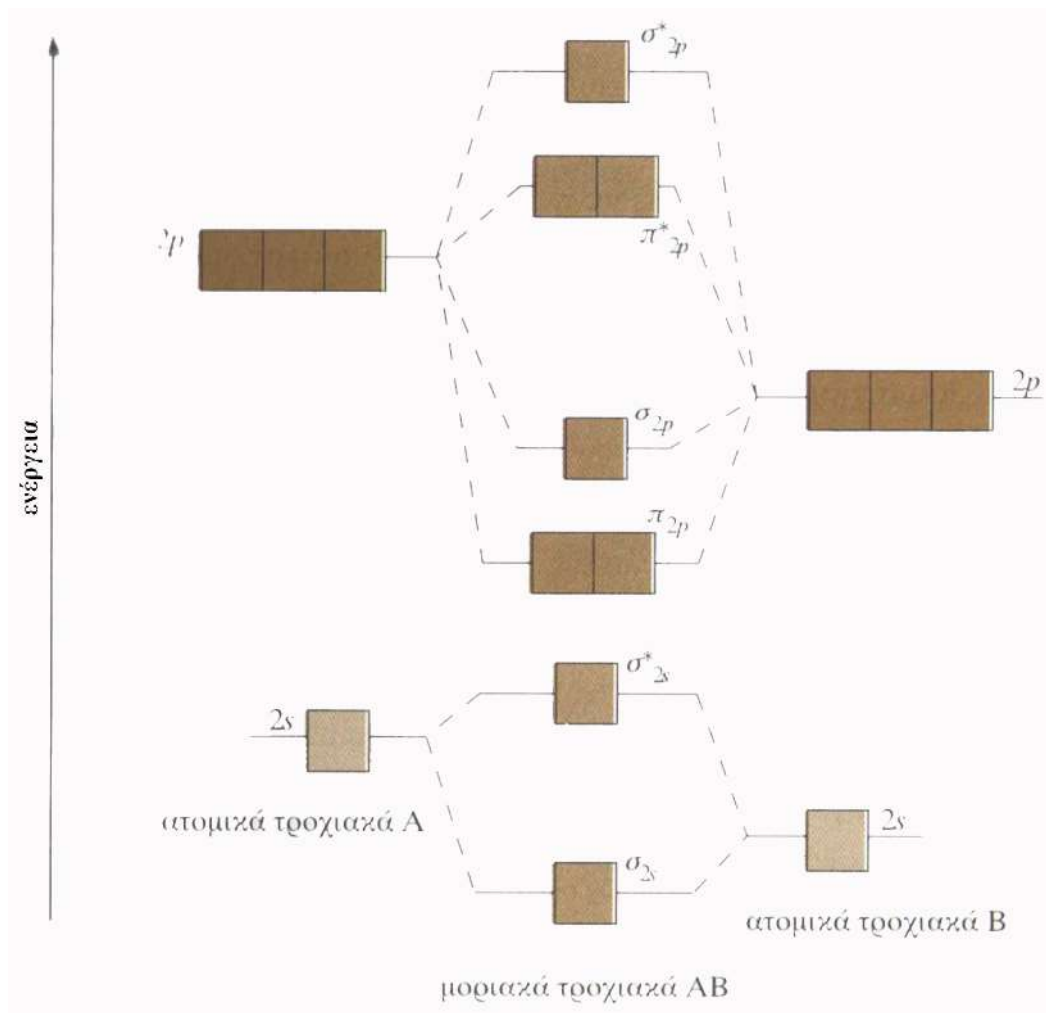


# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (ΜΟ)

- ❖ Ετεροπυρηνικά διατομικά μόρια ή ιόντα (πολικοί δεσμοί)
  - Το πιο ηλεκτραρνητικό στοιχείο (με ατομικά τροχιακά χαμηλότερης ενεργειακής στάθμης) συνεισφέρει περισσότερο στο δεσμικό μοριακό τροχιακό.
  - Ενώ το λιγότερο ηλεκτραρνητικό στοιχείο (με ατομικά τροχιακά υψηλότερης ενεργειακής στάθμης) συνεισφέρει περισσότερο στο αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό.

# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (ΜΟ)

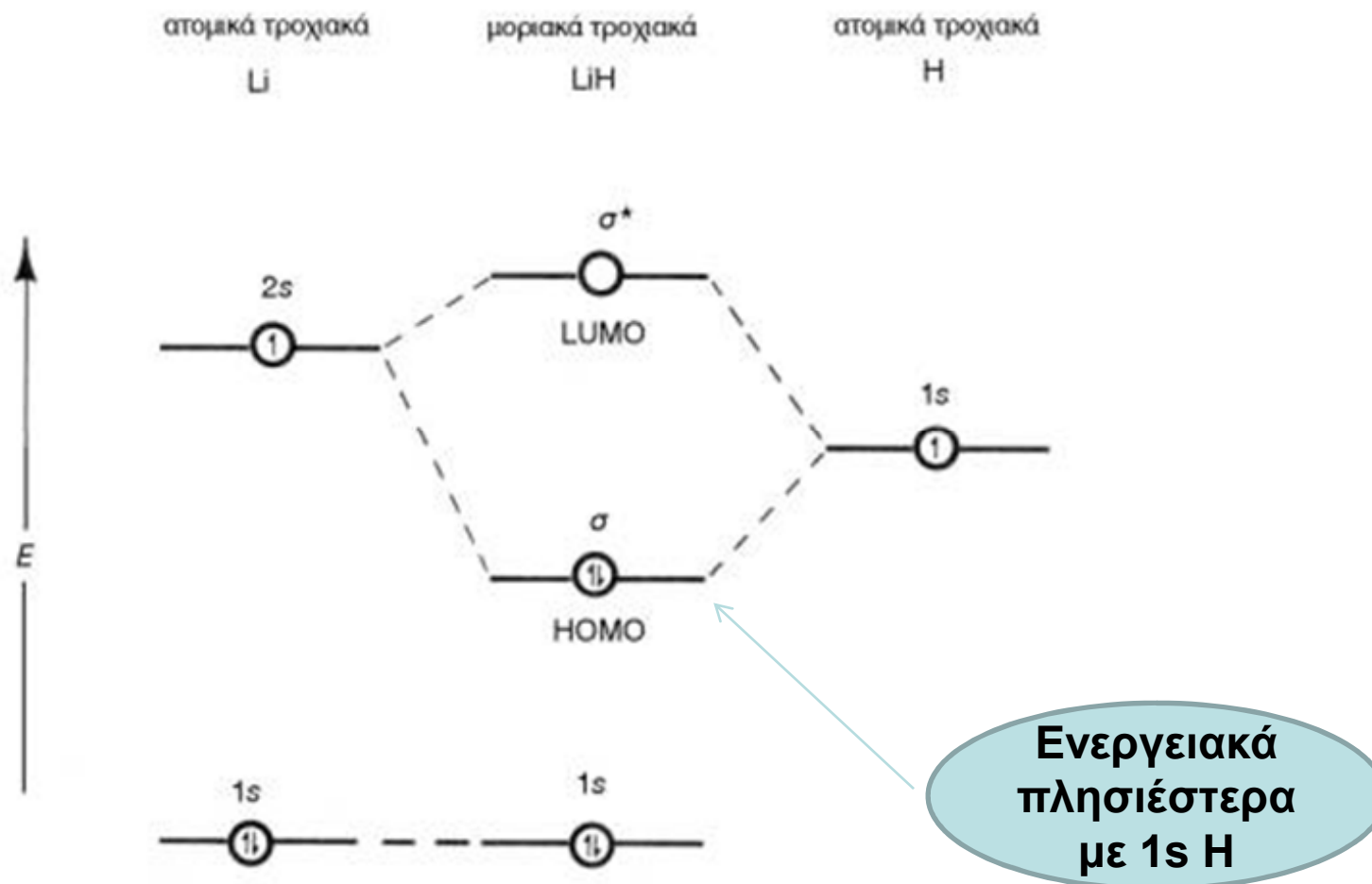
- ❖ Ετεροπυρηνικά διατομικά μόρια ή ιόντα AB (πολικό δεσμό) με το B να είναι ηλεκτραρνητικότερο του A



όπως  
 $B_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$

# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (ΜΟ)

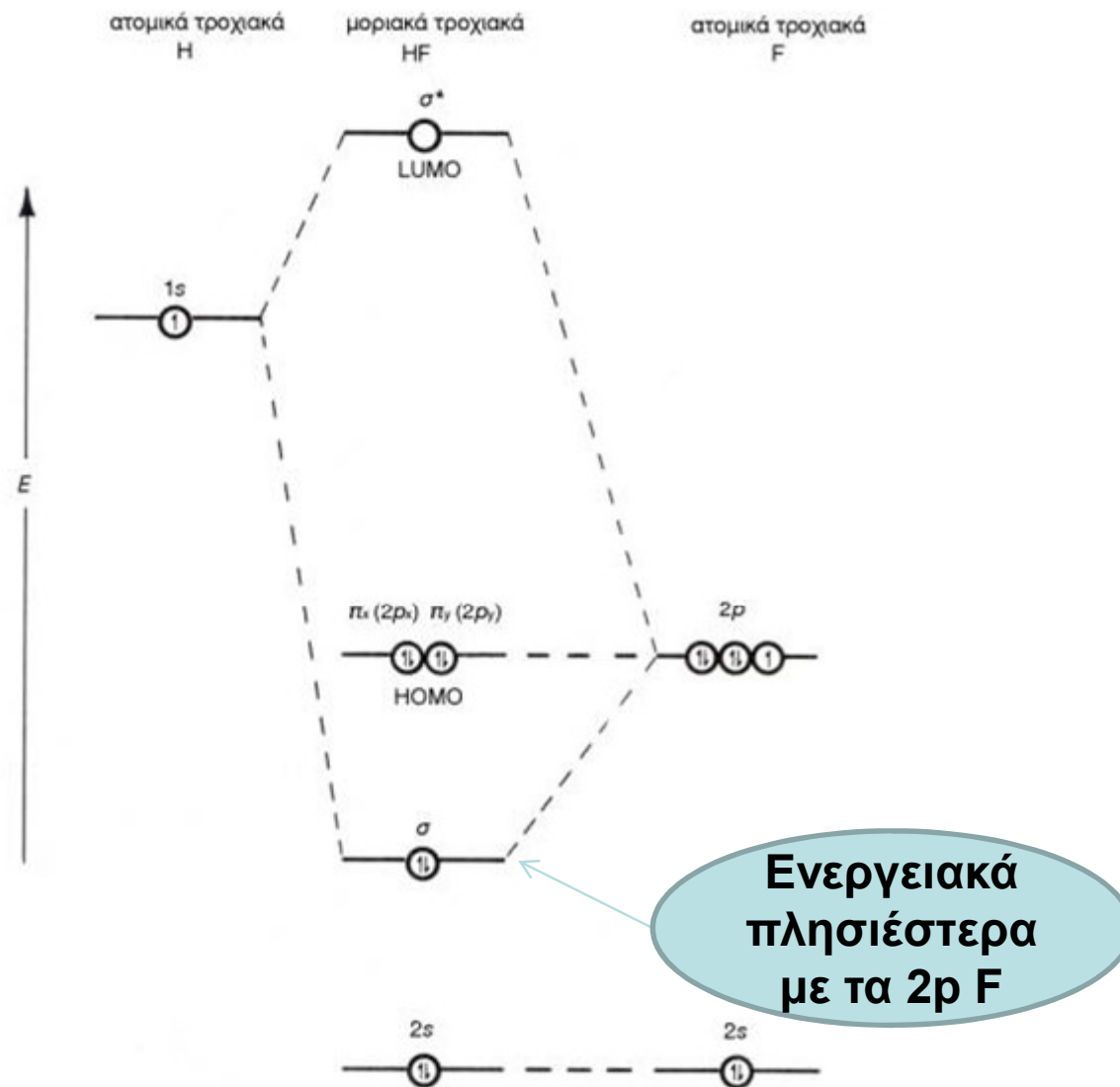
## ❖ Μόριο LiH



- Ηλεκτρονιακή δομή του LiH:  $(1s)^2(\sigma)^2$
- Τάξη δεσμού =  $\frac{1}{2} (2-0) = 1$

# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (ΜΟ)

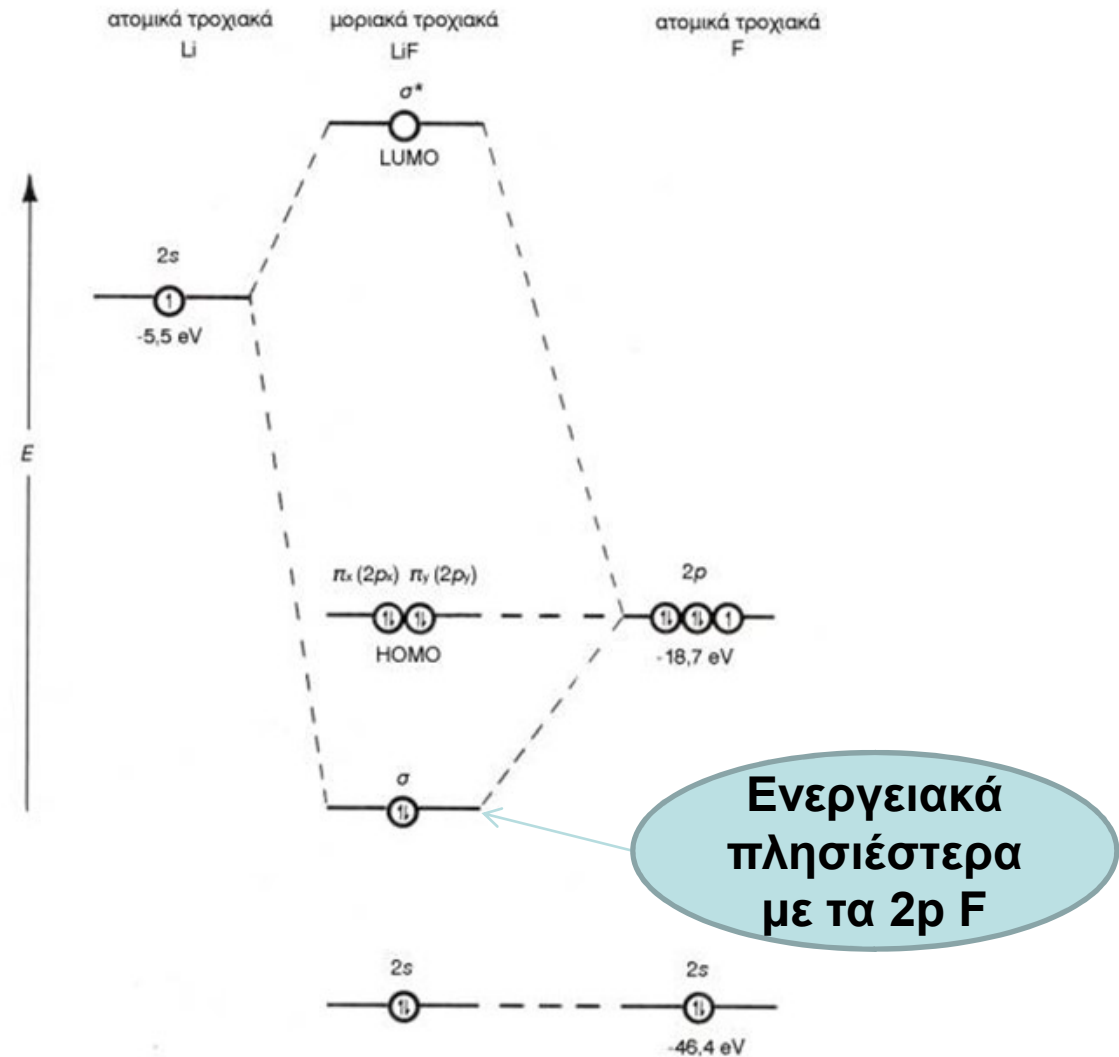
## ❖ Μόριο HF



- Ηλεκτρονιακή δομή του HF:  $(1s)^2(2s)^2(\sigma)^2(2p_x)^2(2p_y)^2$
- Τάξη δεσμού =  $\frac{1}{2} (2-0) = 1$

# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (ΜΟ)

## ❖ Μόριο LiF



- Ηλεκτρονιακή δομή του LiF:  $(1s_F)^2(1s_{Li})^2(2s)^2(\sigma)^2(2p_x)^2(2p_y)^2$
- Τάξη δεσμού =  $\frac{1}{2} (2-0) = 1$

# Μοριακά Τροχιακά

## ❖ Ασκήσεις

- Σχεδιάστε τα ενεργειακά διαγράμματα MO για το μόριο CO. Υπολογίστε με τη βοήθεια αυτών των διαγραμμάτων την τάξη δεσμού των ενώσεων: α) CO, β) CO<sup>+</sup>, γ) CO<sup>-</sup>. Ποιες από αυτές είναι παραμαγνητικές;
- Ποιο από τα ακόλουθα μόρια ή ιόντα περιμένετε να είναι παραμαγνητικά; (α) NO, (β) NF<sup>-</sup>, (γ) O<sub>2</sub><sup>2-</sup>, (δ) Ne<sub>2</sub><sup>2+</sup>, (ε) CN, (στ) C<sub>2</sub><sup>2+</sup>.
- Σχεδιάστε τα ενεργειακά διαγράμματα MO για τα CF και CF<sup>-</sup> και με βάση αυτά να δικαιολογήσετε τα αντίστοιχα μήκη δεσμών 128 pm και 139 pm.

# Μέταλλα

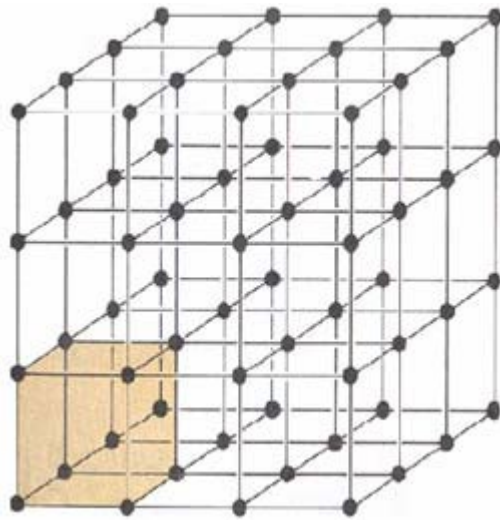
❖ Οι ιδιότητες των μετάλλων οφείλονται στη φύση και την ισχύ του μεταλλικού δεσμού.

## ➤ Κοινές Ιδιότητες Μετάλλων

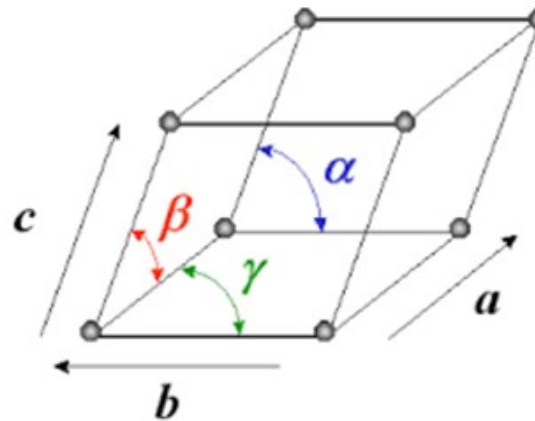
- ✓ Είναι πολύ καλοί αγωγοί τόσο της θερμότητας όσο και του ηλεκτρισμού
- ✓ Έχουν χαμηλή ενέργεια ιοντισμού
- ✓ Έχουν χαρακτηριστική μεταλλική λάμψη
- ✓ Είναι όλκιμα και ελατά
- ✓ Έχουν υψηλά σημεία τήξης και ζέσης
- ✓ Έχουν μεγάλη πυκνότητα
- ✓ Σχηματίζουν πολύ εύκολα κράματα (στερεά διαλύματα) με άλλα μέταλλα
- ✓ Είναι κρυσταλλικά υλικά

# Κρυσταλλικά Πλέγματα

- ❖ Τα μέταλλα είναι κρυσταλλικά υλικά στην στερεά κατάσταση. Τα άτομά τους τοποθετούνται σε μια τρισδιάστατη, κανονική και συμμετρική διάταξη που επαναλαμβάνεται στο χώρο. Το τρισδιάστατο αυτό δίκτυο είναι γνωστό ως κρυσταλλικό πλέγμα. Το μικρότερο τμήμα του κρυσταλλικού πλέγματος το οποίο διατηρεί όλα τα χαρακτηριστικά του όλου πλέγματος ονομάζεται μοναδιαία κυψελίδα.



Κρυσταλλικό πλέγμα



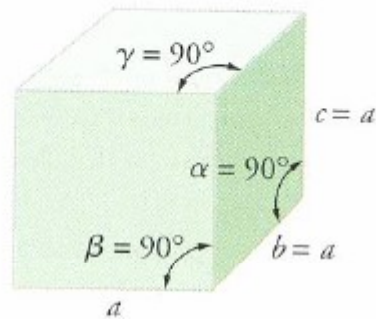
Μοναδιαία κυψελίδα

Η μοναδιαία κυψελίδα καθορίζεται αν είναι γνωστές οι τρεις ακμές  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , και οι τρεις γωνίες  $\alpha$ ,  $\beta$  και  $\gamma$ .

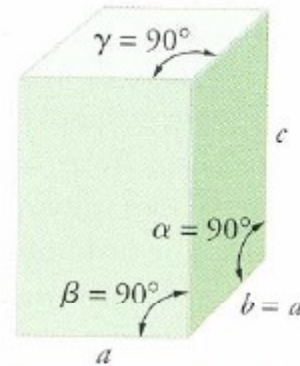


# Κρυσταλλικά Συστήματα

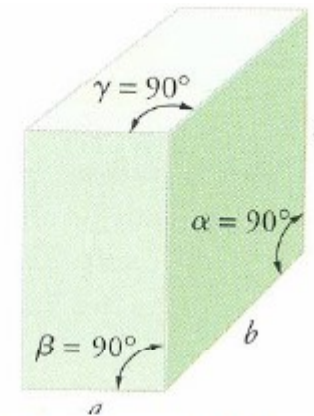
- ❖ Τα κρυσταλλικά στερεά με βάση τις διαστάσεις  $a$ ,  $b$ ,  $c$  και τις γωνίες  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  της μοναδιαίας κυψελίδας τους κατατάσσονται σε 7 κρυσταλλικά συστήματα.



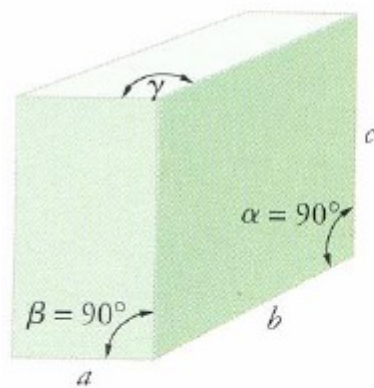
Κυβικό



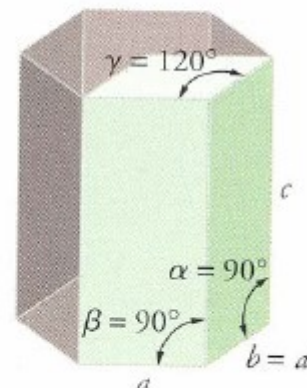
Τετραγωνικό



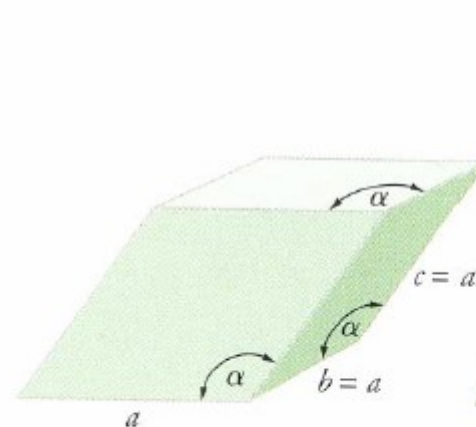
Ορθορομβικό



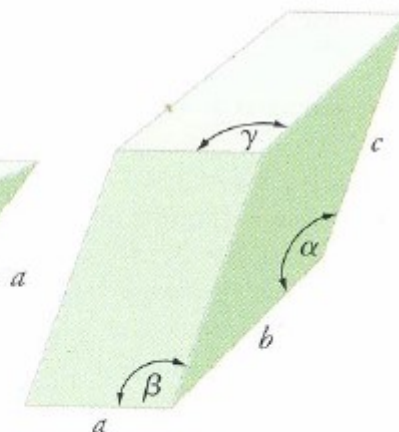
Μονοκλινές



Εξαγωνικό



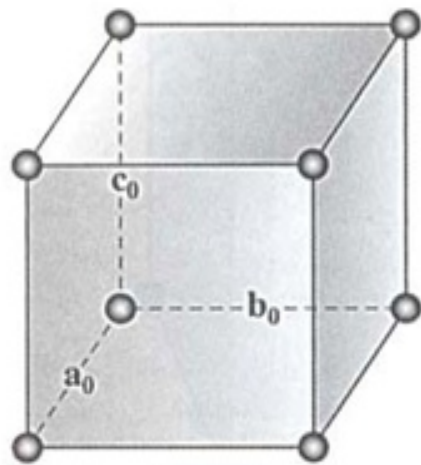
Ρομβοεδρικό



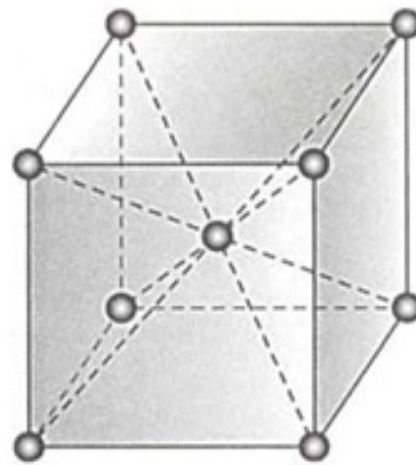
Τρικλινές

# Κρυσταλλικά Πλέγματα

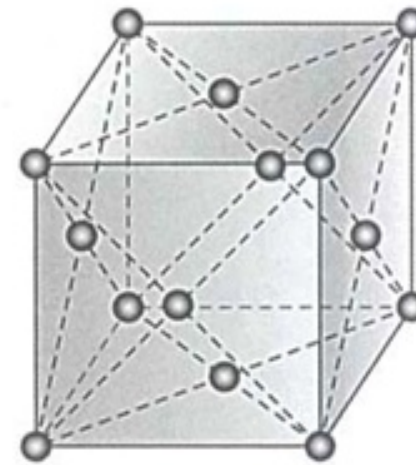
- ❖ Με αυτά τα 7 κρυσταλλικά συστήματα συνδέονται 14 διαφορετικά κρυσταλλικά πλέγματα.
- Το **κυβικό σύστημα** περιλαμβάνει τρία κρυσταλλικά πλέγματα με σταθερές  $a=b=c$  και  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ . Αυτά είναι α) το απλό (sc), β) το χωροκεντρωμένο (bcc) και γ) το εδροκεντρωμένο (fcc).



sc



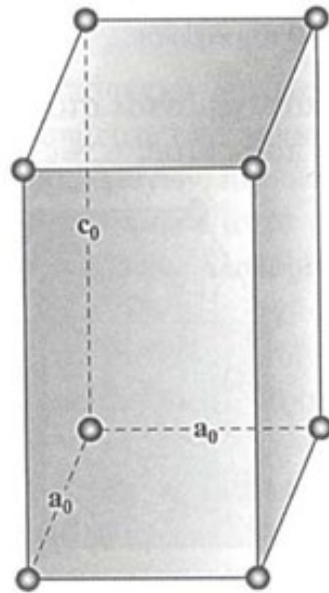
bcc



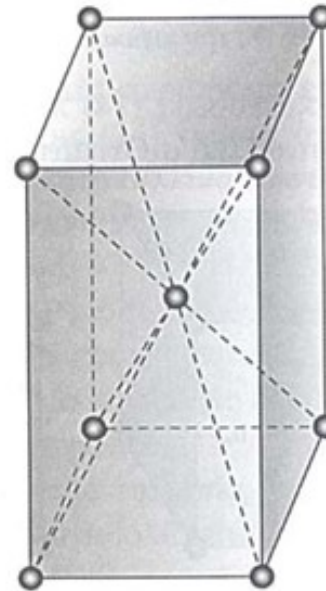
fcc

# Κρυσταλλικά Πλέγματα

- Το **τετραγωνικό σύστημα** εμφανίζει **δύο πλέγματα** με σταθερές  $a=b \neq c$  και  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ , το **απλό (st)** και το **χωροκεντρωμένο (bct)**.



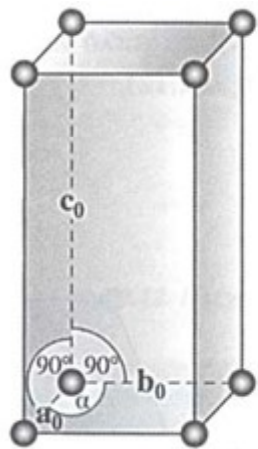
st



bct

# Κρυσταλλικά Πλέγματα

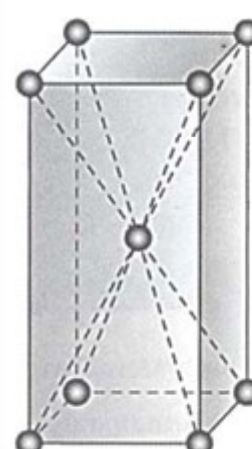
- Το **όρθορομβικό σύστημα** περιλαμβάνει τέσσερις τύπους πλεγμάτων με σταθερές  $a \neq b \neq c$  και  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , α) το **απλό (sor)**, β) το **μονοεδρικά κεντρωμένο (mfcor)**, γ) το **χωροκεντρωμένο (bcor)** και δ) το **εδροκεντρωμένο (fcor)**.



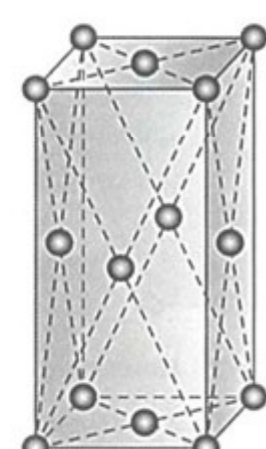
sor



mfcor



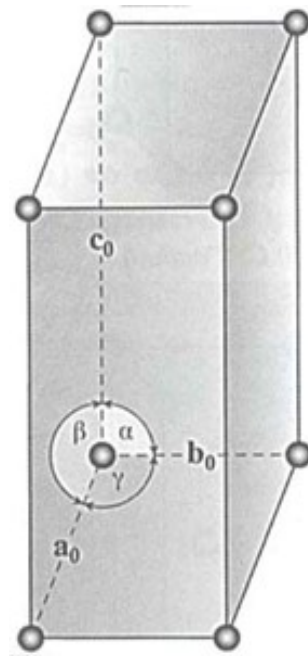
bcor



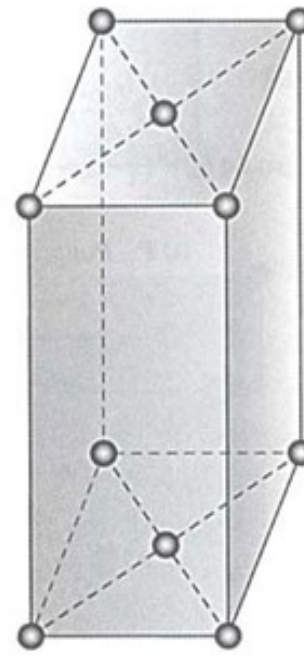
fcor

# Κρυσταλλικά Πλέγματα

- Το **μονοκλινές σύστημα** περιλαμβάνει δύο τύπους πλεγμάτων με σταθερές  $a \neq b \neq c$  και  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma \neq 90^\circ$ , α) το **απλό (sm)**, και το β) το **μονοεδρικά κεντρωμένο (mfcm)**.



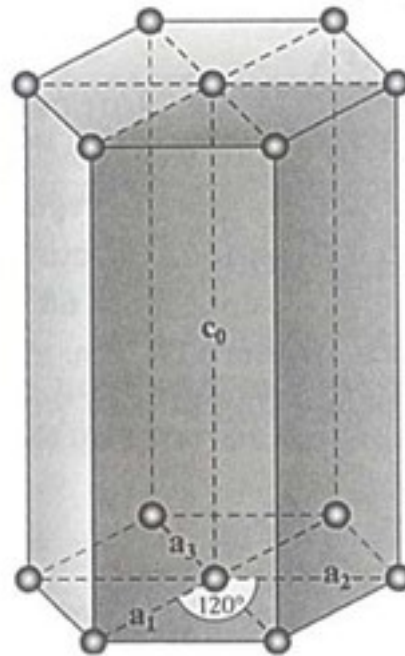
sm



mfcm

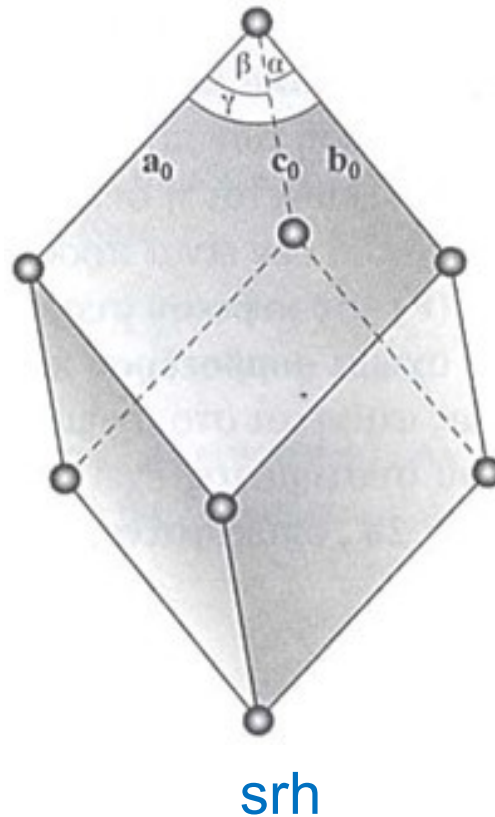
# Κρυσταλλικά Πλέγματα

- Το **εξαγωνικό σύστημα** περιλαμβάνει ένα **κρυσταλλικό πλέγμα** με σταθερές  $a=b\neq c$  και  $\alpha=\beta=90^\circ$ ,  $\gamma=120^\circ$ .



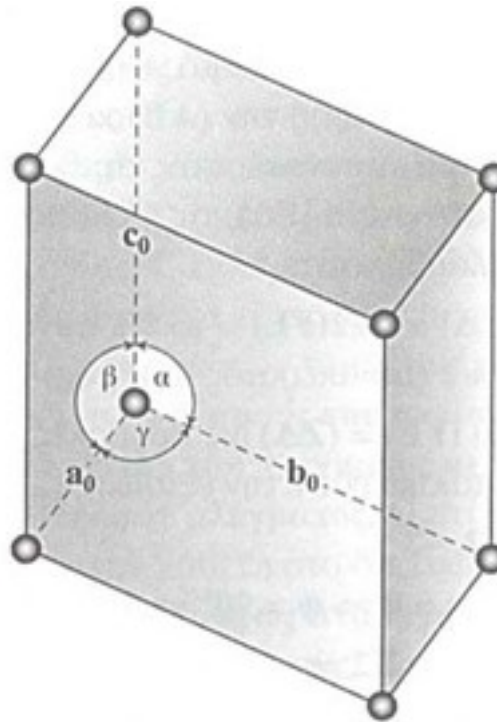
# Κρυσταλλικά Πλέγματα

- Το **ρομβοεδρικό σύστημα** περιλαμβάνει ένα απλό κρυσταλλικό πλέγμα (srh) με σταθερές  $a=b=c$  και  $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$  ( $\leq 120^\circ$ ).



# Κρυσταλλικά Πλέγματα

- Το **τρικλινές σύστημα** περιλαμβάνει **μόνο το απλό πλέγμα (str)** με σταθερές  **$a \neq b \neq c$**  και  **$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$** .



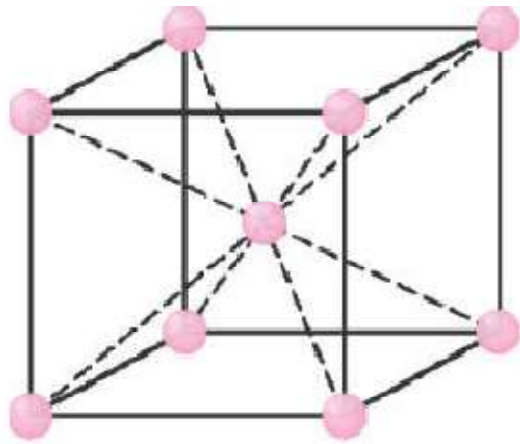
str



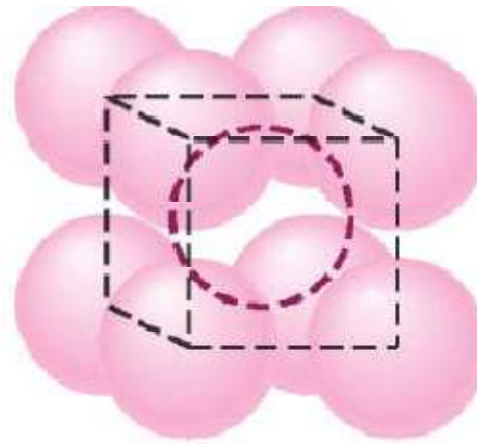
# Κρυσταλλική Δομή Μετάλλων

- ❖ Τα περισσότερα μέταλλα στη θερμοκρασία περιβάλλοντος εμφανίζουν μια από τις ακόλουθες τρεις κρυσταλλικές δομές:
  - Χωροκεντρωμένη κυβική κρυσταλλική δομή (bcc)
  - Εδροκεντρωμένη κυβική κρυσταλλική δομή (fcc) και
  - Εξαγωνική κρυσταλλική δομή μέγιστης πυκνότητας (hcp)
- ❑ Και τα τρία αυτά κρυσταλλικά συστήματα αντιστοιχούν σε δομές πυκνότερης συσσώρευσης ατόμων μέσα στη μοναδιαία κυψελίδα και αυτό έχει ως συνέπεια κατά κανόνα τα μέταλλα να εμφανίζουν μεγάλη πυκνότητα.
  - ✓ Βαρέα μέταλλα : πυκνότητα  $> 5 \text{ g/cm}^3$
  - ✓ Ελαφρότερο μέταλλο το Li με μία πυκνότητα  $0,534 \text{ g/cm}^3$
  - ✓ Βαρύτερο μέταλλο το Ir με μία πυκνότητα  $22,56 \text{ g/cm}^3$

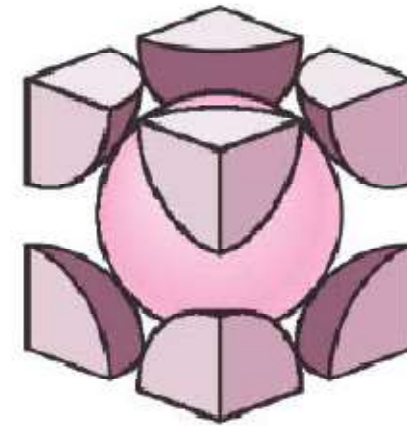
# Χωροκεντρωμένη Κυβική Δομή (bcc)



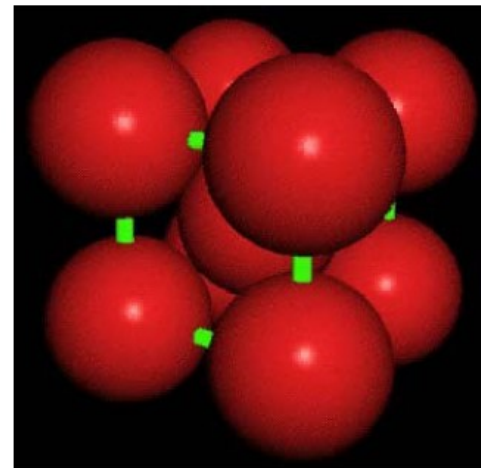
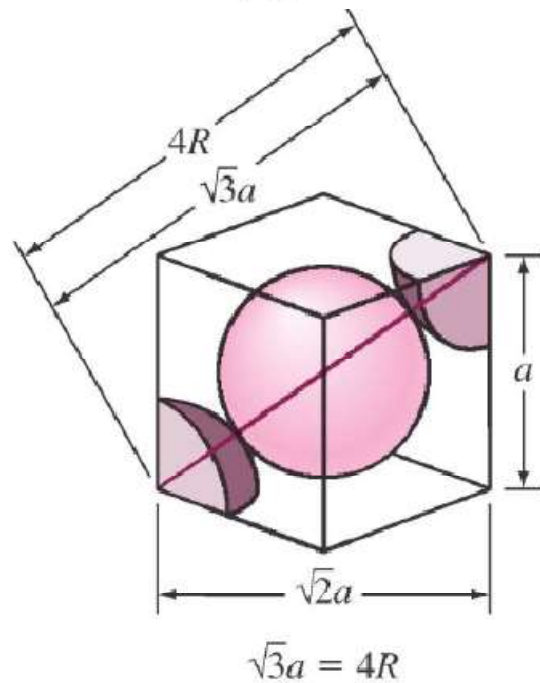
(a)



(b)

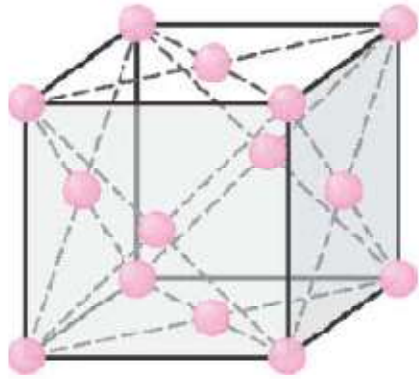


(c)

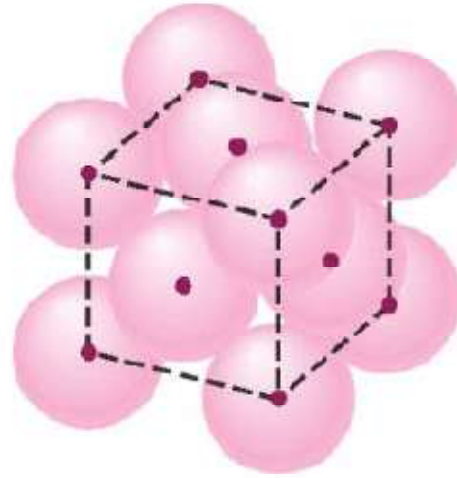


Μηχανική αντοχή

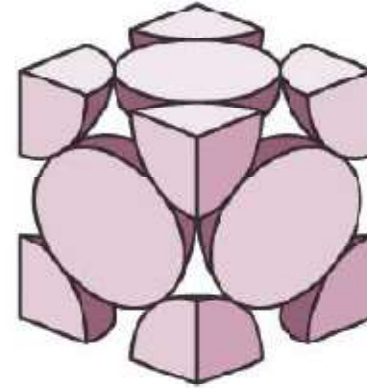
# Εδροκεντρωμένη Κυβική Δομή (fcc)



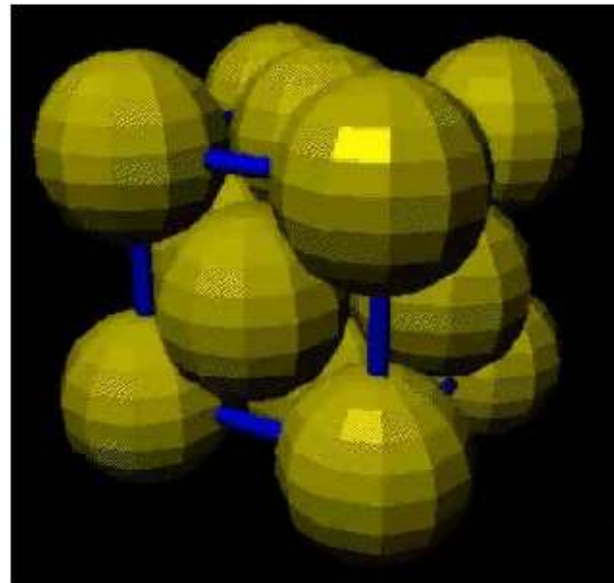
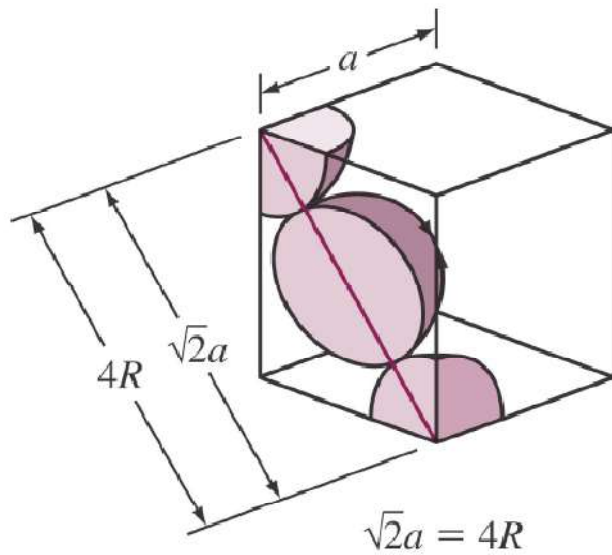
(a)



(b)

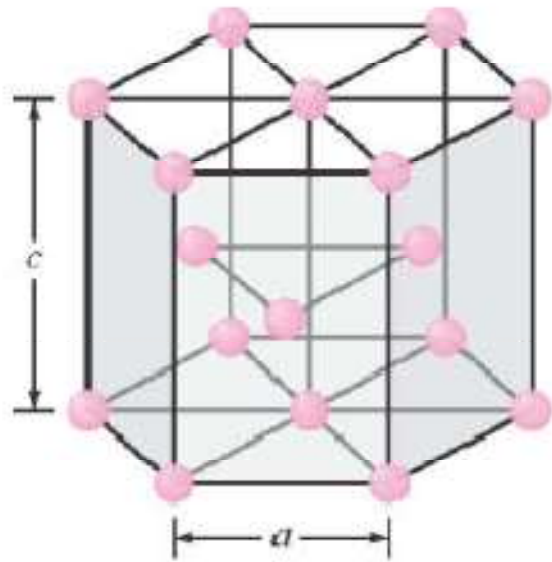


(c)



Ολκιμότητα

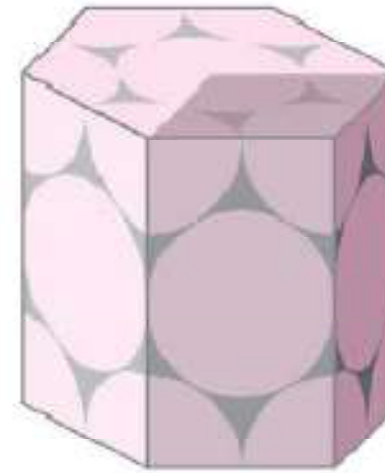
# Εξαγωνική Δομή Μεγίστης Πυκνότητας (hcp)



(a)



(b)



(c)

Μη σφυρηλατίσιμο

# Κρυσταλλικές Δομές Μετάλλων

IA	IIA											IIIA	IVA	VA
Li bcc	Be hcp													
Na bcc	Mg hcp											Al ccp		
		IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIII B			IB	IIB			
K bcc	Ca ccp	Sc hcp	Ti hcp	V bcc	Cr bcc	Mn bcc	Fe bcc	Co hcp	Ni ccp	Cu ccp	Zn hcp	Ga or		
Rb bcc	Sr ccp	Y hcp	Zr hcp	Nb bcc	Mo bcc	Tc hcp	Ru hcp	Rh ccp	Pd ccp	Ag ccp	Cd hcp	In bct	Sn bct	
Cs bcc	Ba bcc	La hcp	Hf hcp	Ta bcc	W bcc	Re hcp	Os hcp	Ir ccp	Pt ccp	Au ccp	Hg rh	Tl hcp	Pb ccp	Bi rh

bcc = χωροκεντρωμένη κυβική δομή

ccp  $\equiv$  fcc = εδροκεντρωμένη κυβική δομή (ή κυβική δομή  
μεγίστης πυκνότητας)

hcp = Εξαγωνική δομή μεγίστης πυκνότητας

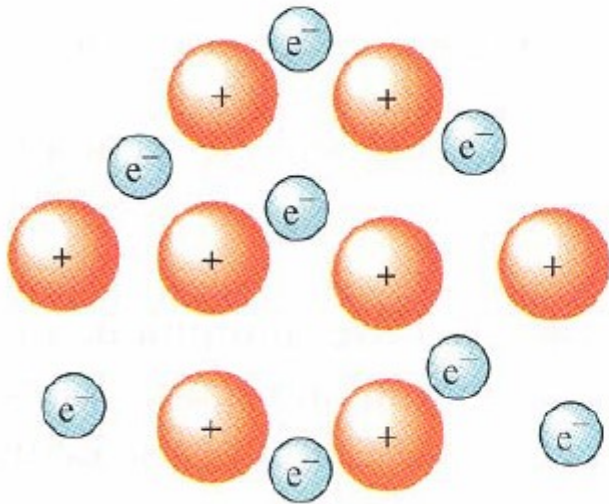
bct = Χωροκεντρωμένη τετραγωνική δομή

or = Ορθορομβική δομή

rh = Ρομβοεδρική δομή

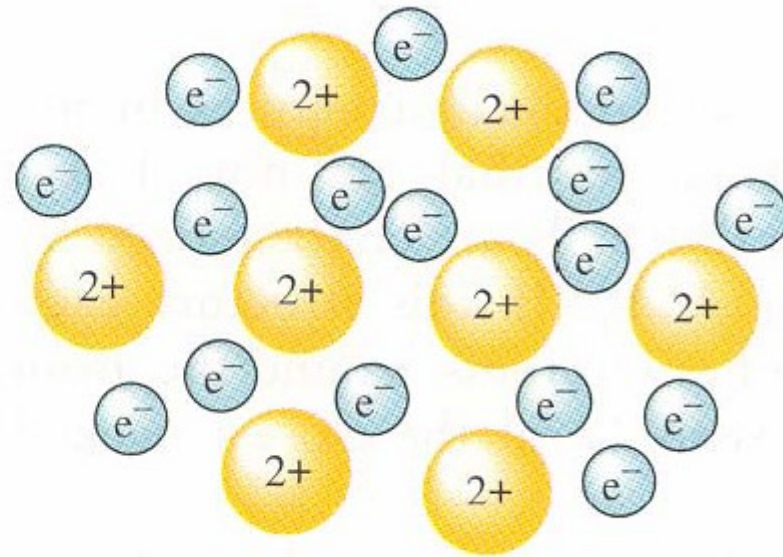
# Μεταλλικός Δεσμός

- ❖ Ο μεταλλικός δεσμός είναι ένας ισχυρός δεσμός, γι' αυτό τα περισσότερα μέταλλα έχουν υψηλά σημεία τήξεως.
- ❖ Τα μέταλλα αποτελούνται από θετικά ιόντα τα οποία βρίσκονται μέσα σε ένα «αέριο ηλεκτρονίων», το λεγόμενο «ηλεκτρονιακό νέφος» (απεντοπισμός ηλεκτρονίων).



Άλκαλι μέταλλο

με ένα e<sup>-</sup> σθένους



Αλκαλική γαία

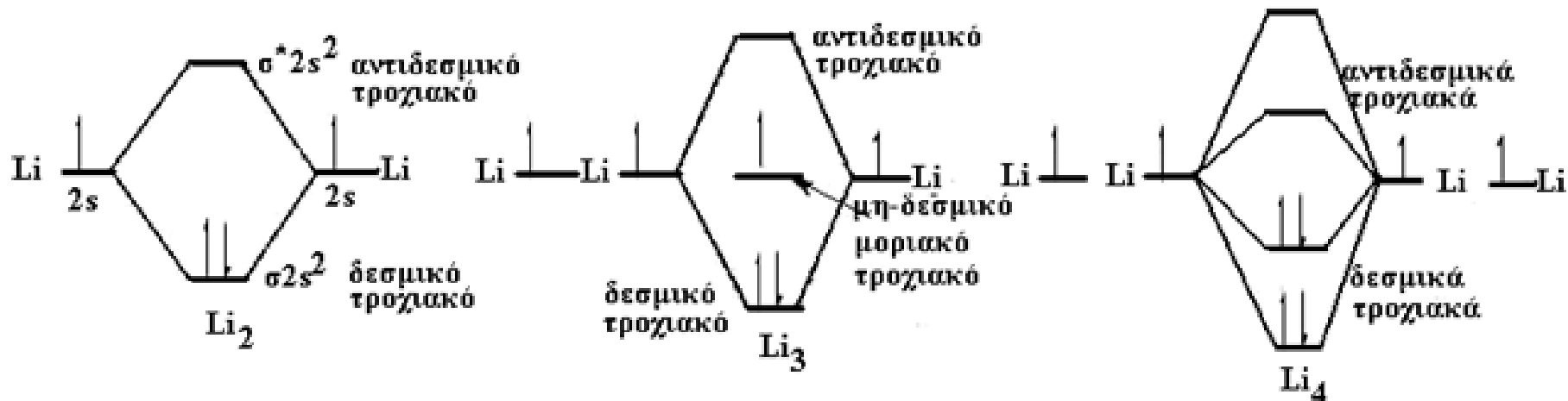
με δύο e<sup>-</sup> σθένους



# Μεταλλικός Δεσμός – Θεωρία ζώνης

❖ Η θεωρία ζώνης αποτελεί στην ουσία εφαρμογή της θεωρίας μοριακών τροχιακών στα μέταλλα

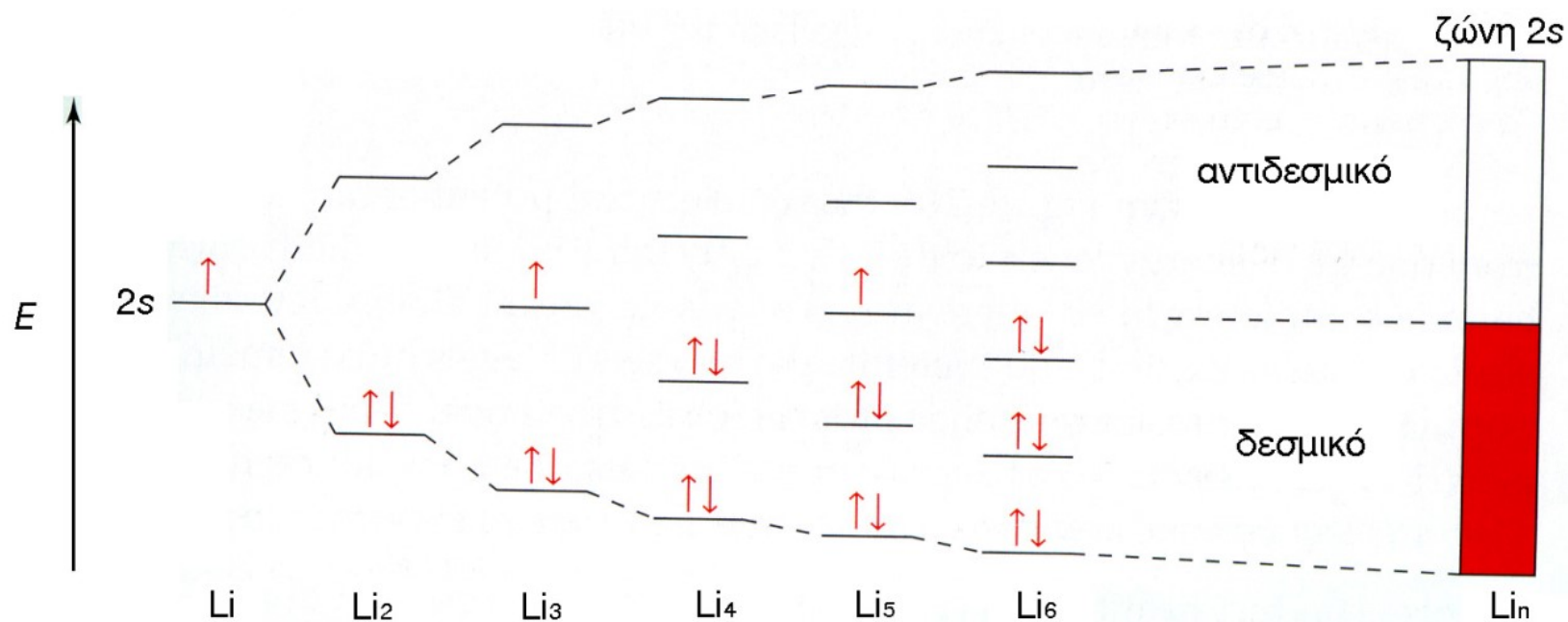
Li:  $[\text{He}]2s^1 2p^0$





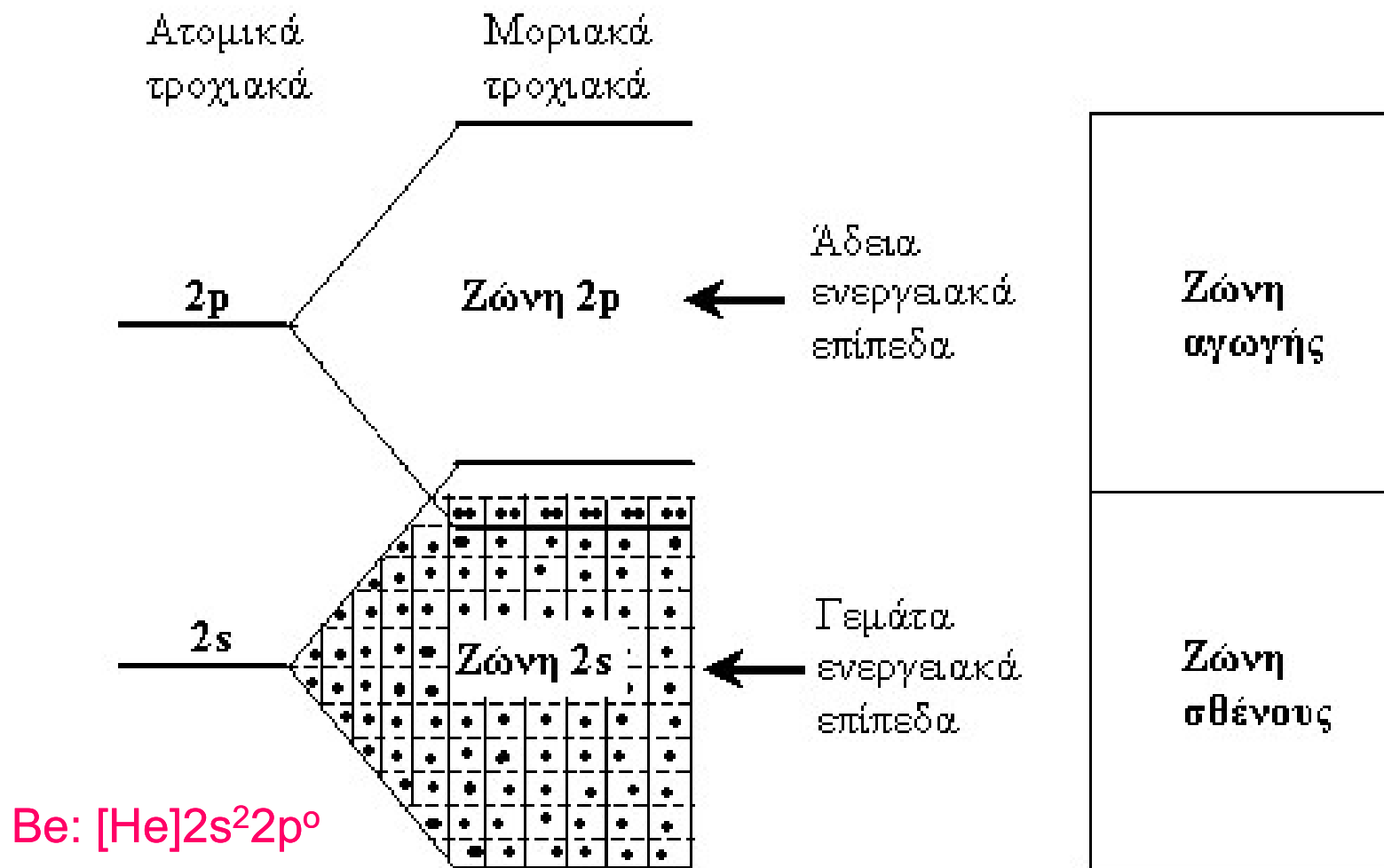
# Μεταλλικός Δεσμός – Θεωρία ζώνης

- Ο αριθμός των ενεργειακών επιπέδων αυξάνεται μέχρι που τα επίπεδα συγχωνεύονται σε μια συνεχή ταινία ή ζώνη ενεργειών.
- Η ταινία  $2s$  είναι ημισυμπληρωμένη  $\Rightarrow$  δυνατότητα κίνησης  $e^-$  στον κενό χώρο της ταινίας  $\Rightarrow$  ερμηνεία ηλεκτρικής αγωγιμότητας.



# Μεταλλικός Δεσμός – Θεωρία ζώνης

- Σχηματισμός των ταινιών 2s και 2p στο μεταλλικό Be.
- Οι ταινίες 2s και 2p αλληλοεπικαλύπτονται με αποτέλεσμα να μπορεί να υπάρξει ροή  $e^-$   $\Rightarrow$  ερμηνεία ηλεκτρικής αγωγιμότητας.



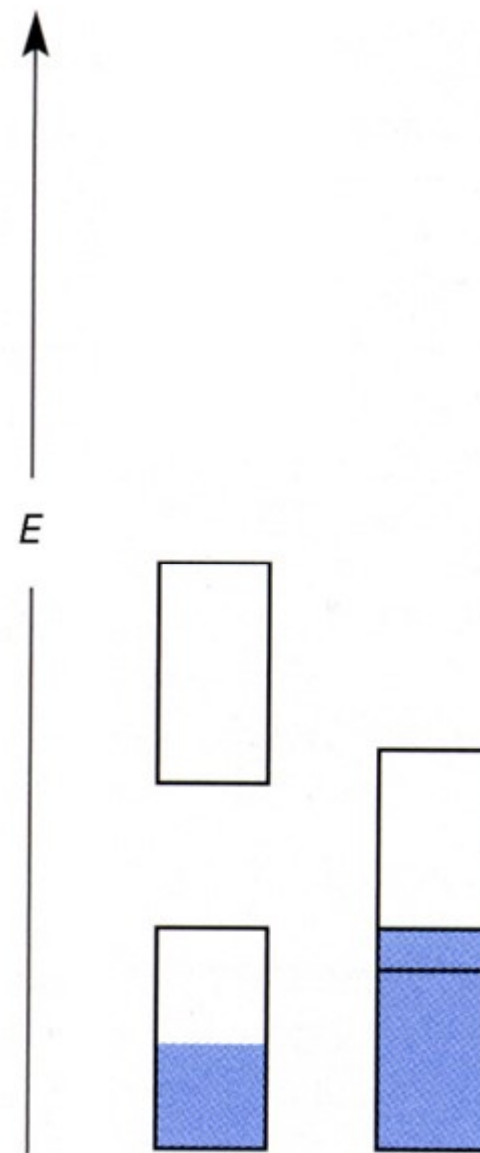
# Μεταλλικός Δεσμός – Θεωρία ζώνης

➤ Στους μεταλλικούς αγωγούς

➤ είτε η ζώνη σθένους είναι μερικώς συμπληρωμένη με ηλεκτρόνια (πχ. περίπτωση λιθίου, νατρίου κλπ.)

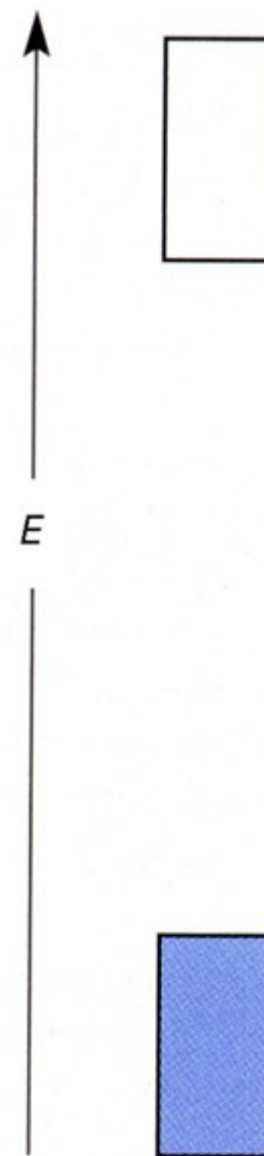
➤ ή οι ζώνες σθένους και αγωγής αλληλεπικαλύπτονται μεταξύ τους (πχ. περίπτωση Βηρυλλίου).

➤ Σε αυτές τις περιπτώσεις δεν υπάρχει ενεργειακό χάσμα ανάμεσα στα άδεια και τα γεμάτα μοριακά τροχιακά και συνεπώς η μετάβαση των ηλεκτρονίων από τα γεμάτα στα άδεια μοριακά τροχιακά μπορεί να γίνει πολύ εύκολα

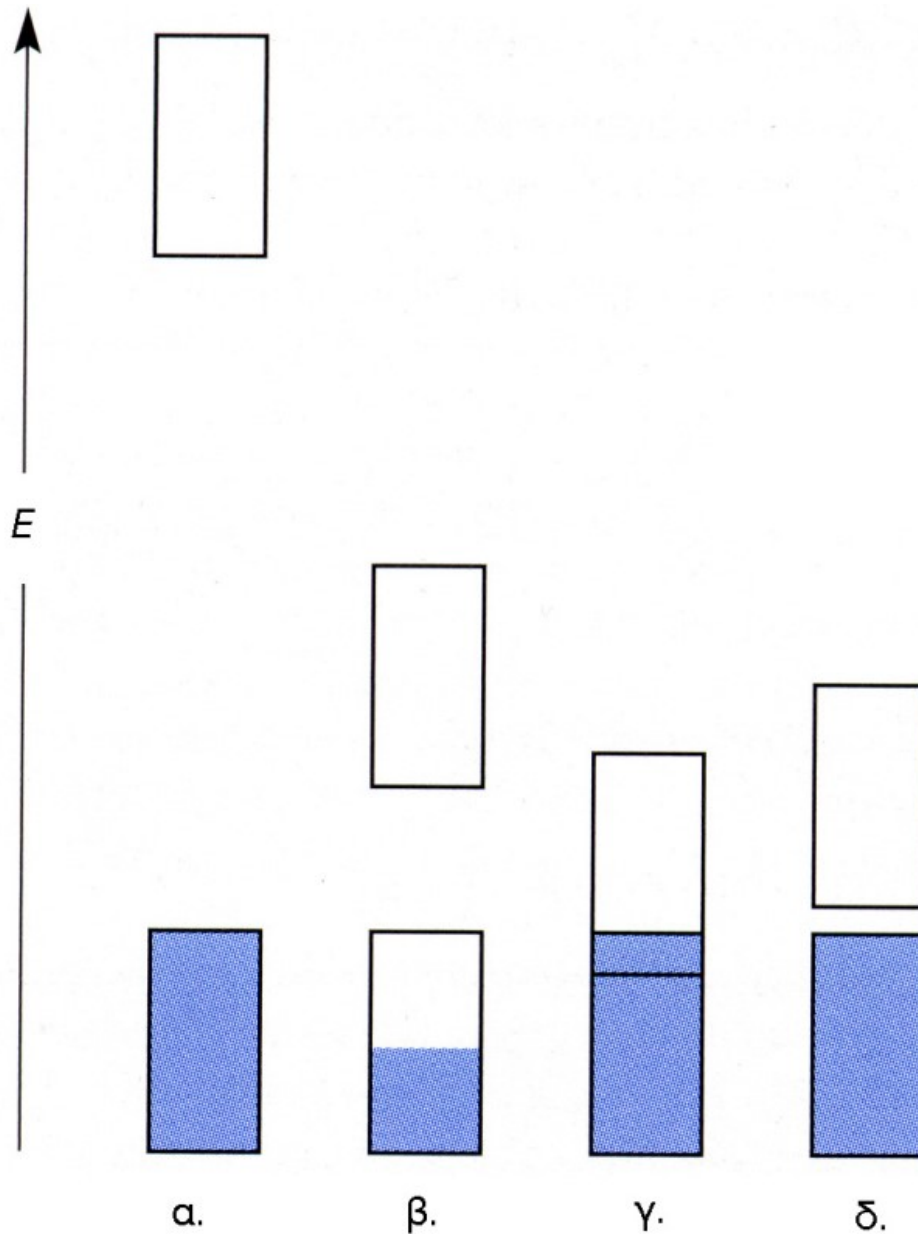


# Μεταλλικός Δεσμός – Θεωρία ζώνης

- Στους μονωτές η ζώνη σθένους είναι γεμάτη.
- Δεν υπάρχουν κενά μοριακά τροχιακά για να μεταβούν σε αυτά ηλεκτρόνια προκαλώντας αγωγιμότητα.
- Επιπλέον, υπάρχει σημαντικό ενεργειακό χάσμα ανάμεσα στη ζώνη σθένους και την επόμενη άδεια ζώνη μοριακών τροχιακών.
- Τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να προωθηθούν σε άδεια μοριακά τροχιακά και συνεπώς δεν μπορούν να κινηθούν ελεύθερα άγωντας το ηλεκτρικό ρεύμα.



# Μεταλλικός Δεσμός – Θεωρία ζώνης



Σχηματική ερμηνεία της ηλεκτρικής αγωγιμότητας υλικών με βάση τη θεωρία των ζωνών.

α. μονωτής,

β. και γ. μεταλλικός αγωγός,

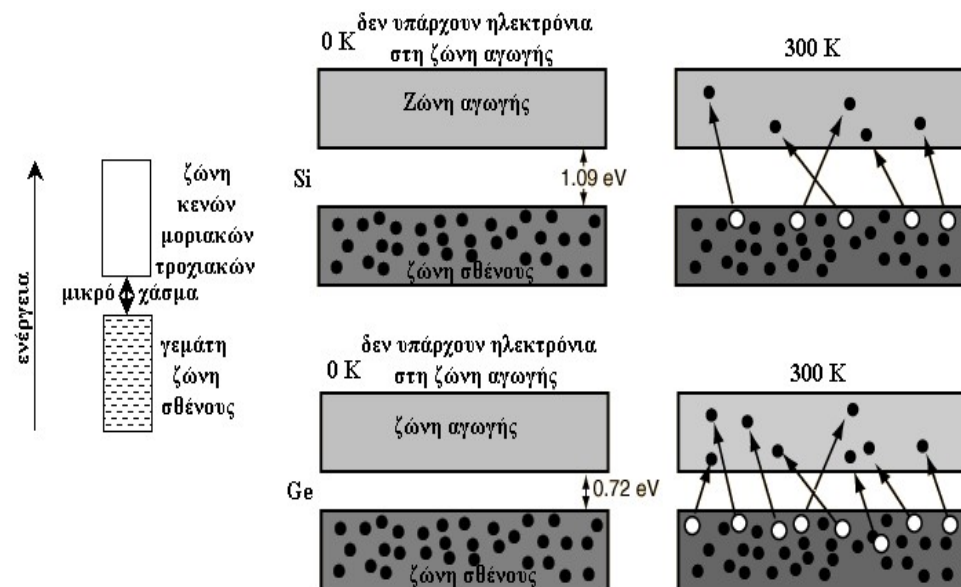
δ. ημιαγωγός

# Μεταλλικός Δεσμός – Θεωρία ζώνης

➤ Οι φυσικοί ημιαγωγοί είναι βασικά μονωτές με αρκετά μικρό ενεργειακό χάσμα ανάμεσα στη ζώνη σθένους και την επόμενη άδεια ζώνη μοριακών τροχιακών.

➤ Με απορρόφηση θερμικής ενέργειας μπορεί ένας μικρός αριθμός ηλεκτρονίων να προωθηθεί από τη ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγής.

➤ Το προωθημένο ηλεκτρόνιο στη ζώνη αγωγής αλλά και το εναπομείναν ασύζευκτο ηλεκτρόνιο στη ζώνη σθένους μπορούν να άγουν το ηλεκτρικό ρεύμα.

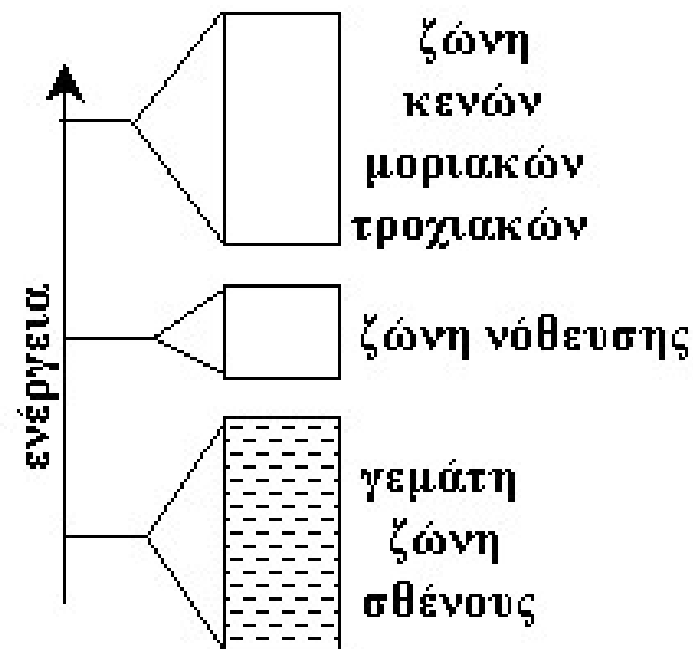


# Μεταλλικός Δεσμός – Θεωρία ζώνης

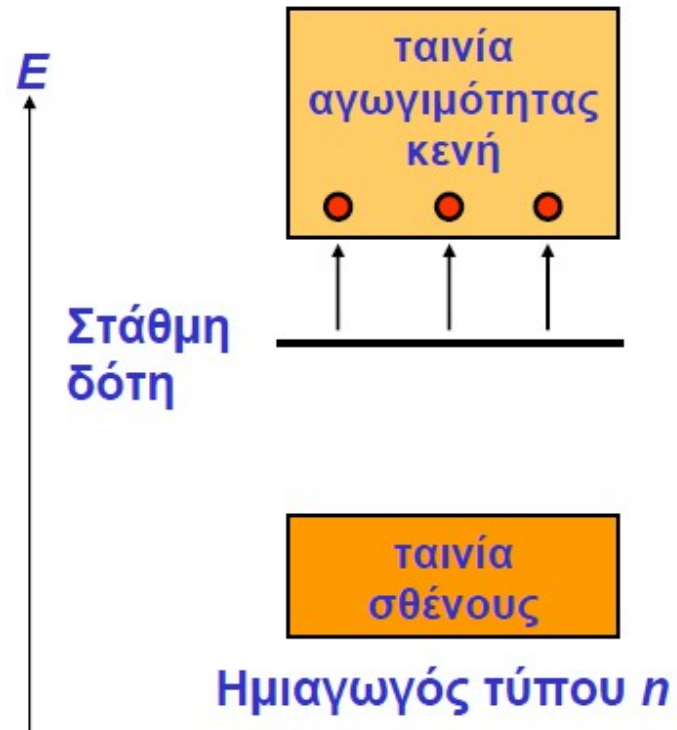
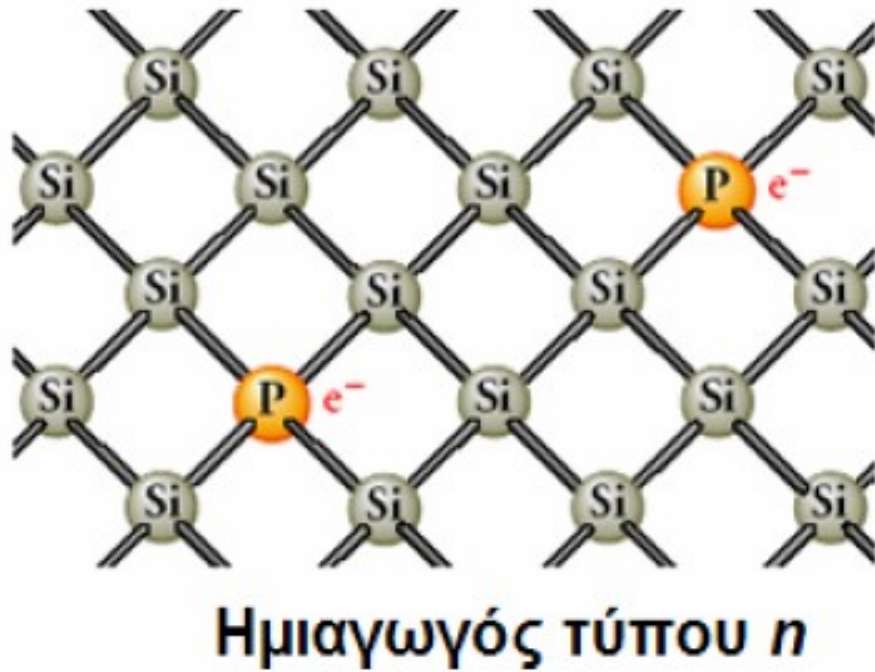
❖ Ημιαγωγοί Νόθευσης (doped semiconductors): δημιουργούνται από τη νόθευση των μονωτών με κατάλληλες προσμίξεις.

➤ Η πρόσμιξη δημιουργεί μια μικρή ζώνη μοριακών τροχιακών ανάμεσα στις ζώνες σθένους και αγωγής του μονωτή που δρα σαν γέφυρα ανάμεσα τους.

➤ Με αυτό τον τρόπο ηλεκτρόνια από τη ζώνη σθένους του μονωτή μπορούν να περάσουν στη ζώνη νόθευσης ή και από τη ζώνη νόθευσης στη ζώνη αγωγής του μονωτή και να άγουν με αυτό το τρόπο το ηλεκτρικό ρεύμα.



# Ημιαγωγοί Προσμίξεως

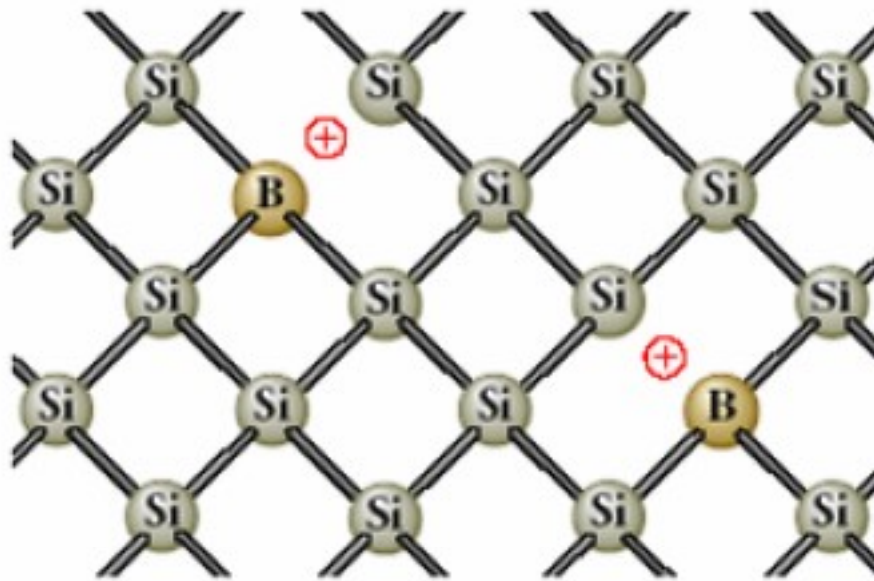


**Πυρίτιο νοθευμένο με φώσφορο.** Τα επιπλέον  $e^-$  σθένους από τα άτομα του P είναι ελεύθερα να κινηθούν και να άγουν το ρεύμα.

Σε έναν ημιαγωγό τύπου  $n$ , η στάθμη του δότη είναι λίγο κάτω από τη ζώνη αγωγιμότητας του ημιαγωγού, έτσι  $e^-$  από τον δότη εύκολα μετακινούνται στη ζώνη αγωγιμότητας.



# Ημιαγωγοί Προσμίξεως

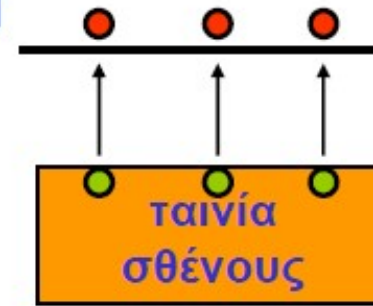


Ημιαγωγός τύπου  $p$

**Πυρίτιο νοθευμένο με βόριο.** Ένας δεσμός στον οποίο λείπει ένα  $e^-$  ισοδυναμεί με μία θετικά φορτισμένη οπή.



Στάθμη δέκτη



Ημιαγωγός τύπου  $p$

Σε έναν ημιαγωγό τύπου  $p$ , η στάθμη του δέκτη είναι λίγο πάνω από τη ζώνη σθένους του ημιαγωγού, έτσι  $e^-$  από τον ημιαγωγό εύκολα μετακινούνται στη στάθμη του δέκτη αφήνοντας πίσω τους θετικές οπές.

## Μεταλλικός δεσμός - Κρυσταλλικές δομές

### ❖ Ασκήσεις

**Ποια από τις ακόλουθες προτάσεις ισχύει για τους μεταλλικούς δεσμούς;**

- A.** Οι μεταλλικοί δεσμοί σχηματίζονται αποκλειστικά μεταξύ ατόμων του ίδιου είδους μετάλλου.
- B.** Οι μεταλλικοί δεσμοί σχηματίζονται αποκλειστικά μεταξύ ατόμων διαφορετικών μετάλλων.
- Γ.** Οι μεταλλικοί δεσμοί σχηματίζονται μεταξύ ατόμων μετάλλου του ίδιου ή διαφορετικού είδους και οφείλεται στην έλξη των πυρήνων και των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας των μετάλλων.
- Δ.** Οι μεταλλικοί δεσμοί σχηματίζονται μεταξύ ατόμων μετάλλων του ίδιου ή διαφορετικού είδους και οφείλεται στην έλξη του πυρήνα και των ηλεκτρονίων των μετάλλων.

**Τι από τα ακόλουθα συμβαίνει μέσα σε ένα κρυσταλλικό πλέγμα ενός μετάλλου;**

- A.** Τα μεταλλικά ιόντα μπορούν να κινηθούν ελεύθερα μέσα στο πλέγμα.
- B.** Τα ηλεκτρόνια σθένους βρίσκονται σε καθορισμένες θέσεις στο πλέγμα του μετάλλου.
- Γ.** Ζεύγη ιόντων και ηλεκτρονίων μπορούν να κυκλοφορούν ελεύθερα μέσα στο πλέγμα.
- Δ.** Κανένα από τα παραπάνω.

## Μεταλλικός δεσμός - Κρυσταλλικές δομές

### ❖ Ασκήσεις

Ένα μέταλλο που έχει ένα μόνο άτομο στη στοιχειώδη του κυψελίδα δομείται στο κρυσταλλικό σύστημα:

- A. απλό κυβικό,
- B. χωροκεντρωμένο κυβικό (bcc),
- Γ. εδροκεντρωμένο κυβικό (fcc),
- Δ. εξαγωνικό συμπαγές (hcp).

Τα περισσότερα μέταλλα δομούνται:

- A. στο κυβικό κρυσταλλικό σύστημα,
- B. στο κυβικό εδροκεντρωμένο και κυβικό χωροκεντρωμένο,
- Γ. στο κυβικό εδροκεντρωμένο, κυβικό χωροκεντρωμένο και εξαγωνικό πυκνότητας συσσώρευσης,
- Δ. σε οποιαδήποτε κυβικό ή εξαγωνικό κρυσταλλικό σύστημα.

## Μεταλλικός δεσμός - Κρυσταλλικές δομές

**Πώς ορίζεται ο μεταλλικός δεσμός;**

- A.** Είναι ο χημικός δεσμός που πραγματοποιείται με την έλξη των ατόμων μετάλλου και άλλων στοιχείων.
- B.** Είναι ο χημικός δεσμός που πραγματοποιείται μεταξύ των ατόμων μετάλλου που μεταφέρουν τα ηλεκτρόνια τους.
- Γ.** Είναι ο χημικός δεσμός που πραγματοποιείται με την έλξη των κατιόντων των ατόμων μετάλλου και του περιβάλλοντα ηλεκτρονιακού νέφους.
- Δ.** Είναι ο χημικός δεσμός που πραγματοποιείται μεταξύ των ατόμων μετάλλου που μοιράζονται τα ηλεκτρόνια τους.

**Στην απαγορευμένη ενεργειακή ζώνη σε ένα διάγραμμα ενεργειακών ζωνών ενός μεταλλικού κρυστάλλου:**

- A.** ισχύει η απαγορευτική αρχή του Pauli,
- B.** δεν υπάρχουν ενεργειακές στάθμες,
- Γ.** υπάρχουν ενεργειακές στάθμες που όμως δεν καταλαμβάνονται από ηλεκτρόνια,
- Δ.** υπάρχουν ενεργειακές στάθμες που μπορούν υπό ορισμένες συνθήκες να καταληφθούν από ηλεκτρόνια.

## Μεταλλικός δεσμός - Κρυσταλλικές δομές

### ❖ Ασκήσεις

- Πως χαρακτηρίζεται ο τύπος του ημιαγωγού που προκύπτει αν σε έναν κρύσταλλο Ge αντικατασταθούν μερικά άτομα Ge από άτομα i) Sb, ii) Ga. Δικαιολογήστε την απάντησή σας. Δίνονται οι ατομικοί αριθμοί:  $_{32}\text{Ge}$ ,  $_{31}\text{Ga}$  και  $_{51}\text{Sb}$ .
- Πόσες ενεργειακές στάθμες υπάρχουν στην ταινία αγωγιμότητας ενός μονοκρυστάλλου νατρίου μάζας 2,3g; Πόσα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας διαθέτει ο κρύσταλλος αυτός; Δίνεται το  $AB = 23 \text{ g/mol}$ .
- Δείξτε ότι τα άτομα καταλαμβάνουν μόνο το 52,4% του όγκου σε μία απλή κυβική δομή στην οποία όλα τα άτομα είναι ίδια.
- Να βρείτε τη σχέση μεταξύ ατομικής ακτίνας και διαστάσεων κυψελίδας στα συστήματα απλό κυβικό, εδροκεντρωμένο κυβικό και χωροκεντρωμένο κυβικό.
- Η ατομική ακτίνα του Fe είναι 1.24 Å. Να υπολογίσετε τις διαστάσεις των κυψελίδων στο bcc και fcc Fe.
- Ο Cu έχει ατομική ακτίνα 0.128 nm, δομή fcc, A.B. 63.5 g/mole. Να υπολογισθεί η πυκνότητα του και να συγκριθεί με την τιμή που προσδιορίζεται πειραματικά (8.94 g/cm<sup>3</sup>).

## Μεταλλικός δεσμός - Κρυσταλλικές δομές

### ❖ Ασκήσεις

1. Ο Pt κρυσταλλώνεται σε ένα fcc κυβικό κρυσταλλικό πλέγμα και έχει πυκνότητα ίση με  $21,45\text{g/cm}^3$ . Να υπολογιστούν οι διαστάσεις της μοναδιαίας του κυψελίδας ( $a$ ). Να συγκρίνεται την τιμή που θα βρείτε με την πειραματική τιμή,  $392,4\text{pm}$  ( $3,924\text{\AA}$ ). Δίνονται, το  $A_{\text{Pt}} = 195,08\text{g/mol}$  και ο  $N_A = 6.023 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$ .
2. Ο Au εμφανίζει μία κυβική δομή με διαστάσεις μοναδιαίας κυψελίδας  $a = 407,9\text{pm}$  ( $4,079\text{\AA}$ ). Η πυκνότητα του μετάλλου είναι ίση με  $19,3\text{g/cm}^3$ . Υπολογίστε τον αριθμό των ατόμων Au στη μοναδιαία του κυψελίδα. Ποιον τύπο κυβικού πλέγματος έχει ο Au; Δίνονται:  $A_{\text{Au}} = 196,97\text{g/mol}$ ,  $N_A = 6.023 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$ .
3. Ο Ag έχει μία fcc δομή με διαστάσεις μοναδιαίας κυψελίδας  $a = 408,6 \text{ pm}$  ( $4,086 \text{ \AA}$ ). Η πυκνότητα της μοναδιαίας κυψελίδας του είναι ίση με  $10,50\text{g/cm}^3$ . Υπολογίστε τη μάζα ενός ατόμου Ag. Κατόπιν, χρησιμοποιώντας την γνωστή τιμή του ατομικού του βάρους, απολογείστε τον αριθμό Avogadro. Δίνεται το  $A_{\text{Ag}} = 107,87\text{g/mol}$ .

## Μεταλλικός δεσμός - Κρυσταλλικές δομές

### ❖ Ασκήσεις

5. Στο σχήμα φαίνεται η μοναδιαία κυψελίδα ενός κρυστάλλου. Οι πορτοκαλί σφαίρες είναι άτομα Α και οι γκρίζες άτομα Β.

- α) Ποιος είναι ο χημικός τύπος της ένωσης που έχει αυτή τη μοναδιαία κυψελίδα;  
β) Ως προς τα άτομα Α, η μοναδιαία κυψελίδα είναι κυβική; Αν ναι, τίνος τύπου;

