به نام خدا

فصل دوم: ساختار اتمی و پیوندهای بین اتمی

ساختار اتمی

- اتم
  - الکترون – 9.11×10^{-31} kg
  - پروتون } 1.67×10^{-27} kg
  - نوترون

- عدد اتمی = تعداد پروتونها در هسته اتم
- واحد جرم اتمی (A)= amu =1/12 اتم جرم کربن

وزن اتمی = وزن 6.022×10^{23} اتم یا مولکول

1 amu/atom = 1g/mol

C 12.011
H 1.008 etc.

عدد آووگادرو= 6.022×10^{23} = N_A

وزن هر اتم NA x =وزن اتمی یا مولکولی

N =تعداد نوترون

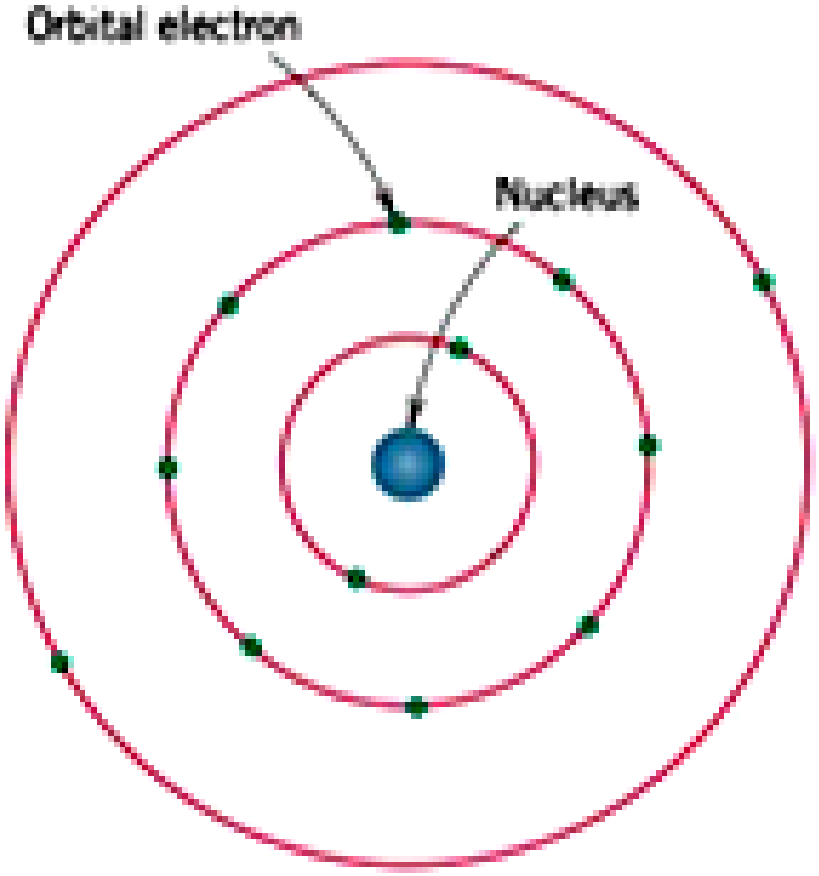
Z =تعداد پروتون

A= Z + N

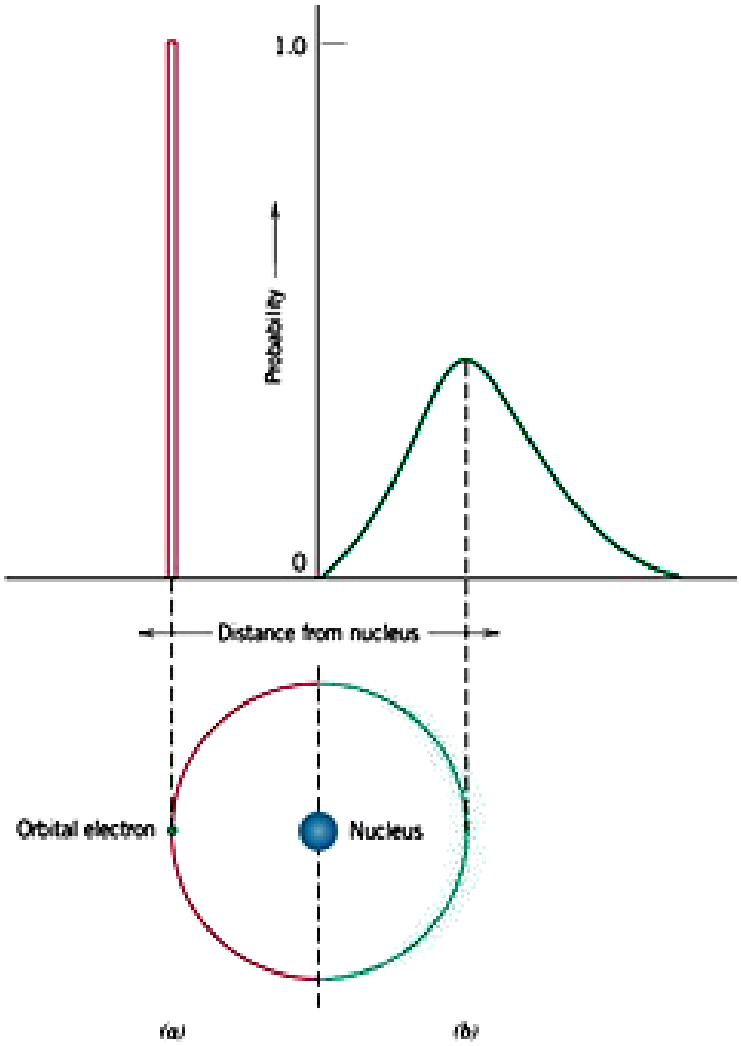
ساختار اتمی

- الکترونهای لایه ظرفیت تعیین کننده همه خواص زیر هستند:
  1) شیمیایی
  2) الکتریکی
  3) حرارتی
  4) نوری

اتم بور



مدل مکانیکی موجی اتم



ساختار الکترونیک

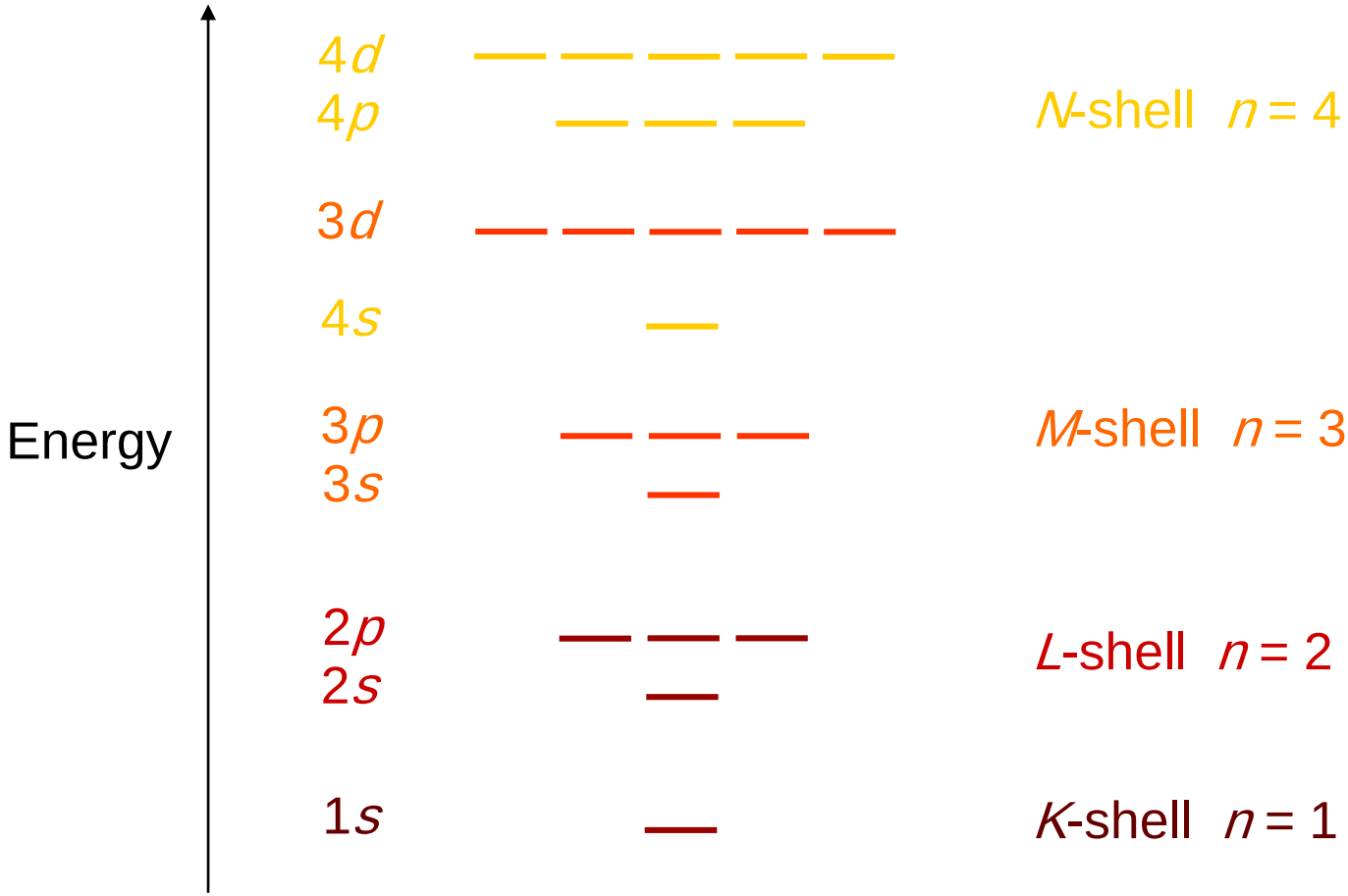
- الکترونها خاصیت موجی و ذره ای دارند.
  - این یعنی الکترونها داخل اوربیتالهایی هستند که با احتمال تعریف می شوند.
  - هر اوربیتال در سطح انرژی گسسته بوسیله اعداد کوانتومی تعیین می شود.

عدد کوانتوم	تخصیص
K, *L*, *M*, *N*, *O* (1, 2, 3, etc.)	n = اصلی (سطح انرژی)
s, *p*, *d*, *f* (0, 1, 2, 3,…, *n*-1)	l = فرعی (اوربیتالها)
1, 3, 5, 7 (-*l* to +*l*)	m_l = مغناطیس
½, -½	m_s = اسپین

حالتهای انرژی الکترون

الکترون ها...

- دارای حالت انرژی گسسته هستند.
- تمایل به اشغال پایین ترین حالت انرژی دارند.



بررسی عناصر

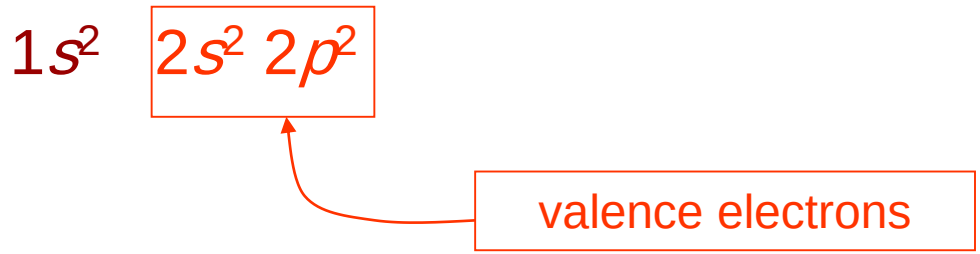
- برای بیشتر عناصر: پیکربندی الکترون پایدار نیست.

Element	Atomic #	Electron configuration	
Hydrogen	1	$1s^1$	
Helium	2	$1s^2$	(stable)
Lithium	3	$1s^2 2s^1$	
Beryllium	4	$1s^2 2s^2$	
Boron	5	$1s^2 2s^2 2p^1$	
Carbon	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	
...		...	
Neon	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	(stable)
Sodium	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	
Magnesium	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	
Aluminum	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	
...		...	
Argon	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	(stable)
...	...	...	
Krypton	36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$	(stable)

پیکربندی الکترون

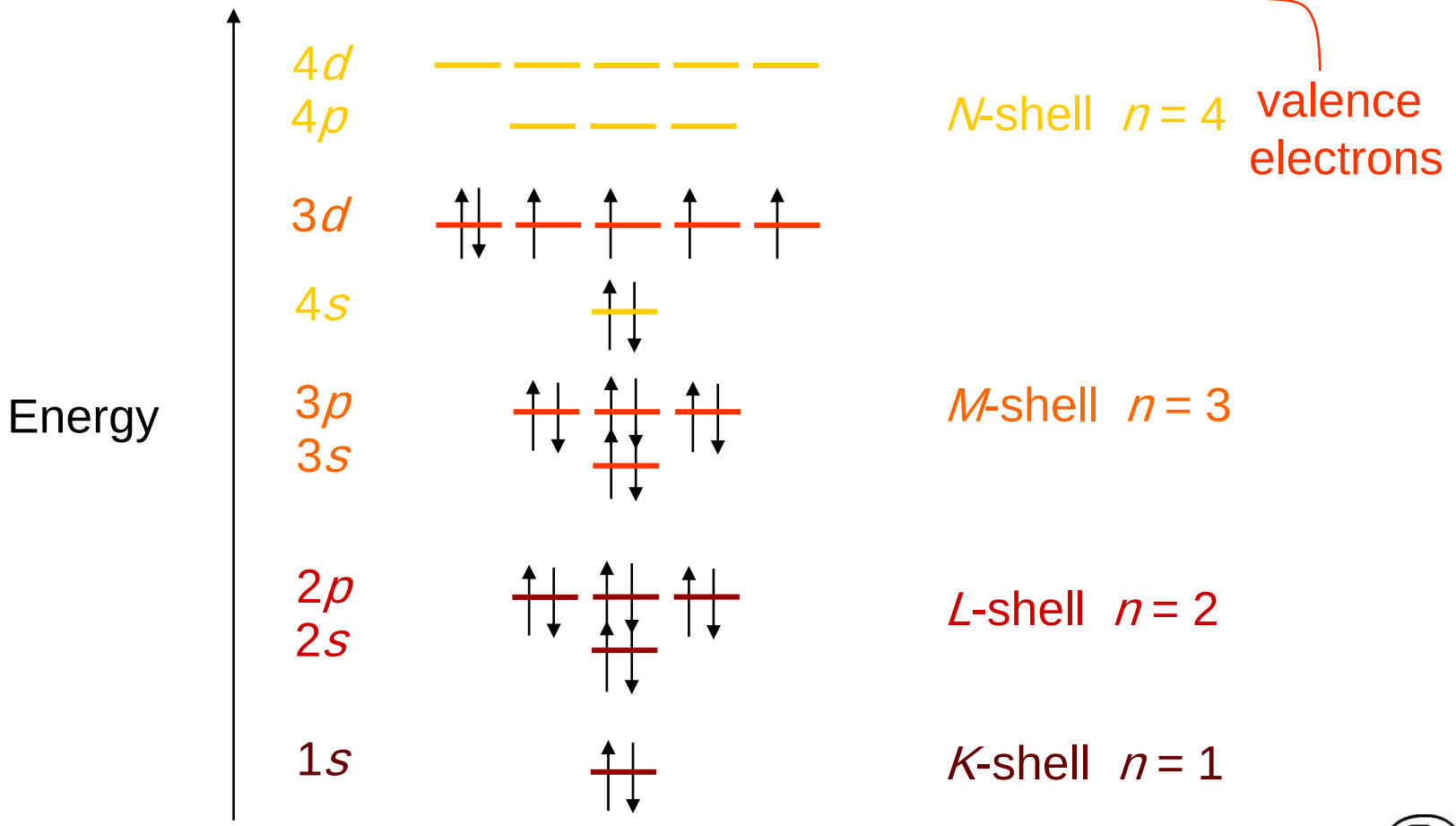
- الکترونهای لایه ظرفیت: آنهایی هستند که در لایه پرنشده قراردارند.
- لایه های پرشده پایدار تر هستند.
- الکترونهای لایه ظرفیت بیشترین تمایل را برای برقراری پیوند شیمیایی دارند.

– مثال: C (atomic number = 6)



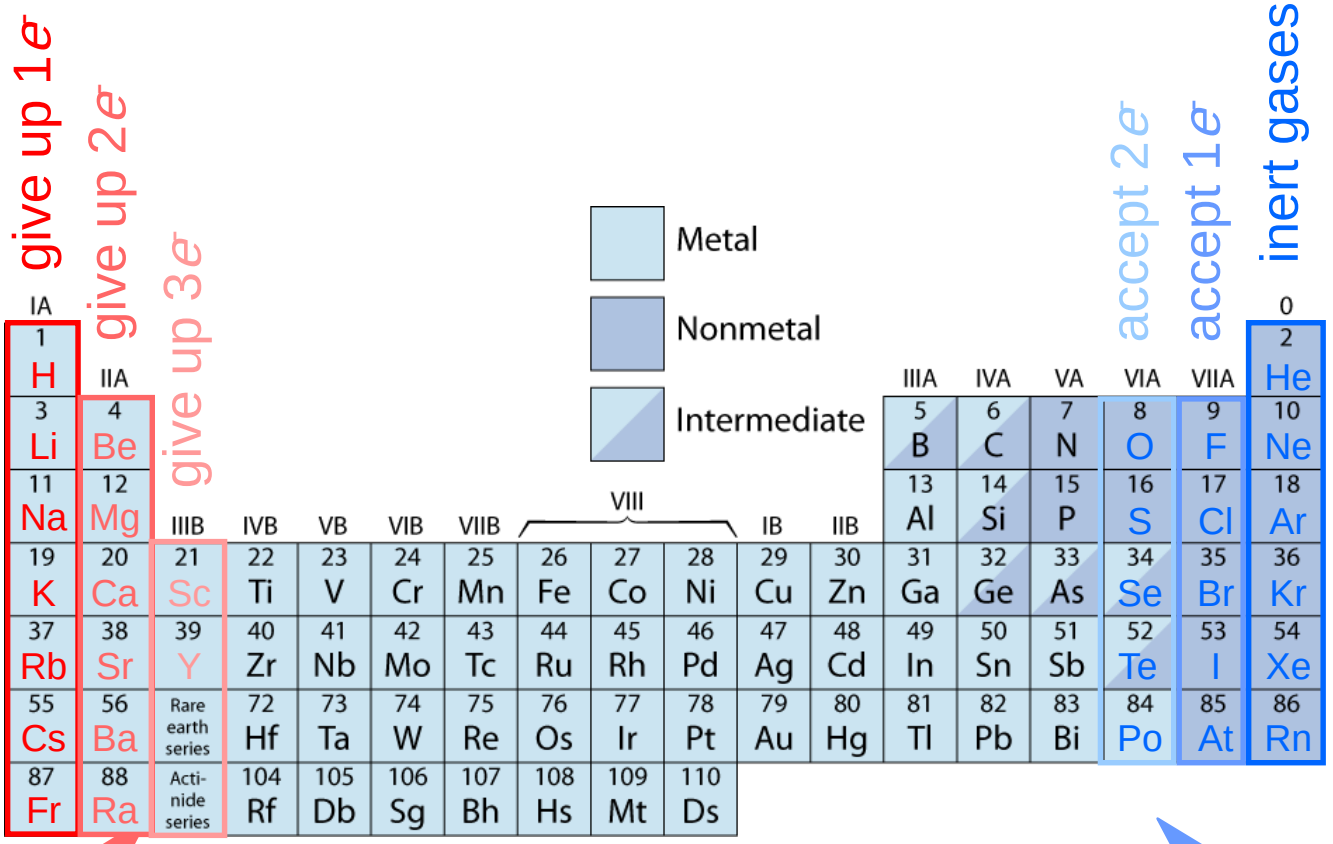
پیکربندی الکترون

مثال: Fe - atomic # = 26 $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^6$ $3d^6$ $4s^2$



جدول تناوبی

- ستون ها: ساختار لایه ظرفیت یکسان دارند.

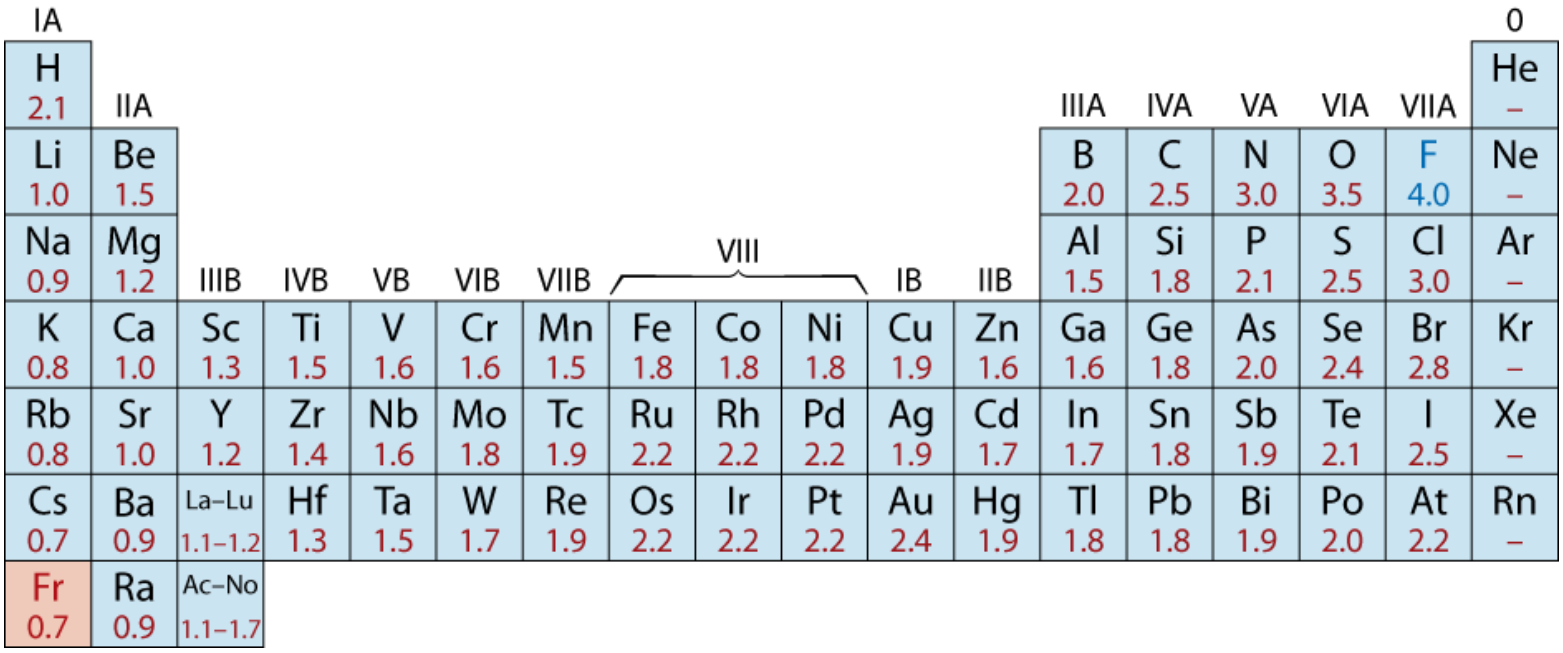


عناصر الکتروپوزیتیو: تمایل به دادن الکترون وو تبدیل شدن به یون مثبت دارند.

عناصر الکترونگاتیو: تمایل به گرفتن الکترون و تبدیل شدن به یون منفی را دارند.

الکترونگاتیویته

- دامنه آن بین 0.7 تا 4.0 است.
- مقادیر بالا: تمایل به گرفتن الکترون دارند.



Smaller electronegativity

Larger electronegativity

نافلز + فلز – پیوند یونی

الکترون می گیرد ↑ الکترون می دهد ↑

الکترونگاتیوی های نامشابه

ex: MgO

Mg $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$ [Ne] $3s^2$

O $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

Mg^{2+} $1s^2\ 2s^2\ 2p^6$ [Ne]

O^{2-} $1s^2\ 2s^2\ 2p^6$ [Ne]

الکترونها در لایه های مختلف

Table 2.1 The Number of Available Electron States in Some of the Electron Shells and Subshells

Principal Quantum Number n	*Shell Designation*	*Subshells*	*Number of States*	*Number of Electrons*	
				Per Subshell	*Per Shell*
1	*K*	*s*	1	2	2
2	*L*	*s*	1	2	8
		p	3	6	
3	*M*	*s*	1	2	18
		p	3	6	
		d	5	10	
4	*N*	*s*	1	2	32
		p	3	6	
		d	5	10	
		f	7	14	

الکترونها در سدیم و کلر

3s1

Sodium	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Magnesium	Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Aluminum	Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Silicon	Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
Phosphorus	P	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
Sulfur	S	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Chlorine	Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

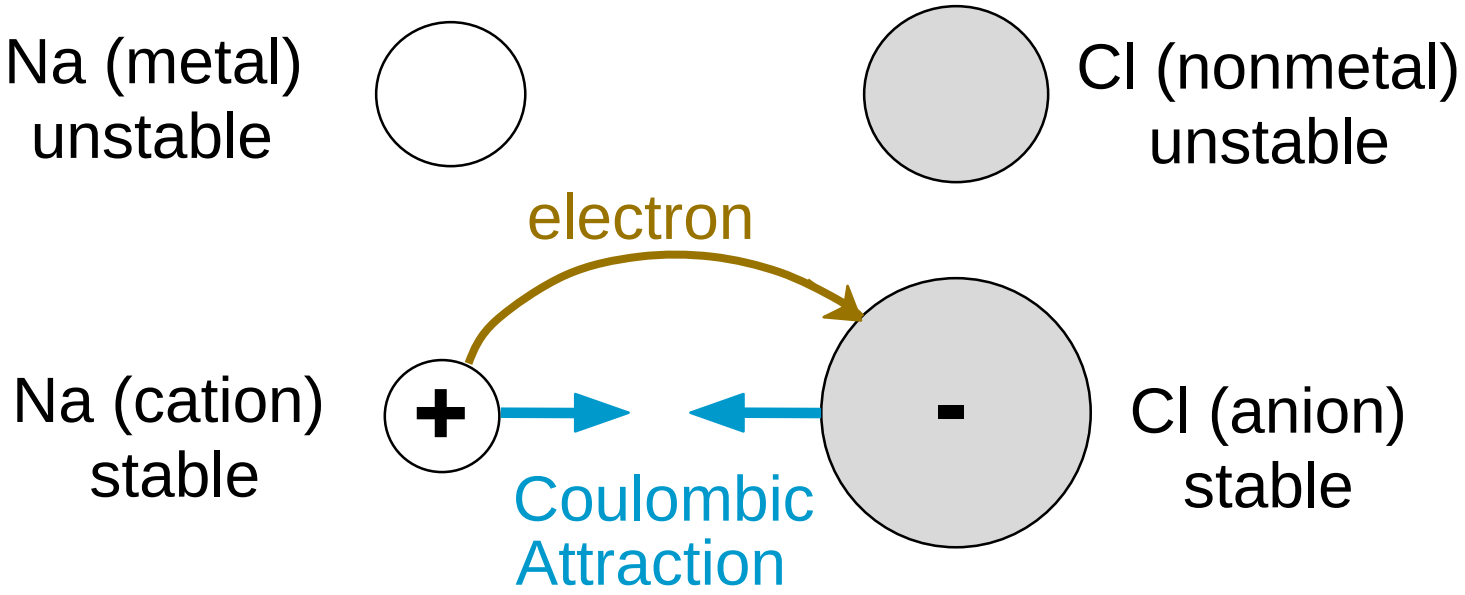
3s2 3p5

پیوندهای اولیه

- پیوند یونی
- پیوند کوالانسی
- پیوند فلزی

پیوند یونی

- بین یونهای مثبت و منفی اتفاق می افتد.
- نیاز به انتقال الکترون دارد.
- تفاوت زیاد در الکترونگاتیوی ها نیاز است.
- مثال: NaCl



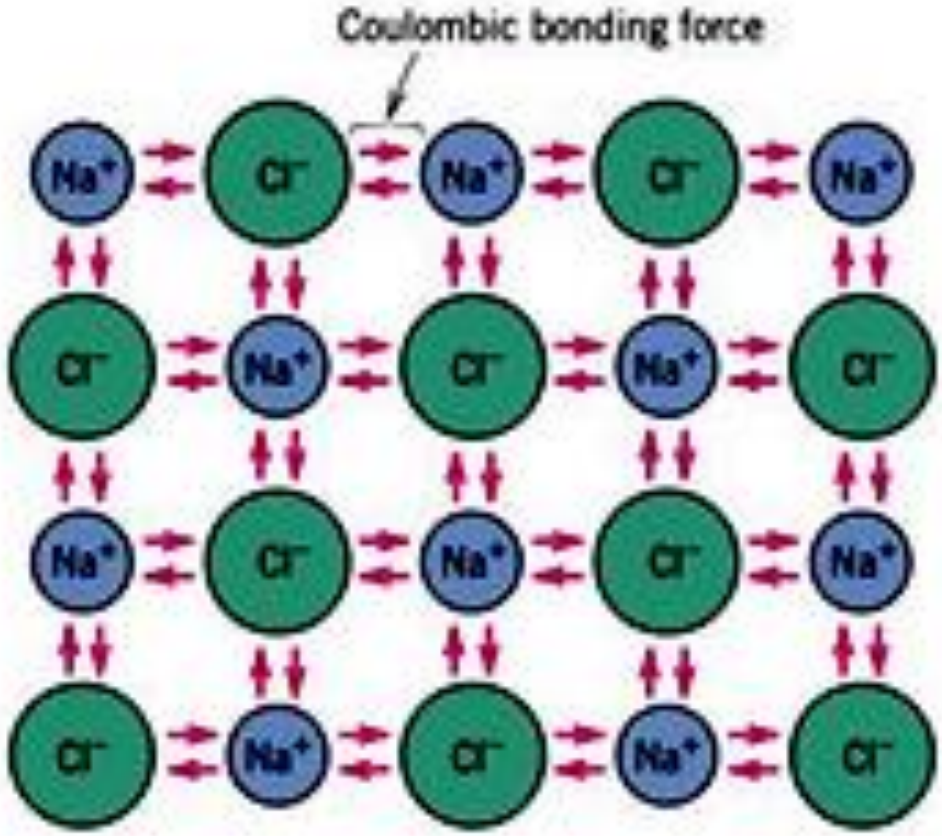
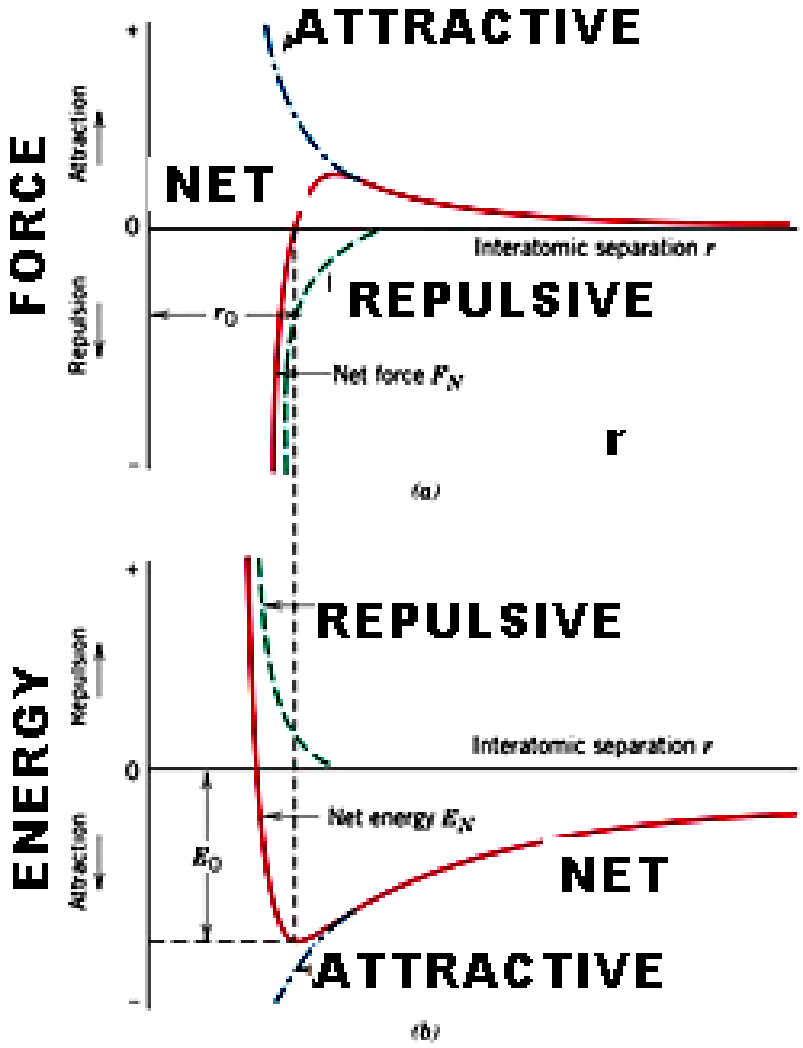


Figure 2.9
bonding in s

نیروها و انرژی های پیوندی



$$F_N = F_A + F_R \tag{2.2}$$

$$F_A + F_R = 0 \tag{2.3}$$

$$E = \int_r F \, dr \tag{2.4}$$

$$E_N = \int F_N dr \tag{2.5}$$

$$= \int_{\infty}^{r} F_A\,dr + \int_{\infty}^{r} F_R\,dr \qquad (2.6)$$

$$= E_A + E_R \qquad (2.7)$$

$$E_A = -\frac{A}{r} \qquad (2.8)$$

repulsive energy is[4]

$$E_R = \frac{B}{r^n} \qquad (2.9)$$

$A = (Z1 * Z2 * e^2)/(4*\pi*\varepsilon_0)$;

$e = 1.602 * 10^{(-19)}$ COULOMBS ;

$\varepsilon_0 = 8.85 * 10^{(-12)}$

Z1, Z2 = ظرفیت یونها

نیروها و انرژی های پیوندی

نیروی جاذبه بین یونهای K^+ و O^{2-} وقتی فاصله مراکز آنها $r0 = 1.5\ nm$ است چقدر است؟

حل:

نیروی جاذبه بین دو یون، FA، با مشتق گیری از رابطه انرژی جاذبه، معادله 2.8 به دست می آید:

$$F_A = \frac{dE_A}{dr} = \frac{d\left(-\frac{A}{r}\right)}{dr} = \frac{A}{r^2}$$

$$F_A = \frac{(Z_1 e)(Z_2 e)}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

$$= \frac{(1)(2)(1.602 \times 10^{-19}\ \text{C})^2}{(4)(\pi)(8.85 \times 10^{-12}\ \text{F/m})(1.5 \times 10^{-9}\ \text{m})^2}$$

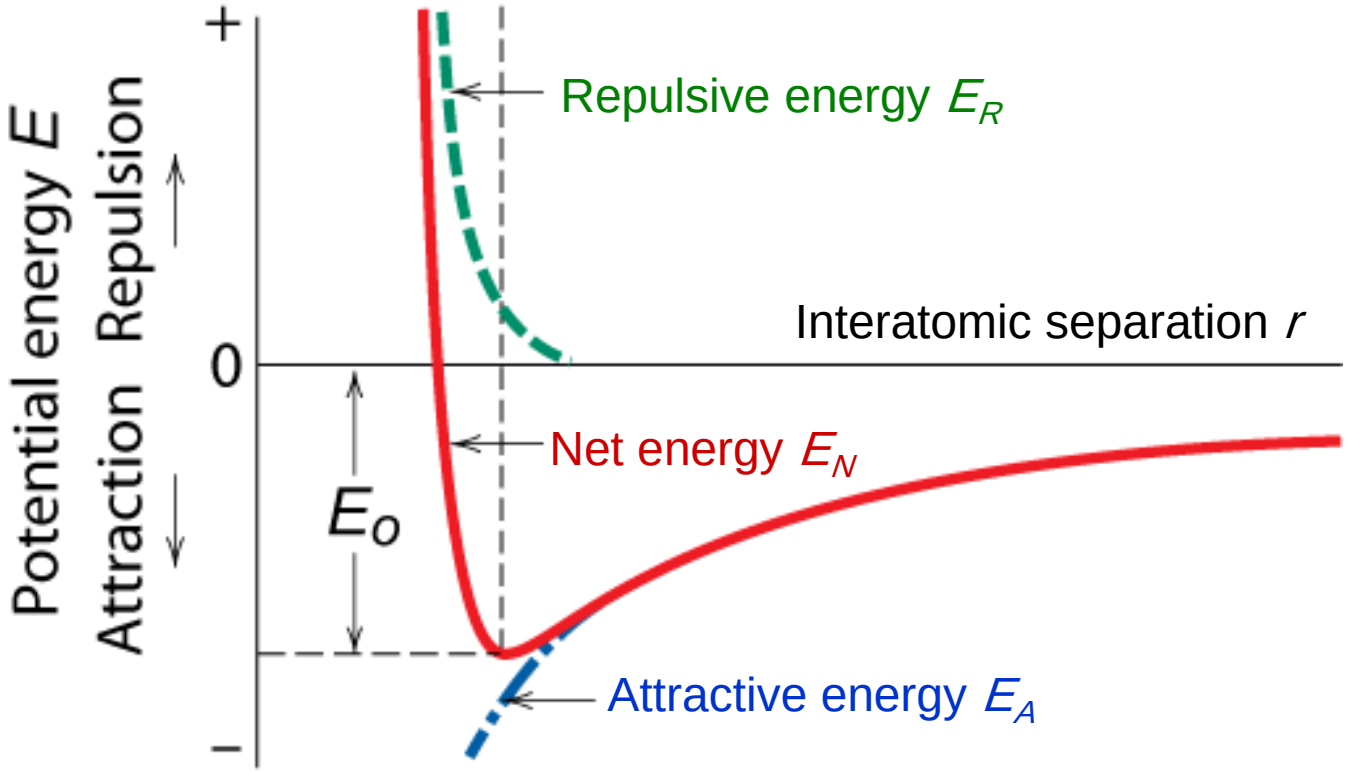
=2.05 × 10^(-10) N

پیوند یونی

- انرژی- پایدارترین حالت حداقل انرژی است.
  - تعادل انرژی ترمهای دافعه و جاذبه

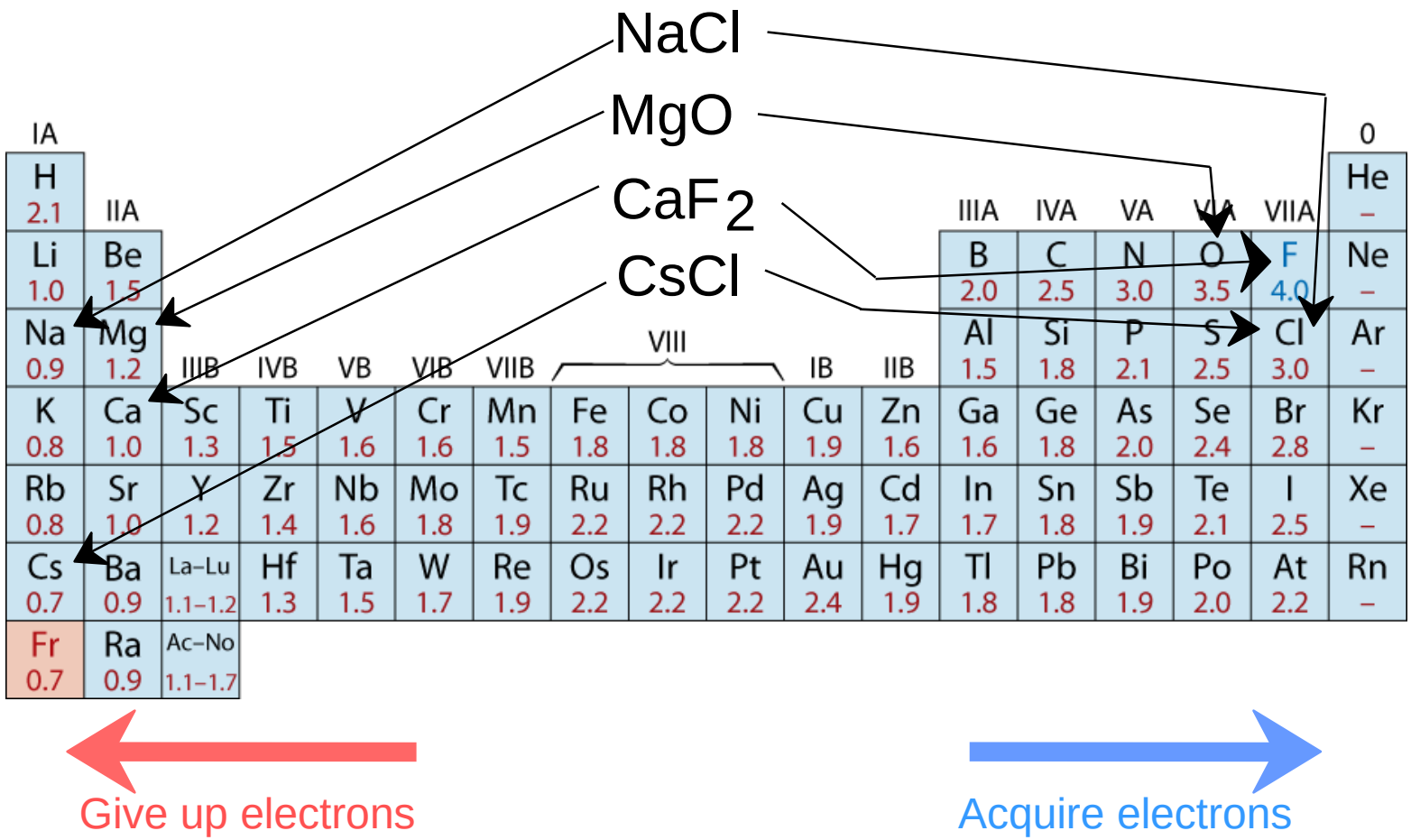
$$E_N = E_A + E_R = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n}$$

n = 8 for ions



مثالهایی از پیوندهای یونی

- پیوندهای برجسته در سرامیکها



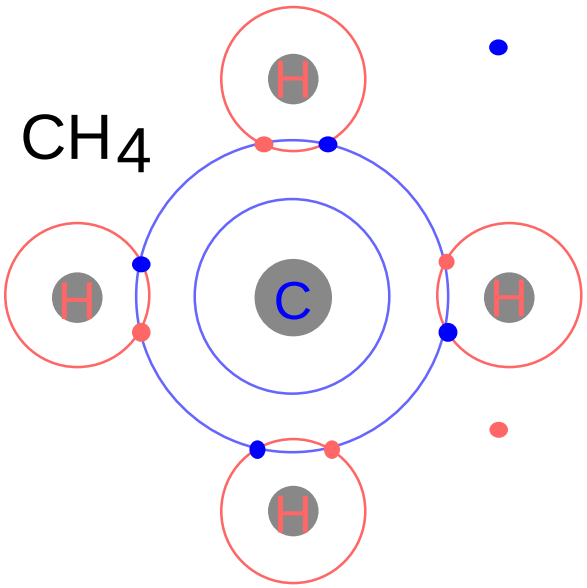
پیوند کوالانسی

- الکترونگاتیوی های مشابه: به اشتراک گذاری الکترون
- پیوندها توسط الکترونهای لایه طرفیت تعیین می شوند- اوربیتالهای s و p غالبا در پیوند شرکت می کنند.

- مثال: CH_4

C : چهار الکترون لایه ظرفیت دارد پس به چهار الکترون دیگر نیاز دارد

H : یک الکترون لایه ظرفیت دارد پس به یک الکترون دیگر نیاز دارد



پیوندهای اولیه

- پیوندهای ترکیبی یونی-کوالانسی

$$\%\ \text{ionic character} = \left(1 - e^{-\frac{(X_A - X_B)^2}{4}}\right) \times (100\%)$$

where X_A & X_B are Pauling electronegativities

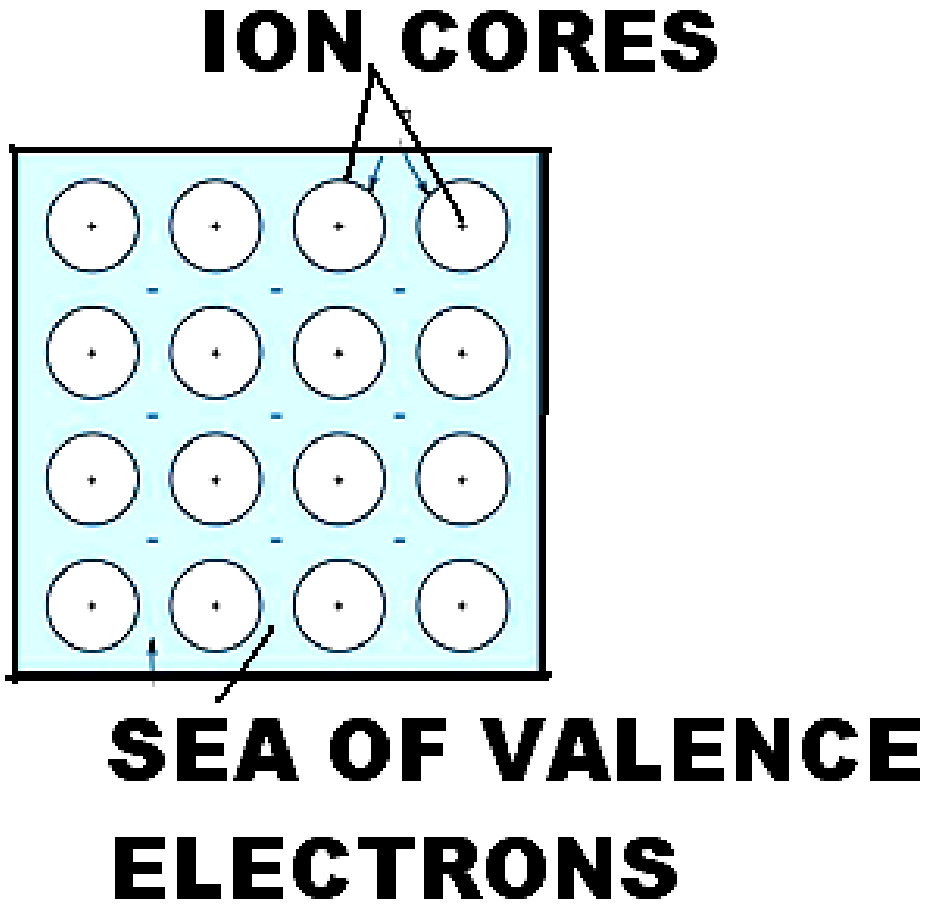
Ex: MgO $\quad X_{Mg} = 1.2$

$X_O = 3.5$

$$\%\,\text{ionic character} = \left(1 - e^{-\frac{(3.5-1.2)^2}{4}}\right) \times (100\%) = 73.4\%\,\text{ionic}$$

پیوند فلزی

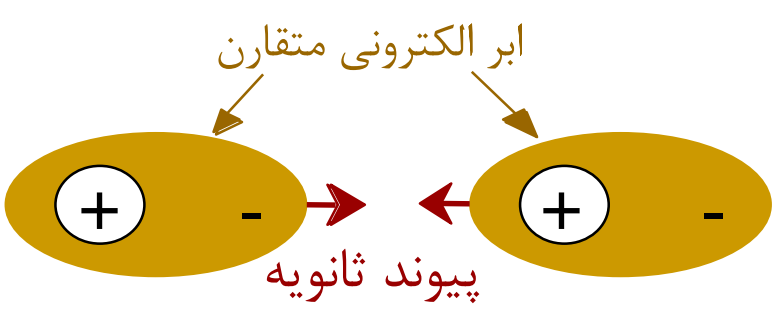
پیوند فلزی: هسته های مثبت اتم در دریایی از الکترون شناورند.



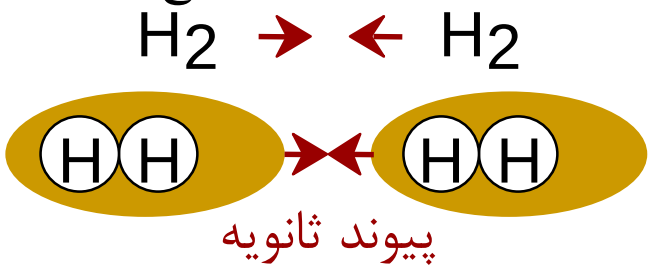
پیوندهای ثانویه

ناشی از برهمکنش بین دوقطبی ها است.

- دوقطبی های لحظه ای



مانند H2 مایع

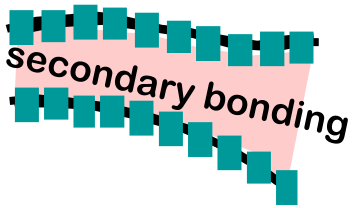


- دوقطبی های دائمی: بین مولکولها

– مثال کلی:

– مانند HCl مایع

– مانند پلیمرها

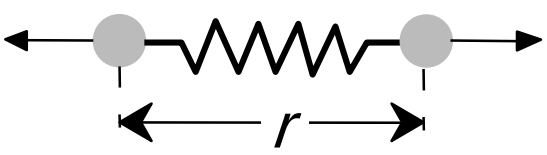


خلاصه: پیوندها

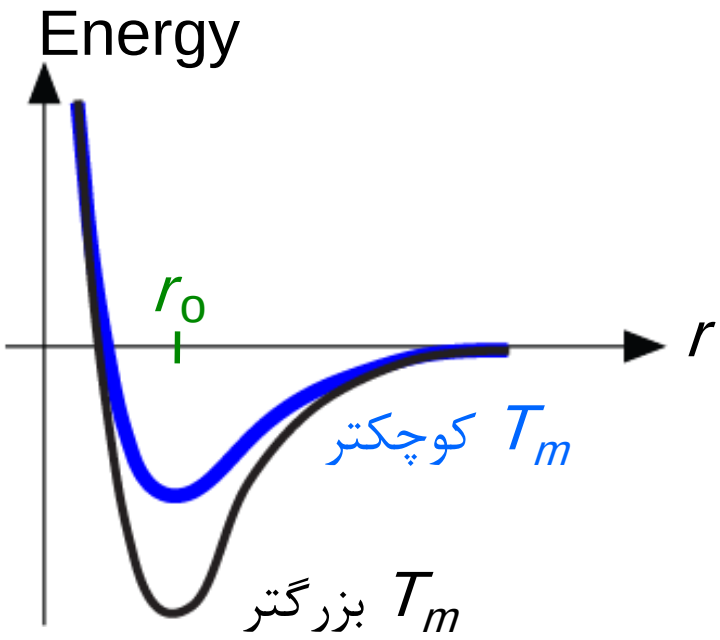
نوع	انرژی پیوند	توضیحات
یونی	زیاد	بی جهت (سرامیکها)
کوالانسی	متغیر زیاد: الماس کم: بیسموس	جهت دار (نیمه هادیها، سرامیکها و زنجیره های پلیمری)
فلزی	متغیر زیاد: تنگستن کم: جیوه	بی جهت (فلزات)
ثانویه	کمترین	جهت دار بین زنجیره های پلیمری بین مولکولها

خواص پیوند: T_m

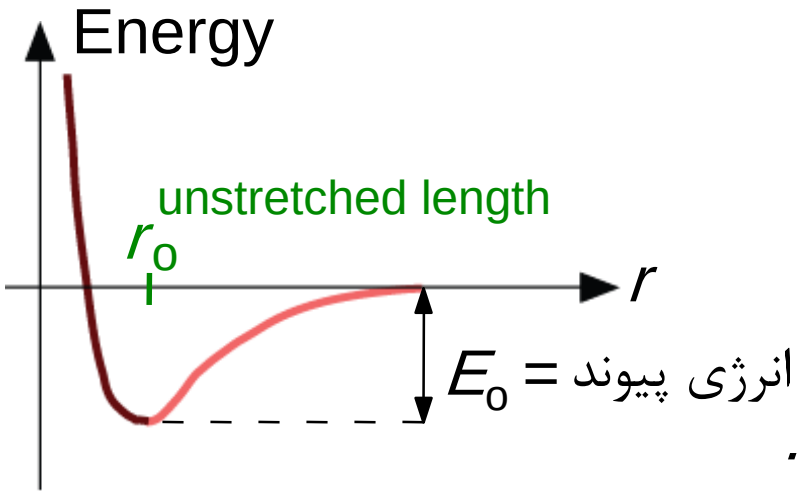
- طول پیوند، r



- دمای ذوب، T_m



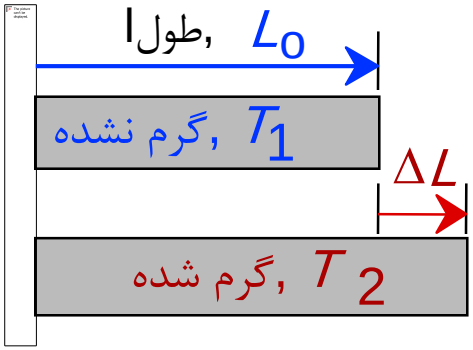
- Bond energy, E_o



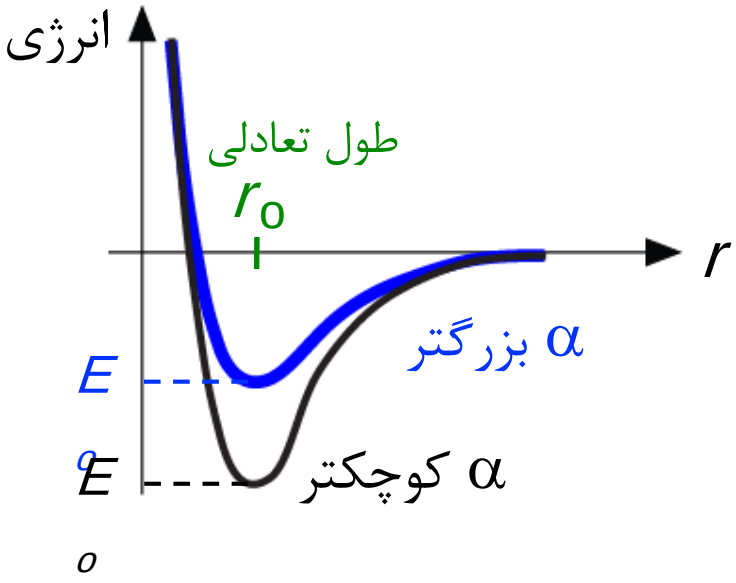
هرچه E_o بزرگتر باشد بزرگتر T_m است.

خواص پیوند: α

- ضریب انبساط حرارتی، α



$$\frac{\Delta L}{L_o} = \alpha\,(T_2 - T_1)$$



هرچه E_o بزرگتر باشد بزرگتر α است.

خلاصه: پیوندهای اولیه

سرامیکها
(پیوندهای اولیه و ثانویه)

انرژی پیوند زیاد
Tm زیاد
α کم

فلزات
(پیوند فلزی)

انرژی پیوند متغیر
E متوسط
Tm متوسط
α متوسط

پلیمرها
(کوالانسی و ثانویه)

پیوندهای ثانویه غالبند
E کم
Tm کم
α زیاد