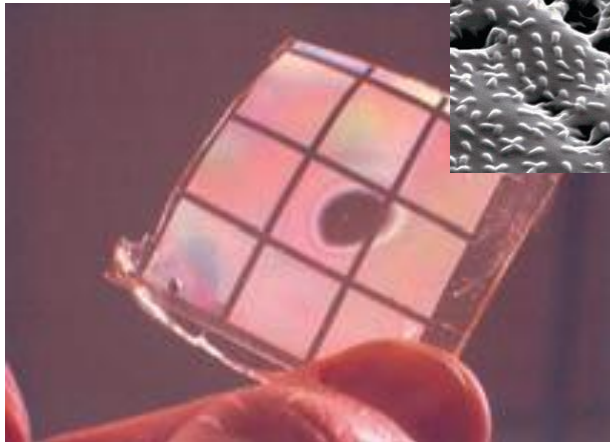
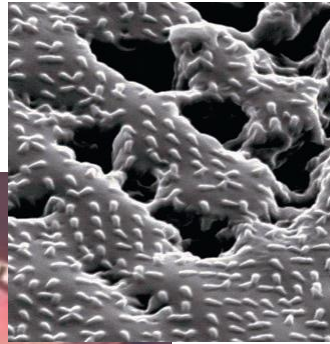
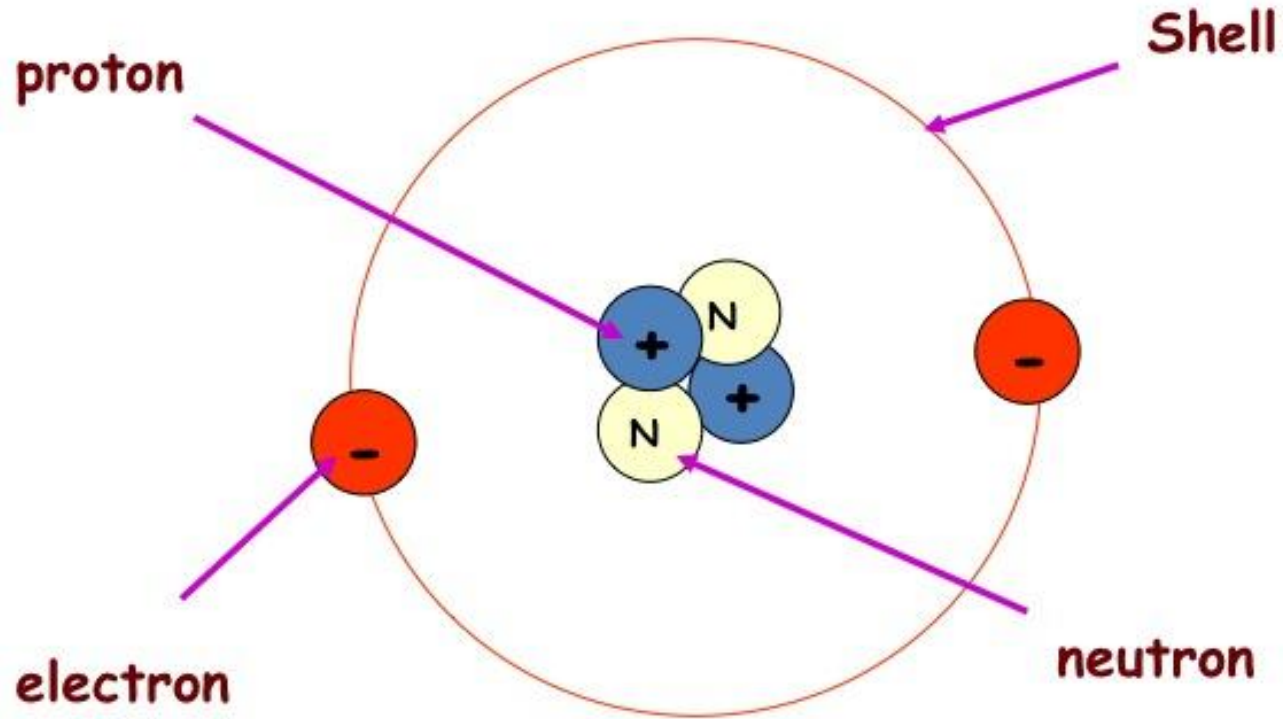


فصل دوم: ساختار اتمی و برهمکنش های بین اتمی

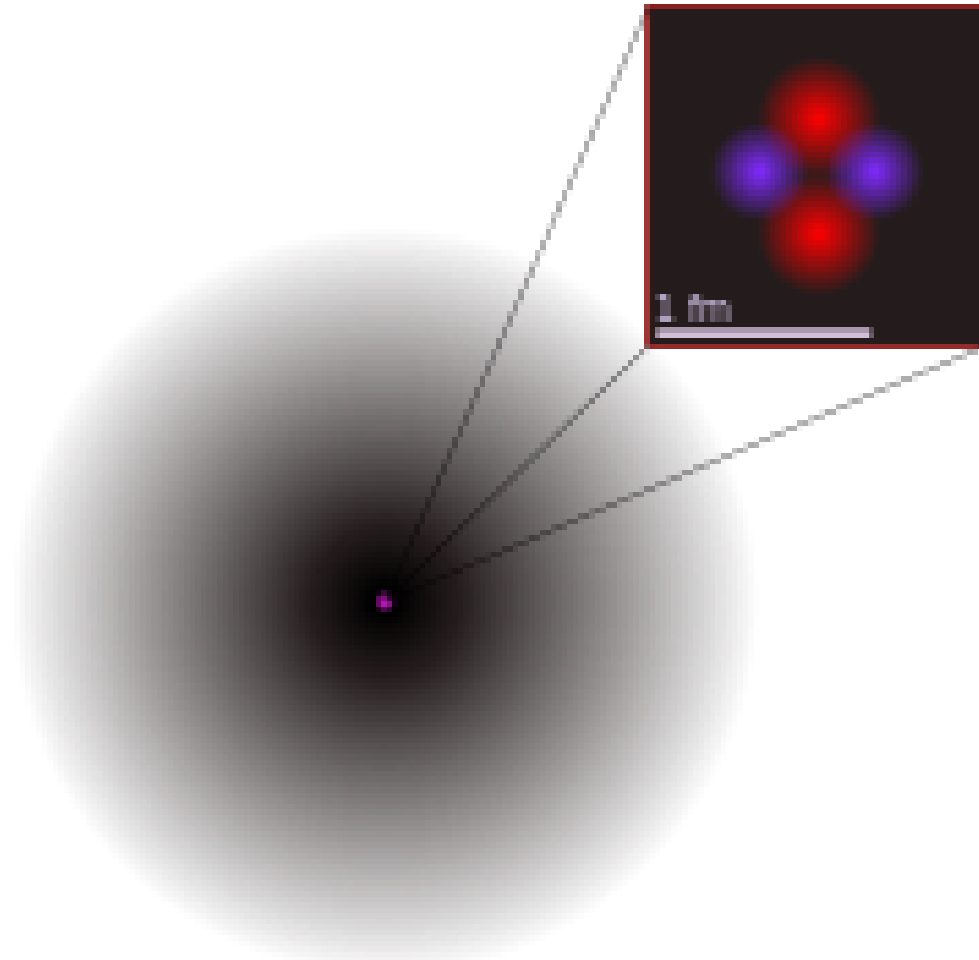


- آنچه در این فصل می آموزیم:
- آشنایی با ساختار اتم
- تعیین انرژی پیوند
- انواع پیوندها
- تاثیر نوع پیوند بر خواص مواد

مطالعه ساختار اتم



آرایش الکترونی اتم



$$1 \text{ \AA} = 100,000 \text{ fm}$$

آرایش الکترونی در اتم هلیم

Adapted from
Wikipedia

مشخصات اعداد کوانتومی در اولین چهار قشر

| تعداد الکترون ها در سطوح انرژی مختلف | عدد کوانتومی اسپین | عدد کوانتومی مغناطیسی (تعداد موقعیت ها) | موقعیت ها و سطوح انرژی پایین | عدد کوانتومی فرعی | مدارات اصلی | عدد کوانتومی اصلی () |
|--------------------------------------|--------------------|---|------------------------------|-------------------|-------------|-----------------------|
| ۲ | +1/2, -1/2 | ۱ | s | ۰ | K | ۱ |
| ۲ ۶ | +1/2, -1/2 | ۱ ۳ | s p | ۰ ۱ | L | ۲ |
| ۲ ۶ ۱۰ | +1/2, -1/2 | ۱ ۳ ۵ | s p d | ۰ ۱ ۲ | M | ۳ |
| ۲ ۶ ۱۰ ۱۴ | +1/2, -1/2 | ۱ ۳ ۵ ۷ | s p d f | ۰ ۱ ۲ ۳ | N | ۴ |

جدول تناوبی

کاهش خواص فلزی

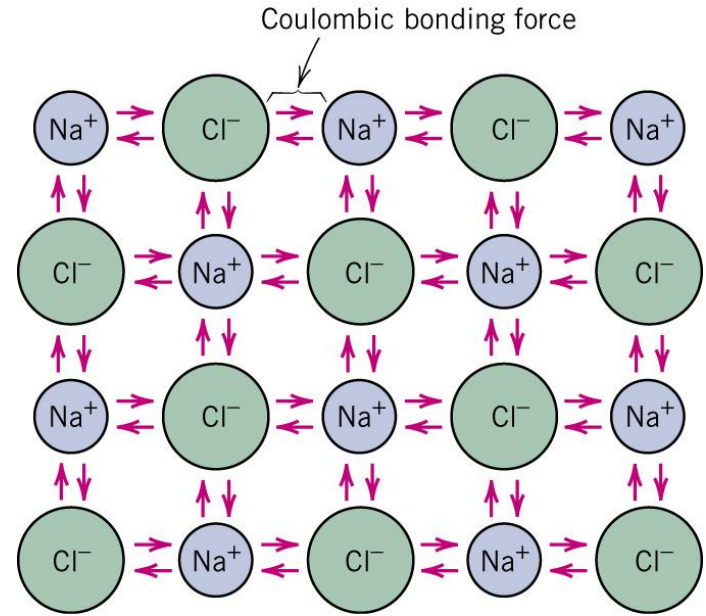
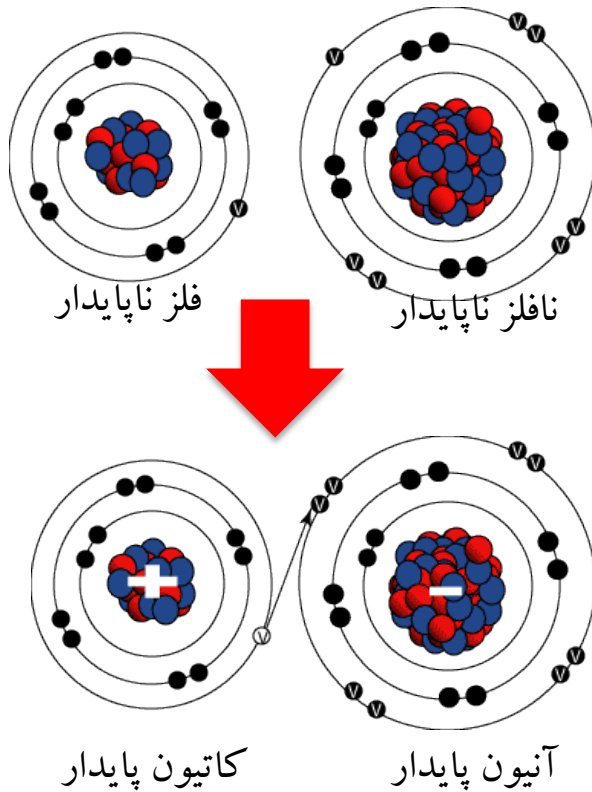
افزایش خواص فلزی

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-----|-----|---------|-----|-----|-----|-------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-------|------|-----|-----|-------|--|----|--|
| IA | | | | | | | | | | | | | 0 | | | | | | | |
| H | | | | | | | | | | | | | | | | | | | He | |
| 2.1 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | - | |
| Li | IIA | | | | | | | | | | | | III A | IV A | VA | VIA | VII A | | Ne | |
| 1.0 | Be | | | | | | | | | | | | B | C | N | O | F | | - | |
| 1.5 | | | | | | | | | | | | | 2.0 | 2.5 | 3.0 | 3.5 | 4.0 | | | |
| Na | Mg | | | | | | | | | | | | Al | Si | P | S | Cl | | Ar | |
| 0.9 | 1.2 | | | | | | | | | | | | 1.5 | 1.8 | 2.1 | 2.5 | 3.0 | | - | |
| | | IIIB | IVB | VB | VIB | VII B | VIII | | | IB | IIB | | | | | | | | | |
| K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | | | Kr | |
| 0.8 | 1.0 | 1.3 | 1.5 | 1.6 | 1.6 | 1.5 | 1.8 | 1.8 | 1.8 | 1.9 | 1.6 | 1.6 | 1.8 | 2.0 | 2.4 | 2.8 | | | - | |
| Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | | | Xe | |
| 0.8 | 1.0 | 1.2 | 1.4 | 1.6 | 1.8 | 1.9 | 2.2 | 2.2 | 2.2 | 1.9 | 1.7 | 1.7 | 1.8 | 1.9 | 2.1 | 2.5 | | | - | |
| Cs | Ba | La-Lu | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | | | Rn | |
| 0.7 | 0.9 | 1.1-1.2 | 1.3 | 1.5 | 1.7 | 1.9 | 2.2 | 2.2 | 2.2 | 2.4 | 1.9 | 1.8 | 1.8 | 1.9 | 2.0 | 2.2 | | | - | |
| Fr | Ra | Ac-No | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 0.7 | 0.9 | 1.1-1.7 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

افزایش الکترونگاتیویته

افزایش الکترونگاتیویته

پیوند یونی




شمایی از پیوند یونی
در نمک طعام

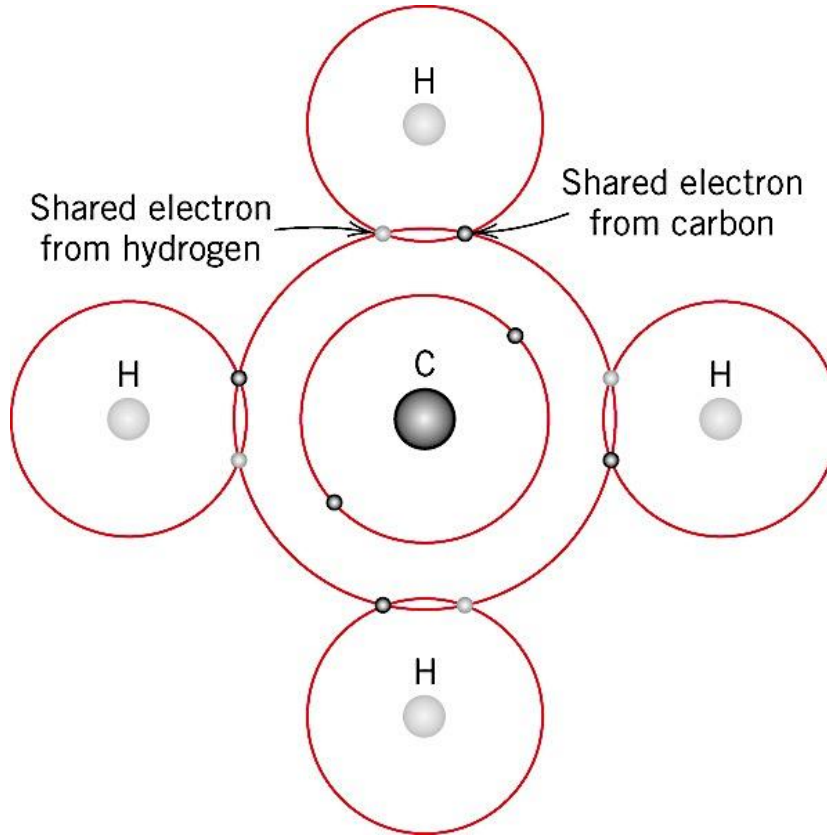
پیوند یونی

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-----|-----|---------|-----|-----|-----|-------|------|-----|-----|-----|-----|-----|------|-----|-----|-----|------|----|--|
| IA | | | | | | | | | | | | | | | | | | 0 | |
| H | | | | | | | | | | | | | | | | | | He | |
| 2.1 | IIA | | | | | | | | | | | | IIIA | IVA | VA | VIA | VIIA | - | |
| Li | Be | | | | | | | | | | | | B | C | N | O | F | Ne | |
| 1.0 | 1.5 | | | | | | | | | | | | 2.0 | 2.5 | 3.0 | 3.5 | 4.0 | - | |
| Na | Mg | | | | | | | | | | | | Al | Si | P | S | Cl | Ar | |
| 0.9 | 1.2 | | | | | | | | | | | | 1.5 | 1.8 | 2.1 | 2.5 | 3.0 | - | |
| | | IIIB | IVB | VB | VIB | VII B | VIII | | | | IB | IIB | | | | | | | |
| K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr | | |
| 0.8 | 1.0 | 1.3 | 1.5 | 1.6 | 1.6 | 1.5 | 1.8 | 1.8 | 1.8 | 1.9 | 1.6 | 1.6 | 1.8 | 2.0 | 2.4 | 2.8 | - | | |
| Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe | | |
| 0.8 | 1.0 | 1.2 | 1.4 | 1.6 | 1.8 | 1.9 | 2.2 | 2.2 | 2.2 | 1.9 | 1.7 | 1.7 | 1.8 | 1.9 | 2.1 | 2.5 | - | | |
| Cs | Ba | La-Lu | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn | | |
| 0.7 | 0.9 | 1.1-1.2 | 1.3 | 1.5 | 1.7 | 1.9 | 2.2 | 2.2 | 2.2 | 2.4 | 1.9 | 1.8 | 1.8 | 1.9 | 2.0 | 2.2 | - | | |
| Fr | Ra | Ac-No | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 0.7 | 0.9 | 1.1-1.7 | | | | | | | | | | | | | | | | | |


Give up electrons


Acquire electrons

پیوند کوالانسی



کربن دارای ۴ الکترون والانس است
نیاز به ۴ الکترون دارد.
هر هیدروژن ۱ الکترون والانس دار
یک الکترون می خواهد.

شمایی از مولکول متان

نمونه هایی از پیوند کووالانسی

Key

- 29 → Atomic number
- Cu → Symbol
- 63.54 → Atomic weight

Nonmetal

Intermediate

HF

H₂O

CH₄

C(diamond)

SiC

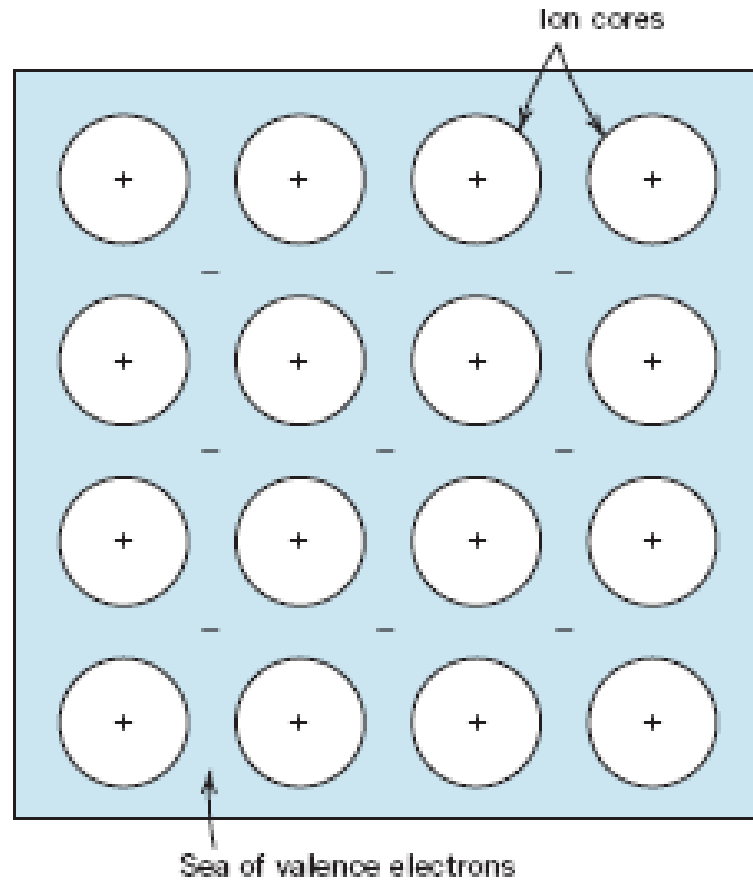
F₂

GaAs

H₂

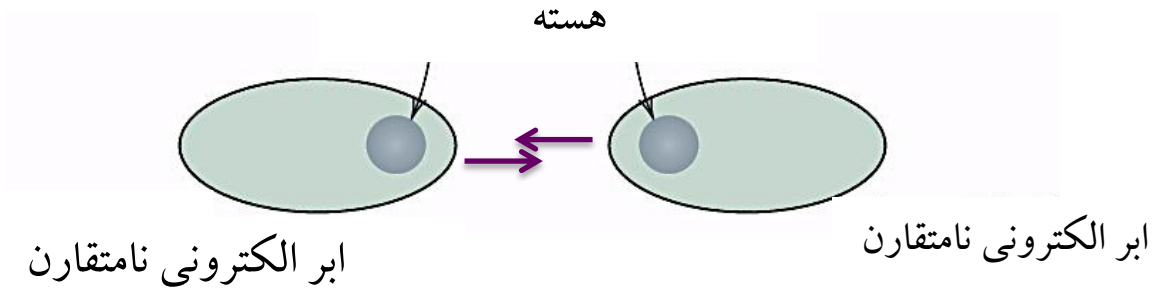
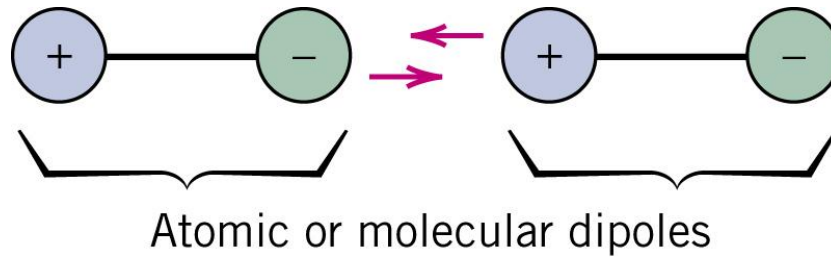
| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|-------------------|--------------------|
| 1 H 1.0080 | 2 He 4.0026 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 3 Li 6.939 | 4 Be 9.0122 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 11 Na 22.990 | 12 Mg 24.312 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 19 K 39.102 | 20 Ca 40.08 | 21 Sc 44.956 | 22 Ti 47.90 | 23 V 50.942 | 24 Cr 51.996 | 25 Mn 54.938 | 26 Fe 55.847 | 27 Co 58.933 | 28 Ni 58.71 | 29 Cu 63.54 | 30 Zn 65.37 | 31 Ga 69.72 | 32 Ge 72.59 | 33 As 74.922 | 34 Se 78.96 | 35 Br 79.91 | 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 (99) | 44 Ru 101.07 | 45 Rh 102.91 | 46 Pd 106.4 | 47 Ag 107.87 | 48 Cd 112.40 | 49 In 114.82 | 50 Sn 118.69 | 51 Sb 121.75 | 52 Te 127.60 | 53 I 126.90 | 54 Xe 131.30 |
| 55 Cs 132.91 | 56 Ba 137.34 | Rare earth series | 72 Hf 178.49 | 73 Ta 180.95 | 74 W 183.85 | 75 Re 186.2 | 76 Os 190.2 | 77 Ir 192.2 | 78 Pt 195.09 | 79 Au 196.97 | 80 Hg 200.59 | 81 Tl 204.37 | 82 Pb 207.19 | 83 Bi 208.98 | 84 Po (210) | 85 At (210) | 86 Rn 222 |
| 87 Fr (223) | 88 Ra (226) | Acti-nide series | | | | | | | | | | | | | | | |

پیوند فلزی

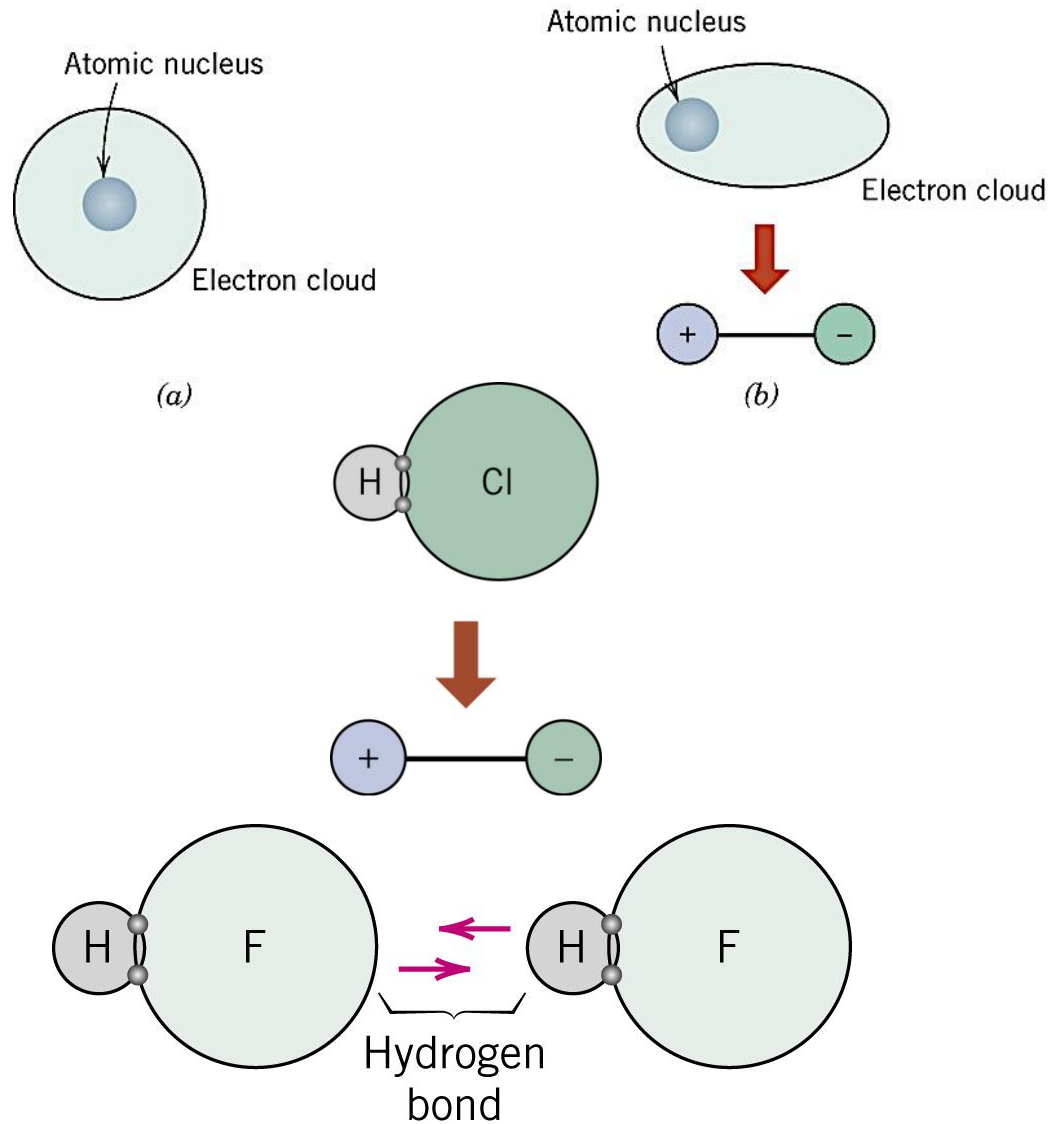


شمایی از پیوند فلزی

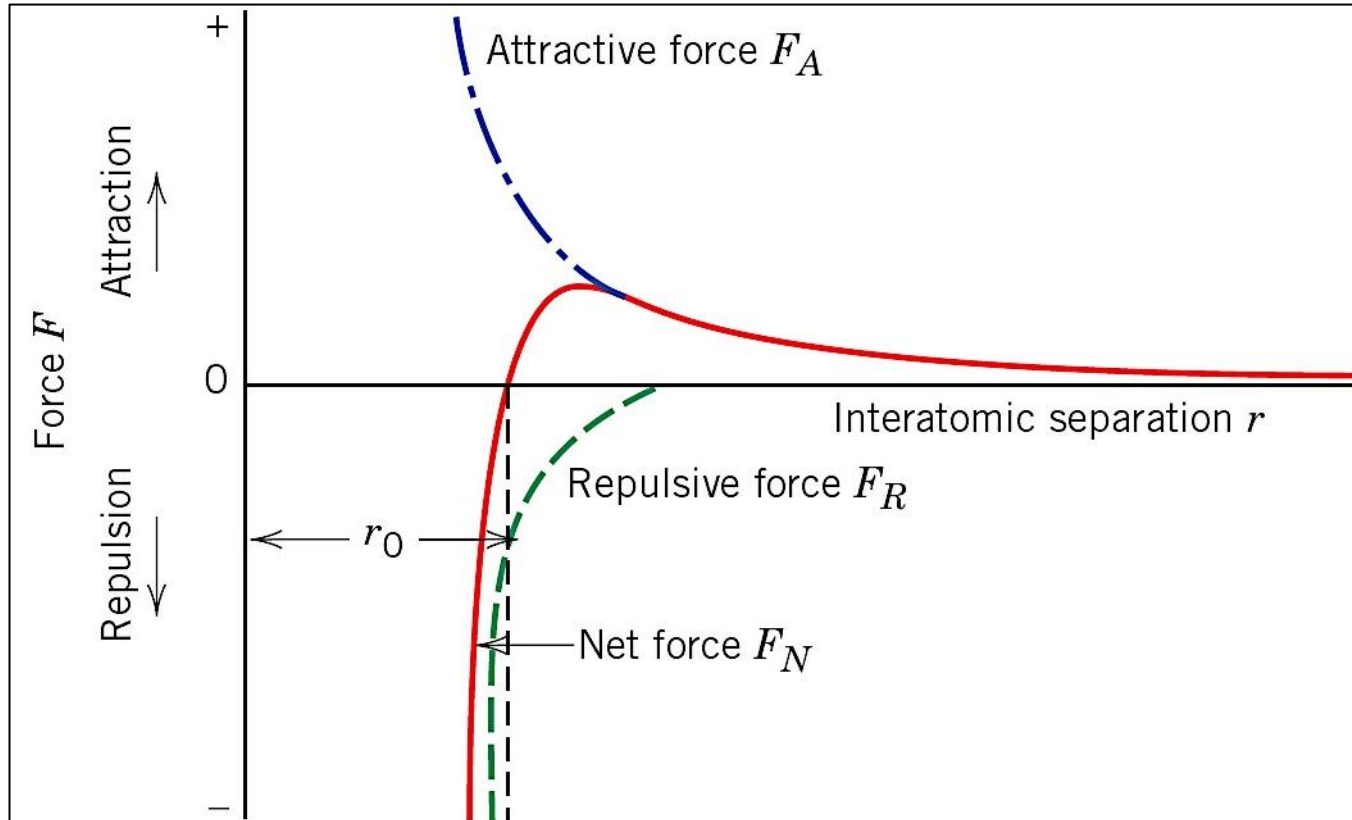
پیوند ثانویه (بین مولکولی)



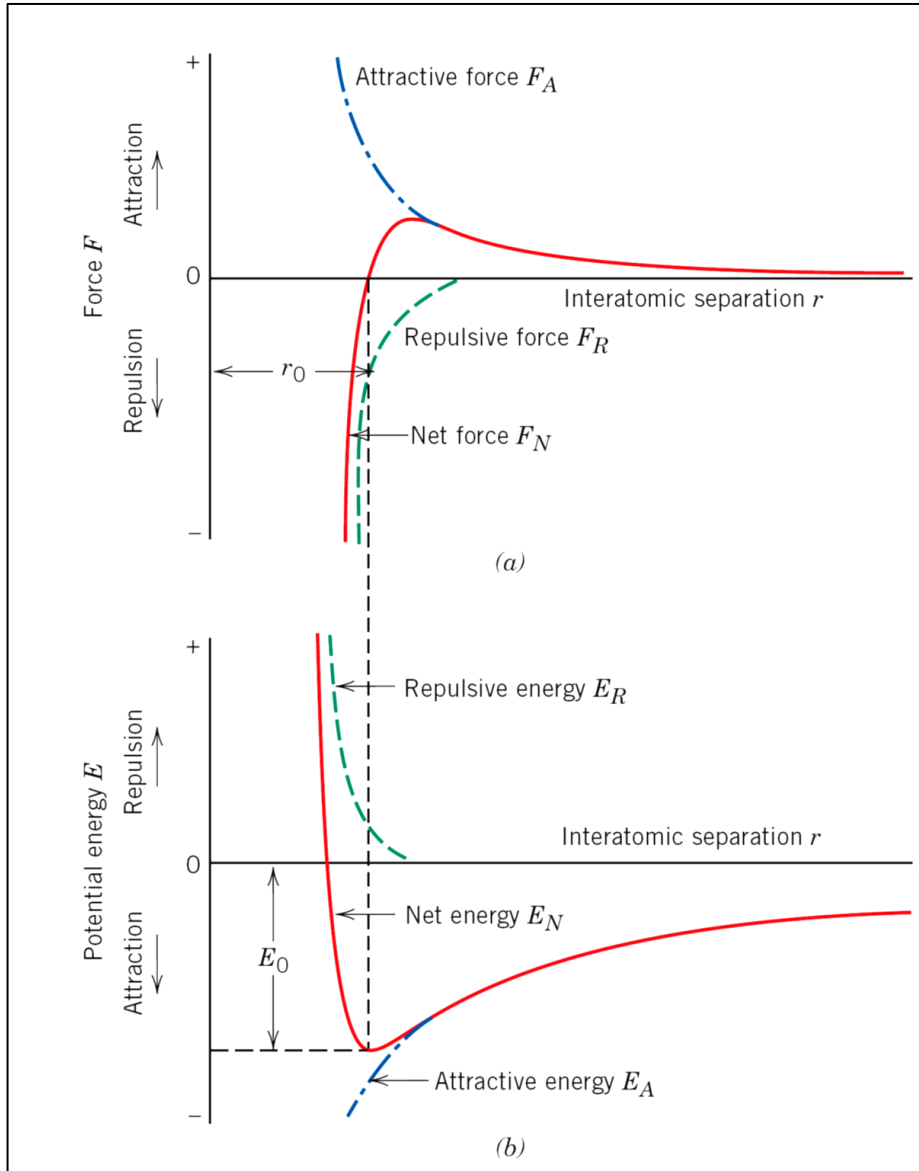
انواع پیوند ثانویه



محاسبه فواصل بین اتمی



انرژی پیوند



انرژی کل

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

انرژی دافعه

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

انرژی جاذبه

$$= E_A + E_R$$

$$E = \frac{K_0 Z_1 Z_2 q^2}{a} + \frac{b}{a^n}$$

انرژی پیوند

- انرژی پیوند تابع نوع پیوند اتمی است:

| انرژی پیوندی (کیلوژول) | نوع پیوند |
|--------------------------|------------|
| ۶۲۵-۱۵۵۰ | یونی |
| ۵۲۰-۱۲۵۰ | کووالانسی |
| ۱۰۰-۸۰۰ | فلزی |
| ۴۰> | واندروالسی |

خواص وابسته به انرژی پیوند

- نقطه ذوب: هر چه انرژی پیوند قوی تر، عمق چاه پتانسیل بیشتر، نقطه ذوب بالاتر

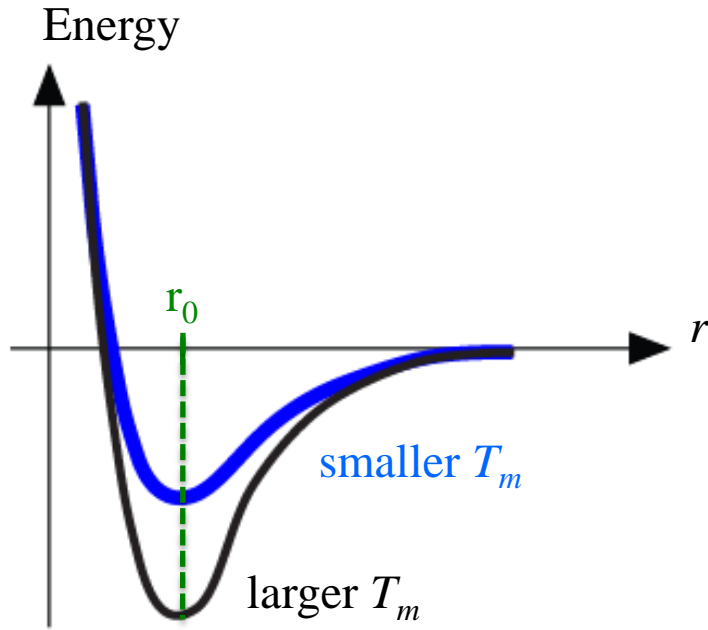
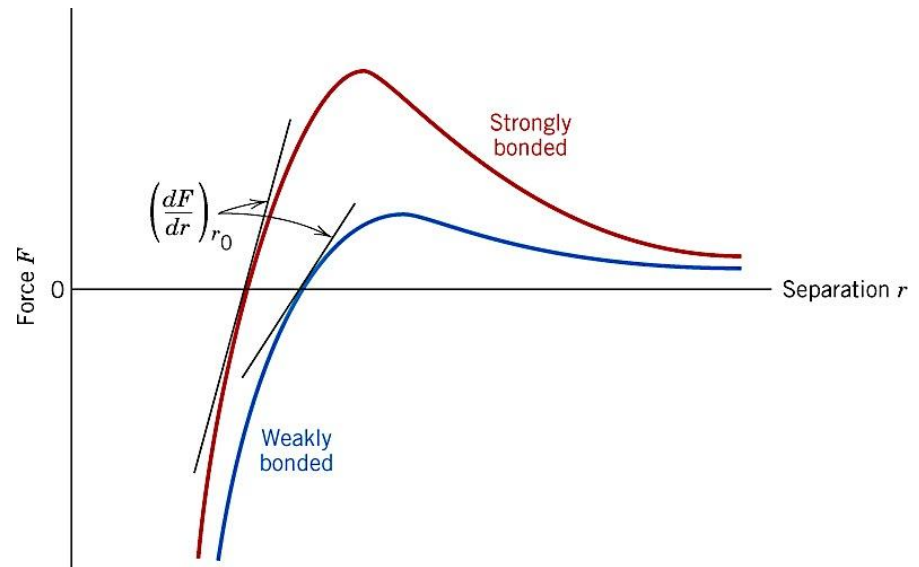
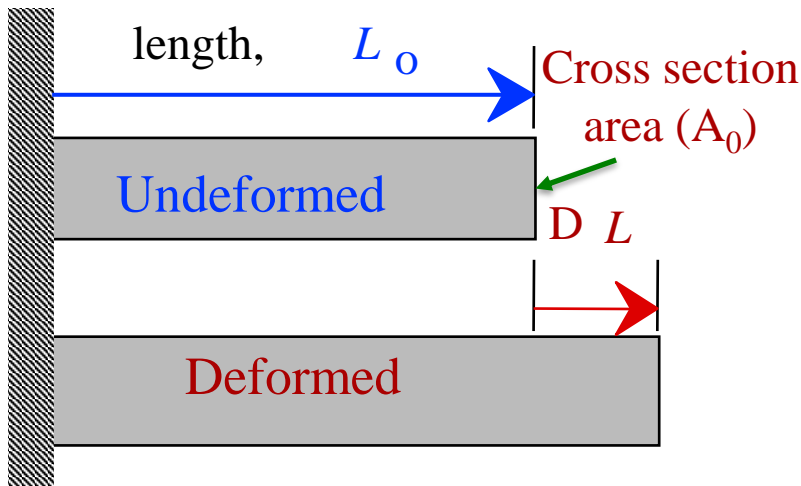


Table 2.3 Bonding Energies and Melting Temperatures for Various Substances

| Bonding Type | Substance | Bonding Energy | | Melting Temperature (°C) |
|---------------|------------------|----------------|-------------------------------|--------------------------|
| | | <i>kJ/mol</i> | <i>eV/Atom, Ion, Molecule</i> | |
| Ionic | NaCl | 640 | 3.3 | 801 |
| | MgO | 1000 | 5.2 | 2800 |
| Covalent | Si | 450 | 4.7 | 1410 |
| | C (diamond) | 713 | 7.4 | >3550 |
| Metallic | Hg | 68 | 0.7 | -39 |
| | Al | 324 | 3.4 | 660 |
| | Fe | 406 | 4.2 | 1538 |
| van der Waals | W | 849 | 8.8 | 3410 |
| | Ar | 7.7 | 0.08 | -189 |
| | Cl ₂ | 31 | 0.32 | -101 |
| Hydrogen | NH ₃ | 35 | 0.36 | -78 |
| | H ₂ O | 51 | 0.52 | 0 |

خواص وابسته به انرژی پیوند

- مدول یانگ: تابعی از مقاومت پیوند اتمی در برابر تغییر فاصله تعادلی اتم ها. (متناسب با شیب نمودار نیروی بین اتمی-فاصله در نقطه r_0)
- هر چه شیب منحنی در فاصله تعادلی بیشتر باشد، مدول یانگ بیشتر است.



Elastic modulus

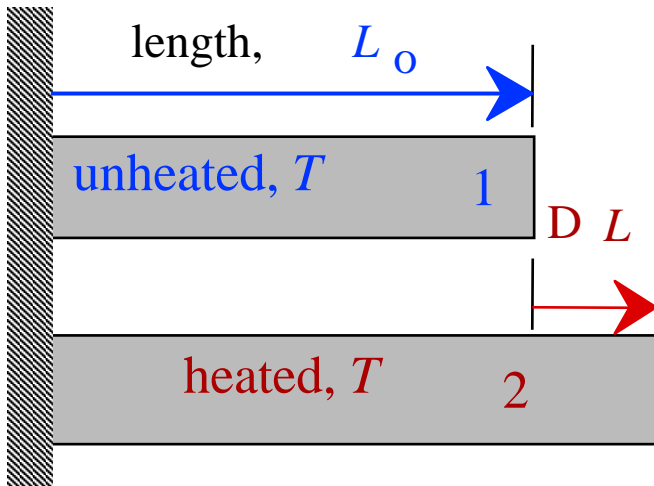
stress

strain

$$\frac{F}{A_0} = E \frac{\Delta L}{L_0}$$

نمودار نیرو-فاصله برای دو ماده با مدول الاستیسیته بالا و پایین

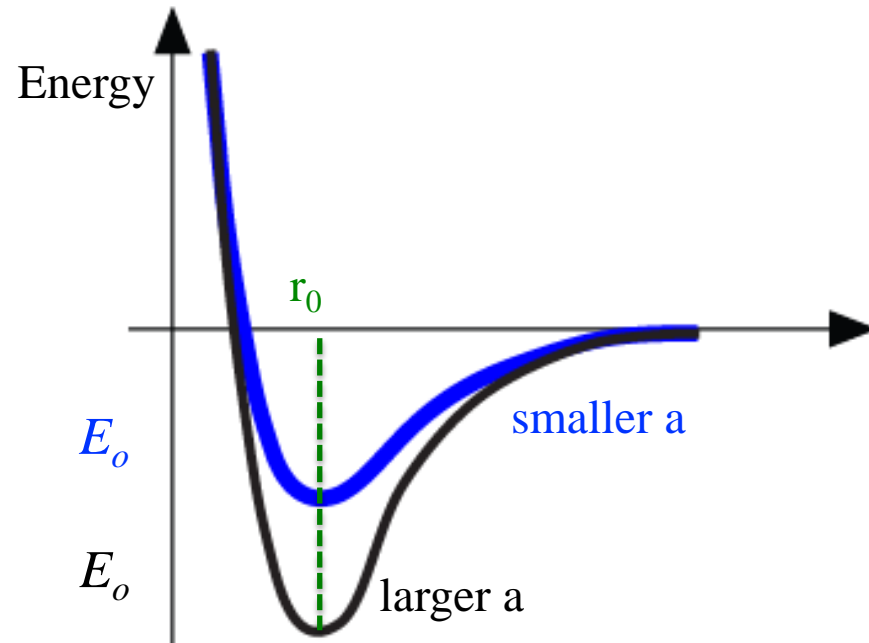
خواص وابسته به انرژی پیوند



جزوه

$$\frac{\Delta L}{L_0} = \alpha \Delta T$$

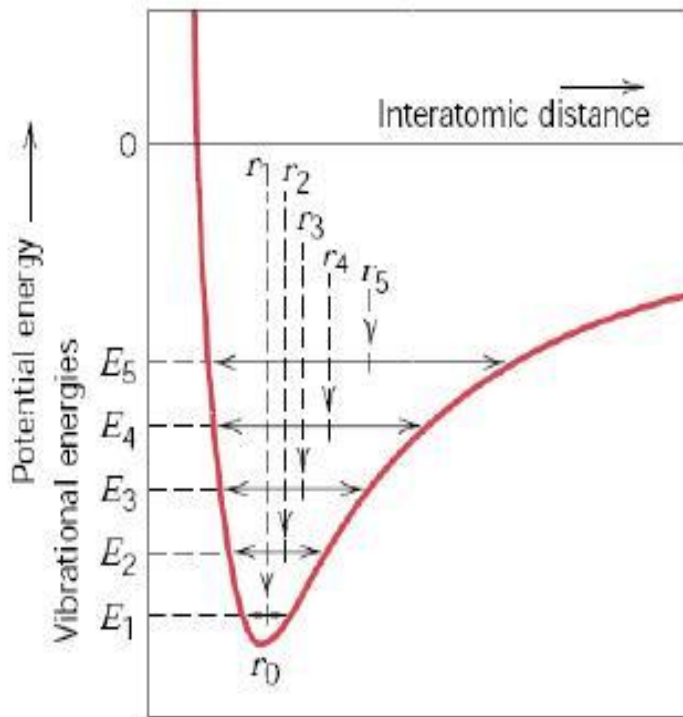
تعریف ضریب انبساط حرارتی



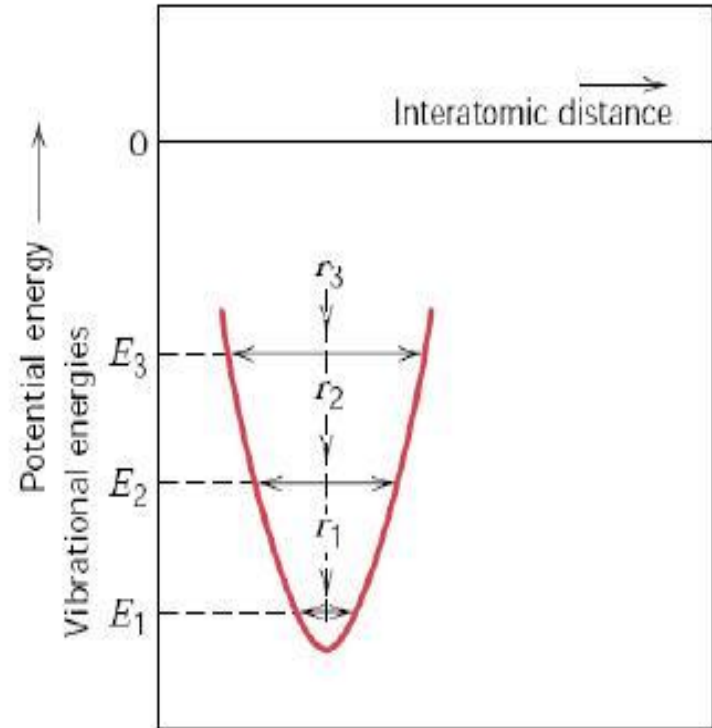
تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب فاصله اتمی.

خواص وابسته به انرژی پیوند

- انبساط حرارتی ناشی از انحناى نامتقارن قسمت پایین منحنى انرژی-فاصله است.



(ب)



(الف)

تفاوت منحنى متقارن و نامتقارن