



Τμήμα Μηχανολόγων
Μηχανικών

Ελληνικό Μεσογειακό Πανεπιστήμιο

Τεχνολογία Υλικών Ι

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Ελληνικό Μεσογειακό Πανεπιστήμιο

Δρ. Σκλήρη Ευαγγελία

□ Από τη Μακροδομή στην Ατομική Κλίμακα

- Οι ιδιότητες εξαρτώνται από τον δεσμό
- Ο δεσμός εξαρτάται από την ηλεκτρονική δομή
- Η ηλεκτρονική δομή εξαρτάται από τη δομή του ατόμου
- Άρα: Για να καταλάβουμε τα υλικά, πρέπει να ξεκινήσουμε από το άτομο.

Δομή Ατόμου

Βασικά μεγέθη που περιγράφουν ένα άτομο

☐ Ατομικός αριθμός (atomic number, Z)

- ✓ Αριθμός πρωτονίων του πυρήνα του ατόμου
- ✓ Ακέραιος, 1 (Υδρογόνο) μέχρι 92 (Ουράνιο) και 94 (Πλουτώνιο)
- ✓ Ίσος με τον αριθμό των ηλεκτρονίων

☐ Μαζικός αριθμός (atomic mass number, A)

- ✓ Αριθμός πρωτονίων και νετρονίων (N) του πυρήνα του ατόμου ($A=Z+N$)
- ✓ Κάθε άτομο έχει μοναδικό Z
- ✓ Άτομα με ίδιο Z και διαφορετικό N = **Ισότοπα** του ατόμου

☐ Ατομική μάζα (atomic mass) ατόμου X (A_x)

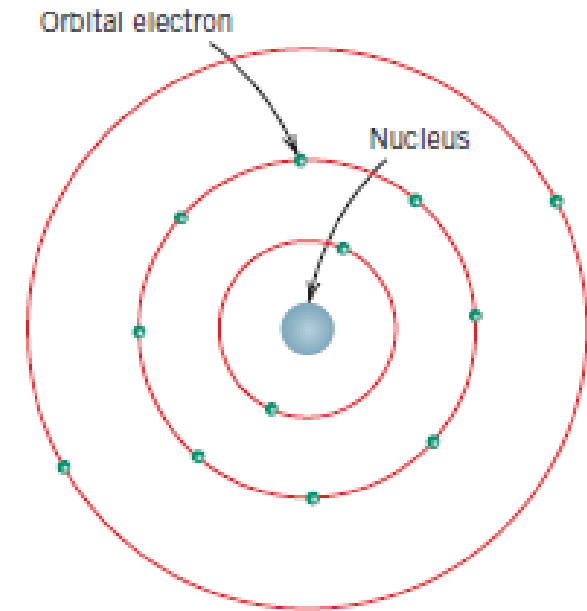
- Άθροισμα μαζών πρωτονίων και νετρονίων του πυρήνα του ατόμου
- Για στοιχεία που έχουν ισότοπα, ισούται με το σταθμισμένο μέσο όρο των ατομικών μαζών των ισοτόπων του
- Λέγεται και Ατομικός βάρους (atomic weight)

☐ Μονάδα ατομικής μάζας (atomic mass unit, amu) = μάζα του (1/12) της ατομικής μάζας του ^{12}C

- A_x (g/mol) ή M_x (g/mol) \leftrightarrow 1 mol ατόμων ή μορίων $\leftrightarrow N_A = 6,023 \times 10^{23}$ άτομα ή μόρια (**Αριθμός Avogadro**)

Ατομικά Πρότυπο Κβαντικής Θεωρίας

- ❑ Σύμφωνα με το ατομικό πρότυπο του Bohr: Το ηλεκτρόνιο περιστρέφεται γύρω από τον πυρήνα του ατόμου όπως ένας πλανήτης γύρω από τον Ήλιο
 - ✓ Σωματίδιο που περιστρέφεται επιταχύνεται προς το κέντρο περιστροφής
 - ✓ Επιταχυνόμενο φορτίο εκπέμπει Η/Μ ακτινοβολία, άρα το ηλεκτρόνιο θα έπεφτε στον πυρήνα
- ❑ Bohr είπε
 - ✓ Το ηλεκτρόνιο περιστρέφεται σε επιτρεπτές τροχιές γύρω από τον πυρήνα, χωρίς να μεταβάλλεται η ενέργειά του
 - ✓ Σε κάθε επιτρεπτή τροχιά, η στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι κβαντισμένη
 - ✓ $L = n \cdot \frac{h}{2\pi} = n \cdot \hbar$
 - ✓ Ενεργειακές μεταβολές συμβαίνουν μόνο όταν το ηλεκτρόνιο μεταβαίνει από επιτρεπόμενη σε επιτρεπόμενη τροχιά



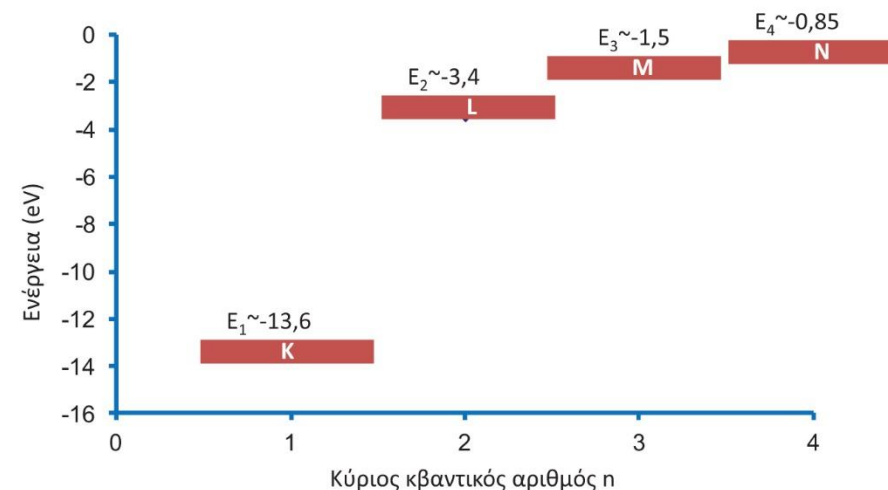
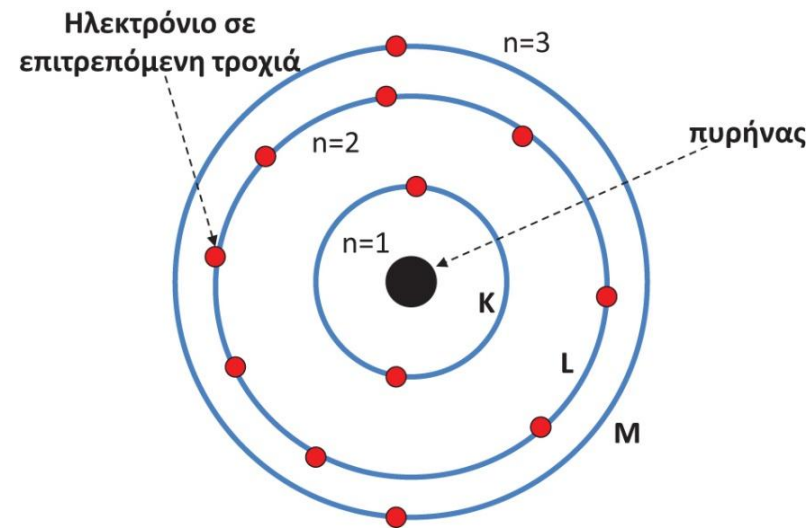
Ατομικά Πρότυπο Κβαντικής Θεωρίας

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{m_e |e|^2}$$
$$E = -\frac{m_e |e|^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

n = κύριος κβαντικός αριθμός

Το -13.6 eV είναι η ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης.

Όσο αυξάνει το n , το ηλεκτρόνιο βρίσκεται κατά μέσο όρο πιο μακριά από τον πυρήνα, η ενέργειά του γίνεται λιγότερο αρνητική και επομένως είναι λιγότερο δεσμευμένο.



Ατομικά Πρότυπο Κυματικής Θεωρίας

- Τα ηλεκτρόνια έχουν και κυματικά χαρακτηριστικά
- Αντί για θέση, πιθανότητα κατάστασης (συνάρτηση κατανομής)
- Η λύση της εξ. Schrödinger → 3 ακόμη κβαντικούς αριθμούς
- Για κάθε ενεργειακή στοιβάδα (n) αντιστοιχεί ένας αριθμός υποστοιβάδων (subshells) όπου το ηλεκτρόνιο έχει σταθερή γωνιακή στροφορμή

• «αζιμουθιακός» ή «δευτερεύων» κβαντικός αριθμός
 Για κάθε n:

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

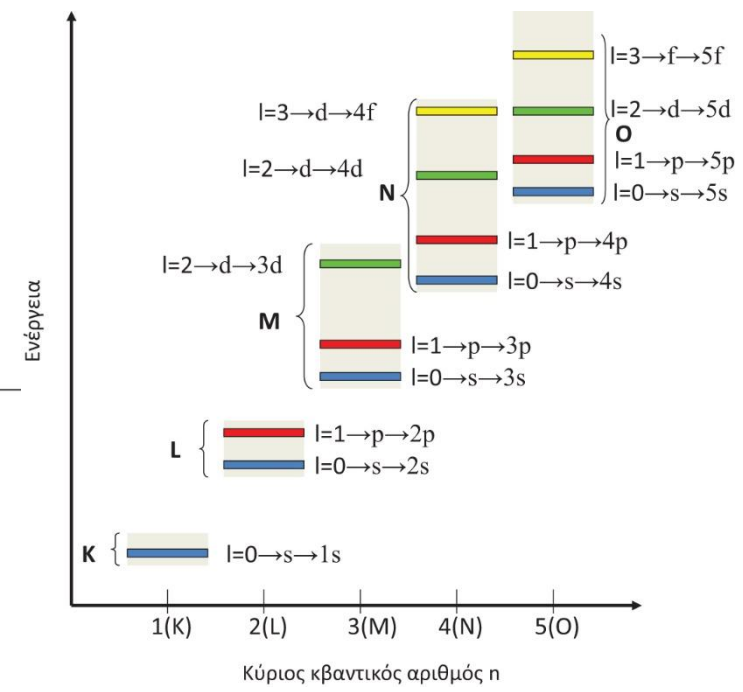
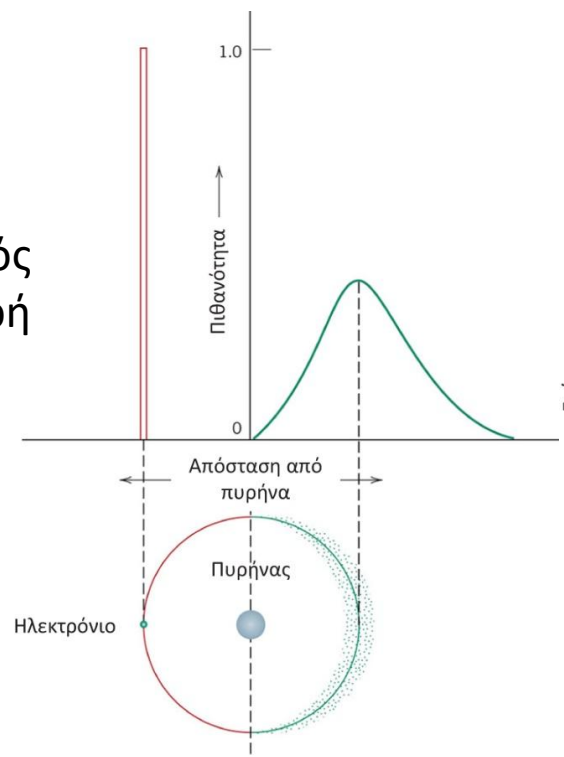
Παράδειγμα:

- n = 1 → l = 0
- n = 2 → l = 0, 1
- n = 3 → l = 0, 1, 2

Παράδειγμα:

- n = 2**
- l = 0, 1
- έχουμε 2s και 2p

- Εκφράζει σχήμα ή συμμετρία τροχιάς



Ατομικά Πρότυπο Κυματικής Θεωρίας

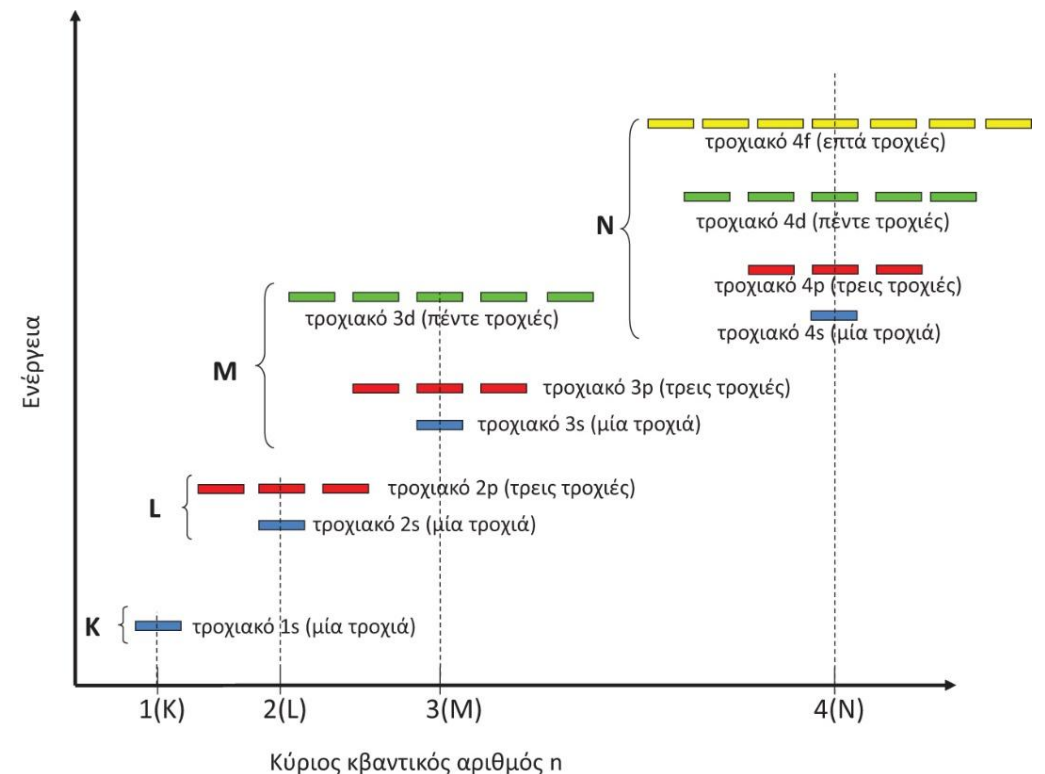
- Η τροχιακή στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι διάνυσμα
- Πρέπει να λαμβάνει επιτρεπτές κατευθύνσεις
- Κβάντωση χώρου
- Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_ℓ)
- $m_\ell = -\ell, \dots, +\ell$ δηλαδή συνολικά $(2\ell + 1)$ καταστάσεις
- Ιδιοστροφορμή (spin) του ηλεκτρονίου $[s(s+1)](\hbar/2) = (\sqrt{3}/2)\hbar$
- Κβαντικός αριθμός του spin s ($=1/2$)
- Συνιστώσες spin $= \pm(1/2)\hbar$, ($s=\pm 1/2$)
- Απαγορευτική αρχή του Pauling
Δεν μπορούν να υπάρξουν δύο ηλεκτρόνια σε ένα άτομο με ίδιους και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς

$n \rightarrow$ ενεργειακό επίπεδο (μέγεθος τροχιακού)

$l \rightarrow$ σχήμα τροχιακού (s, p, d, f)

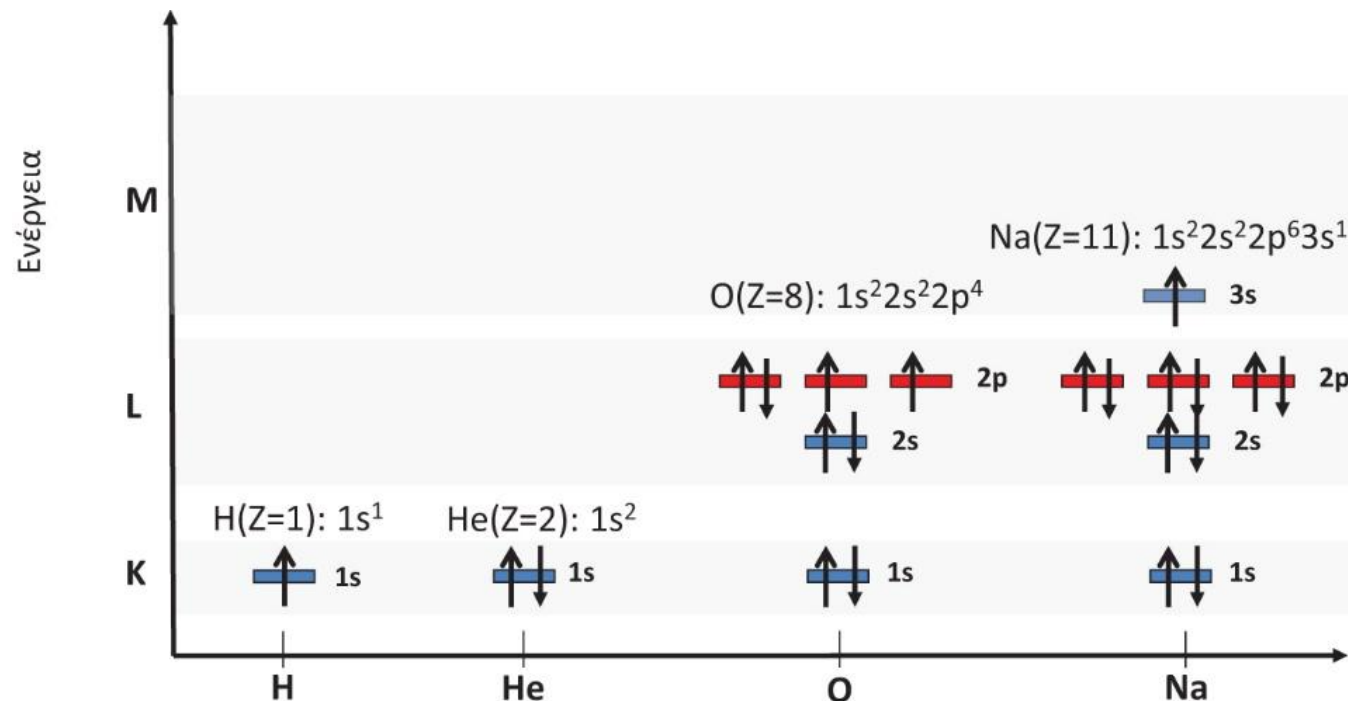
$m_l \rightarrow$ χωρικός προσανατολισμός τροχιακού

$m_s \rightarrow$ κατεύθυνση spin του ηλεκτρονίου



Ηλεκτρονιακή Δομή Ατόμου

- Κάθε τροχιά (τρεις ίδιοι κβαντικοί αριθμοί) μπορεί να δεχθεί μέχρι δύο ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλο spin
- Τα ηλεκτρόνια τοποθετούνται στις διάφορες επιτρεπόμενες ενεργειακές καταστάσεις, έτσι ώστε η συνολική ενέργεια του ατόμου να είναι η μικρότερη δυνατή
- Ηλεκτρόνια εξωτερικής στοιβάδας = ηλεκτρόνια σθένους, καθορίζουν το είδος της χημικής σχέσης



Περιοδικός Πίνακας

Ατομικός αριθμός (Z)

Ατομική μάζα (A_x)

Μέταλλο

Αμέταλλο

Επαμφοτερίζον

IA 1 H 1.0080																	0 2 He 4.0026	
3 Li 6.941	4 Be 9.0122											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180	
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIII				IB	IIB	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.064	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.08	21 Sc 44.956	22 Ti 47.87	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.41	31 Ga 69.72	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80	
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30	
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	Rare earth series	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.2	76 Os 190.23	77 Ir 192.2	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.19	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)	
87 Fr (223)	88 Ra (226)	Actinide series	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (277)	109 Mt (268)	110 Ds (281)									

Σπάνιες γαίες

57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.35	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.92	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------

Ακτινίδια

89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)
-------------------	--------------------	--------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------

Περιοδικός Πίνακας

- ✓ Περίοδοι (στοιβάδες) = 7
- ✓ Ομάδες (αριθμός ηλεκτρονίων εξωτερικής στοιβάδας) = 18 (8 κύριες + 10 δευτερεύουσες)
- ✓ Μέταλλα, αμέταλλα, επαμφοτερίζοντα
- ✓ Ηλεκτρόνια εξωτερικής στοιβάδας = ηλεκτρόνια σθένους, καθορίζουν το είδος της χημικής σχέσης
- ✓ IA = αλκάλια (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)
- ✓ IIA = αλκαλικές γαίες (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra)
- ✓ VIIA = αλογόνα (F, Cl, Br, I)
- ✓ VIII = αδρανή (ευγενή) αέρια (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn)
- ✓ Στοιχεία μεταξύ IIIB και IIB = στοιχεία μετάπτωσης (transition elements)
μερικώς συμπληρωμένο d κάποιας στοιβάδας και 2 ηλεκτρόνια (συμπληρωμένο) το s της επόμενης στοιβάδας

Ηλεκτρονιακή Δομή - Περιοδικός Πίνακας

Ομάδα:

IA 0

Ηλεκτρονιακή δομή των στοιχείων

1	H 1 1s																	He 2 1s
2	Li 1 Be 2 2s											B 1 C 2 N 3 O 4 F 5 Ne 6 2p						
3	Na 1 Mg 2 3s											Al 1 Si 2 P 3 S 4 Cl 5 Ar 6 3p						
4	K 1 Ca 2 4s	Sc 1 Ti 2 V 3 Cr 4 Mn 5 Fe 6 Co 7 Ni 8 Cu 9 Zn 10 3d											Ga 1 Ge 2 As 3 Se 4 Br 5 Kr 6 4p					
5	Rb 1 Sr 2 5s	Y 1 Zr 2 Nb 3 Mo 4 Tc 5 Ru 6 Rh 7 Pd 8 Ag 9 Cd 10 4d											In 1 Sn 2 Sb 3 Te 4 I 5 Xe 6 5p					
6	Cs 1 Ba 2 6s	La* 1 Hf 2 Ta 3 W 4 Re 5 Os 6 Ir 7 Pt 8 Au 9 Hg 10 5d											Tl 1 Pb 2 Bi 3 Po 4 At 5 Rn 6 6p					
7	Fr 1 Ra 2 7s	+Ac 1 Rf 2 Ha 3 6d																
Περίοδος:	Σπάνιες γαίες (Λανθανίδια)	Ce 1 Pr 2 Nd 3 Pm 4 Sm 5 Eu 6 Gd 7 Tb 8 Dy 9 Ho 10 Er 11 Tm 12 Yb 13 Lu 14 4f																
	Ακτινίδια	Th 1 Pa 2 U 3 Np 4 Pu 5 Am 6 Cm 7 Bk 8 Cf 9 Es 10 Fm 11 Md 12 No 13 Lr 14 5f																

Ατομική Ακτίνα

Η ατομική ακτίνα αυξάνει

Η ατομική ακτίνα αυξάνει

1 H Υδρογόνο 1,00794																	2 He Ήλιο 4,003
3 Li Λίθιο 6,941	4 Be Βερίλιο 9,012182											5 B Βόριο 10,811	6 C Άνθρακας 12,0107	7 N Άζωτο 14,00674	8 O Οξυγόνο 15,9994	9 F Φθόριο 18,9984032	10 Ne Νέον 20,1797
11 Na Νάτριο 22,989770	12 Mg Μαγνήσιο 24,3050											13 Al Άλουμίνιο 26,981538	14 Si Σίλικιο 28,0855	15 P Φωσφόρος 30,973761	16 S Θείο 32,066	17 Cl Χλωρίο 35,4527	18 Ar Άργον 39,948
19 K Πotasium 39,0983	20 Ca Κάλσιος 40,078	21 Sc Σκάνδιου 44,955910	22 Ti Τίτανιο 47,867	23 V Βανάδιου 50,9415	24 Cr Χρoμίο 51,9961	25 Mn Μαγγάνιο 54,938049	26 Fe Σίδηρος 55,845	27 Co Κόβαλτ 58,933200	28 Ni Νικέλιο 58,6934	29 Cu Μεταλλικό 63,546	30 Zn Ζήνκο 65,39	31 Ga Γαλιόριο 69,723	32 Ge Γερμάνιο 72,61	33 As Άρσενιο 74,92160	34 Se Σελήνιο 78,96	35 Br Βρώμιο 79,904	36 Kr Κρυπτόν 83,80
37 Rb Ρουβίδιο 85,4678	38 Sr Στραόντιο 87,62	39 Y Ίτιριο 88,90585	40 Zr Ζιρκόνιο 91,224	41 Nb Νιόβιο 92,90638	42 Mo Μολυβδαίνιο 95,94	43 Tc Τεχνήτιο (98)	44 Ru Ρουθέτιο 101,07	45 Rh Ροδιόλιο 102,90550	46 Pd Παλλάδιο 106,42	47 Ag Αργήριο 107,8682	48 Cd Καδμείο 112,411	49 In Ινδίο 114,818	50 Sn Σταννίο 118,710	51 Sb Αντιμόνιο 121,760	52 Te Τελούριο 127,60	53 I Ιώδιο 126,90447	54 Xe Χημείο 131,29
55 Cs Καίσιο 132,90545	56 Ba Βαρίο 137,327	57 La Λανθάνιο 138,9055	58 Hf Ήφαιστιο 178,49	59 Ta Ταντάλιο 180,9479	60 W Βολφράμιο 183,84	61 Re Ρενόγιο 186,207	62 Os Όσμιο 190,23	63 Ir Ιρίδιο 192,217	64 Pt Πλάτινα 195,078	65 Au Χρυσός 196,96655	66 Hg Μερκούριο 200,59	67 Tl Θαλλίο 204,3833	68 Pb Πολύμορφο 207,2	69 Bi Βισμούριο 208,98038	84 Po Πολωνίο (209)	85 At Αστέριο (210)	86 Rn Ραδίο (222)
87 Fr Γαλλίο (223)	88 Ra Ραδίο (226)	89 Ac Ακτινίο (227)	90 Rf Ραφρένιο (261)	105 Db Δουβνίο (262)	106 Sg Σεντσοργίο (263)	107 Bh Βόλφιο (262)	108 Hs Ήσσιο (265)	109 Mt Μοχταβίο (266)	110 (269)	111 (272)	112 (277)						
58 Ce Κερίτιο 140,116	59 Pr Προσπορίτιο 140,90765	60 Nd Νεοπορίτιο 144,24	61 Pm Προμειθίο (145)	62 Sm Σαμάρσιο 150,36	63 Eu Ευρώπιο 151,964	64 Gd Γαδολίνιο 157,25	65 Tb Τερβίο 158,92534	66 Dy Δυσπρόσιο 162,50	67 Ho Ήλμιο 164,93032	68 Er Ερβίο 167,26	69 Tm Θυμίο 168,93421	70 Yb Ύψερβιο 173,04	71 Lu Λουτήσιο 174,967				
90 Th Θοράκιο 232,0381	91 Pa Πρωακτινίο 231,03588	92 U Ουράνιο 238,0289	93 Np Νεπτούριο (237)	94 Pu Πλουτωνίο (244)	95 Am Αμερίκιο (243)	96 Cm Κουρίτιο (247)	97 Bk Βερμίουλιο (247)	98 Cf Καλιφόρνιο (251)	99 Es Εϊσενστάϊν (252)	100 Fm Φέρμιο (257)	101 Md Μοντέλιουσιο (258)	102 No Νόβελιο (259)	103 Lr Λανθάνιο (262)				

Στοιχείο	Ατομική Ακτίνα (nm)	Στοιχείο	Ατομική Ακτίνα (nm)
Νάτριο (Na)	0,186	Μολυβδαίνιο (Mo)	0,136
Μαγνήσιο (Mg)	0,160	Αργυρος (Ag)	0,144
Άλουμίνιο (Al)	0,143	Κασσίτερος (Sn)	0,140
Τιτάνιο (Ti)	0,144	Αντιμόνιο (Sb)	0,141
Χρoμίο (Cr)	0,125	Κάδμιο (Cd)	0,149
Σίδηρος (Fe)	0,124	Ταντάλιο (Ta)	0,143
Κοβάλτιο (Co)	0,125	Βολφράμιο (W)	0,137
Νικέλιο (Ni)	0,125	Λευκόχρυσος (Pt)	0,139
Χαλκός (Cu)	0,128	Χρυσός (Au)	0,144
Ψευδάργυρος (Zn)	0,133	Μόλυβδος (Pb)	0,175

Δεσμοί μεταξύ Ατόμων στο Στερεό

➤ Γιατί τα άτομα ενώνονται;

Για να μειώσουν την ενέργεια τους

Με τον δεσμό το σύστημα αποκτά χαμηλότερη δυναμική ενέργεια

Πλησιάζουν σε πιο σταθερή ηλεκτρονιακή διάταξη (συχνά πλήρη εξωτερική στοιβάδα)

➤ Πότε ένα σύστημα είναι σταθερό;

Όταν οι ελκτικές δυνάμεις εξισορροπούν τις απωστικές

Στην απόσταση ισορροπίας r_0

Όταν η ελεύθερη ενέργεια είναι ελάχιστη

➤ Τι καθορίζει τις ιδιότητες των υλικών;

Ο τύπος δεσμού και η δομή

☐ Δυνάμεις Μεταξύ Ατόμων

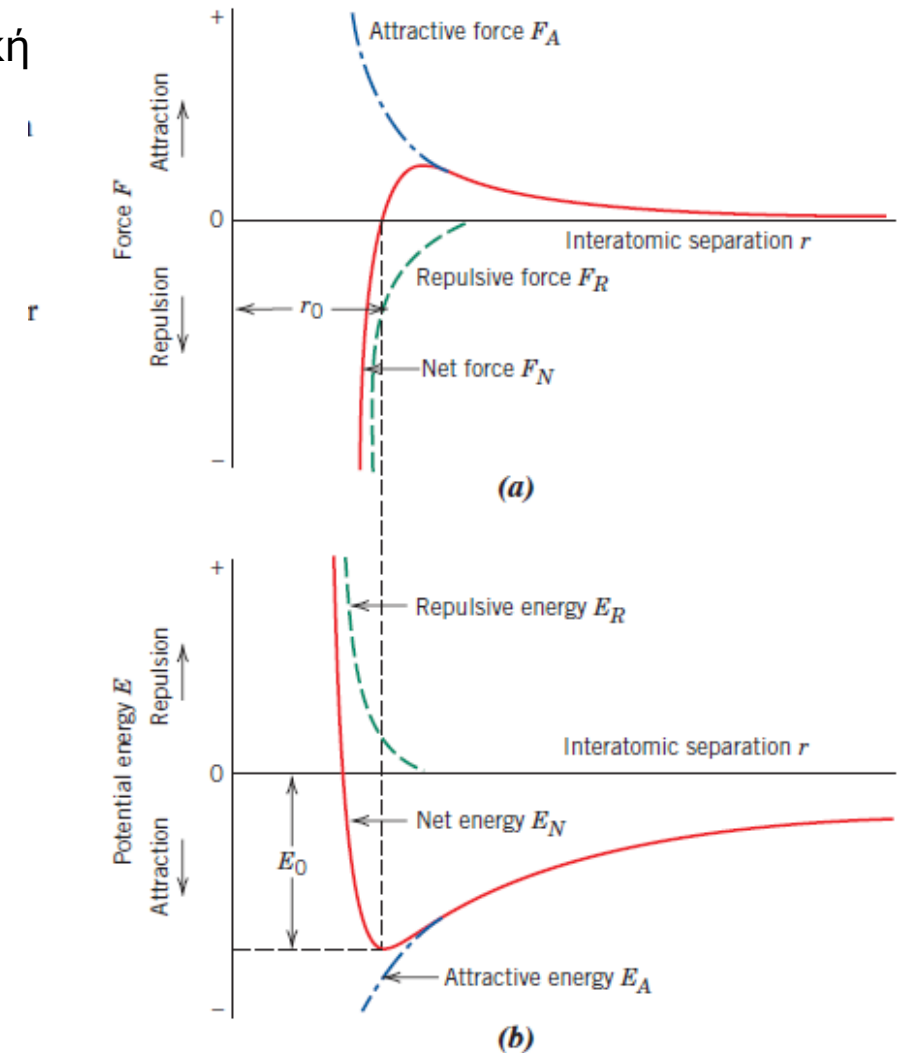
Υπάρχουν δύο δυνάμεις:

- Ελκτική (F_A)
- Απωστική (F_R)

Η συνολική δύναμη:

$$F_N = F_A + F_R$$

- Σε μεγάλες αποστάσεις \rightarrow ελκτική
- Σε πολύ μικρές \rightarrow απωστική
- Στο $r_0 \rightarrow F = 0 \rightarrow$ ισορροπία



Δεσμοί μεταξύ Ατόμων στο Στερεό

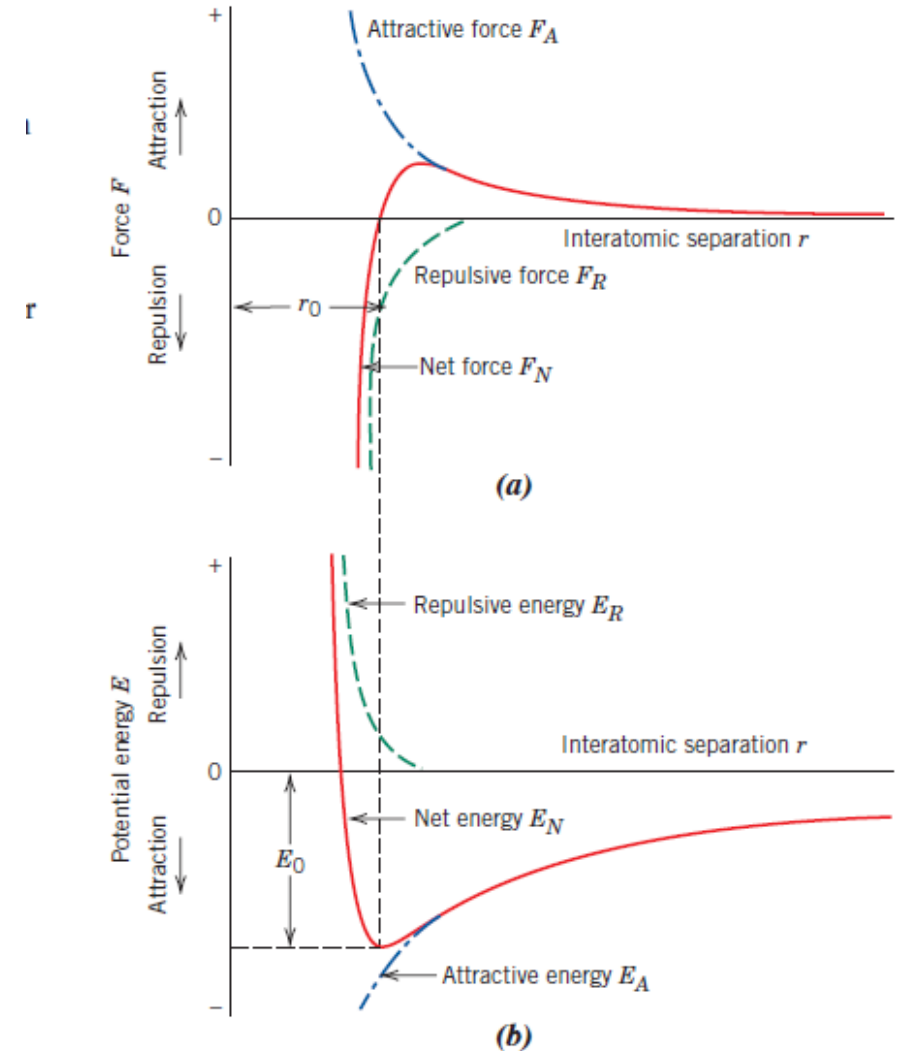
□ Καμπύλη Ενέργειας

Ενέργεια δυναμικού $U(r)$

- $r_0 \rightarrow$ απόσταση ισορροπίας
- $E_0 \rightarrow$ ενέργεια δεσμού

- Όσο βαθύτερο το πηγάδι \rightarrow ισχυρότερος δεσμός
- Η καμπυλότητα στο r_0 σχετίζεται με το E (Young's modulus)

Για ένα σχετικά άκαμπτο υλικό, η κλίση της καμπύλης στη θέση $r = r_0$ θα είναι πολύ απότομη, ενώ για πιο εύκαμπτα υλικά οι κλίσεις είναι μικρότερες



Κύριοι Δεσμοί Μεταξύ Ατόμων

Τρεις ισχυροί δεσμοί:

- Ιοντικός
- Ομοιοπολικός
- Μεταλλικός

- Η διαδικασία σχηματισμού δεσμών προϋποθέτει την ύπαρξη ηλεκτρονίων σθένους.
- Η φύση του δεσμού εξαρτάται από τις ηλεκτρονικές διαμορφώσεις των ατόμων που συμμετέχουν στον δεσμό.
- Τα άτομα θέλουν να αποκτήσουν σταθερές ηλεκτρονικές διαμορφώσεις, παρόμοιες με αυτές των ευγενών αερίων, με πλήρως συμπληρωμένη την εξωτερική τους στιβάδα.

Ιοντικός Δεσμός

- ❑ **Ιοντικός Δεσμός:** Απαντάται σε ενώσεις που αποτελούνται από μέταλλα και αμέταλλα στοιχεία τα οποία βρίσκονται στα άκρα των οριζόντιων γραμμών του περιοδικού πίνακα.
- ❑ Τα άτομα ενός μεταλλικού στοιχείου δίνουν εύκολα τα ηλεκτρόνια σθένους τους σε άτομα ενός αμέταλλου στοιχείου → ηλεκτρονική διαμόρφωση ευγενούς αερίου
- ❑ Η συνολική ενέργεια είναι άθροισμα:

$$E(r) = E_A + E_R$$

Ελκτική ενέργεια (Coulomb)

$$E_A = -\frac{A}{r}$$

Απωστική ενέργεια

$$E_R = \frac{B}{r^n}$$

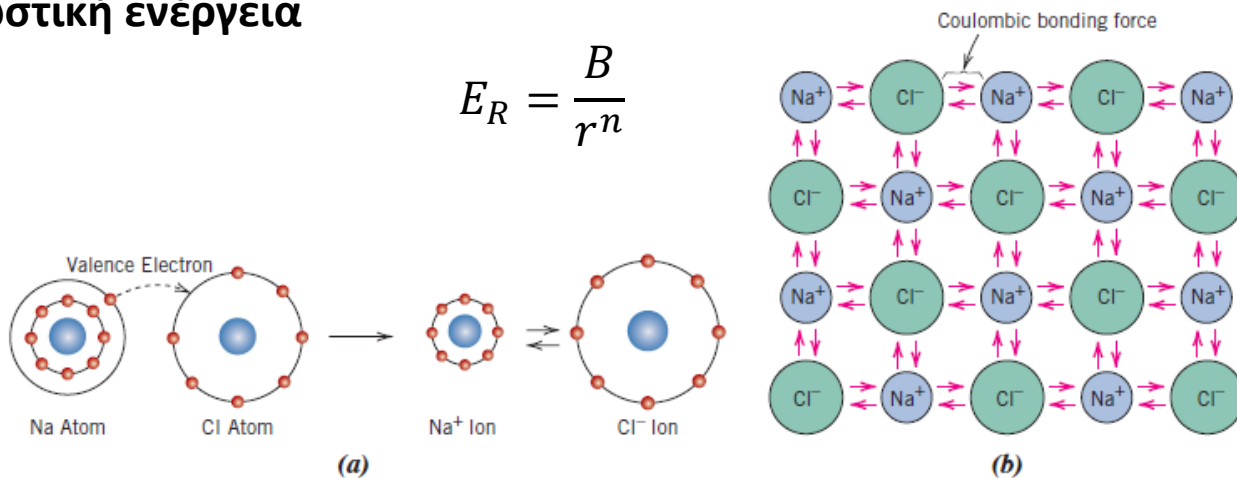
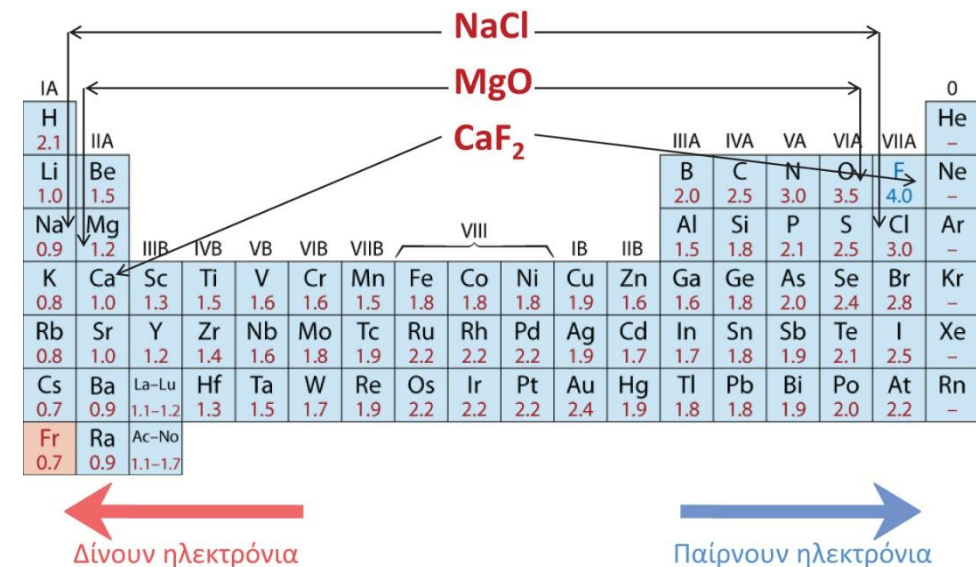


Figure 2.11 Schematic representations of (a) the formation of Na⁺ and Cl⁻ ions and (b) ionic bonding in sodium chloride (NaCl).



Ιδιότητες Ιοντικών Υλικών

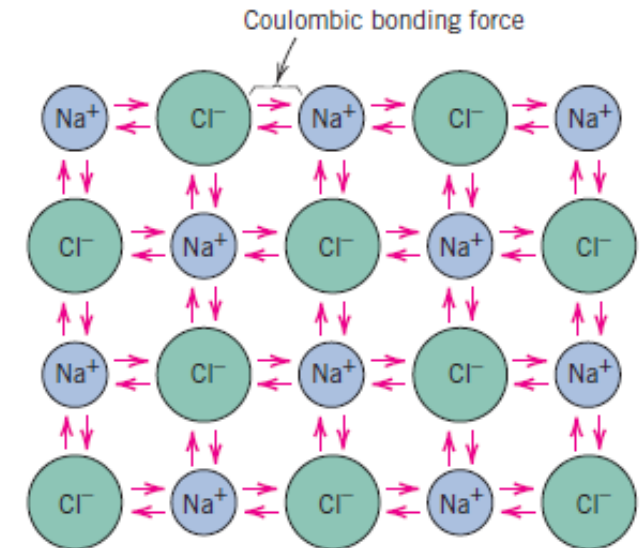
- Ισχυρή Coulomb έλξη
- Μη κατευθυντικός αλλά ηλεκτροστατικός δεσμός, δηλαδή το μέτρο των δεσμικών δυνάμεων είναι το ίδιο σε όλες τις κατευθύνσεις γύρω από το ιόν.
- Πλέγμα εναλλασσόμενων φορτίων

Ιδιότητες

- Υψηλή θερμοκρασία τήξης → Μεγάλη ενέργεια δεσμού
- Σκληρά → Ισχυρές ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις

Αλλά

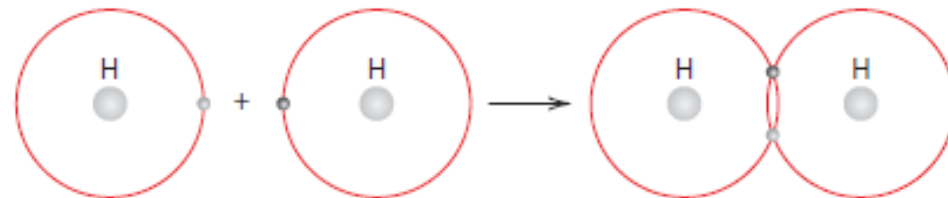
- Ψαθυρά → Κατά την ολίσθηση πλησιάζουν όμοια φορτία → άπωση → ρωγμή
- Κακοί αγωγοί → Τα ιόντα βρίσκονται σε σταθερές κρυσταλλικές θέσεις και δεν μπορούν να μετακινηθούν ελεύθερα.



Ομοιοπολικός Δεσμός

- ❑ Ο ομοιοπολικός δεσμός απαντάται σε υλικά των οποίων τα άτομα έχουν μικρές διαφορές ως προς την ηλεκτραρνητικότητα.
- ❑ Δύο ομοιοπολικά ενωμένα άτομα συνεισφέρουν στο δεσμό από ένα τουλάχιστον ηλεκτρόνιο έκαστο, και αυτά τα διαμοιραζόμενα ηλεκτρόνια μπορεί να θεωρηθεί ότι ανήκουν και στα δύο άτομα.
- ❑ Ο ομοιοπολικός δεσμός είναι ισχυρός
- ❑ Ο ομοιοπολικός δεσμός είναι κατευθυντικός.
Οι δεσμικές δυνάμεις ασκούνται μεταξύ συγκεκριμένων ατόμων και μπορούν να υφίστανται μόνο στην κατεύθυνση του άξονα που ενώνει τα δύο άτομα.

Figure 2.12 Schematic representation of covalent bonding in a molecule of hydrogen (H_2).



Ιδιότητες Ομοιοπολικών Υλικών

- Κοινή χρήση ηλεκτρονίων
- Κατευθυντικός δεσμός (συγκεκριμένη γεωμετρία)
- Υψηλή ενέργεια δεσμού
- Τοπική κατανομή ηλεκτρονικής πυκνότητας μεταξύ των ατόμων

Ιδιότητες

- Υψηλή θερμοκρασία τήξης → Ισχυροί δεσμοί
- Πολύ σκληρά → Δυσκολία αναδιάταξης δεσμών
- Υψηλό μέτρο ελαστικότητας → Μεγάλη καμπυλότητα ενεργειακού πηγαδιού

Αλλά

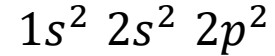
- Ψαθυρά → Η κατευθυντικότητα δεν επιτρέπει εύκολη ολίσθηση
- Χαμηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα (συνήθως) → Τα ηλεκτρόνια είναι δεσμευμένα σε συγκεκριμένους δεσμούς.

Υβριδισμός Δεσμών στον Άνθρακα

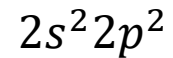
Άνθρακας

Ατομικός αριθμός: 6

Ηλεκτρονική διαμόρφωση:



Τα ηλεκτρόνια σθένους είναι αυτά της εξωτερικής στοιβάδας (n=2):



Επομένως 4 ηλεκτρόνια σθένους άρα μπορεί να κάνει 4 ομοιοπολικούς δεσμούς.

☐ Υβριδισμός τροχιακών

Τα 2s και 2p τροχιακά μπορούν να αναμειχθούν (hybridization) ώστε να δημιουργηθούν ισοδύναμα υβριδικά τροχιακά.

- **sp³ Υβριδισμός (Diamond)**
- **sp² Υβριδισμός (Graphite)**

Υβριδισμός Δεσμών στον Άνθρακα

□ sp^3 Υβριδισμός (Diamond)

sp^3 τροχιακά

Τετραεδρική γεωμετρία (109.5°)

4 ισχυροί σ -δεσμοί

Ιδιότητες:

- Πολύ υψηλή σκληρότητα
- Πολύ υψηλό μέτρο ελαστικότητας
- Μονωτής

□ sp^2 Υβριδισμός (Graphite)

sp^2 τροχιακά

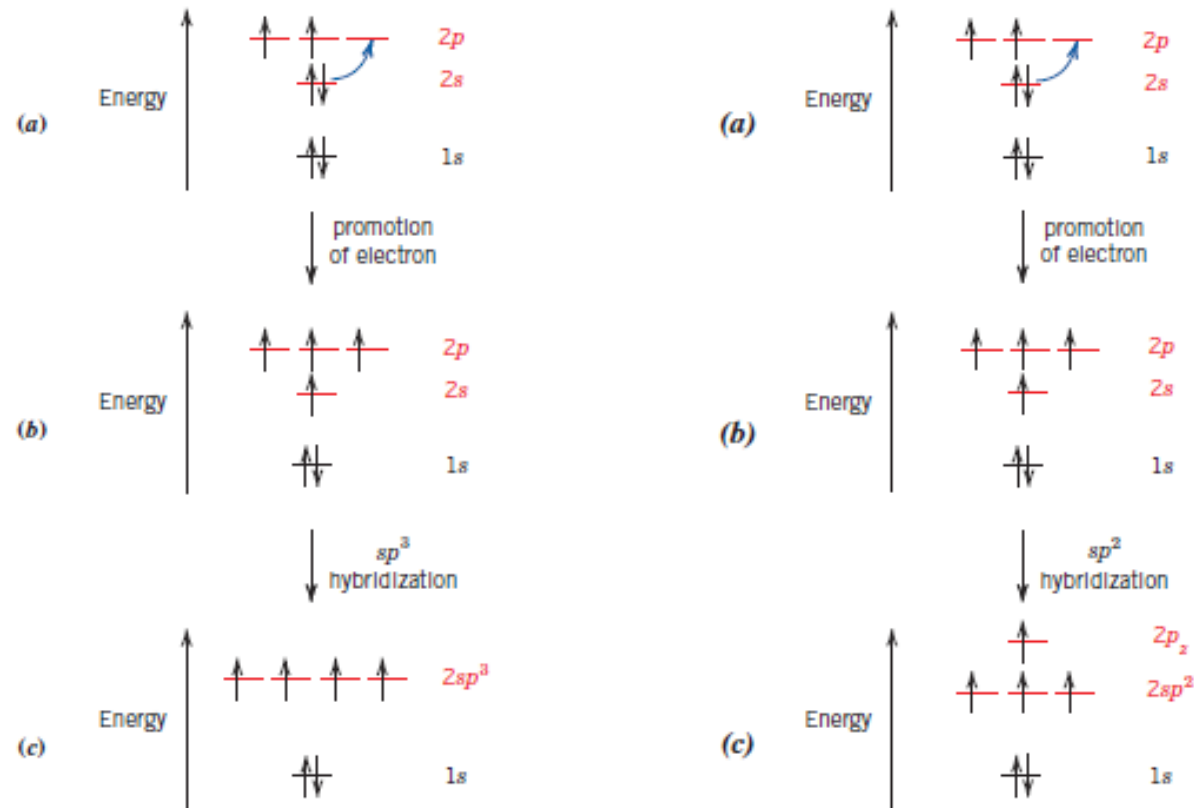
Επίπεδη εξαγωνική δομή (120°)

3 σ -δεσμοί + 1 π -δεσμός

Τα π -ηλεκτρόνια είναι αποδεσμευμένα μέσα στο επίπεδο.

Ιδιότητες:

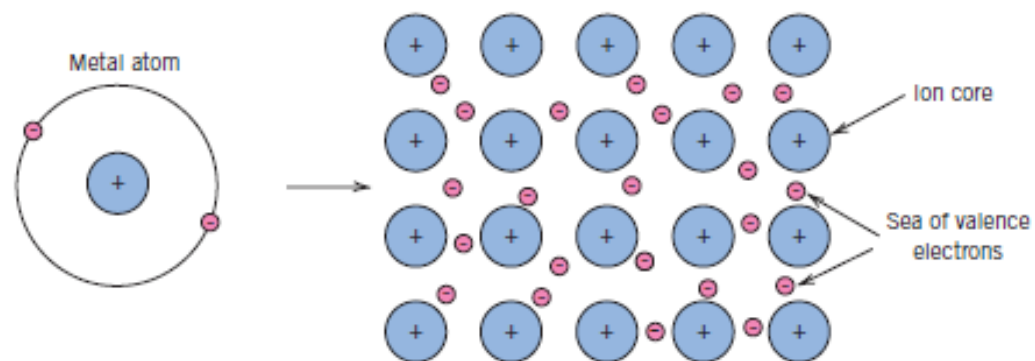
- Καλή ηλεκτρική αγωγιμότητα στο επίπεδο
- Ασθενείς δεσμοί μεταξύ επιπέδων (Van der Waals)
- Μαλακό υλικό



Μεταλλικός Δεσμός

- ❑ Ο μεταλλικός δεσμός απαντάται στα μέταλλα και τα κράματα τους.
- ❑ Τα ηλεκτρόνια σθένους δεν δεσμεύονται από κάποιο συγκεκριμένο άτομο του στερεού αλλά είναι σχεδόν ελεύθερα να κινηθούν σε όλη τη μάζα του.
- ❑ Τα ηλεκτρόνια σθένους ανήκουν στο σύνολο του μετάλλου, σχηματίζοντας ένα «νέφος ηλεκτρονίων» στο εσωτερικό του.
- ❑ Τα ηλεκτρόνια που δεν ανήκουν στην στιβάδα σθένους και οι πυρήνες των ατόμων συγκροτούν ιοντικά κέντρα, τα οποία έχουν ολικό θετικό φορτίο ίσο κατά μέτρο με το ολικό φορτίο των ηλεκτρονίων σθένους ανά άτομο.

Figure 2.19 Schematic illustration of metallic bonding.



Μεταλλικός Δεσμός

- Μεταλλικός δεσμός
- «Θάλασσα» αποδεσμευμένων ηλεκτρονίων
- Μη κατευθυντικός δεσμός
- Πλέγμα θετικών ιόντων μέσα σε ηλεκτρονικό νέφος

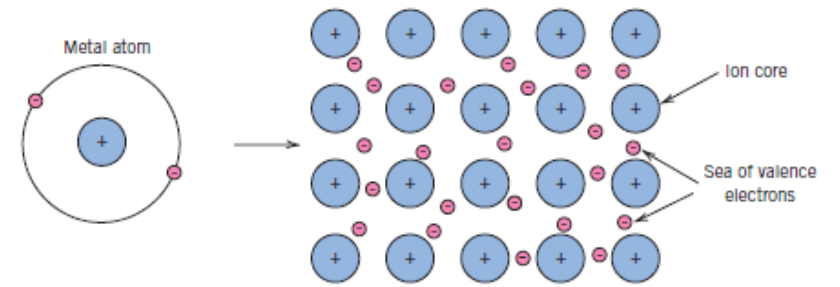
Ιδιότητες

- Καλή ηλεκτρική αγωγιμότητα → Τα ελεύθερα ηλεκτρόνια μεταφέρουν φορτίο
- Καλή θερμική αγωγιμότητα → Τα ηλεκτρόνια μεταφέρουν ενέργεια
- Ολκιμότητα → Η μη κατευθυντικότητα επιτρέπει ολίσθηση επιπέδων
- Μεταλλική λάμψη → Αλληλεπίδραση ελεύθερων ηλεκτρονίων με το φως

Αλλά

- Συνήθως χαμηλότερη θερμοκρασία τήξης από τα κεραμικά
- Επιρρεπή σε οξείδωση/διάβρωση

Figure 2.19 Schematic illustration of metallic bonding.



Δευτερέοντες Δεσμοί

Δευτερογενείς Δεσμοί (Van der Waals)

- Ασθενείς ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις
- Εμφανίζονται μεταξύ ουδέτερων ατόμων ή μορίων
- Δεν περιλαμβάνουν μεταφορά ή κοινή χρήση ηλεκτρονίων
- Πολύ μικρότερη ενέργεια δεσμού από τους πρωτογε

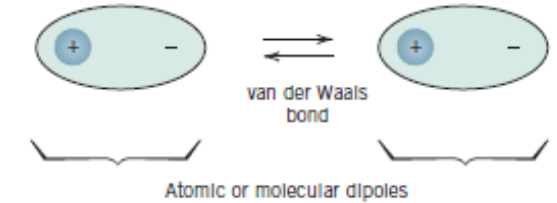
☐ Τύποι van der Waals

Διπολικός – διπολικός → Μεταξύ μόνιμων διπόλων (π.χ. πολικά μόρια)

Επαγόμενος διπολικός → Μόνιμο δίπολο επάγει δίπολο σε γειτονικό άτομο

Στιγμιαίος (London dispersion) → Προσωρινές διακυμάνσεις ηλεκτρονικής πυκνότητας → Υπάρχει σε όλα τα άτομα και μόρια

Figure 2.20 Schematic illustration of van der Waals bonding between two dipoles.



Μόνιμο δίπολο – μόνιμο δίπολο

Δευτερέοντες Δεσμοί

(a) Ηλεκτρικά συμμετρικό άτομο/μόριο

- Το θετικό φορτίο (πυρήνας) και το αρνητικό (ηλεκτρονικό νέφος) είναι συμμετρικά καταναμεημένα.
- Δεν υπάρχει μόνιμο δίπολο.
- Είναι ουδέτερο και μη πολικό.

(b) Επαγόμενο δίπολο

- Υπάρχει ένα μόνιμο δίπολο (αριστερά).
- Πλησιάζει ένα συμμετρικό (μη πολικό) άτομο.
- Το ηλεκτρονικό νέφος του δεύτερου παραμορφώνεται.
- Δημιουργείται **επαγόμενο δίπολο**.
- Αναπτύσσεται ασθενής έλξη → van der Waals bond.

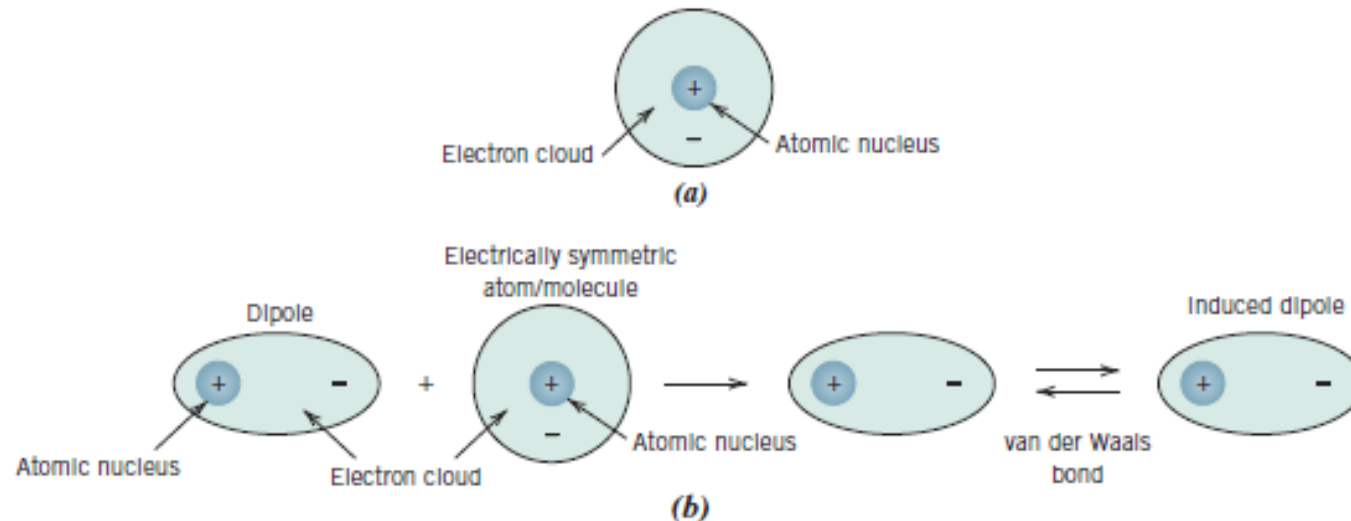


Figure 2.21 Schematic representations of (a) an electrically symmetric atom and (b) how an electric dipole induces an electrically symmetric atom/molecule to become a dipole—also the van der Waals bond between the dipoles.

Δίπολο – επαγόμενο δίπολο

Δεσμός Υδρογόνου

- Ειδική περίπτωση δευτερογενούς δεσμού (van der Waals)
- Ισχυρότερος από άλλους van der Waals
- Αναπτύσσεται μεταξύ πολικών μορίων

Όταν το H είναι ομοιοπολικά δεσμευμένο με:

- F
- O
- N

Δημιουργείται ισχυρό μόνιμο δίπολο. Το H αποκτά έντονο μερικώς θετικό φορτίο (δ^+)

Ιδιότητες που επηρεάζει

- Υψηλότερο σημείο βρασμού
- Αυξημένο ιξώδες
- Ισχυρή διαμοριακή συνοχή
- Δομή και ιδιότητες βιολογικών μορίων (DNA, πρωτεΐνες)

Παράδειγμα: Νερό (H₂O)

- ✓ Κάθε μόριο μπορεί να σχηματίσει έως 4 δεσμούς υδρογόνου
- ✓ Δημιουργείται τρισδιάστατο δίκτυο
- ✓ Εξηγεί:
 - Υψηλό σημείο βρασμού

Μικτοί Δεσμοί

❑ Στα περισσότερα στερεά υλικά δεν υπάρχει καθαρός τύπος δεσμού

❑ Οι δεσμοί έχουν μικτό χαρακτήρα:

- Ιοντικό – Ομοιοπολικό
- Ομοιοπολικό – Μεταλλικό
- Μεταλλικό – Ιοντικό

Παραδείγματα

- Κεραμικά → Ιοντικός + Ομοιοπολικός
- Ημιαγωγοί (Si, Ge, GaAs) → Ομοιοπολικός + Μεταλλικός
- Διαμεταλλικές ενώσεις → Μεταλλικός + Ιοντικός

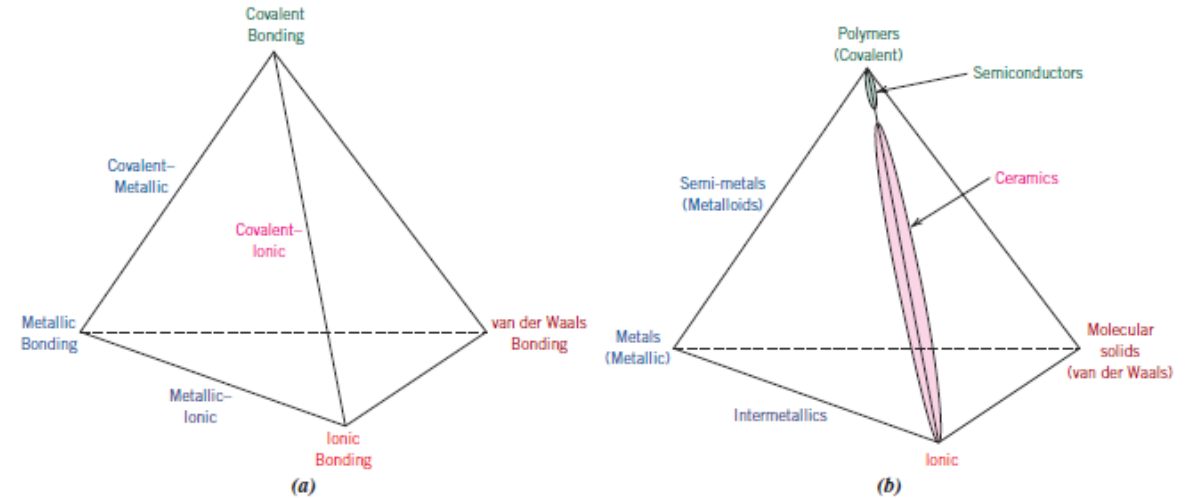


Figure 2.25 (a) Bonding tetrahedron: Each of the four extreme (or pure) bonding types is located at one corner of the tetrahedron; three mixed bonding types are included along tetrahedron edges. (b) Material-type tetrahedron: correlation of each material classification (metals, ceramics, polymers, etc.) with its type(s) of bonding.

Άσκηση:

(α) Να αναφέρετε δύο σημαντικές κβαντομηχανικές αρχές που σχετίζονται με το πρότυπο του Bohr για το άτομο.

(β) Να αναφέρετε δύο σημαντικές επιπλέον βελτιώσεις που προέκυψαν από το κυματομηχανικό (wave-mechanical) μοντέλο του ατόμου.

Απάντηση:

(α) Κβάντωση της ενέργειας

Τα ηλεκτρόνια μπορούν να έχουν μόνο συγκεκριμένες, διακριτές τιμές ενέργειας (επιτρεπόμενες ενεργειακές στάθμες).

Μεταπτώσεις ηλεκτρονίων μεταξύ ενεργειακών σταθμών

Η απορρόφηση ή εκπομπή ενέργειας γίνεται όταν το ηλεκτρόνιο μεταπηδά από μία επιτρεπόμενη στάθμη σε άλλη (εκπομπή/απορρόφηση φωτονίου).

(β) Κυματοσωματιδιακός χαρακτήρας του ηλεκτρονίου

Το ηλεκτρόνιο δεν θεωρείται απλώς σωματίδιο σε τροχιά, αλλά περιγράφεται ως κύμα.

Περιγραφή θέσης μέσω πιθανότητας (τροχιακά)

Δεν υπάρχουν καθορισμένες κυκλικές τροχιές.

Η θέση του ηλεκτρονίου περιγράφεται από κατανομή πιθανότητας (ατομικά τροχιακά).

Ασκήσεις

Άσκηση:

Σε σχέση με τα ηλεκτρόνια και τις ηλεκτρονικές καταστάσεις, τι καθορίζει ο καθένας από τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς;

Απάντηση:

Κάθε ηλεκτρόνιο σε ένα άτομο περιγράφεται από τέσσερις κβαντικούς αριθμούς

Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

- ✓ Καθορίζει το ενεργειακό επίπεδο
- ✓ Σχετίζεται με το μέγεθος του τροχιακού
- ✓ Όσο μεγαλύτερο το n → τόσο μεγαλύτερη ενέργεια και απόσταση από τον πυρήνα

Τιμές: $n = 1, 2, 3, \dots$

Αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός (l)

- ✓ Καθορίζει το σχήμα του τροχιακού
- ✓ Συνδέεται με το είδος του υποφλοιού

Τιμές: $l = 0$ έως $(n - 1)$

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)

- ✓ Καθορίζει τον προσανατολισμό του τροχιακού στο χώρο
- ✓ Δείχνει πόσα τροχιακά υπάρχουν σε κάθε υποφλοιό

Τιμές:

$$m_l = -l \text{ έως } +l$$

Κβαντικός αριθμός spin (m_s)

- ✓ Καθορίζει τη φορά περιστροφής (spin) του ηλεκτρονίου

Τιμές:

$$m_s = +1/2 \text{ ή } -1/2$$

Ασκήσεις

Άσκηση:

Να δοθούν οι ηλεκτρονιακές διαμορφώσεις για τα ακόλουθα ιόντα:

Fe^{2+} ($Z = 26$), Al^{3+} ($Z = 13$), Cu^+ ($Z = 29$) και O^{2-} ($Z = 8$).

Ασκήσεις

Άσκηση:

Να δοθούν οι ηλεκτρονιακές διαμορφώσεις για τα ακόλουθα ιόντα:

Fe^{2+} ($Z = 26$), Al^{3+} ($Z = 13$), Cu^+ ($Z = 29$) και O^{2-} ($Z = 8$).

Απάντηση:

Αφαιρούνται πρώτα τα ηλεκτρόνια από το 4s και μετά από το 3d.

Fe^{2+}

Fe ($Z = 26$)

Ουδέτερο: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

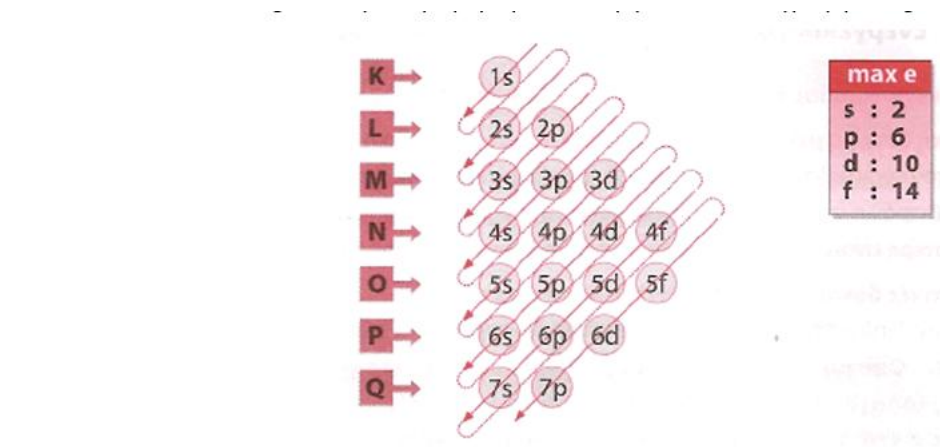
Αφαιρώ $2e^-$ από 4s άρα $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$ ή $[\text{Ar}]3d^6$

Al^{3+}

Al ($Z = 13$)

Ουδέτερο: $[\text{Ne}]3s^2 3p^1$

Αφαιρούμε 3 ηλεκτρόνια: $[\text{Ne}]$



Η κατάταξη είναι η: $2p < 3p < 4s < 3d < 4p < 4f$

Cu^+

Cu ($Z = 29$)

Ουδέτερο: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

= $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^1$

Αφαιρούμε 1 ηλεκτρόνιο από 4s: $[\text{Ar}]3d^{10}$

O^{2-}

O ($Z = 8$)

Ουδέτερο: $1s^2 2s^2 2p^4$

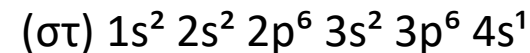
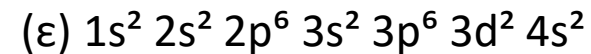
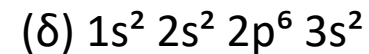
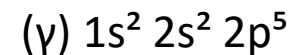
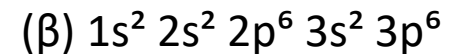
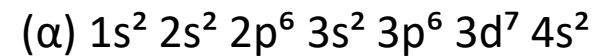
Προσθέτουμε 2 ηλεκτρόνια: $1s^2 2s^2 2p^6$ ή $[\text{Ne}]$

Ασκήσεις

Άσκηση:

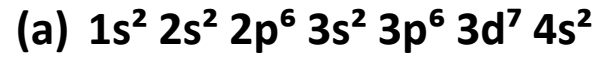
Να προσδιορίσετε αν καθεμία από τις παρακάτω ηλεκτρονικές διαμορφώσεις αντιστοιχεί σε ευγενές αέριο, αλογόνο, αλκάλιο μέταλλο, αλκαλική γαία, μεταβατικό μέταλλο

Να αιτιολογήσετε την επιλογή σας.

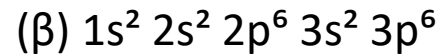


Ασκήσεις

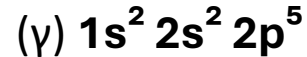
Απάντηση:



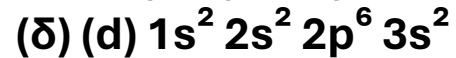
$[Ar]3d^7 4s^2 \rightarrow$ d ηλεκτρόνια και μη πλήρης συμπληρωμένη d στιβάδα άρα **μεταβατικό μέταλλο**.



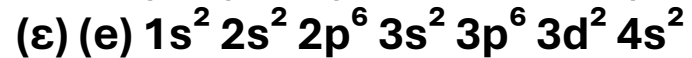
$[Ne]3s^2 3p^6 = [Ar] \rightarrow$ πλήρη συμπληρωμένη εξωτερική στιβάδα \rightarrow ευγενές αέριο



Εξωτερική στιβάδα: $2s^2 2p^5 \rightarrow$ 7 ηλεκτρόνια σθένους \rightarrow **Αλογόνο**



Εξωτερική στιβάδα $3s^2 \rightarrow$ 2 ηλεκτρόνια σθένους \rightarrow **Αλκαλική γαία**



$[Ar]3d^2 4s^2 \rightarrow$ d ηλεκτρόνια \rightarrow Μη πλήρης d \rightarrow **Μεταβατικό μέταλλο**



$[Ar]4s^1 \rightarrow$ 1 ηλεκτρόνιο σθένους \rightarrow **Αλκάλιο μέταλλο**

Άσκηση:

Να εξηγήσετε γιατί το υδροφθόριο (HF) έχει υψηλότερη θερμοκρασία βρασμού από το υδροχλώριο (HCl) (19.4°C έναντι -85°C), παρόλο που το HF έχει μικρότερο μοριακό βάρος.

Άσκηση:

Να εξηγήσετε γιατί το υδροφθόριο (HF) έχει υψηλότερη θερμοκρασία βρασμού από το υδροχλώριο (HCl) (19.4°C έναντι -85°C), παρόλο που το HF έχει μικρότερο μοριακό βάρος.

Απάντηση:

Η θερμοκρασία βρασμού εξαρτάται κυρίως από την ισχύ των διαμοριακών δυνάμεων.

Το φθόριο είναι πολύ ηλεκτραρνητικό. Ο δεσμός H–F είναι έντονα πολικός άρα σχηματίζονται ισχυροί δεσμοί υδρογόνου μεταξύ των μορίων. Οι δεσμοί υδρογόνου είναι σημαντικά ισχυρότεροι από τις απλές δυνάμεις van der Waals ή τις διπολικές αλληλεπιδράσεις.

Στο HCl ο δεσμός H–Cl είναι λιγότερο πολικός. Δεν σχηματίζονται δεσμοί υδρογόνου. Επομένως υπάρχουν μόνο ασθενείς διπολικές και δυνάμεις διασποράς.

Ασκήσεις

Άσκηση:

Ποιος τύπος ή ποιοι τύποι δεσμού αναμένονται για τα ακόλουθα υλικά: ορείχαλκος (brass, κράμα Cu–Zn), εποξική ρητίνη (epoxy), θειούχο βάριο (BaS), στερεό ξένο (solid xenon), μπρούντζος (bronze), νάιλον (nylon), φωσφίδιο αλουμινίου (AlP)

Άσκηση:

Ποιος τύπος ή ποιοι τύποι δεσμού αναμένονται για τα ακόλουθα υλικά: ορείχαλκος (brass, κράμα Cu–Zn), εποξική ρητίνη (epoxy), θειούχο βάριο (BaS), στερεό ξένο (solid xenon), μπρούντζος (bronze), νάιλον (nylon), φωσφίδιο αλουμινίου (AlP)

Απάντηση:

- ορείχαλκος (brass, κράμα Cu–Zn) → Κράμα δύο μετάλλων → Μεταλλικός δεσμός
- εποξική ρητίνη (epoxy) → πολυμερές → Ομοιοπολικοί δεσμοί και Δευτερογενείς δεσμοί μεταξύ αλυσίδων → ομοιοπολικός + van der Waals
- θειούχο βάριο (BaS) → Μέταλλο + αμέταλλο → Μεγάλη διαφορά ηλεκτραρνητικότητας → Ιοντικός (με μικρό ομοιοπολικό χαρακτήρα)
- στερεό ξένο (solid xenon) → Ευγενές αέριο → Δεν σχηματίζει πρωτογενείς δεσμούς → van der Waals
- μπρούντζος → Cu–Sn → κράμα μετάλλων → Μεταλλικός δεσμός
- νάιλον (nylon) → Ομοιοπολικοί δεσμοί κατά μήκος της αλυσίδας → Δεσμοί υδρογόνου μεταξύ αλυσίδων
→ Ομοιοπολικός + Δεσμοί υδρογόνου
- AlP (Aluminium phosphide) → Μέταλλο + αμέταλλο → Μέτρια διαφορά ηλεκτραρνητικότητας → Μικτός δεσμός (Ιοντικός + Ομοιοπολικός)

Ευχαριστώ για την προσοχή σας!