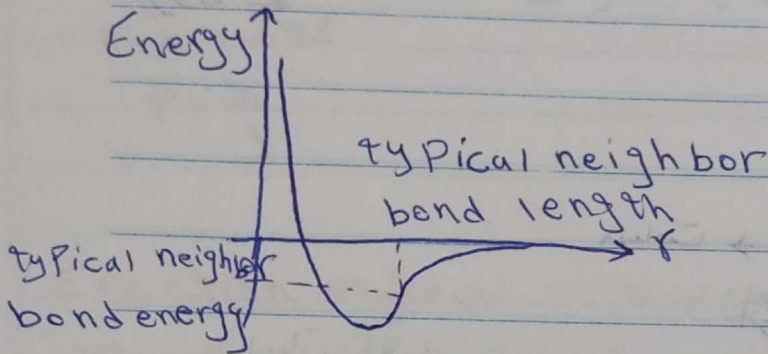


ارتباط انرژی و پیوستگی

اتم‌ها دوست دارند کنار هم باشند تا انرژی کمتری بشود
 و اتم‌ها سعی می‌کنند بیشترین تعداد پیوند را داشته باشند



پیوندهای غیر جهت دار

یونی

فلزی

دایو لال

اتم‌ها مشتاق هستند بیشترین تعداد پیوند را بدهند که خود
 اتم بخواد تشکیل بده علاقه داره که حجم هگزائونال بگیره

پولو نیم ۵۰ اختیار میکنی دانه و رفتار هگزائونال می‌دهد

$$APF = \frac{\frac{4}{3}\pi (0.5a)^3}{a^3}$$
 حجم اتم
 برششش

مورد اول الاستیک در راستای ۱۰۰ به چه شکلی هست

هگزائونال ۱۲۰° ← HCP (FCC CCP)

$APF(FCC) = 0.74$
 $APF(BCC) = 0.68$

FCC

BCC

$APF(FCC) = APF(HCP)$ SINACO

قوانین حاکم بر الکترون ها ←

$$E_s = \frac{-2\pi^2 m e^4}{n^2 h^2} = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

انرژی الکترون ←

E مجموع انرژی جنبشی و پتانسیل یک الکترون است

$$n\lambda = 2\pi r$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Electron state →

حرکت زاویه ای الکترون → l عدد اقل

m_l → ناهمبندی بردار حرکت زاویه ای الکترون

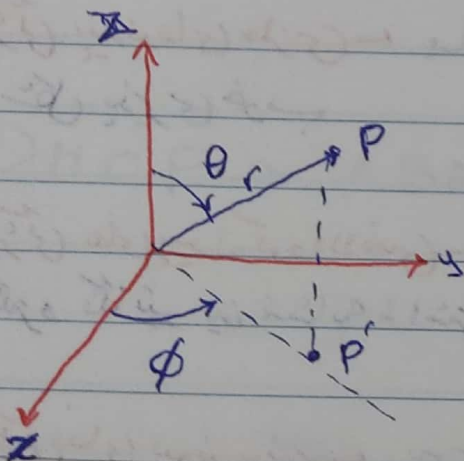
m_s → چرخش

$$\Delta p_n \Delta n \geq \frac{h}{2\pi}$$

اقل عدم قطعیت هایزنبرگ ←

Δn ← عدم قطعیت در موقعیت / Δp ← عدم قطعیت در حرکت

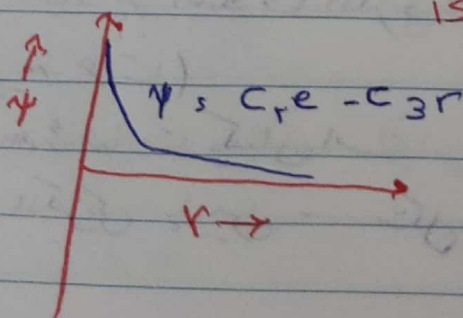
معادله شرودینگر ←



$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

$$\psi = R(r) \Phi(\phi) \Theta(\theta)$$

حل تابع ψ برای الکترون هییدروژن 1s



اتم یا الکترون تمایل به اشغال کمترین حالت انرژی را دارند.

نکته: آرایش الکترونی بیشتر عناصر تا یا بدست است

الکترون تکانشی ← $\frac{1}{2}(I + A)$ ۸.۵

تمایل یونیزاسیون، انرژی کیری تمایل → I
اتم بولس ترک یک الکترون

تمایل الکترون، انرژی کیری توانایی اتم در جذب یک الکترون
الکترون افتاده

چهار نوع پیوند مهم در مهندسی داریم ←

(1) پیوند فلزی (2) پیوند کووالانسی (3) پیوند یونی (4) پیوند واندر والس

نکته: ۱۱۸ اتم عنصر شناخته شده ۸۲ عنصر فلزی است

ویژگی پیوندهای فلزی ← با جهت غیر جهت دارد. رسانایی خوب الکتریکی و حرارتی
- شکل پذیری خوب

ویژگی های پیوند کووالانسی ← با جهت جهت دارد. رسانایی الکتریکی - عدم شکل پذیری
الکترون تکانشی به مشابه - اشتراک الکترون ها

ویژگی های پیوند یونی ← بین یون های مثبت و منفی اتفاق می افتد - نیاز به اشغال
الکترون دارد - نیاز به افتلا فی الکترون تکانشی به بالادارد (NaCl)
(عدم وابستگی به جهت) $CaF_2 - CsCl - MgO$

استفاده در همه جهات یکسان است

رسانایی الکتریکی پایین - شکل پذیری پایین

پیوندهای ثانویه شامل پیوندهای واندر والس و هیدروژنی هستند
 پیوندهای شیمیایی نسبتاً ضعیف، نیروهای بین دو یا چند مولکول، یون یا اتم هستند
 نیروهای بین مولکولی باعث جذب یا دفع مولکول با نسبت به هم می شوند
 اغلب این پیوندها مشخصه های فیزیکی مواد (مانند نقطه ذوب) اما تعیین کننده
 در این پیوندها انتقال و اشتراک الکترون وجود ندارد

انتخاب کلاسی استاد

$$HCP \rightarrow AB$$

آهن در فشار بالا ساختار HCP دارد (می گویند آهن مرکز زین اینگونه است)

مشکل اصلی ساختارهای HCP این است که نمی توان آن را تغییر
 شکل داد مگر برای همین باید شکل کرد که آهن HCP نیست و می توان
 آن را حالت و تغییر شکل داد

داخل ساختار HCP یا BCC مشکلی یا نقی شاید در درشت
 داشت باشد

$$DHCP \rightarrow ABAC \dots$$

وقتی دو لایه روی هم قرار می گیرند فضاها خالی ایجاد می شود

الکترا ۸ وجهی $\frac{a}{\sqrt{2}}$
 فضای ۴ وجهی $\frac{a\sqrt{2}}{2\sqrt{2}}$

ممانعت است که می توان قرار داد بدون اینکه مشکلی پیش بیاید

مثال
 حد اکثر ضلع ایچی
 که می توان قرار داد
 $R = 0.225$

به اتم‌های هر اتم ما دو فضای ترا هندرال داریم و به فضای هر اتم فضای
اوکتاهدرال داریم

به اتم‌های هر یون Σ ترا فضا داریم

به اتم‌های هر unit cell - HCP ما دو ترا اوکتاهدرال داریم

و FCC به اتم‌های هر unit cell ۸ ترا اوکتاهدرال داریم

اگر پیوندها غیر جهت دار باشند ساختار pack هست HCP - FCC است و اگر
چون هم انرژی صفا فیزی دلد ۴ ساختار HCP خارج شده است

غالباً ترکیب فیزی که غیر جهت دارند ساختار HCP یا pack دارند

کتاب یاد سون - جدول ۴

اکسیرنی که ترا هندرال بریدج می گذر نصف می‌شود

۵ جانسون با پیکرینک هم

۴

به یون NaCl فضاهای اوکتاهدرال‌ها پر شده است

تقریب $NiAs \rightarrow$

به اوکتاهدرال FCC Σ فضای اوکتاهدرال داریم
به اوکتاهدرال HCP Δ فضای اوکتاهدرال داریم

کریستال ← جامدی با ترتیب دوده ای اتم، یون یا مولکول است

امیزال ← ماده جامد معدنی طبیعی است که دارای ساختار بلوری است

الکس ← ماده ای طبیعی که نادر است می تواند بلوری یا آمورف آبی یا غیر آبی باشد

$$APF = \frac{\text{حجم اتم در واحد سلول}}{\text{حجم سلول واحد}}$$

$$f = \frac{n A}{N_C N_A}$$

تعداد یونیت سل ← حجم یک اتم
 وزن اتمی ← حجم اتم در واحد سلول
 عدد آووگادرو ← $N_C N_A$
 حجم واحد سلول

نکته پیوند بدون جهت برای مثال فلزات منجر به بسته بندی نزدیک می شود

نکته اگر لایه ای از اتم ها روی مثلث روی بالا باشند قلم C دارد و اگر روی مثلث روی به پایین باشند قلم B دارد (تمام نسبت به)

f_{CCS} $a = 2\sqrt{2}R$ $N = 4$ $APF = 0.74$

فضای اکتاهدرال داریم / فضای تتراهدرال داریم
 مثلث داوود مثلث با نقطه

BCC $a = \frac{4}{\sqrt{3}}R$ $N = 2$ $APF = 0.68$

فضای اکتاهدرال داریم / فضای تتراهدرال داریم

قوانین با توانگ برای ترکیبات یونی ←

اول ← قانون نسبت شعاع

دوم ← اعلی ظرفیت پذیری الکترو استاتیک

سوم ← به اشتراک گذاری چند وجهی (I)

چهارم ← به اشتراک گذاری چند وجهی (II)

پنجم ← قاعده نقطه

نسبت شعاع ها ← یون موجود در ساختار بلوری تمایل دارد تا آنجا که اندازه آن اجازه می دهد یون های دارای بار مخالف در اطراف خود جمع کند

نسبت اندازه چند وجهی هماهنگی را تعیین می کند

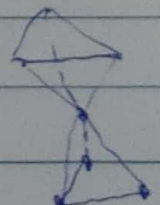
شعاع یونها با شماره های هماهنگی متقارن می تغییر می کند

ظرفیت پذیری الکترو استاتیک ← در یک ساختار کریستالی بایدار مقاومت

کل پیوندها از هماهنگی حاصل می شود یونها می که به یون مرکزی می رسند برابر با بار یون مرکزی است

به اشتراک گذاری چند وجهی I ← ثبات یک کریستال هنگامی که چند وجهی ها صورت و لبه ها را به اشتراک می گذارند کاهش می یابد

به اشتراک گذاری گوشه های چند وجهی ثابت ترین تنظیمات است



Year _____ Month _____ Day _____

اشتراک آذایی چند وجهی در یک کریستال حادس کاتیون های مختلف کاتیون های که از ظرفیت بالایی برخوردارند و تعداد همپوشانی کمی دارند تمایل دارند که چند وعده برای همپوشانی خود را به اشتراک بگذارند.

کاتیون های بسیار شارژ تمایل دارند تا آنجا که ممکن است فاصله داشته باشند تا دافعه الکترو استاتیکی را به حداقل برسانند.

قاعدگی نقطه تعداد انواع مختلف چند وجهی در یک کریستال کم است

تعداد مکان های کریستالوگرافی محدود است زیرا انواع چند وجهی که می تواند در کنار هم قرار بگیرند ضمن حفظ تقارن بلور محدود هستند (چون بلور باید متقارن باشد پس هر شکلی نمی تواند با هم بگیرد)

نکته در یون NaCl تمام مکان های octahedral توسط کاتیون ها پر شده اند

نکته در یون NiAs که به فرم HCP است و $\text{CN} = 4$ یون As در منشور مثلثی قرار دارد و Ni در فضاهای octahedral نشسته است

نکته در یون Li_2O به فرم FCC می باشد که یون Li^+ در فضاهای tetrahedral نشسته که هر O^{2-} به 4 یون Li^+ متصل و هر Li^+ به 4 یون متصل است که CN متفاوت است در هر دایره کردن آنها ترکیب را بدست می آورد

نکته تمام حفره های چهار وجهی در HCP نمی تواند پر شوند زیرا نزدیکی کاتیون ها این اجازه را نمی دهد همچنین در ساختار FCC نیز ممکن نیست که تمام فضاهای octa و tetra پر شوند زیرا به همان علت بالا نزدیکی کاتیون با آنیون موجود در آن ساختار اجازه اینکار را نمی دهد

Date:

NOTEBOOK

Year _____ Month _____ Day _____

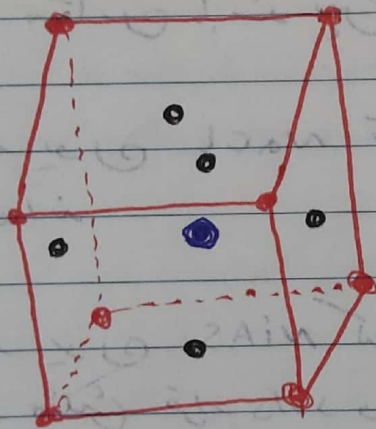
نکته: wurzites Zinc Blende دو حالت مختلف ZnS هستند که در دو فرم FCC و HCP (آرایش یونی در فرم بی باشد) می باشد

محققان جایگاه اتم ها در فرم های اتمی هم می باشد

نکته: در یون Al_2O_3 و پلا فضا های octahedral با کاتیون Al^{3+} پر شده اند در این یون ساختار HCP می باشد

نکته: Pervoskite (cation) یون سراسری است که موقع اتم ها به شکل زیر است

Red: Ca^{2+}
Blue: Ti^{4+}
black: O^{2-}



$Co O^{2-}$ (2 with Ti^{4+}) (2 with Ca^{2+})

$Co Ca^{2+} = 12$

$Co Ti^{4+} = 4$

سیلیکات ها - الیاس (کاتی) - گرافیت - گرافن و فولرانس (انگلی) (کاتی)

سیلیکات ها - موادی بر پایه Si و O به فرم (SiO_2)

سیلیکات ها در ترکیب یک، دو سه بعدی با ترکیب چهار، قطبی ها تشکیل می شوند

نکته: سیلیس (سیلیس ذوب شده) نیز با ترکیب (SiO_2) در تراهیدرا ساخت می شود اما به روشی نامنظم است

نکته: آرایش در سلیکات ها با نسبت ۵ به ۱۵ مسطحی می شود که به صورت دو بعدی و تئوری با ۵ به ۱۵ باشند

مولکول های غول پیکر کوالانسی ← موادی با پیوند کوالانسی بسیار زیاد

معمولاً در دمای محیط جامد هستند. (همیشه)

- میلیون ها پیوند کوالانسی قوی دارند

- آنها همیشه دارای نقطه ذوب و جوش بالایی هستند

مولکول های کوالانسی کوچک مانند $N \equiv N$ - $O = O$ - $H - H$

دارای نقطه ذوب و جوش کم هستند که به این دلیل است که آنها نیروهای بین مولکولی بسیار ضعیفی دارند

اختار الیاس SiO_2 ← علت ایجاد این ساختار و صفاتهای Tetrahedral و سه بعدی آن به علت ترکیب sp^3 در آن است

گرافیت ← ساختار لایه ای دارد که در هر لایه بین اتم ها پیوند کوالانسی هست ولی بین لایه ها نیروی لندن که به راحتی لایه ها روی هم می لغزند

گرافیت در نوع HCP (هگزاگونال) و Rhombohedral (ریمبوهدرال) است که ساختار HCP آن مد تفرع باست و در فرآیندی باید گرافیت به طور کامل به شکل HCP در بیاد که گرافیت باید اتم هرم HCP در دمای بالا ۱۴۰۰° اتفاق می افتد

گرافن ← به هر لایه در گرافن، گرافن گویند که مقاومت بالا و هدایت الکتریکی بالا دارد

فولرین ← Buckminsterfullerene یونانی به معنی شکر است از سری مولکولهای کربن توخالی است که یا یک قفس بدست یا یک استوانه (نانو لوله کربنی) تشکیل می دهد که پیوندها کاملاً کووالانسی است

خطاهای انباشتی ← ردیفی از اتم ها به خاطر ملا حظات انرژی به صورت ~~مستقیم~~ مستقیم و نه روی قله اتمی جای نمی شود بلکه انتقال با عبور از فضا های خالی بین اتمی به صورت نزدیک حرکت می کند تا در موقعیت کناری خود قرار گیرد عبور صفحه نمایش یک دفعه داریم که مشتاق به پر شدن هستند که صفحه جایا شده و ثانجایی منجر به ایجاد صفحه جدیدی می شود که نقص در انباشتی است

در چور نقص است ← صفحه جدیدی ایجاد شود - صفحه ای بر داشته شود

نکته در کریستال های که ما معرفی می کنیم می تواند دارای نقص های صفحه ای باشد

تعیین ساختار برای مثال fcc به hcp ← مکانیزم آن با حرکت هالفتک آن جایابی انجام می شود هر نقص که یک به سیون بین لایه ها قرار می گیرد

نکته و Twin ها به جای بسیار هم هستند مخصوصاً در ساختار fcc به hcp که تبدیل کامل نیست که در سمتی خود ساختار fcc هست و در سمت دیگر با ساختار آئینهای که همون فاز قبلی است اما این ساختار در چرخش تفاوت داند که اگر از صفحه $[111]$ ببینیم این ساختار آئینهای با جایابی های جزئی ایجاد می شوند

تاریخ ساختار و کلا کریستالوگرافی ← مقادیر کلیه در ۱۹۱۱ در باره دانده برف و گذشت اولین اثر تجربی و تحلیل ساختار بلور عیاست

نکته: اولین گزارش از کریستال تقاشی های فوق است

اولین قانون کریستالوگرافی ← ثابت بودن زاویه بین سطوح خارجی بلوری هر کریستال

نقدهای هالده Haüy در کریستالوگرافی ← اولین شخصی که فهمید که می توان بلور ها را با کنار هم قرار دادن مکعب های متوازی السطوح ساخت

نکته: سپس Haüy به این نتیجه رسید که γ شکل پایه در ایجاد کریستال ها وجود دارد که همه اینها γ وجهی متوازی السطوح هستند و γ شکل یونیت سل در فضای سه بعدی بیشتر نداریم که با کنار هم قرار دادن اینها می توان فضا را پر کرده کریستال ها را ساخت

نکته: زاویه بین صفحات خارجی یک کریستال طبیعی همیشه یکسان است

نکته: نسبت صفحات در کریستال همیشه نسبتی گویا خواهد بود

نکته: صفحات و مرکز تقارن (Constancy of symmetry) در کریستال ها ثابت است

قانون منقه Weiss ← که صفحات منقه با ایندکس اویل منطقه باها دارد

اصل Neumann ← خواص فیزیکی کریستال به ساختار یا تقارن اویل کریستال برمی گردد (symmetry) برای مثال اگر کریستالی با 90° چرخش همون ساختار قبل شود پس تمام خواص من جمله

الکتریکی نیز با چرخش کریستال ثابت می ماند و باید خواص فیزیکی هم ثابت بماند

کشف Hessel $\rightarrow$ تقسیم بندی انواع تقارن در کریستال طبیعی را پیشنهاد می کند که ۳۲ تقارن Symmetry داریم که فقط دارای دوجه های ۹ و ۱۸ و ۱۲۰ هستند (۹۰ - ۱۲۰ - ۱۸۰ - ۹۰) چرخش و تنها تقارن های دوران در کریستال به اندک هین زاویه هاست

نتیجه $\rightarrow$ این ۳۲ تقارن در نهایت در ۱۴ شبکه به نام Bravais Lattice مطرح می شوند و در ۷ گروه سیستم کریستالی تقسیم می شوند در نتیجه ما ۷ بلور ساختاری داریم اما از دید توضیح و تقارن ۱۴ شبکه داریم که ۷ هون ۷ شکل پایه بدست می آیند

Space Group $\rightarrow$ وقتی طر حواره را روی ۱۴ حالت توضیح انجام دهیم ۲۳۰ گروه بدست می آید که گروه نوع اول نامیده می شود

۲۳۰ حالت کریستال

$$\text{Motif} + \text{Lattice} = 230$$

تا ۱۴

۱۴ تا Lattice با Motif سر جمع ۲۳۰ حالت ایجاد می کند

در فضای ۳ بعدی ۲۳۰ Space Groups سر جمع با نتایج کو بی بدست آید

کلا ۷ طرح دو بعدی در کریستال داریم و ۵ شبکه در فضای ۲ بعدی بیشتر نداریم

در دو بعد

$$\text{Motif} + \text{Lattice} = 17$$

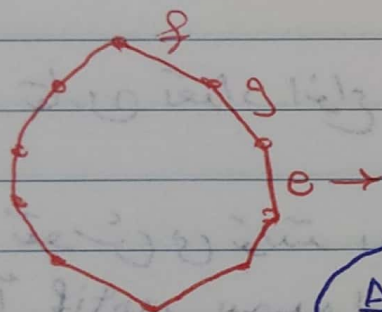
۷ حالت کریستال

تا ۵

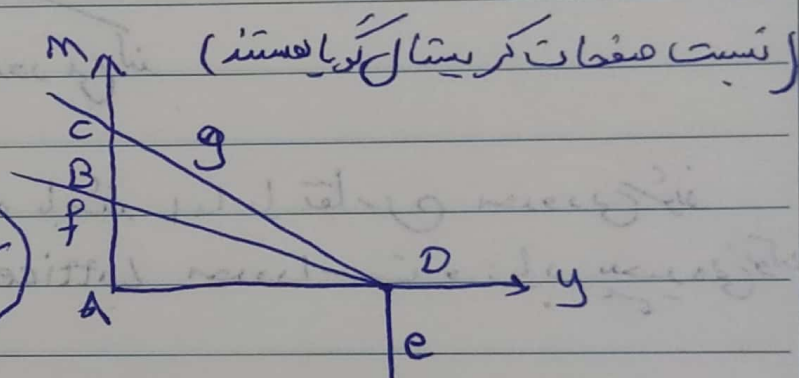
قوانین کریستالوگرافی ۱ - ثابت بودن زاویه های بین سطحی که بیان می کند که زاویه بین صفحه های متناظر مجاور در کریستال علی رغم اشکال و اندازه های مختلف و نحوه رشد کریستال همیشه ثابت است (قانون استرو)

۲ اگر یکی کریستال مقطعی بزنیم که از افلاعی تشکیل شده (مقطع)

اگر در یکی از رئوس افلاعی را به محور مختصات استانداردیم نقاط برخورد با محور را اگر با یکدیگر بسنجیم نسبت های گویا هستند



گویا $\frac{AC}{AB}$



۳ قانون ثابت بودن تقارن - تمام بلورهای ماده دارای عناصر تقارن یکسانی هستند، دارای صفحه - محور و مرکز تقارن یکسان

نکته ابعاد بلور واحد هم قدری کم است که عملاً همه صورتهای بلوری صاف هستند

نکته indem صفحات بیشتر از ۴ نمی شود

چرا علوم در لایه ای می خورد به این قرله دارند - برای پایش کردن انرژی سطح و صفحه های سطح پایین تر یا انرژی کمتر نسبت به صفحه های بالا تر اند و پله ها ایجاد می شود تا انرژی min شود

Subject: _____

NOTEBOOK

Date: _____

Year _____ Month _____ Day _____

کرستال ← چیدمان منظم آنها یا مولکولها که با ترتیب در یک دو یا سه بعد تکرار می شود
Motif ← واحد تکرار شونده (یا یونیت) منتهی به مقادیر است

Lattice (شکله) ← شکله ای خیالی از تقاطعی که تقویش بر روی آنها تکرار می شود
ویژگی مهم شکله ← احاطه احواف تمام تقاطع شکله یکسان است

unit cell ← یک واحد بلکری یا متوالی الاقلداهی که حاوی موتیف است
و در شکله تکرار می شود

نکته → تقارن تعداد انواع شکله را محدود می کند

نکته → تقویش می تواند بسیار پیچیده باشد اما با تقارن محدود می شود
و غالباً Motif پیچیده است ولی Lattice محدود است و زیاد پیچیده نمی تواند
باشد

نکته → Motif برای ایجاد Lattice اجازه دوران ندارد بلکه فقط انتقال
Motif ایجاد Lattice می کند