

# Bölüm 2: Atomik Yapı & Atomarası Bağlar

- Bağlanmayı ne sağlar?
- Ne tip bağlar vardır?
- Bağların sebep olduğu özellikler nelerdir?



# Atomun yapısı (Birinci sınıf kimyası)

- atom –
  - electronlar –  $9.11 \times 10^{-31}$  kg
  - protonlar }  $1.67 \times 10^{-27}$  kg
  - neutronlar }
- Atom sayısı = atomun çekirdeğindeki proton sayısı  
= nötral parçacıktaki elektron sayısı
- A [=] atom kütle birimi = amu =  $^{12}\text{C}$ 'nin kütlesinin 1/12 si

Atomik kütle =  $6.022 \times 10^{23}$  molekülün yada atomun kütlesi  
1 amu/atom = 1g/mol

C 12.011  
H 1.008 etc.



# Atomik Yapı

- Elektronlar, özellikle dış yörüngedekiler, atomun
  - Elektriksel
  - Mekanik
  - Kimyasal
    - Isıl
- Özelliklerini belirlediğinden atom yapısının bilinmesi mühendislik malzemelerini incelemeye önem taşır.



# Elektronik Yapı

- Elektronlar dalgabenzeri ve parçacık özellikleri gösterirler
  - Bu demektirki elektronlar **orbitallerde** bulunma olasılıkları ile tanımlanırlar.
  - Her orbitalin belli bir aralıkta enerji seviyesi vardır ve bunlar **kuantum sayıları** ile belirtilir.

## Kuantum sayısı

$n$  = temel (enerji seviyesi= kabuk)

$l$  = altseviye (altkabuklar)

$m_l$  = magnetik (orbitaller)

$m_s$  = spin

## Gösterimi

$K, L, M, N, O$  (1, 2, 3, vb.)

$s, p, d, f$  (0, 1, 2, 3, ...,  $n-1$ )

1, 3, 5, 7 ( $-l$  den  $+l$  ye)

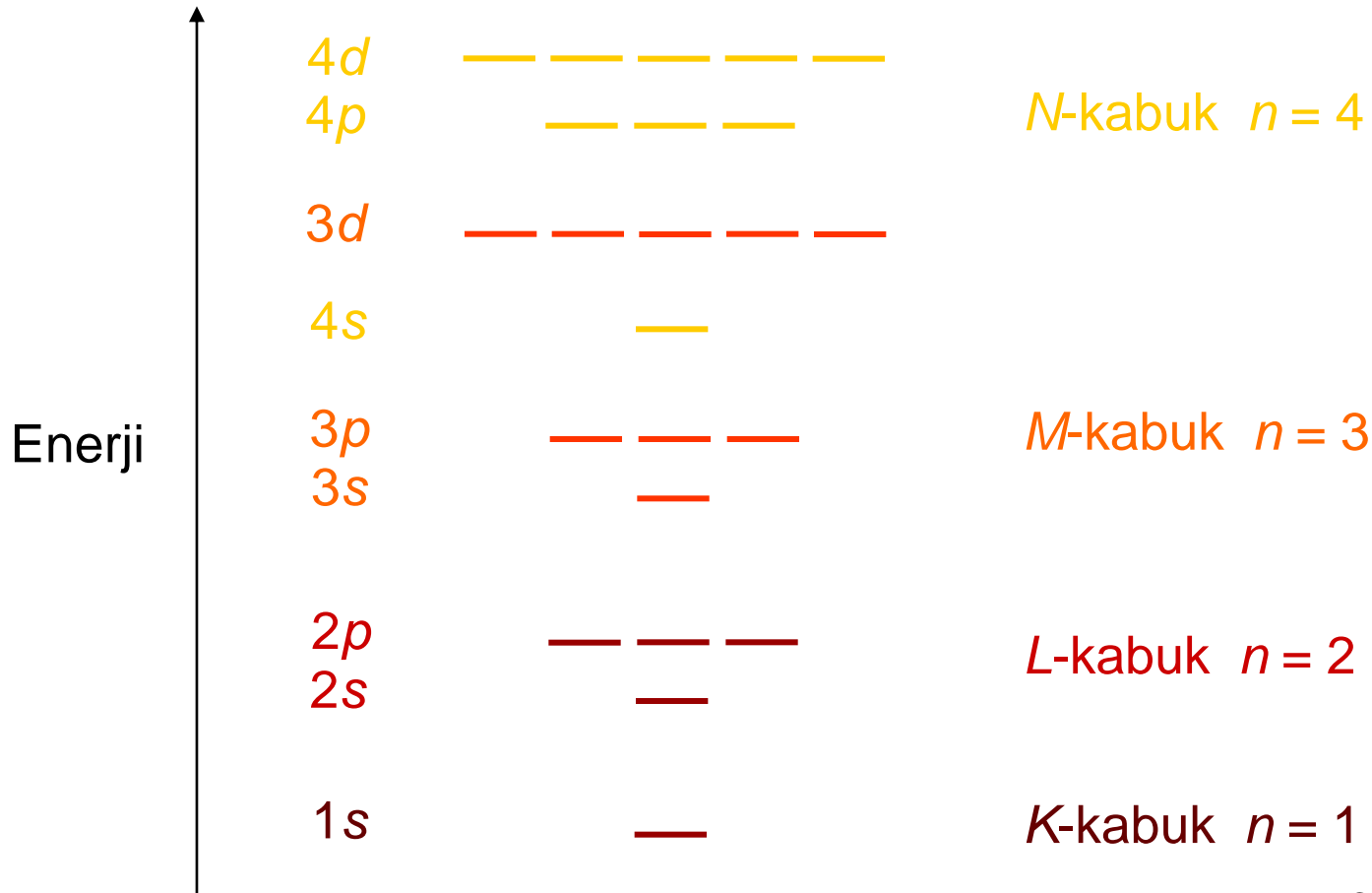
$1/2, -1/2$



# Elektron Enerji Seviyeleri

Electronlar...

- belli enerji seviyelerine sahiptir
- en düşük enerji seviyesini doldurma eğilimindedirler.



# ELEMENTLERE BAKIŞ

- Çoğu element: Düzensiz elektron konfigürasyonu.

<u>Element</u>	<u>Atomik Sayk</u>	<u>Electron konfigürasyonu</u>
Hidrojen	1	$1s^1$
Helyum	2	$1s^2$ (kararlı)
Lityum	3	$1s^2 2s^1$
Berilyum	4	$1s^2 2s^2$
Boron	5	$1s^2 2s^2 2p^1$
Karbon	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
...	...	...
Neon	10	$1s^2 2s^2 2p^6$ (kararlı)
Sodyum	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Magnezyum	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Aluminyum	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
...	...	...
Argon	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ (kararlı)
...	...	...
Kripton	36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$ (kararlı)

Alıntı: Table 2.2, Callister & Rethwisch 8e.

- Neden kararsız? **Valans kabuk** (en dış) Genellikle tam dolu değil.



# Elektron Konfigürasyonu

- **Valans elektronlar** – yarı dolu üst enerji seviyesindeki elektronlar.
  - Tam dolu kabuklar daha kararlıdır.
  - Valans elektronlar bağlanmaya en hazır olanlardır ve kimyasal özellikleri kontrol ederler.
- örnek: C (atom sayısı = 6)

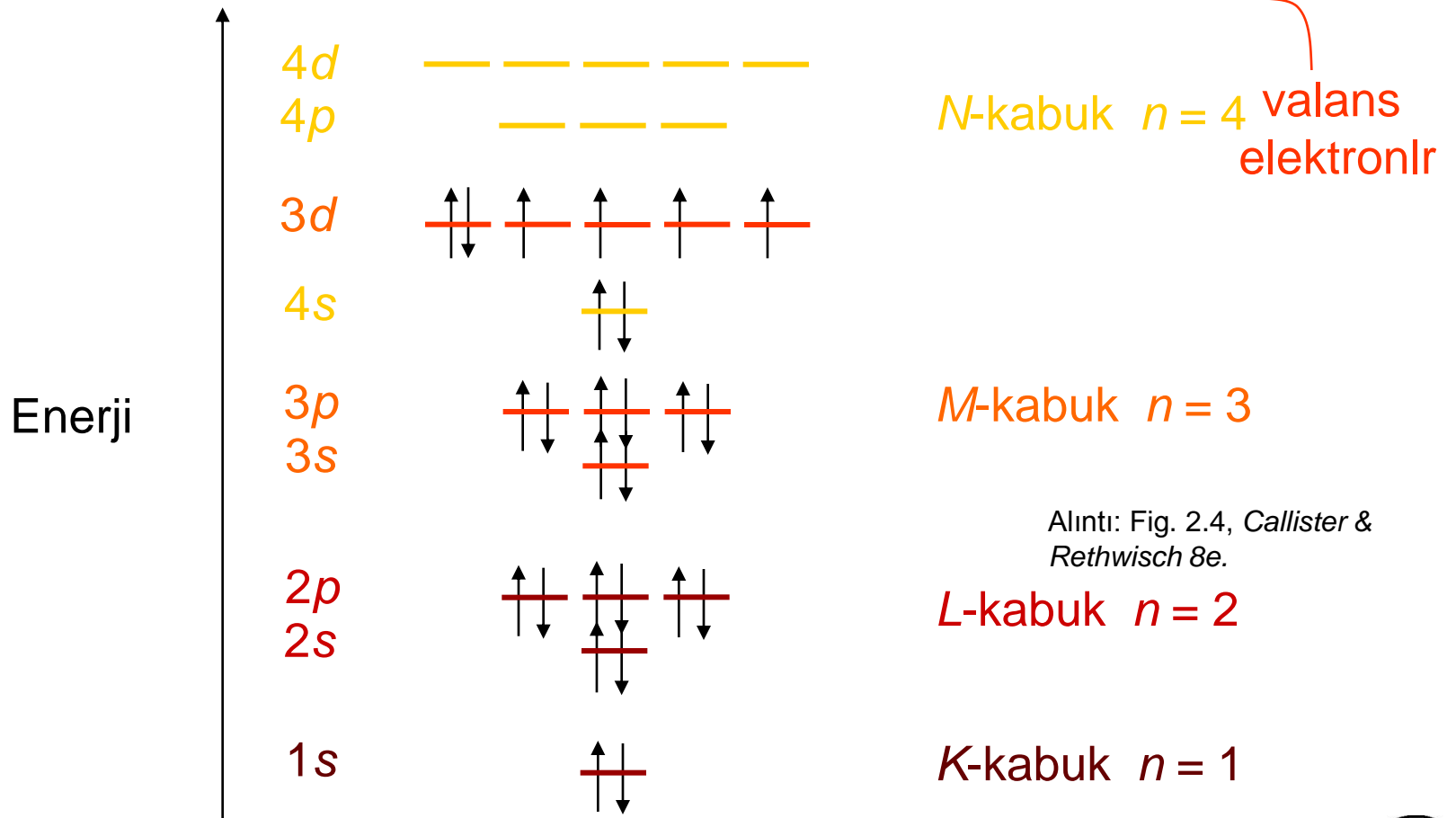


valans elektronları=4



# Elektron Konfigürasyonu

ör: Fe – atom sayısı=26  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$   $3d^6 4s^2$



Alıntı: Fig. 2.4, Callister & Rethwisch 8e.





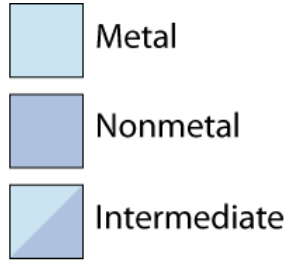
# Periodik Tablo

- Sütunlar: benzer **Valans** yapı

IA	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIII			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	0	
1 H	2 He										3 B	4 C	5 N	6 O	7 F	8 Ne		
3 Li	4 Be										13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
11 Na	12 Mg										29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
55 Cs	56 Ba	Rare earth series	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
87 Fr	88 Ra	Acti-nide series	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds									

1e<sup>-</sup> verir  
2e<sup>-</sup> verir  
3e<sup>-</sup> verir

2e<sup>-</sup> alır  
1e<sup>-</sup> alır  
soy gazlar



Alıntı: Fig. 2.6, Callister & Rethwisch 8e.

Elektropozitiv elementler:  
Elektron kaybederek + iyon oluştururlar

Elektronegatif elementler:  
Elektron alarak - iyon oluştururlar.



# Elektronegativity

- 0.7 den 4.0 e deđişir
- Büyük deđer: elektron isteđinin fazlalığı.

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																Ar
0.9	1.2																-
		IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	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															



küçük elektronegativity



büyük elektronegativity

Alıntı: Fig. 2.7, Callister & Rethwisch 8e

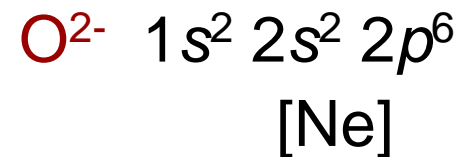
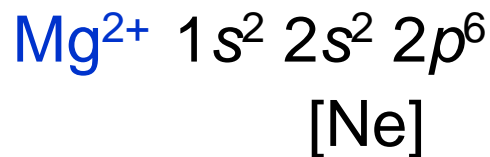
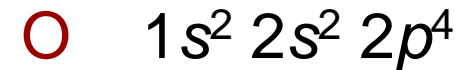
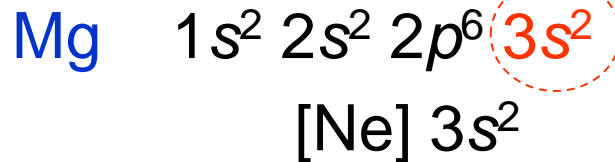


# ATOMLARARASI BİRİNCİL BAĞLAR

İyonik bağlar – ↑ metal + ↑ ametal  
electron verir elektron alır

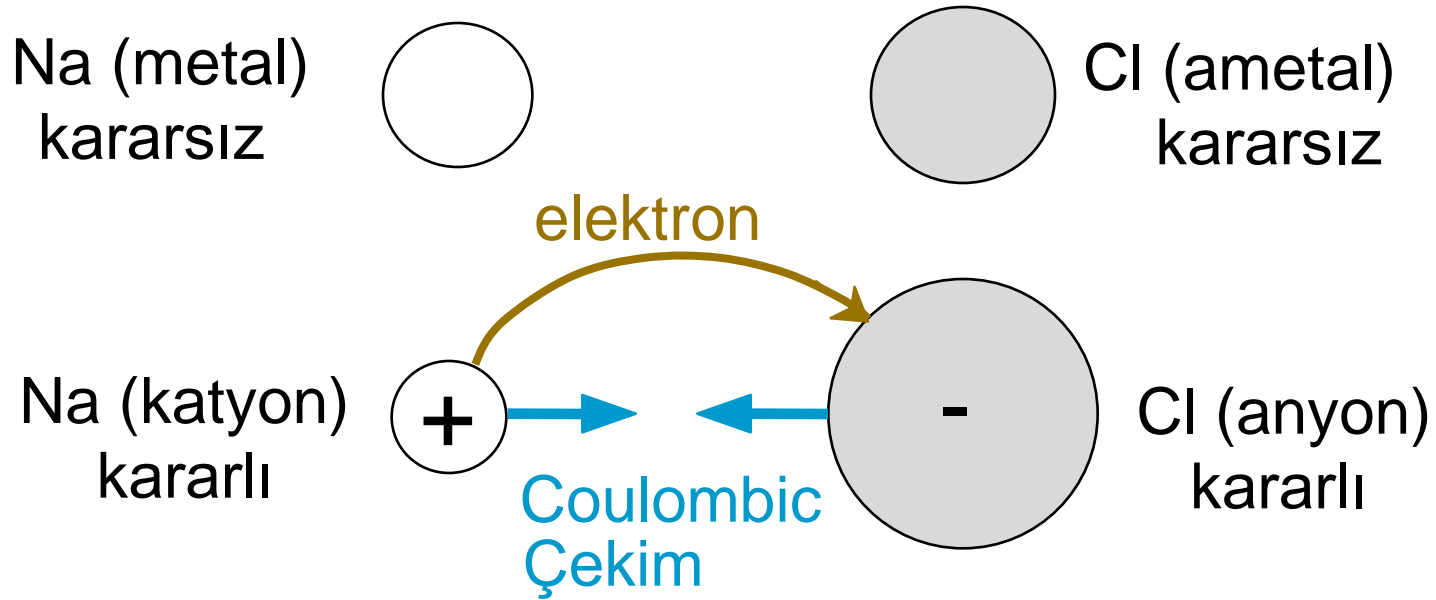
Elektronegativiteler farklıdır

ex: MgO



# İyonik bağlar

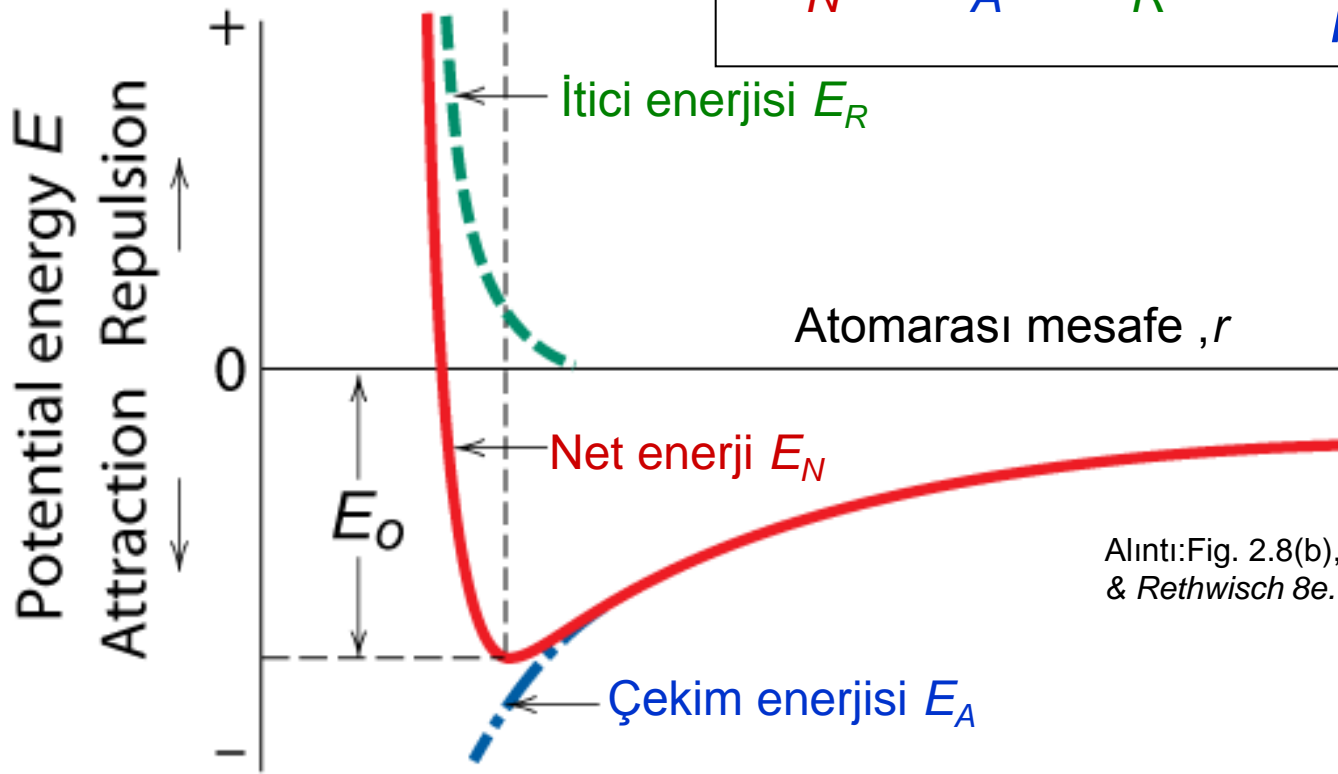
- + ve – iyonların birleşimi.
- Elektron transferi gerekir .
- Elektronegativitelerde büyük fark olmalı.
- Örnek: NaCl



# İyonik bağlar

- Enerji – minimum enerji daha kararlı
  - Enerji dengesi: çekim ve itici terimleri

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



Alıntı: Fig. 2.8(b), Callister & Rethwisch 8e.



# Örnekler: İyonik Bağlar

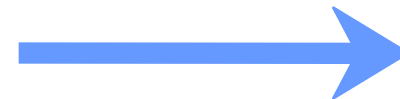
- Seramiklerdeki baskın bağlar

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	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII				IB	IIB	1.5	1.8	2.1	2.5	3.0	-
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																



Elektrondan vazgeçer

Alıntı: Fig. 2.7, Callister & Rethwisch 8e.



Elektron ister

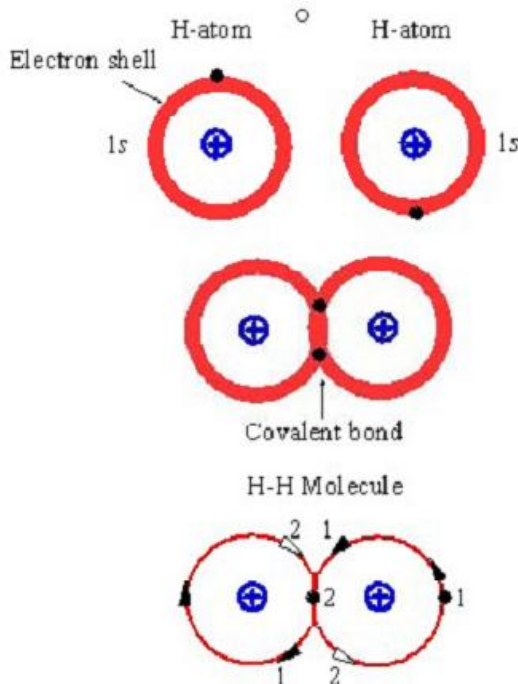


# Kovalent Bağlar

Kovalent Bağlar (Elmas, Silisyum, Germanyum, v.b.)

## Kovalent Bağ- yaşamın anahtarı

Kovalent Bağ: atkabuklardaki elektron boşluklarını tamamlamak için atomların valans elektronlarının paylaşılmasıyla oluşup, net potansiyel enerji azalır.



ör. İki H atomu arasında oluşan **kovalent bağ** sonucunda  $H_2$  molekülü oluşur.

Elektronlar zamanlarının çoğunu iki çekirdek arasında geçirirler, bu iki çekirdek ve elektronlar arasında net bir çekim doğurur ki bu çekim kovalent bağın kökenidir.

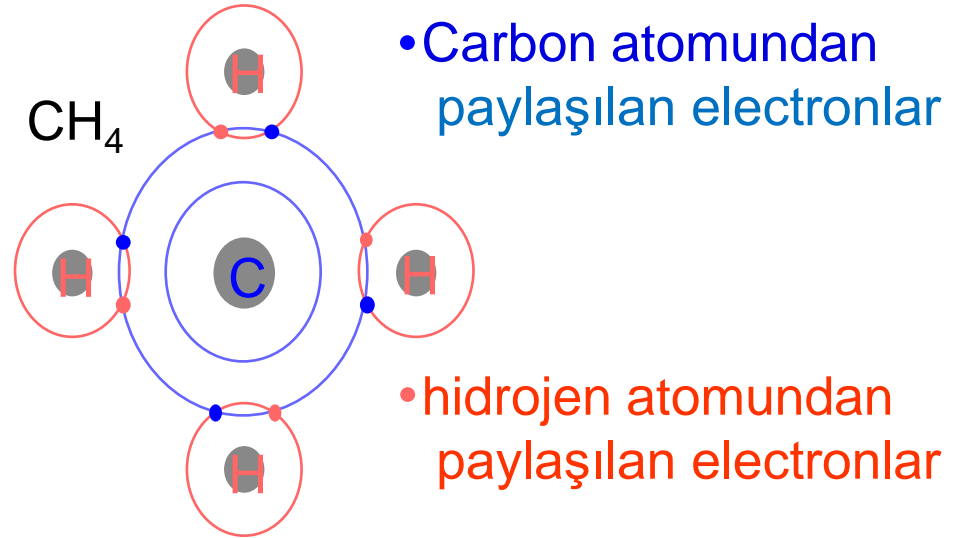


# Kovalent Bağlar

- benzer **elektronegativite**  $\therefore$  elektronların paylaşımı
- Bağlar valence elektronlarla belirlenir– s & p orbitalleri bağda baskındır.
- Örnek: CH<sub>4</sub>

C: 4 valans e<sup>-</sup>,  
4 tane daha ister

H: 1 valans e<sup>-</sup>,  
1 tane daha ister



- Paylaşılan elektronlar ve çekirdek arasındaki **yüksek Coulomb çekimi** sayesinde, bütün bağlar arasında **en yüksek enerjiye Kovalent** bağ sahiptir.
- **Çok yüksek erime noktasına** sahiptirler, en sert katılar (ör. Elmas)
- Yönlü ve güçlü bağ yüzünden sünek değildir. (Kırılmandır)
- Krisalde serbest elektron olmadığı için **zayıf elektrisel iletkenidir.**

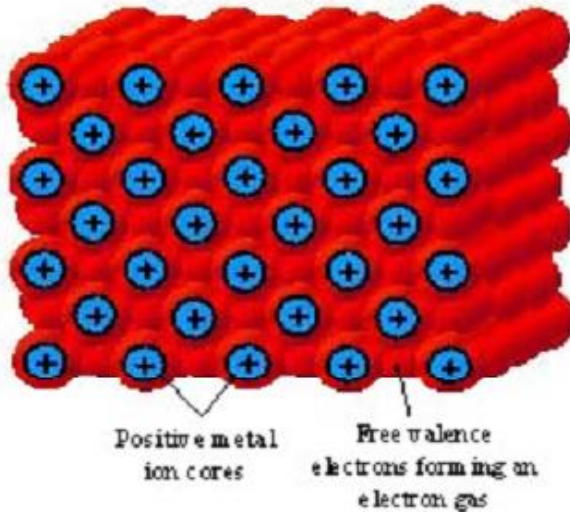




# Metalik Baęlar

Bakır, altın, gümüş, bronz, pirinç, v.b.

- Metal atomlarının az sayıda valans elektronları vardır; bunlar her bir atomdan verilip (yönsüzdürler ve **elektron bulutu** veya gazı oluřtururlar) oluřan tüm iyonlarca paylařılarak metal katısını oluřtururlar.
- elektronlar ve iyonlar arasındaki yapıřtırıcı etkiyle olabilecek en sıkı řekilde baęlıdırlar.



Özellikleri:

- Yönsüz baę (toplu olarak elektron paylařımı) → sünek
- Serbest valans elektronlar yüksek elektrik ve termal iletkenlik

# Birincil Bağlar

- Metalik Bağlar
- İyonik Bağlar
- Kovalent Bağlar
  
- İyonik-Kovalent Karışık bağlar

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

$X_A$  &  $X_B$  Pauling elektronegativiteleri

Ör: MgO

$$\begin{aligned} X_{\text{Mg}} &= 1.2 \\ X_{\text{O}} &= 3.5 \end{aligned}$$

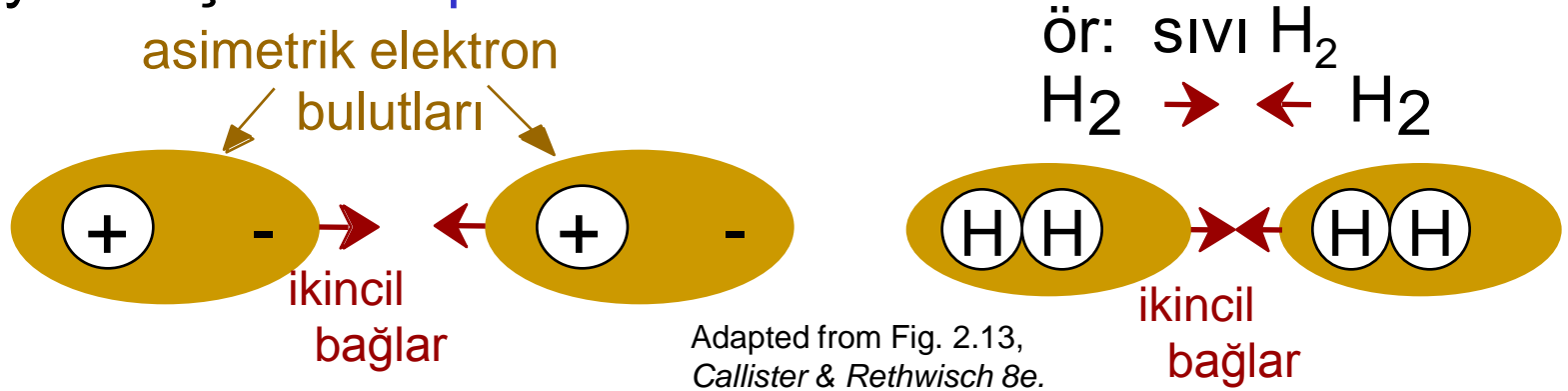
$$\% \text{ iyonik karakter} = \left( 1 - e^{-\frac{(3.5-1.2)^2}{4}} \right) \times (100\%) = 73.4\% \text{ iyonik}$$



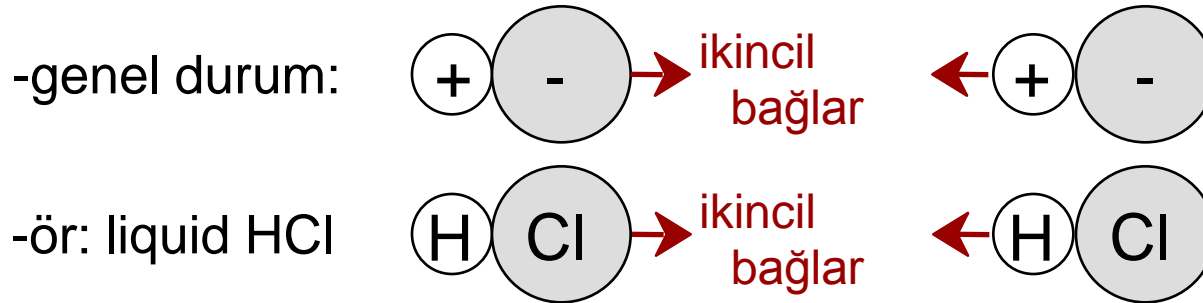
# İKİNCİL BAĞLAR

Dipollerin birbirleriyle etkileşimiyle oluşurlar

- Uyarılmış anlık dipoller



- Kalıcı dipoller-molekülün oluşturduğu



Adapted from Fig. 2.15, Callister & Rethwisch 8e.



İkincil bağlar

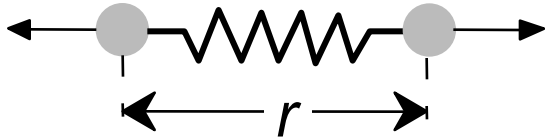
# Özet: Bağlar

<u>Tip</u>	<u>Bağ Enerjisi</u>	<u>Yorumlar</u>
İyonik	Büyük!	Yönsüz ( <b>seramikler</b> )
Kovalent	Değişken büyük-elmas küçük-Bizmut	Yönlü ( <b>yarıiletkenler</b> , <b>seramikler</b> <b>polymer zincirler</b> )
Metalik	Değişken büyük-Tungsten küçük-civa	Yönsüz ( <b>metaller</b> )
İkincil	küçük	Yönlü ( <b>polymerler</b> , moleküllerarası)

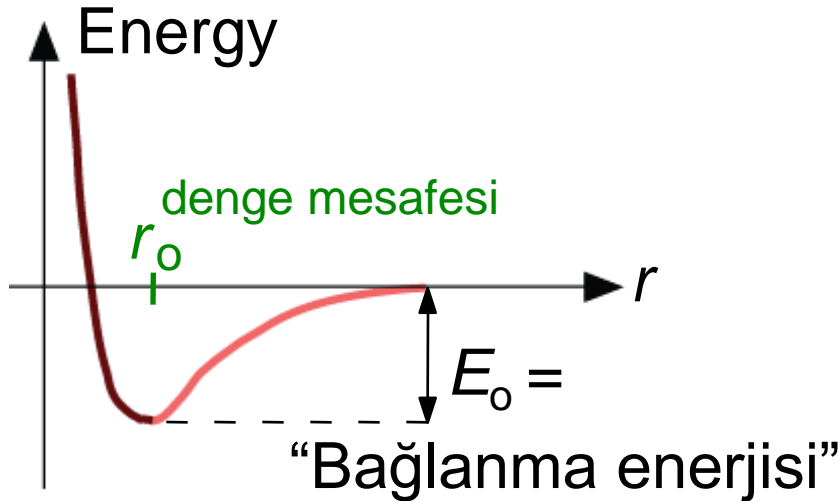


# Bağlardan gelen bazı özellikler: $T_m$

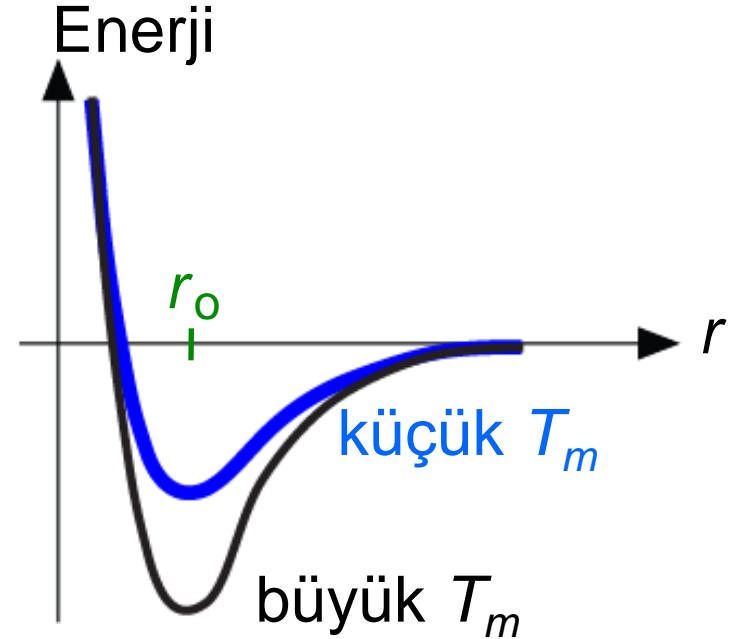
- bağ uzunluğu,  $r$



- Bağlanma enerjisi,  $E_o$



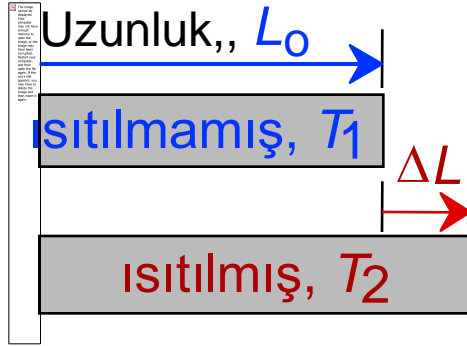
- Erime Sıcaklığı,  $T_m$



Eğer  $E_o$  büyükse  $T_m$  de büyüktür

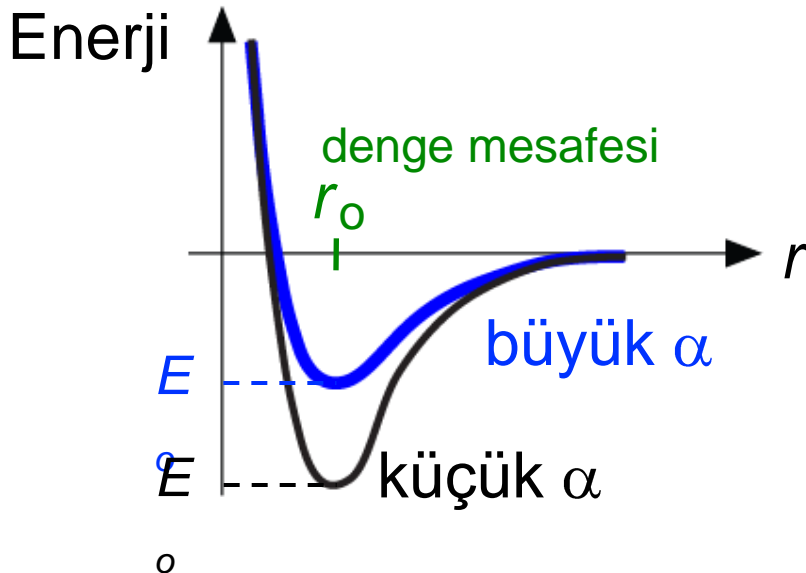
# Bağlardan gelen bazı özellikler: $\alpha$

- Termal genleşme katsayısı,  $\alpha$



termal genleşme katsayısı

$$\frac{\Delta L}{L_0} = \alpha (T_2 - T_1)$$



$E_0$  küçükse,  $\alpha$  büyüktür

# Özet: Birincil bağlar

seramikler

(İyonik & kovalent bağ):

Yüksek bağlanma enerjisi

yüksek  $T_m$

yüksek  $E$

düşük  $\alpha$

Metaller

(Metalik bağ):

Değişken bağlanma enerjisi

orta  $T_m$

orta  $E$

orta  $\alpha$

Polymerler

(kovalent & ikincil):

İkincil bağlar baskın

düşük  $T_m$

düşük  $E$

yüksek  $\alpha$

