

## ΟΙΚΟΛΟΓΙΑ & ΧΗΜΕΙΑ ΓΙΑ ΜΗΧΑΝΙΚΟΥΣ

### Εισαγωγή στη Χημεία Υλικών Δομή και δεσμοί των υλικών

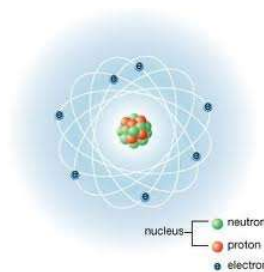
Introduction to Materials Chemistry  
Structure & Bonding

Μπαδογιάννης Ε.

45

### Δομή και δεσμοί των υλικών

- Οι δεσμοί μεταξύ των ατόμων κάθε υλικού (οι δυνάμεις που συγκρατούν τα άτομα)
- Η γεωμετρική ταξινόμηση των ατόμων ή των μορίων (ο τρόπος τοποθέτησης τους)
- οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους
- Οι ατέλειες που εμφανίζονται στη γεωμετρική ταξινόμηση των ατόμων



Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>46</sup>

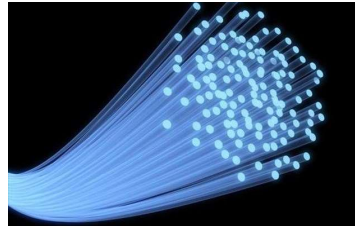
46

## Δομή και δεσμοί των υλικών και ιδιότητες

- Ο άνθρακας στην μορφή διαμαντιού είναι το σκληρότερο υλικό ενώ σαν γραφίτης είναι τόσο μαλακός που χρησιμοποιείται σαν λιπαντικό ή στα μολύβια γραφής



- Το πυρίτιο που είναι το βασικότερο συστατικό της άμμου θαλάσσης χρησιμοποιείται στην υπερκαθαρή του μορφή στην κατασκευή οπτικών ινών?

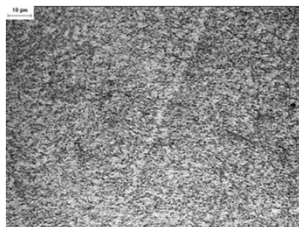


Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ <sup>47</sup>

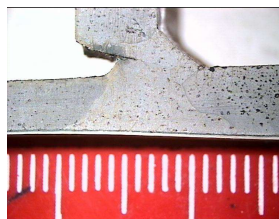
47

## Δομή - Κλίμακα δομής ατόμων

- Ατομική δομή (μερικά Å),
- Διευθέτηση ατόμων σε μικρή (από 1 έως 10<sup>10</sup> Å → άμορφα υλικά) ή ευρεία κλίμακα (από 10 nm έως cm → κρυσταλλικά υλικά),
- Νανοδομή από 1 έως 100 nm,
- Μικροδομή από 100 έως 100,000 nm ή 0.1 to 100 μm,
- Μακροδομή >100 μm



Μαρτενσίτης εξ' επαναφοράς  
(κλίμακα 10 μm)



Συγκόλληση ελάσματος χάλυβα  
(Μακροδομή, κλίμακας 1000 μm)

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ <sup>48</sup>

48

## Δομή Ατόμου

- Ατομικός Αριθμός (Z): αριθμός ηλεκτρονίων ή πρωτονίων
- Αριθμός νετρονίων (N)
- Μαζικός Αριθμός (A):  $A=Z+N$
- Μάζα πρωτονίων, νετρονίων:  $1,67 \times 10^{-24} \text{g}$
- Μάζα ηλεκτρονίων:  $9.11 \times 10^{-28} \text{g}$
- Αριθμός Avogadro ( $N_A$ ):  $6,02 \times 10^{23} \text{mole}^{-1}$ , αριθμός ατόμων ανά mole ή gr-at ή gr-ion
- Μονάδα Ατομικής Μάζας (amu):  $1/12$  της μάζας του άνθρακα 12
- Σχέση amu και ατομικού βάρους (AB):  $1 \text{amu}/\text{άτομο}$  ή  $\text{μόριο} = 1 \text{g}/\text{mole}$
- ( $\text{AB}_{\text{Fe}} = 55,85 \text{g} \cdot \text{mole}^{-1}$  ή  $55,85 \text{amu}/\text{atom}$  or mole)

### Παράδειγμα

Υπολογισμός Αριθμού ατόμων σε 100 gr Ag:  $\text{AB}_{\text{Ag}} = 107,868 \text{g} \cdot \text{mole}^{-1}$

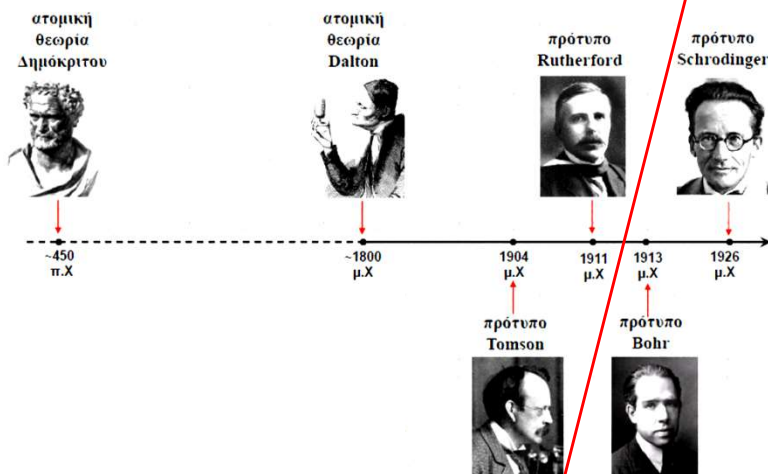
$$\text{AA}_{\text{Ag}} = (100 \text{g}) / (6,02 \times 10^{23} \text{atom} \cdot \text{mole}^{-1}) / (107,868 \text{g} \cdot \text{mole}^{-1}) = 5,58 \times 10^{23} \text{atom}$$

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>49</sup>

49

## Δομή Ατόμου: χρονική εξέλιξη

*Η χρονική εξέλιξη της δομής του ατόμου.*



Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>50</sup>

50

## Δομή Ατόμου: Πρότυπο Bohr

Το ατομικό πρότυπο του Bohr αποτελεί συνέχεια του προτύπου του Rutherford και μπορεί να περιγραφεί συνοπτικά με τις δυο συνθήκες του:

- Την μηχανική συνθήκη **(A)** και την οπτική συνθήκη **(B)**
  - A. Τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα σε **καθορισμένες** κυκλικές τροχιές. Κάθε επιτρεπόμενη τροχιά έχει καθορισμένη ενέργεια, είναι δηλαδή **κβαντισμένη**.
  - B. Το ηλεκτρόνιο εκπέμπει ή απορροφά ενέργεια όταν μεταπηδά από μια τροχιά (ενεργειακή στάθμη) σε μια άλλη τροχιά. Όταν το ηλεκτρόνιο μεταπίπτει από μια τροχιά υψηλότερης ενέργειας σε μια άλλη χαμηλότερης ενέργειας, τότε εκπέμπεται ακτινοβολία. Στην αντίθετη περίπτωση (από χαμηλή ενεργειακή στάθμη σε υψηλή), απορροφάται ακτινοβολία.

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ 51

51

## Περιοδικός πίνακας

The Periodic Table of the Elements

The periodic table is color-coded by groups: alkali metals (orange), alkaline earth metals (yellow), transition metals (green), metalloids (light green), other metals (light blue), nonmetals (purple), halogens (dark purple), noble gases (pink), lanthanoids (light orange), actinoids (light red), and unknown elements (grey).

**Notes:**

- \* as of 1st January 1970
- \*\* as of 1st January 1970
- † as of 1st January 1970
- ‡ as of 1st January 1970
- § as of 1st January 1970
- ¶ as of 1st January 1970
- || as of 1st January 1970
- ||| as of 1st January 1970
- |||| as of 1st January 1970
- ||| as of 1st January 1970
- || as of 1st January 1970
- † as of 1st January 1970
- \*\* as of 1st January 1970
- \* as of 1st January 1970

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ 52

52

### Στοιχεία περιοδικού πίνακα

- Κατάταξη στοιχείων με αύξοντα ατομικό αριθμό
- 7 Οριζόντιες γραμμές «περίοδοι»
- 18 κατακόρυφες στήλες «ομάδες»
- Ο αριθμός της περιόδου συμπίπτει με τον αριθμό των στοιβάδων του στοιχείου
- Στοιχεία της ίδιας ομάδας έχουν παρόμοιες ιδιότητες
- Στοιχεία της ίδιας περιόδου μεταβάλλουν τις ιδιότητες τους προοδευτικά καθώς κινούμαστε οριζόντια, δηλαδή αλλάζοντας ομάδα, για κάθε περίοδο (ατομικό αριθμό).

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>53</sup>

53

### Στοιχεία περιοδικού πίνακα

- Στοιχεία που έχουν τον ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων στην εξωτερική στοιβάδα έχουν παρόμοιες ιδιότητες
- Στοιχεία 1<sup>ης</sup> στήλης – ομάδας: αλκάλια
- Στοιχεία 2<sup>ης</sup> στήλης – ομάδας: αλκαλικές γαίες
- Στοιχεία 17<sup>ης</sup> στήλης – ομάδας: αλογόνα
- Στοιχεία 18<sup>ης</sup> στήλης – ομάδας: ευγενή αέρια
- Από αριστερά στα δεξιά: Ελαττώνεται ο μεταλλικός χαρακτήρας και η ηλεκτροθετικότητα (αυξάνεται η **ηλεκτραρνητικότητα**)
- Πλήρωση κάθε στιβάδας με ηλεκτρόνια: αριθμός ηλεκτρονίων =  $2n^2$  (n: κύριος κβ. αριθμός, n=1,2,3,..)

Google Drive Ασκ. 1

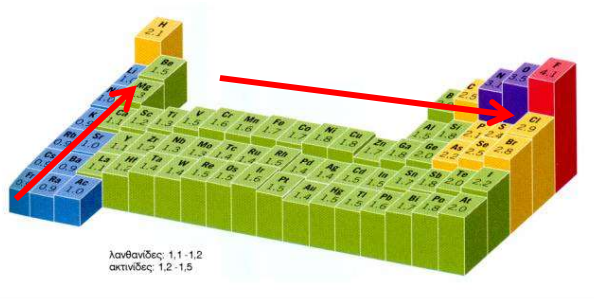
Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>54</sup>

54

## Ηλεκτραρνητικότητα (electronegativity)

Ηλεκτραρνητικότητα (electronegativity),  $\chi$ , ενός στοιχείου είναι ένα εμπειρικό μέτρο της τάσης

που έχει το άτομο ενός μορίου να έλκει προς το μέρος του ηλεκτρόνια



Περιοδικότητα ηλεκτραρνητικότητας **ΑΥΞΗΣΗ**: Αριστερά προς Δεξιά/ Κάτω προς Πάνω

Η ηλεκτραρνητικότητα,  $\chi$ , μετράται στην κλίμακα από 0 έως 4  
 Ηλεκτροθετικά: αριστερά στον περιοδικό πίνακα αλκάλια Cs:0.7, Li:1.0  
 Ηλεκτραρνητικά: δεξιά στον Π.Π. F: 4.0, O: 3.5

Google Drive Ασκ. 2

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ 55

55

## Ηλεκτραρνητικότητα (electronegativity)

1 H 2.1																	2 He -				
3 Li 1.0	4 Be 1.5															5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2															13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -				
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -				
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -				
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7																			

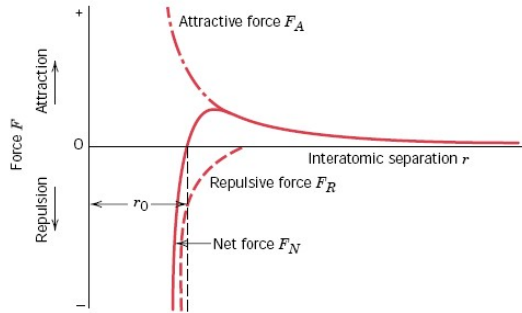
FIGURE 2.7 The electronegativity values for the elements. (Adapted from Linus Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd edition. Copyright 1939 and 1940, 3rd edition copyright © 1960, by Cornell University. Used by permission of the publisher, Cornell University Press.)

Google Drive Ασκ. 3

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ 56

56

### Δυνάμεις και ενέργειες δεσμών



Η **συνολική δύναμη** που ασκείται μεταξύ δύο ατόμων που πλησιάζουν μεταξύ τους είναι:

$$F_N = F_A + F_R$$

$F_A$ : ελκτική δύναμη εξαρτώμενη από το είδος του δεσμού μεταξύ των ατόμων

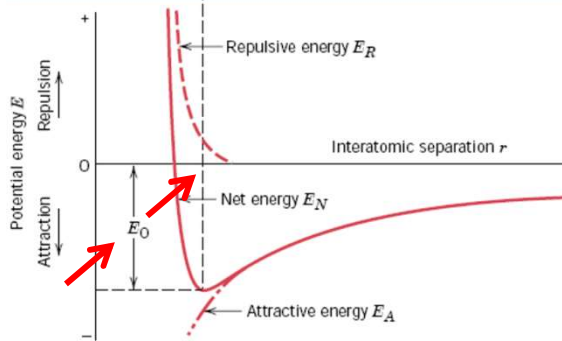
$F_R$ : απωστική δύναμη λόγω επικάλυψης των εξωτερικών ηλεκτρονιακών στοιβάδων

Στην ισορροπία  $F_N = F_A + F_R = 0$ . Τα κέντρα των ατόμων βρίσκονται σε απόσταση  $r_0$ . Σε πολλά άτομα  $r_0 \approx 0.3 \text{ nm}$

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ 57

57

### Δυνάμεις και ενέργειες δεσμών



$E_0$ : η ενέργεια σύνδεσης για  $r_0$ , η ενέργεια που χρειάζεται για τον αποχωρισμό των ατόμων

- Εξαρτάται από το είδος του δεσμού
- Συναρτά πολλές από τις ιδιότητες των υλικών

Η ενέργεια δίνεται από τις σχέσεις:

$$E = \int F dr \quad \rightarrow \quad F = \frac{dE}{dr}$$

$$E_N = \int_{\infty}^r F_N dr \quad \text{Συνολική}$$

$$= \int_{\infty}^r F_A dr + \int_{\infty}^r F_R dr$$

$$= E_A + E_R \quad \text{Ελκτική + Απωστική}$$

$$F_N = \frac{dE_A}{dr} + \frac{dE_R}{dr}$$

Google Drive Ασκ. 4, 5, 6

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ 58

58

## Χημικοί δεσμοί

Δεσμοί μεταξύ ατόμων που οδηγούν στην ελάττωση της δυναμικής ενέργειας και άρα σε ενεργειακά σταθερότερη κατάσταση

- Απαραίτητη η ύπαρξη  $e^-$  σθένους
- Η ηλεκτρονιακή κατάσταση καθορίζει το είδος του δεσμού

### Πρωτεύοντες δεσμοί (μεγάλες ενδοατομικές δυνάμεις)

- Ιοντικός ή ετεροπολικός δεσμός
- Ομοιοπολικός δεσμός
- Μεταλλικός δεσμός

### Δευτερεύοντες δεσμοί ή Van der Waals (σχετικά ασθενείς δυνάμεις μεταξύ ατόμων ή και μορίων)

- Μόνιμος διπολικός δεσμός
- Μεταβαλλόμενος διπολικός δεσμός (μόνιμο δίπολο - επαγόμενο δίπολο, επαγόμενο δίπολο-επαγόμενο δίπολο)

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ <sup>59</sup>

59

## Ιοντικός Δεσμός ή Ετεροπολικός Δεσμός (ionic bond)

Αποτελεί ένωση ενός ηλεκτροθετικού με ένα ηλεκτραρνητικό στοιχείο και οφείλεται στην ηλεκτροστατική τους αλληλεπίδραση

**Ηλεκτροθετικά στοιχεία:** ικανά να δώσουν λίγα ηλεκτρόνια σθένους και να γίνουν θετικά φορτισμένα ιόντα

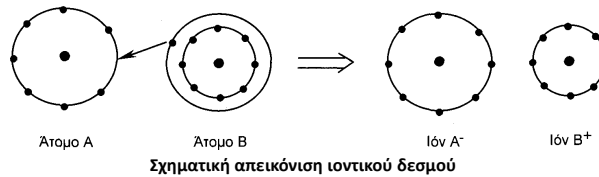
**Ηλεκτραρνητικά στοιχεία:** έλκουν ηλεκτρόνια σθένους και γίνονται αρνητικά φορτισμένα ιόντα

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ <sup>60</sup>

60



## Ιοντικός Δεσμός ή Ετεροπολικός Δεσμός (ionic bond)

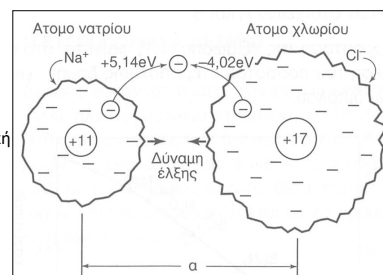


- Δεσμοί Μετάλλων – Αμετάλλων
- Μέταλλο (δίνει e<sup>-</sup>) - Αμέταλλο (παίρνει e<sup>-</sup>)
- Αποκτούν σταθερή ηλεκτρονιακή δομή
- Κεραμικά/ Γύψος / Ασβεστίτης /Αλάτι
- Στην κρυσταλλική τους μορφή παίρνουν τέτοιες θέσεις ώστε να ελαχιστοποιούνται απωστικές δυνάμεις μεταξύ ιόντων ίδιου προσήμου
- Μερικά, σε υδατικό διάλυμα κινούνται ελεύθερα και η κρυσταλλική δομή καταστρέφεται. Π.χ. NaCl

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ <sup>61</sup>

61

## Ιοντικός Δεσμός ή Ετεροπολικός Δεσμός (ionic bond)



Σχηματισμός ιοντικού δεσμού στο μόριο του NaCl

- Αποσπάται ένα e<sup>-</sup> από το Na
- Το Na αποκτά ηλεκτρονιακή δομή Ne (1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>)
- Μειώνεται το μέγεθός του

- Μεταφέρεται σε «κενή θέση» της εξωτερικής στοιβάδας του ατόμου του Cl
- Το Cl αποκτά δομή Ar (1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup>)

Ελκτικές δυνάμεις τύπου Coulomb :

$$E_A = -\frac{A}{r}, \quad A = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} (|Z_1 e|) (|Z_2 e|)$$

Απωστική Δύναμη:

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

Google Drive Ασκ. 7, 8

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ <sup>62</sup>

62

## Ιοντικός Δεσμός ή Ετεροπολικός Δεσμός (ionic bond)

- Ίδιος δεσμός στις 3 διευθύνσεις (μη κατευθυντικός)
- Σταθερός δεσμός που απαιτεί σταθερή διάταξη θετικών και αρνητικών ιόντων
  - άρα συγκριμένη δομή
- Απαντάται στα κεραμικά υλικά
- Ενέργειες δεσμών 600-1500 kJ/mol
- Υψηλή θερμοκρασία Τήξης
- Καλοί μονωτές
- Σκληρά – ψαθυρά υλικά

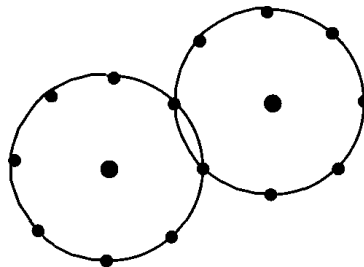
Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ <sup>63</sup>

63

## Ομοιοπολικός Δεσμός (covalent bond)

Άτομα που μοιράζονται τα ηλεκτρόνια του εξωτερικού τους φλοιού με άλλα άτομα (κοινό ζεύγος ηλεκτρονίων) δημιουργούν ένα ομοιοπολικό δέσμο. Έτσι, κάθε άτομο εμφανίζει στον εξωτερικό του φλοιό έναν πλήρη αριθμό ηλεκτρονίων

Μικρές διαφορές ηλεκτραρνητικότητας των στοιχείων (μηδενική διαφορά)



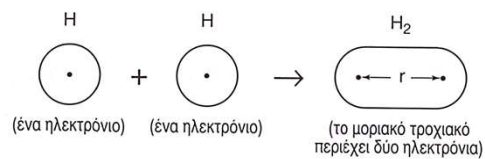
Σχηματική απεικόνιση ομοιοπολικού δεσμού

Μπαδογιάννης Ε. - 2<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΤΕΧΝΙΚΑ ΥΛΙΚΑ <sup>64</sup>

64

## Ομοιοπολικός Δεσμός (covalent bond)

Η στοιβάδα σθένους έχει 1 ηλεκτρόνιο. Όταν δύο άτομα προσεγγίσουν, συνενώνονται τα ατομικά τροχιακά και μειώνεται η δυναμική ενέργεια

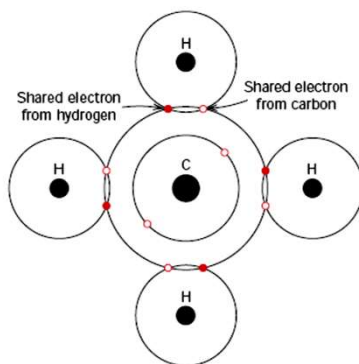


Μόριο Υδρογόνου: σχηματισμός ομοιοπολικού δεσμού

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>65</sup>

65

## Ομοιοπολικός Δεσμός (covalent bond)



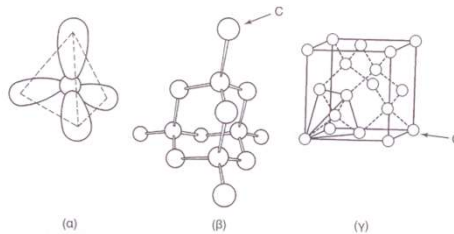
Μόριο μεθανίου ( $\text{CH}_4$ ): σχηματισμός ομοιοπολικού δεσμού

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>66</sup>

66

## Ομοιοπολικός Δεσμός (covalent bond)

- Κυριαρχεί στις ενώσεις του Si
- Η ένταση του ομοιοπολικού δεσμού είναι ανάλογη του δεσμού των ηλεκτρονίων σθένους με τον πυρήνα
- Μονωτές ή ημιαγωγοί
- Δεν προβλέπεται η μηχαν. συμπεριφορά με βάση τα χαρακτηριστικά των δεσμών
- Στερεές ενώσεις: **Διαμάντι (C)**, **πυρίτιο (Si)** (Ο άνθρακας έχει 6 ηλεκτρόνια: τα 4 στην εξωτερική στοιβάδα (L) κατέχουν κορυφές τετραέδρου. Κάθε άτομο ενώνεται με ομοιοπολικό δεσμό με τέσσερα άλλα γειτονικά)



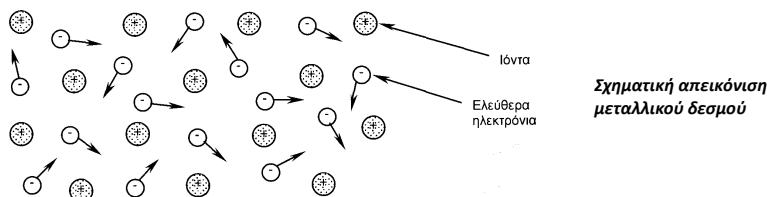
ΣΧΗΜΑ 1.4. Δομή διαμαντιού. (α) Διάταξη ατομικών τροχιακών στο άτομο του άνθρακα. (β) Διάταξη ατόμων άνθρακα στο διαμάντι. (γ) Κρυσταλλική δομή του διαμαντιού (κυβική).

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ 67

67

## Μεταλλικός Δεσμός (metallic bond)

- Τα ηλεκτρόνια σθένους σχηματίζουν ένα κοινό για όλα τα άτομα-κατιόντα «νέφος» (ελεύθερα ηλεκτρόνια) που κινείται σχεδόν ελεύθερα
- Τα ηλεκτρόνια που δεν ανήκουν στα  $e^-$  σθένους σχηματίζουν "ιοντικά κέντρα" με θετικό φορτίο, ίσο με αυτό των  $e^-$  σθένους
- Λόγω του αδύνατου δεσμού με τον πυρήνα, το νέφος ηλεκτρονίων συνδέεται ασθενώς με τα ιόντα δηλαδή κινείται σχεδόν ελεύθερα.
- Τα  $e^-$  σθένους προστατεύουν τα ιοντικά κέντρα από τις μεταξύ τους απωστικές δυνάμεις.
- Ο δεσμός δεν παρουσιάζει ιδιαίτερο προσανατολισμό.
- Τα ιόντα έχουν τάση να καταλάβουν θέσεις υψηλής συμμετρίας και μεγάλης πυκνότητας.
- Ο μεταλλικός δεσμός είναι η ελκτική δύναμη μεταξύ του ηλεκτρονιακού νέφους και των θετικών ιόντων του μετάλλου.
- Συναντάται μόνο στα μέταλλα, τα οποία έχουν λίγα σχετικά ηλεκτρόνια στην εξωτερική τους στοιβάδα (1-3), σε μεγάλη απόσταση από τον πυρήνα.



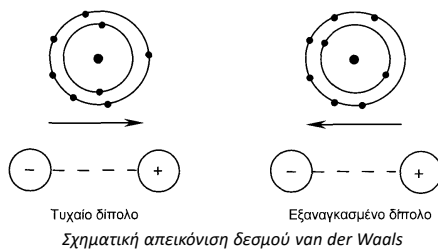
Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ 68

68

## Δευτερεύοντες δεσμοί - (ΔΙΑ)ΜΟΡΙΑΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ

### Δεσμοί van der Waals

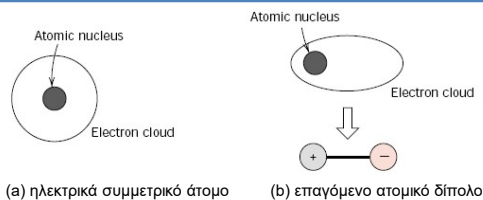
- Ο δεσμός van der Waals είναι σχετικά ασθενής δεσμός (4 - 30 kJ/mol) μεταξύ ευσταθών ατόμων με πλήρη εξωτερική στοιβάδα (π.χ. ευγενών αερίων)
- Οφείλεται κυρίως στην εμφάνιση πολικότητας, δηλαδή στην ιδιότητα στιγμιαίου προσανατολισμού του ηλεκτρικού φορτίου
- Το δίπολο προκύπτει όταν υπάρχει απόσταση μεταξύ των θετικών και αρνητικών τμημάτων ενός ατόμου ή μορίου
- Πρακτικά μεταξύ όλων των ατόμων ή μορίων που μπορεί να συνδέονται με πρωτεύοντες δεσμούς
- Ο δεσμός είναι αποτέλεσμα έλξης Coulomb



Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>69</sup>

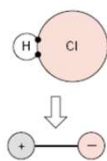
69

## Δευτερεύοντες δεσμοί - (ΔΙΑ)ΜΟΡΙΑΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ



οι δονήσεις που υφίστανται τα άτομα προκαλούν βραχυχρόνιες παραμορφώσεις και κατά συνέπεια δημιουργία μικρών ηλεκτρικών δίπολων

### Μόνιμα Δίπολα (ΠΟΛΙΚΑ ΜΟΡΙΑ)



#### Πολικό μόριο HCl.

Σε αυτή την περίπτωση υπάρχουν μόνιμες διπολικές ροπές λόγω της ασύμμετρης τοποθέτησης των θετικά και αρνητικά φορτισμένων περιοχών

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>70</sup>

70

## Δευτερεύοντες δεσμοί - (ΔΙΑ)ΜΟΡΙΑΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ

### Επαγόμενο δίπολο - Επαγόμενο δίπολο

- Αναίρεση της ηλεκτρικής συμμετρίας λόγω κινήσεων δόνησης
- Το δίπολο που δημιουργήθηκε προκαλεί επαγωγή σε γειτονικό του
  - Υγροποίηση διαφόρων μορίων π.χ. των ευγενών αερίων
  - Χαμηλές θερμ. τήξης και βρασμού

### Δίπολο - Επαγόμενο δίπολο

- Η μόνιμα ασύμμετρη κατανομή ενός μόνιμου διπόλου προκαλεί επαγωγή σε γειτονικό του

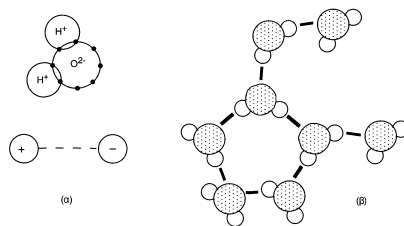
Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>71</sup>

71

## (ΔΙΑ)ΜΟΡΙΑΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ

### Δεσμός υδρογόνου (Δίπολο-Δίπολο)

- Ο δεσμός μεταξύ ενός ατόμου Η ενός μορίου και ενός ισχυρά ηλεκτραρνητικού ατόμου άλλου μορίου (F, O, N).
- Αποτελεί ειδική περίπτωση δεσμού διπόλου - διπόλου (προσανατολισμένος)



Σχηματική απεικόνιση δεσμού υδρογόνου

- Μεγάλη σχετικά ενέργεια δεσμού 51 kJ/mol
- Μεγάλες θερμ. τήξης και βρασμού για τα HF, H<sub>2</sub>O

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>72</sup>

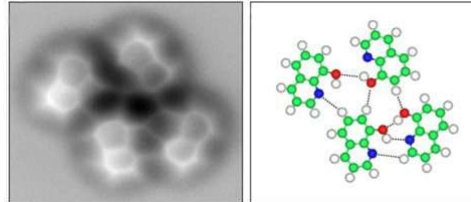
72

## (ΔΙΑ)ΜΟΡΙΑΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ

### Δεσμός υδρογόνου

#### Ιδιότητες

- Διαλυτότητα
- Επιφ. Τάση
- Τριχοειδής αναρρόφηση
- Τάση ατμών
- Ιξώδες



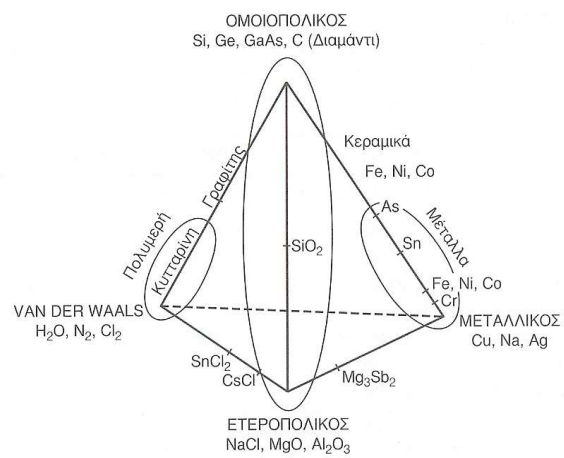
#### Εφαρμογές

- Λειτουργία συγκολλητικών
- Τασιεργά
- Γαλακτωματοποιητές
- Αφυγραντήρες

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>73</sup>

73

## Μεικτός χαρακτήρας ατομικών δεσμών



Google Drive Ασκ. 9

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>74</sup>

74

## Φύση ατομικού δεσμού - Ιοντικός χαρακτήρας

- Εξαρτάται από την διαφορά ηλεκτραρνητικότητας  $|\Delta\chi|$  μεταξύ των ατόμων
  - $|\Delta\chi| > 1.7$ , ΙΟΝΤΙΚΟΣ ή ΕΤΕΡΟΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ
  - $0 < |\Delta\chi| < 1.7$ , ΠΟΛΩΜΕΝΟΣ ή ΠΟΛΙΚΟΣ ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ
  - $|\Delta\chi| = 0$ , ΚΑΘΑΡΑ ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

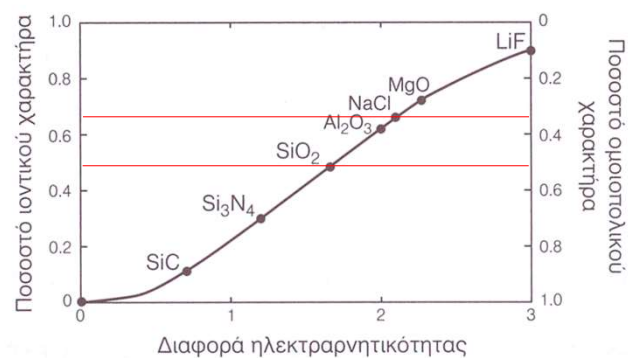
Ιοντικός χαρακτήρας δεσμού:  $I.X.\% = \{1 - \exp[-(0.25)(\chi_A - \chi_B)^2]\} \times 100$

Google Drive Ασκ. 10

Μπαδογιάννης Ε. - 2<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΤΕΧΝΙΚΑ ΥΛΙΚΑ <sup>75</sup>

75

## Ιοντικός χαρακτήρας



π.χ. Ο δεσμός  $SiO_2$  είναι κατά 51% ιοντικός και κατά 49% ομοιοπολικός

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>76</sup>

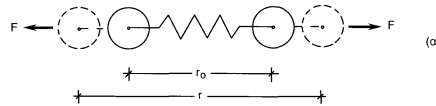
76



## Δυνάμεις μεταξύ ατόμων - ενέργεια δεσμού

### Ατομικός δεσμός

- Ελκτικές και απωθητικές δυνάμεις
- Ελκτικές ή απωθητικές ενέργειες αλληλεπίδρασης
- Θέση ισορροπίας, όταν ελκτικές και απωθητικές δυνάμεις εξουδετερώνονται

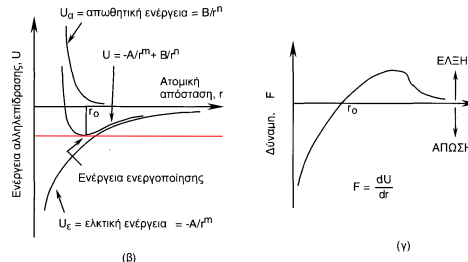


**Δυστένεια S:**  $S = \frac{dF}{dr} = \frac{d^2U}{dr^2}$

- Για μικρές μεταβολές του r από την τιμή r<sub>0</sub>, η δυστένεια S είναι σταθερή

$$S_0 = \left( \frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_0}$$

- Ο δεσμός είναι ελαστικός (φυσική ερμηνεία του νόμου του Hooke)

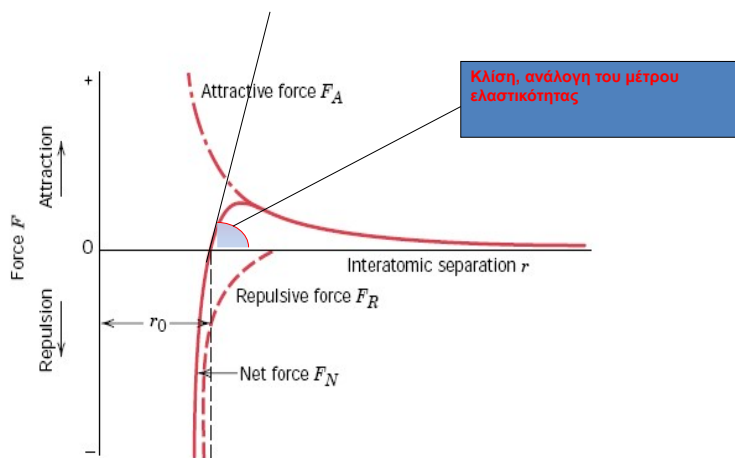


(α) Ατομικός δεσμός, (β) ενέργεια δεσμού, (γ) δύναμη δεσμού

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>77</sup>

77

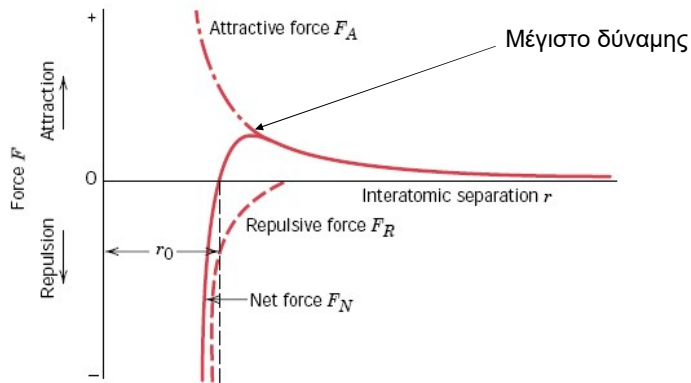
## Δεσμοί και ιδιότητες: πλαστικότητα – νόμος Hooke



Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>78</sup>

78

## Δεσμοί και ιδιότητες: Σκληρότητα - Σ. Τήξης



Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>79</sup>

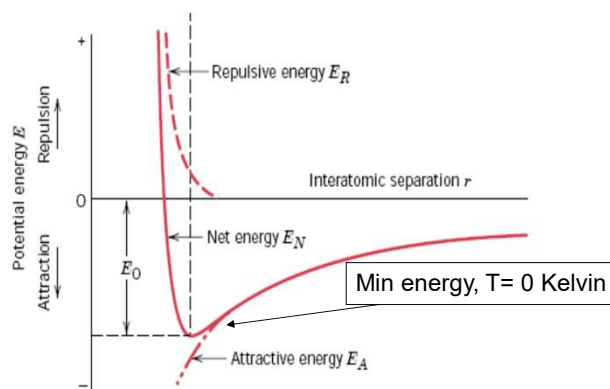
79

## Δεσμοί και ιδιότητες: Σημείο τήξης και βρασμού

Τα άτομα έχουν τη μικρότερη ενέργεια στο απόλυτο μηδέν που αντιστοιχεί στο άκρο της καμπύλης της συνολικής ενέργειας.

Αύξηση της θερμοκρασίας αυξάνει την ενέργεια, έως ότου τα άτομα να μπορούν να διαχωριστούν.

Μεγάλη ενέργεια = ψηλό σημείο τήξης  
Μεγάλη ενέργεια = στερεό  
Μικρές ενέργειες = αέριο  
Ενδιάμεσες ενέργειες = υγρό



Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ <sup>80</sup>

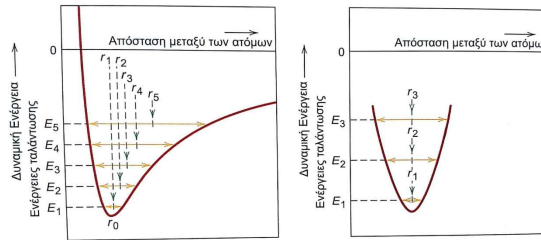
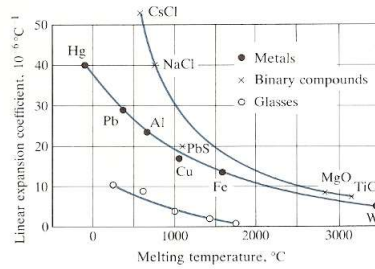
80

### Δεσμοί και ιδιότητες: Θερμική διαστολή

Η θερμική διαστολή υλικών με παρόμοια διευστάση των ατόμων είναι συνήθως αντιθέτως ανάλογη του σημείου τήξης τους.

Τα υλικά με χαμηλό α (συντελεστή θερμικής διαστολής) έχουν βαθύ και πιο συμμετρικό «πηγάδι» ενέργειας.

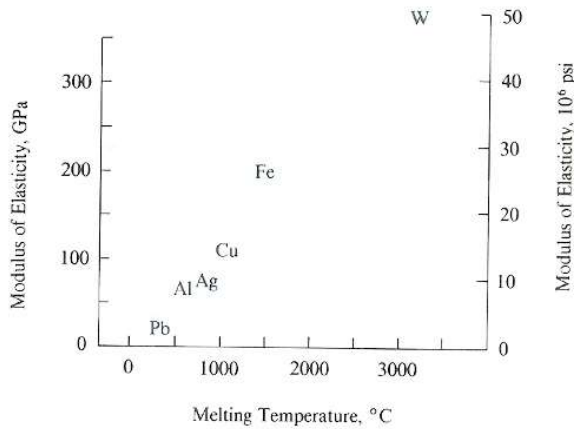
Έτσι οι μέσες ενδοατομικές αποστάσεις των υλικών με ισχυρούς δεσμούς αυξάνονται λιγότερο με την προσφορά θερμικής ενέργειας.



Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ 81

81

### Δεσμοί και ιδιότητες



Τα E και η θερμοκρασία τήξης  $T_M$  συνδέονται μέσω της ενέργειας δεσμού. Επομένως συνδέονται και μεταξύ τους όπως φαίνεται και από το διάγραμμα.

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. - ΟΧΜ 82

82

## Δεσμοί και ιδιότητες: Σημασία της φύσης των δεσμών

Κυριότερα είδη χημικών δεσμών και χαρακτηριστικές ιδιότητες (Θ. τήξης, μετρ.ελαστ., συν. γραμ. διαστολής, Πηγή Χρυσουλάκης Γ., Παντελής Δ. Επιστήμη και τεχνολογία των μεταλλικών υλικών)

ΥΛΙΚΟ	T <sub>m</sub> (°C)	E (GPa)	θ(10 <sup>-6</sup> · °C <sup>-1</sup> )
ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΙ & ΕΤΕΡΟΠΟΛΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ			
TiC	3180	315	7,4
SiC	>2800	480	4,7
MgO	2850	210	13,5
ZrO <sub>2</sub>	2750	205	10,0
C (ινεσ)	>2500	400	—
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2050	380	8,8
SiO <sub>2</sub> (γυαλί)	>1600	72	0,5
ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ			
Mo	2610	324	4,9
B	2030	400	8,3
Ti	1660	116	8,4
Fe	1535	210	11,8
Ni	1453	210	13,3
Cu	1083	110	16,5
Al	660	70	23,6
Mg	649	44	25,2
Zn	420	84	39,7
Pb	327	14	29,3
Sn	232	43	23,0
ΑΣΘΕΝΕΙΣ ΔΕΣΜΟΙ (van der Waals και γέφυρες υδρογόνου)			
Πολιαθυλένιο	115	0,2	210
PVC	130	2,4	54
Εποξειδική ρητίνη	—	2,4	72
Πολυεστέρας	—	5,0	75
Αραμιδια (ινεσ)	—	130	—
Οστά	—	18	—
Ξύλο	—	10	—

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξαμ. – ΟΧΜ 83