\omega}{M\omega^2} = \frac{3\hbar}{M\omega}$$

$$I = I_0 \, e^{-\frac{\hbar G^2}{M\omega^2}}$$: با افزایش ω ضریب شدت زیاد می‌شود.

مثال) $M = 10^{-22}\,kg \qquad \omega = 10^{14}\,s^{-1} \qquad G = 10^{9}\,cm^{-1} \qquad \frac{I}{I_0} = 0.9$

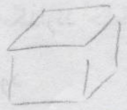
۹۰٪ نوسان در سیستم بلور توسط نوسان کشسان انجام می‌شود و ۱۰٪ آن ناشی از نوسان غیر کشسان است.

دما ← نوسان اتم: نوسان مغزه یونی / نوسان الکترون آخر

مثال: بازتاب‌های نوری ممکن حاصل از پراش پرتوی ایکس با طول موج $1.5\,\mathring{A}$ از صفحات (hkl) را برای یک ساختمان مکعبی ساده با ثابت شبکه $3\mathring{A}$ به دست آورید؟

$\lambda = 1.5\mathring{A} \qquad a = 3\mathring{A} \qquad d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$2d\sin\theta = \lambda \rightarrow \sin\theta = \frac{\lambda}{2d} = \frac{\lambda}{\frac{2a}{\sqrt{k^2+h^2+l^2}}} = \frac{\lambda}{2a} Q^{1/2} \qquad Q = h^2+k^2+l^2$



$\sin\theta = \frac{1.5}{6}\sqrt{Q} = \frac{\sqrt{Q}}{4}$

صفحه	Q	$\sin\theta$	2θ
1 0 0	1	$\frac{1}{4}$	29°
1 1 0	2	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	41.4°
1 1 1	3	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	51.3°
2 0 0	4	$\frac{1}{2}$	60°

تمرین منزل - در یک آزمایش پراش با پرتوی x با طول موج $1.54\mathring{A}$ به دست آمده‌اند. اگر ساختمان مکعبی باشد نوع آن را به دست آورید و ثابت شبکه را حساب کنید.

θ: 20.1 29.2 36.6
43.6 50.2 57.4

فصل ۳: بستگی بلور

انرژی بستگی بلور = همدوسی

انرژی کل یک بلور از انرژی اتم‌های آن در حالت آزاد کمتر است چون بلورها در شرایط محیط پایدارترند.

نیروی هسته‌ای مربوط به نوترون و پروتون هستند

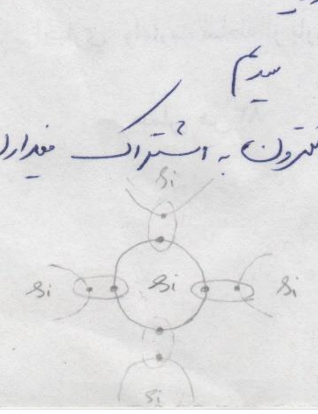
نیروها از دو حالت الکترومغناطیس و الکترواستاتیک پیروی می‌کنند و عمدتاً استاتیک هستند.

بلورها شامل چه نوع پیوندهایی هستند؟

1. پیوند واندروالس: ضعیف و فقط برای بلورهای گازهای بی اثر مشاهده شده‌اند.
سرد کردن و فشار خیلی بالا
2. پیوند یونی: بین یک اتم فلزی و یک غیر فلز به وجود میاد. NaCl
3. پیوند فلزی: پیوند بین اتم‌های یک فلز. سدیم
4. پیوند کووالانس: پیوند بین اتم‌هایی هستند که با هم الکترون به اشتراک می‌گذارند.
نیمه رساناها: سیلیکان

تفاوت بین خواص ماده حاصل از اختلاف در توزیع خارجی‌ترین الکترون‌ها و مغزه‌های یونی سرچشمه می‌گیرد.

انرژی شبکه: انرژی است که باید به بلور افزود تا یون‌های سازنده‌ی آن در حال سکون به فاصله‌ی نامتناهی از هم دور شوند.



۱۳۹۲،۱،۲۸

بلورهای گازهای بی اثر : ساختار fcc

علت این که اتم ها تشکیل بلور می دهند چیست؟ باید پیوندی میان اتم ها باشد به صورت جاذبه که اتم ها میل به تشکیل بلور دهند.

انرژی بلور کمتر از انرژی اتم های آزاد همان اتم ها است.

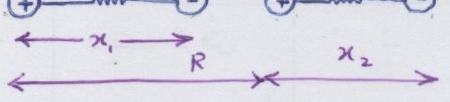
- ساده ترین نوع بلورها هستند. آخرین مدار آن ها از الکترون پر هستند.

- انرژی یونش بسیار بالاست. - نقطه ی ذوب آن ها بسیار پایین است.

برای به دست آوردن علت پیوند بین اتم های گازهای بی اثر چندین نظریه ارائه شده که مهم ترین آن ها نظریه ی واندروالس - لوندن می باشد که به شرح زیر است: یک اتم گازی اثر دارای گشتاور دوقطبی نیست. اگر حلقه باشند پتانسیل هسته + و پتانسیل اطراف آن - ولذا پتانسیل کل صفر خواهد بود. پس به دلیل این که بارهای یک اتم گازی اثر حلقه نیست می توان یک اتم را شبیه فنر در نظر گرفت.

دارای گشتاور دوقطبی

دو فنر



دارای هامیلتونی غیر اختلالی :

$$H_0 = \underbrace{\frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m}}_{\text{انرژی جنبشی اول}} + \underbrace{\frac{1}{2}Cx_1^2 + \frac{1}{2}Cx_2^2}_{\text{پتانسیل اول}}$$

هامیلتون اختلال ناشی از برهم کنش کولنی (الکترون و هسته ی تک) می باشد.

$$H_1 = \overset{\text{دافعه}}{\frac{e^2}{R}} - \overset{\text{جاذبه}}{\frac{e^2}{(R+x_2)}} - \overset{\text{جاذبه}}{\frac{e^2}{(R-x_1)}} + \overset{\text{دافعه}}{\frac{e^2}{R+x_2-x_1}} \qquad \frac{1}{4\pi\varepsilon} = 1$$

۲ تا مثبت — مثبت منفی — مثبت منفی — ۲ تا منفی

$$\begin{cases} \dfrac{-e^2}{R+x_2} = -\dfrac{e^2}{R(1+\frac{x_2}{R})} = -\dfrac{e^2}{R}\left(1-\dfrac{x_2}{R} - \underbrace{\dfrac{-1(-1-1)}{2}}_{\frac{n(n-1)}{2!}}\left(\dfrac{x_2}{R}\right)^2\right) \\ \dfrac{-e^2}{R-x_1} = -\dfrac{e^2}{R(1-\frac{x_1}{R})} = -\dfrac{e^2}{R}\left(1+\dfrac{x_1}{R}+\dfrac{-1(-1-1)}{2}\left(\dfrac{-x_1}{R}\right)^2+\cdots\right) \\ \dfrac{+e^2}{R+x_2-x_1} = \dfrac{e^2}{R+(1+\frac{x_2-x_1}{R})} = \dfrac{e^2}{R}\left[1-\dfrac{x_2-x_1}{R} - 1\dfrac{(-1-1)}{2}\left(\dfrac{x_2-x_1}{R}\right)^2\right] \end{cases}$$

$$H_1 = \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R}\left(1-\cancel{\frac{x_2}{R}}+\left(\frac{x_2}{R}\right)^2\right) - \frac{e^2}{R}\left(1+\cancel{\frac{x_1}{R}}+\left(\frac{x_1}{R}\right)^2\right) + \frac{e^2}{R}\left(1-\cancel{\frac{x_2-x_1}{R}}+\left(\frac{x_2-x_1}{R}\right)^2\right)$$

$$= \frac{-e^2}{R}\left[\left(\frac{x_1}{R}\right)^2+\left(\frac{x_2}{R}\right)^2-\left(\frac{x_2-x_1}{R}\right)^2\right] = \frac{-e^2}{R^3}\left[\cancel{\cdots} + 2x_1x_2\right] = \frac{-2e^2}{R^3}x_1x_2$$

$$H = H_0 + H_1 = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{1}{2}Cx_1^2 + \frac{1}{2}Cx_2^2 - 2\frac{e^2}{R^3}x_1x_2 \qquad (\mathrm{I})$$

دستگاه مورد نظر را به دستگاهی که مد طبیعی سیستم را می دهد تبدیل می کنیم؟ (مدهای متقارن) (مدهای پادمتقارن) (گذارنده گشتاور)

$$\begin{cases} x_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1+x_2) \rightarrow x_1+x_2 = \sqrt{2}x_s \\ x_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-x_2) \rightarrow x_1-x_2 = \sqrt{2}x_a \end{cases}$$

$$2x_1 = \sqrt{2}(x_s+x_a) \qquad 2x_2 = \sqrt{2}(x_s-x_a)$$

$$\xrightarrow{\text{جرم} \times \text{مشتق}} \begin{cases} P_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_s+P_a) \\ P_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_s-P_a) \end{cases}$$

ثابت فنر

$$H = \frac{1}{4m}(P_s+P_a)^2 + \frac{1}{4m}(P_s-P_a)^2 + \frac{1}{4}C(x_a+x_s)^2 + \frac{1}{4}C(x_s-x_a)^2 - \frac{2e^2}{R^3}\left[\frac{1}{2}(x_s+x_a)(x_s-x_a)\right]$$

$$(P_s+P_a)^2 + (P_s-P_a)^2 = P_s^2 + P_a^2 + 2P_sP_a + P_s^2 + P_a^2 - 2P_sP_a = 2(P_s^2+P_a^2).$$

$$(x_a+x_s)^2 + (x_s-x_a)^2 = x_a^2 + x_s^2 + 2x_ax_s + x_s^2 + x_a^2 - 2x_sx_a = 2(x_s^2+x_a^2).$$

$$(x_s+x_a)(x_s-x_a) = x_s^2 - x_ax_s + x_ax_s + x_a^2 = x_s^2 - x_a^2.$$

$$H = \frac{P_s^2}{2m} + \frac{P_a^2}{2m} + \frac{1}{2}Cx_s^2 + \frac{1}{2}Cx_a^2 - \frac{e^2}{R^3}(x_s^2 - x_a^2)$$

$$= \frac{P_s^2}{2m} + \frac{P_a^2}{2m} + \left(\frac{C}{2} - \frac{e^2}{R^3}\right)x_s^2 + \left(\frac{C}{2} + \frac{e^2}{R^3}\right)x_a^2. \quad (\mathrm{II})$$

مقایسه I و II : II بهنجار شده دیاگونال طوری که می‌بینیم جمله‌ی $x_s x_a$ حذف شده.

جمله‌ی $\frac{1}{2} C_s x_s^2$ را می‌خواهیم بسازیم که $C_s = m\omega_s^2$ است.

$$C_s = C - \frac{2e^2}{R^3} = C\left(1 - \frac{2e^2}{CR^3}\right) = m\omega_s^2 \qquad \omega_s^2 = \frac{C}{m}\left(1 - \frac{2e^2}{CR^3}\right) = \omega_0^2\left(1 - \frac{2e^2}{CR^3}\right) \rightarrow \omega_s = \omega_0\left(1 - \frac{2e^2}{CR^3}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_a = C + \frac{2e^2}{R^3} = m\omega_a^2 \qquad \omega_a^2 = \frac{C}{m}\left(1 + \frac{2e^2}{CR^3}\right) = \omega_0^2\left(1 - \frac{2e^2}{CR^3}\right) \rightarrow \omega_a = \omega_0(\dots)^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_s = \omega_0\left[1 - \frac{1}{2}\frac{2e^2}{CR^3} + \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)}{2}\left(\frac{-2e^2}{CR^3}\right)^2 + \dots\right] = \omega_0\left[1 - \frac{e^2}{CR^3} - \frac{1}{8}\left(\frac{-2e^2}{CR^3}\right)^2 + \dots\right].$$

$$\omega_a = \omega_0\left[1 + \frac{1}{2}\frac{2e^2}{CR^3} + \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)}{2}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2 + \dots\right] = \omega_0\left[1 + \frac{e^2}{CR^3} - \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2 + \dots\right]$$

$$\underset{\Delta U}{\Delta \nu} = \frac{1}{2}\hbar\Delta\omega = \frac{1}{2}\hbar(\Delta\omega_s + \Delta\omega_a) \qquad \begin{cases} \Delta\omega_s = \omega_s - \omega_0 \\ \Delta\omega_a = \omega_a - \omega_0 \end{cases}$$

$$\Delta U = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\left[-\frac{e^2}{CR^3} - \frac{1}{8}\left(\frac{-2e^2}{CR^3}\right)^2 + \frac{e^2}{CR^3} - \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2\right] = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\left[-\frac{1}{4}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2\right] = -\frac{\hbar\omega_0}{8}\frac{4e^4}{C^2R^6} = -\frac{A}{R^6}$$

$$A = \frac{\hbar\omega_0 e^4}{2C^2}$$

$$\Delta U = -\frac{A}{R^6}$$

1. نیروی بین دو اتم جاذبه است.
2. با توان ۶ به طور معکوس رابطه دارد.
3. این رابطه صد در صد کوانتومی است.

دافعه پیوندهای بلور گاز بی اثر:

نیروی دافعه باید وجود داشته باشد چون دو اتم به هم نزدیک‌تر و نزدیک‌تر می‌روند و در فاصله‌ی معینی به نام ثابت شبکه از هم قرار می‌گیرند. این فاصله جایی است که نیروی جاذبه با نیروی دافعه اثر هم را خنثی می‌کند.

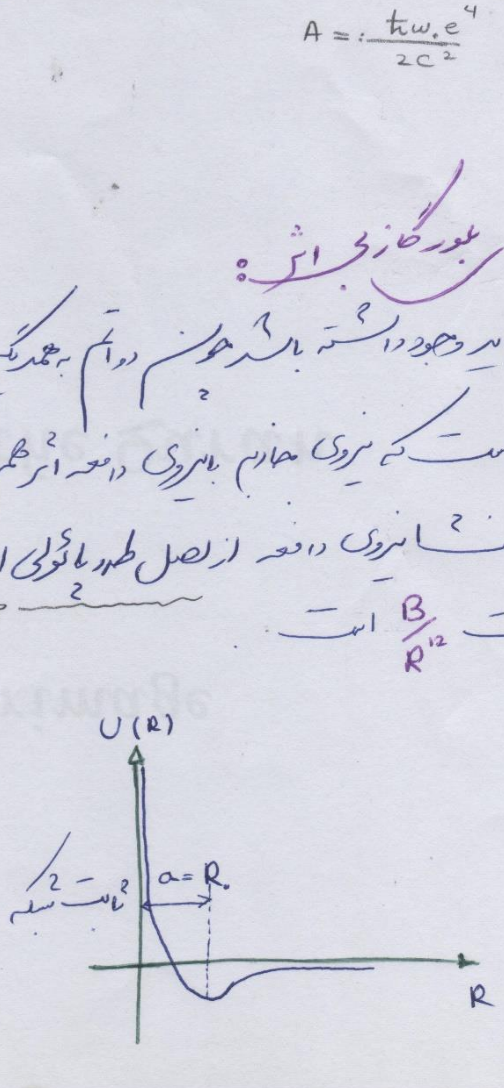
علت دریافت نیروی دافعه از اصل طرد پائولی است و این نیرو به نظر ضعیف‌تر از نیروی جاذبه است و در این کتاب بدون اثبات $\frac{B}{R^{12}}$ است.

همپوشانی اتم‌ها ← افزایش انرژی کل دستگاه

پتانسیل بلور گاز بی اثر : $U = \frac{B}{R^{12}} - \frac{A}{R^6}$ پتانسیل لنارد-جونز

$$A = 4\epsilon\sigma^6, \quad B = 4\epsilon\sigma^{12}$$

$$U(R) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6\right] \qquad \frac{dU}{dR} = 0$$



$$\left.\frac{dU}{dR}\right|_{R=R_0} = 4\epsilon\left[12\frac{\sigma^{12}}{R^{13}} - 6\frac{\sigma^{6}}{R^{7}}\right]\Bigg|_{R=R_0} = 0 \qquad \frac{2\sigma^6}{R^6} = 1 \rightarrow \boxed{R_0 = \left(\frac{1}{2\sigma^6}\right)^{\frac{1}{6}}}$$

سه و ۲ مقادیری هستند که با توجه به نوع شبکه داده می‌شن fcc و bcc.

$$\boxed{1392, 2, 3}$$

بلورهای گازهای بی‌اثر پیوندشان توسط پتانسیل لنارد جونز $U = \frac{B}{R^{12}} - \frac{A}{R^6}$ داده می‌شود.

بلورهای یونی :

نکات عمده در خصوص بلورهای یونی عبارتند از :

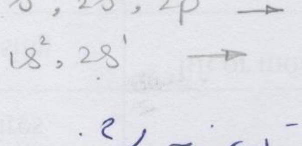
1. بلورهای یونی معمولاً دارای ساختارهای fcc یا sc هستند (مکعبی مرکز وجهی یا مکعبی ساده).
2. پیکربندی الکترون های یونی در بلورهای یونی بسیار مشابه گازهای بی‌اثر می‌باشد به طور مثال: LiF

وقتی یون های بلور یونی را نگاه می‌کنیم مثل گازهای بی اثر هستن

$F: 1s^2, 2s^2, 2p^5 \rightarrow F^-: 1s^2, 2s^2, 2p^6$

$Li: 1s^2, 2s^1 \rightarrow Li^+: 1s^2$

3. توزیع الکترون ها در گازهای بی اثر تقارن کروی دارد و توزیع الکترون ها در یون های بلورهای یونی دارای تا حدودی تقارن کروی است اما وقتی نزدیک می‌شوند فاصله دو یون از حالت تقارن خارج می‌شوند.



در محدوده ای رنگ از تقارن کروی خارج هستن

4. مطالعه دقیق انرژی های دافعش بلورهای یونی است ; بلور NaCl

این انرژی صرف شده

$Na + 5.1\,eV \rightarrow Na^+ + e^-$

$e^- + Cl \rightarrow Cl^- + 3.6\,eV$

$Na^+ + Cl^- \rightsquigarrow NaCl + \underbrace{7.9\,eV}_{\text{انرژی چسبندگی}}$

بدست میاد

$7.9 + 3.6 - 5.1 = 6.4\,eV$

این واکنش انرژی زا است به همین خاطر این واکنش رخ می‌دهد.

نوع پیوند بلورهای یونی :

بخش دافعه پتانسیل لنارد جونز $\left(\frac{B}{R^{12}}\right)$ می‌تواند بخش دافعه‌ی بلورهای یونی یعنی پیوند یونی (سدیم کلرید) یا لیتیم فلوئورید را توضیح دهد. اما می‌توان پتانسیل دافعه‌ی مناسب‌تری هم به دست آورد.

بخش جاذبه‌ی پتانسیل لنارد جونز $\left(-\frac{A}{R^6}\right)$ فقط ۲ تا ۳ درصد پیوند جاذبه‌ی بلورهای یونی را نشان می‌دهد.

بدین ترتیب پتانسیلی برای پیوند بلورهای یونی توسط مادلونگ به صورت زیر ارائه شد :

ثابت‌های مربوط به جفت یون

$$U = \lambda e^{-r/\rho} \pm \frac{q^2}{r} \quad ;\ CGS\ (4\pi\epsilon_0)$$

در پتانسیل مادلونگ جمله‌ی دافعه $\lambda e^{-r/\rho}$ عبارت بهتری از $\frac{B}{R^{12}}$ است زیرا طبق نکته‌ی سوم توزیع الکترون ها اطراف یون ها تقارن کامل کروی ندارند. در فواصل دور از مرز مشترک تا حدودی کروی اند ولی در مرز مشترک از حالت کروی خارج هستن ولذا انتخاب تابع نمایی مناسب‌تر است.

بخش جاذبه‌ی پتانسیل مادلونگ $\pm\frac{q^2}{r}$ برهم‌کنش های کولنی را به صورت مستقیم وارد می‌کنیم در حالی که این جمله در پتانسیل لنارد جونز به صورت جمله‌ی احتمالی وارد شد.

پتانسیل برای یون i ام : $U_i = \sum_j U_{ij}$ $\qquad U_{ij} = \lambda e^{-r_{ij}/\rho} \pm \frac{q^2}{r_{ij}}$

$$U_i = \sum_j{}' \left(\lambda e^{-\frac{r_{ij}}{\rho}} \pm \frac{q^2}{r_{ij}} \right) \qquad U_{tot} = \underbrace{N}_{\text{}} U_i = N \sum_j{}' \left(\lambda e^{-\frac{r_{ij}}{\rho}} \pm \frac{q^2}{r_{ij}} \right)$$

هر زوج برهم کنش یکبار محاسبه شده

برای سهولت بیشتر $r_{ij} = P_{ij} R$

عدد

فاصله‌ی یون‌ها تا همسایه‌ی اول در بلور

$$U_T = N \sum_j{}' \left(\lambda e^{-\frac{P_{ij} R}{\rho}} \pm \frac{q^2}{P_{ij} R} \right)$$

اگر z تعداد همسایه‌های یون در سلول واحد باشد.

ثابت مادلونگ

$$\alpha = \sum{}' \frac{\mp}{P_{ij}} \qquad U_T = N \left(\underbrace{z}_{\text{تعداد همسایه‌های اول یون}} \lambda e^{-R/\rho} - \alpha \frac{q^2}{R} \right)$$

در حالت تعادل (تراز صفری)

$$\left. \frac{dU_t}{dR} \right|_{R=R_\circ} = 0 \quad :$$ در فاصله تعادلی

$$-\frac{N z \lambda}{\rho} e^{-\frac{R_\circ}{\rho}} + N\alpha \frac{q^2}{R_\circ^2} = 0 \quad ; \quad \frac{z\lambda}{\rho} e^{-R_\circ/\rho} = \frac{\alpha q^2}{R_\circ^2}$$

$$z \lambda e^{-R_\circ/\rho} = \rho \frac{\alpha q^2}{R_\circ^2} \quad \longrightarrow R_\circ$$ فاصله تعادلی

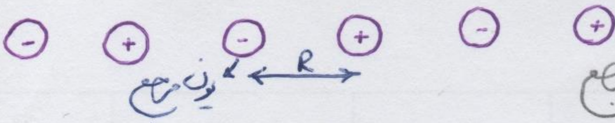
$$U_T = N \left(z \lambda e^{-R_\circ/\rho} - \alpha \frac{q^2}{R_\circ} \right) \qquad U_T(R_\circ) = N \left(\frac{\rho \alpha q^2}{R_\circ^2} - \alpha \frac{q^2}{R_\circ} \right)$$

$$U_T = \alpha \frac{q^2 N}{R_\circ} \left(\frac{\rho}{R_\circ} - 1 \right) \qquad \boxed{U_T(R_\circ) = -\underbrace{\frac{\alpha N q^2}{R_\circ}}_{\text{انرژی مادلونگ}} \left(1 - \frac{\rho}{R_\circ} \right)}$$

$0.1 R_\circ$

پتانسیل مادلونگ

محاسبه‌ی ثابت مادلونگ: برای این کار اگر به صورت بلور یونی خطی در نظر بگیریم می‌توان محاسبه ساده‌ای ارائه کرد ولی برای حالت ۳ بعدی در بلور fcc با مشکل همراه است.



فاصله یون j ام از یون مرجع

$$\alpha = \sum{}' \frac{\mp}{P_{ij}} \longrightarrow \frac{\alpha}{R} = \sum_j{}' \frac{\mp}{P_{ij} R} = \sum_j{}' \frac{\mp}{r_j}$$

$$\frac{\alpha}{R} = 2\left(\frac{1}{R} - \frac{1}{2R} + \frac{1}{3R} - \frac{1}{4R} + \cdots\right)$$

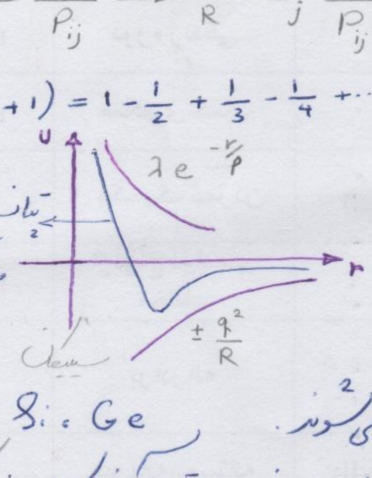
سمت چپ هست

$$\ln(1+1) = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \cdots$$

* به علت اصل طرد پائولی منحنی از $\infty+$ شروع شده به $\infty-$

یون ها در واقعه اسون زیاد شده ولی نزدیک هم.

$$\frac{\alpha}{R} = \frac{2}{R} \ln(1+1) \rightarrow \boxed{\alpha = 2\ln 2}$$



خلاصه:

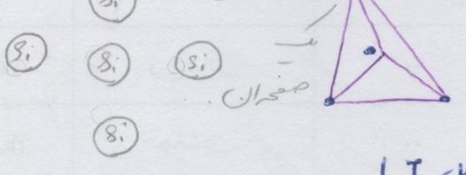
بلورهای گازهای آرگن: $U = \frac{B}{R^{12}} - \frac{A}{R^6}$ پتانسیل لنارد جونز

بلورهای یونی: $U = \lambda e^{-r/\rho} \pm \frac{q^2}{r}$ پتانسیل مادلونگ

بلورهای کووالانت: منظور بلورهایی است که عناصر ستون چهارم جدول تناوبی را شامل می‌شوند. C ، Si ، Ge

کربن (الماس)

در آخرین مدار هرکدام ۴ الکترون دارند و برای کامل شدن لوسته نیاز به ٤ الکترون دیگر دارند. چون لوسته‌ی آخر کامل نیست پس جزء گازهای بی‌اثر محسوب نمی‌شوند و چون چهار الکترون در لوسته‌ی آخر دارند میل به دادن و یا گرفتن الکترون ندارند به عبارتی یونی نمی‌شوند. لذا با چهار اتم همسایه‌ی خود از هرکدام یک الکترون به صورت مشارکتی در اختیار دارند.

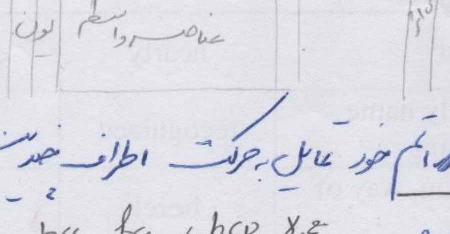


اتم مرجع با چهار اتم همسایه خود در یک صفحه نیستند!

سنگی هیدروژن مولکولی نمونه ای از پیوند کووالانسی است. قوی‌ترین سنگی: پیوند پادوالر

پیوند بین اتم های کووالانت نسبتا پیچیده‌تر از گازهای بی‌اثر و یونی است لذا ادامه در فصل ۲!

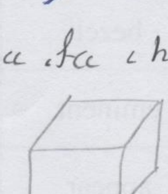
بلورهای فلزی:



هر اتم در لوسته‌ی آخر خود تعدادی الکترون دارد که این اتم و الکترون های آن عامل به حرکتشان حول اتم خود عامل به حرکت اطراف چندین اتم دورتر را دارند و لذا به طور کلی در بلورهای فلزی، الکترون های آزاد زیادی به چشم می‌خورد. bcc ، fcc ، hcp مثلاً

تحلیل انرژی پیوند فلزی: فصل ۶

شعاع اتم:



ناشی از مولکول NaF: شعاع مولکول آزاد: $1.86 + 0.72 = 2.58\ A^\circ$

NaF

شعاع اتم آزاد $1.86\ A^\circ$

شعاع اتم آزاد $0.72\ A^\circ$

بلور: مشاهده شده $\boxed{2.32\ A^\circ}$

$0.26\ A^\circ$

تا ۸۵۴ کتاب و ۹۴۴ pdf به بعد درس نداده. ۱۰۸۴

1392,2,11

فصل چهارم: ارتعاش های بلوری

ارتعاش های شبکه (فونون I) موج کشسان

در جلسات قبل بحث های زیر انجام شده: فصل ۱: ساختار های بلوری فصل دوم: شبکه وارون فصل ۳: انرژی های پیوندی

ارتعاش شبکه ی تک اتمی:

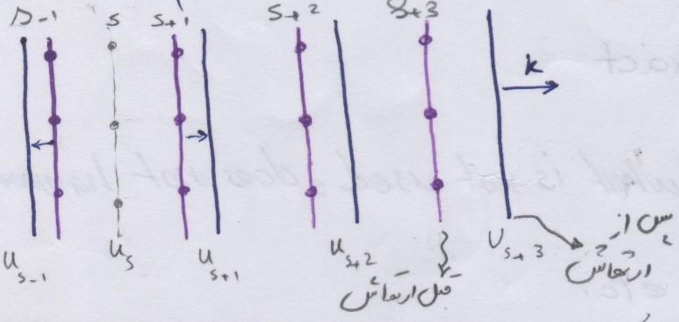
در هر بلوری می دانیم که اتم ها در یک آرایه ی منظم قرار دارند صرف نظر از این که ساختارشان طبق فصل اول کدام است؟!

اگر در این آرایه ی منظم ارتعاش کشسان ایجاد شود

این ارتعاش داخل بلور شروع به حرکت می کند و امواجی می سازد که

این امواج می توانند طولی یا عرضی باشند.

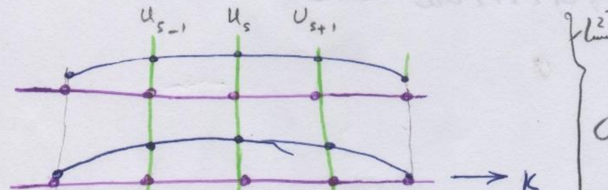
حرکت بلور داستان خودش رو داره و با بودن ارتعاش ارتباطی ندارد.



جهت ارتعاش در راستای انتشار: طولی

برای محاسبات ریاضی در نظر می گیریم بلور یک بعدی باشد

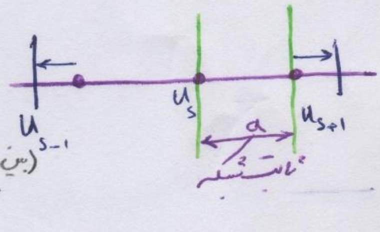
و نزدیک ترین همسایه را در نظر می گیریم.



با توجه به این که ارتعاش ها کشسان هستند مدل نوسانگر هماهنگ را می توان

نزدیک ترین همسایه ۲ تا در یک بعد

۴ تا در ۲ بعد



C_p : ثابت فنر (بین صفحه اتم ها) همسایه

U_s : مکان اتم

نیرو وارد از U_{s-1} به U_s : $F_{s-1} = -C_p \underbrace{(U_s - U_{s-1})}_{\text{جابه جایی}}$

نیروی وارد از U_{s+1} به U_s : $F_{s+1} = -C_p (u_s - u_{s+1})$

نیروی کل وارد بر U_s : $F_s = -C_p (u_s - u_{s-1}) - C_p (u_s - u_{s+1})$: نیروی وارد از طرف همسایه ها

اگر تمام اتم های بلور در نظر گرفته شوند: $\boxed{F_s = \sum_p C_p (U_{s+p} - U_s)}$

if: $F_{s+1} = 0$ ارتعاش نداریم $u_s = u_{s+1}$

$F_{s+1} > 0$ ارتعاش داریم $u_{s+1} > U_s$

$F_{s+1} < 0$ ارتعاش داریم $u_{s+1} < U_s$

اگر جابه جایی نسبت به خطوط سبز به وجود بیاید ارتعاش داریم

اگر p مثبت باشد سمت راست و

اگر p منفی باشد سمت چپ رو می بینیم.