

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΑΤΟΜΟΥ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ

2.1 ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ

Όπως είναι γνωστό η ύλη αποτελείται από βασικές μονάδες που ονομάζονται άτομα (άτμητο=α στερητικό+τέμνω). Η δομή του ατόμου μπορεί να περιγραφεί ικανοποιητικά από την ύπαρξη τριών ειδών μικρότερων σωματιδίων, των πρωτονίων, των ηλεκτρονίων και των νετρονίων. Κάθε άτομο έχει ένα πολύ μικρό πυρήνα αποτελούμενο από πρωτόνια και νετρόνια, ο οποίος περιβάλλεται από ηλεκτρόνια. Σε ένα ηλεκτρικά ουδέτερο άτομο, το αρνητικό φορτίο των ηλεκτρονίων είναι ίσο με το θετικό φορτίο των πρωτονίων. Το φορτίο των πρωτονίων είναι $1,60 \times 10^{-19}$ Cb, ενώ των ηλεκτρονίων είναι ίσο και αντίθετο με αυτό των πρωτονίων. Τα νετρόνια είναι ηλεκτρικά ουδέτερα. Η μάζα όλων των σωματιδίων είναι απειροελάχιστη. Η μάζα των πρωτονίων είναι 1.672×10^{-24} g, η οποία είναι περίπου ίση με τη μάζα των νετρονίων 1.675×10^{-24} g, ενώ η μάζα των ηλεκτρονίων είναι περίπου 1840 φορές μικρότερη, 9.107×10^{-28} g, από τη μάζα των πρωτονίων. Συνεπώς όλη σχεδόν η μάζα του ατόμου βρίσκεται στον πυρήνα. Η διάμετρος του πυρήνα είναι περίπου 10^{-12} mm, ενώ η διάμετρος του ατόμου είναι περίπου 10^{-7} mm.

Ο αριθμός των πρωτονίων που περιέχει ο πυρήνας κάθε χημικού στοιχείου είναι καθορισμένος και ονομάζεται ατομικός αριθμός. Σε ένα ηλεκτρικά ουδέτερο άτομο, ο ατομικός αριθμός είναι ίσος με τον αριθμό των ηλεκτρονίων του. Η ατομική μάζα ενός ατόμου μπορεί να θεωρηθεί ως το άθροισμα των μαζών των πρωτονίων και των νετρονίων του. Αν και τα άτομα όλων των στοιχείων έχουν τον ίδιο αριθμό πρωτονίων, ο αριθμός των νετρονίων τους μπορεί να διαφέρει. Άτομα που έχουν διαφορετικό αριθμό νετρονίων και συνεπώς διαφορετική ατομική μάζα ονομάζονται ισότοπα. Τα ισότοπα χαρακτηρίζονται από το μαζικό αριθμό, ο οποίος ισούται με το άθροισμα των πρωτονίων και νετρονίων, π.χ.:

^{12}C = ισότοπο του άνθρακα με μαζικό αριθμό 12 (6 πρωτόνια+6 νετρόνια)

^{13}C = ισότοπο του άνθρακα με μαζικό αριθμό 13 (6 πρωτόνια+7 νετρόνια)

^{14}C = ισότοπο του άνθρακα με μαζικό αριθμό 14 (6 πρωτόνια+8 νετρόνια)

Το ατομικό βάρος ενός στοιχείου είναι ο αριθμός που δείχνει πόσες φορές το άτομο του στοιχείου είναι βαρύτερο από το 1/12 του βάρους του κοινότερου και ελαφρύτερου ισότοπου του άνθρακα 12, ^{12}C (ατομικό βάρος ^{12}C = 12.000). Το 1/12 του βάρους του ισότοπου του άνθρακα 12, ορίζεται ως μια μονάδα ατομικής μάζας (atomic mass unit, amu). Το ατομικό βάρος ενός στοιχείου είναι ο μέσος όρος των ατομικών βαρών των ισότοπων του που υπάρχουν στη φύση. Για παράδειγμα, το ατομικό βάρος του άνθρακα είναι 12.011.

Τα άτομα συνδέονται μεταξύ τους και σχηματίζουν μόρια, τα οποία είναι τα μικρότερα σωματίδια μιας χημικής ένωσης ή στοιχείου, που διατηρούν τις ιδιότητες του σώματος. Για παράδειγμα, το μόριο του Cl_2 αποτελείται από δυο άτομα χλωρίου, ενώ το μόριο του H_2O αποτελείται από δυο άτομα υδρογόνου ενωμένα με ένα άτομο οξυγόνου.

Η διάμετρος των μορίων είναι περίπου 10^{-6} έως 10^{-5} mm. Το μοριακό βάρος είναι ίσο με το άθροισμα των ατομικών βαρών.

Τόσο το ατομικό όσο και το μοριακό βάρος είναι καθαροί αριθμοί. Επειδή όμως στις αντιδράσεις μεταξύ στοιχείων και ενώσεων πρέπει να χρησιμοποιούνται ποσότητες

μετρήσιμες, για αυτό εισήχθησαν οι όροι γραμμοάτομο και γραμμομόριο, οι οποίοι ταυτίζονται με το ατομικό και μοριακό βάρος αντίστοιχα, αλλά έχουν μονάδες σε γραμμάρια, g/mol. Σε ένα mole μιας ουσίας υπάρχουν $N_A=6.023 \times 10^{23}$ άτομα ή μόρια ή ιόντα, $N_A =$ αριθμός Avogadro.

Για παράδειγμα, το ατομικό βάρος του χαλκού είναι 63.5 g/mol ή 63.5 amu/άτομο (δηλαδή το άτομο του χαλκού είναι 63.5 φορές βαρύτερο από το 1/12 του βάρους του ισότοπου του άνθρακα 12).

2.2 ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

Κατά την προσπάθεια περιγραφής της ηλεκτρονιακής δομής των ατόμων προτάθηκαν διάφορα μοντέλα. Ωστόσο, η κατανόηση της συμπεριφοράς των ηλεκτρονίων επιτεύχθηκε με την εισαγωγή εννοιών και αρχών από δύο νέους κλάδους της κλασικής μηχανικής: της κβαντομηχανικής και της κυματομηχανικής.

2.2.1 ΠΡΟΤΥΠΟ ΤΟΥ RUTHERFORD

Σύμφωνα με τον E. Rutherford, το άτομο παρουσιάζεται ως μικρογραφία του πλανητικού συστήματος. Στο κέντρο του υπάρχει ένας θετικός πυρήνας γύρω από τον οποίο κινούνται σε διάφορες κυκλικές τροχιές τα ηλεκτρόνια, όπως οι πλανήτες γύρω από τον ήλιο. Τα ηλεκτρόνια συγκρατούνται στις τροχιές τους λόγω της ισορροπίας της φυγόκεντρης δύναμης και της ηλεκτροστατικής έλξης με τον πυρήνα.

Στο συμπέρασμα αυτό κατέληξε μετά από μια σειρά πειραμάτων «βομβαρδισμού» λεπτών φύλλων χρυσού ή αλουμινίου με ακτίνες α (θετικά φορτισμένα σωματίδια που προέρχονταν από ράδιο). Παρατηρήθηκε, ότι ενώ τα περισσότερα σωματίδια διαπερνούσαν τα φύλλα του μετάλλου, χωρίς σημαντική εκτροπή από την ευθύγραμμη πορεία τους, σε σπάνιες περιπτώσεις ορισμένα σωματίδια υφίσταντο πολύ μεγάλη εκτροπή. Η εκτροπή αυτών των σωματιδίων αποδόθηκε στο πλησίασμά τους στους θετικά φορτισμένους πυρήνες, ενώ η σπανιότητα των εκτροπών αποτέλεσε μια ένδειξη του εξαιρετικά μικρού όγκου των πυρήνων.

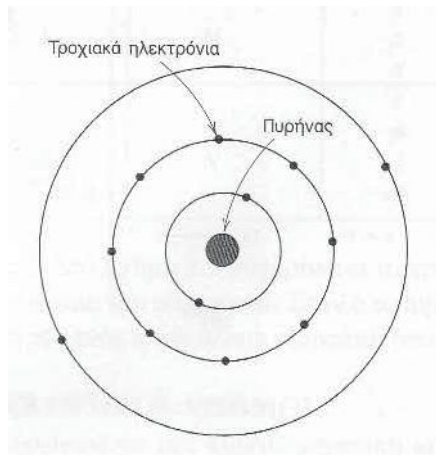
2.2.2 ΠΡΟΤΥΠΟ ΤΟΥ BOHR

Για πρώτη φορά η κβαντική θεωρία εφαρμόστηκε το 1913 από τον Δανό φυσικό N. Bohr, στην προσπάθειά του να εξηγήσει το φάσμα του ατόμου του υδρογόνου.

Με βάση τις αρχές της κβαντομηχανικής έγιναν δύο βασικές παραδοχές:

- 1) τα ηλεκτρόνια των ατόμων κινούνται πάνω σε διακριτές ενεργειακές τροχιές και
- 2) η ενέργειά τους είναι κβαντισμένη. Αυτό σημαίνει ότι για να μεταπηδήσει ένα ηλεκτρόνιο από μια στάθμη χαμηλότερης ενέργειας σε μια στάθμη υψηλότερης, πρέπει να απορροφήσει ενέργεια. Αντίθετα, όταν μεταπηδήσει από μια στάθμη υψηλότερης ενέργειας σε μια στάθμη χαμηλότερης, εκπέμπει τη διαφορά ενέργειας με τη μορφή ακτινοβολίας ορισμένης συχνότητας, δηλαδή $E_2 - E_1 = h\nu$, όπου $h =$ σταθερά του Planck και $\nu =$ συχνότητα ακτινοβολίας. Τα ηλεκτρόνια κατά την περιστροφή τους πάνω στις σταθερές ενεργειακές τροχιές δεν εκπέμπουν ακτινοβολία και συνεπώς διατηρούν την ενέργειά τους.

Συνέπεια αυτών των αρχών ήταν το ατομικό πρότυπο του Bohr. Στο Σχήμα 2.1 παρουσιάζεται αυτό το πρότυπο.



Σχήμα 2.1: Σχηματική παράσταση του ατομικού προτύπου του Bohr.

Η θεωρία του Bohr αποτέλεσε επίτευγμα για την εποχή του και άνοιξε νέους ορίζοντες. Η κατανομή όμως των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα του ατόμου, κατανοήθηκε περισσότερο με την εφαρμογή των αρχών της κυματομηχανικής, προτείνοντας την παραδοχή ότι το ηλεκτρόνιο δεν συμπεριφέρεται μόνο ως σωματίδιο, αλλά και ως κύμα. Σύμφωνα με αυτή τη θεωρία, το ηλεκτρόνιο δεν αντιμετωπίζεται ως σωματίδιο που κινείται σε κυκλική τροχιά, αλλά πλέον η θέση του περιγράφεται από την πιθανότητα να βρίσκεται σε συγκεκριμένο σημείο γύρω από τον πυρήνα. Έτσι δημιουργείται ένα νέφος του οποίου η πυκνότητα στο χώρο αυξάνεται, όταν αυξάνεται και η πιθανότητα του ηλεκτρονίου να βρεθεί σε αυτό το χώρο. Οι κυκλικές τροχιές του Bohr συμπίπτουν με τις περιοχές υψηλής πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους.

2.2.3 ΚΒΑΝΤΙΚΟΙ ΑΡΙΘΜΟΙ

Σύμφωνα με τις αρχές της κυματομηχανικής η κατανομή των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα καθορίζεται από τέσσερις παραμέτρους, που ονομάζονται κβαντικοί αριθμοί.

Ο κύριος κβαντικός αριθμός n μπορεί να έχει ακέραιες τιμές $1, 2, 3, 4, \dots$ και προσδιορίζει τις στιβάδες στις οποίες κατανέμονται τα ηλεκτρόνια. Οι στιβάδες επίσης συμβολίζονται με τα γράμματα K, L, M, N, \dots και συμπίπτουν με τις ενεργειακές τροχιές του ατομικού πρότυπου του Bohr. Ο κύριος κβαντικός αριθμός προσδιορίζει την απόσταση και συνεπώς τη θέση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα.

Το πρότυπο Bohr αρχικά μπορούσε να εξηγήσει το φάσμα του υδρογόνου. Ωστόσο όταν χρησιμοποιήθηκαν φασματοσκόπια με μεγαλύτερη διακριτική ικανότητα φάνηκε ότι κάθε φασματική γραμμή αποτελείται από περισσότερες φασματικές γραμμές. Προκειμένου να υπάρχει αντιστοιχία μεταξύ θεωρίας και πειραματικών δεδομένων έγινε δεκτό ότι οι στιβάδες χωρίζονται σε υποστιβάδες. Οι μεταπτώσεις των ηλεκτρονίων μεταξύ αυτών των υποστιβάδων μπορούσε να εξηγήσει το διαχωρισμό της μιας φασματικής γραμμής σε περισσότερες. Ο αριθμός των υποστιβάδων καθώς και το σχήμα τους προσδιορίζεται από το δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό ℓ . Ο δευτερεύον κβαντικός αριθμός μπορεί να παίρνει τις τιμές $0, 1, \dots, (n-1)$. Για το συμβολισμό των υποστιβάδων χρησιμοποιούνται τα γράμματα s ($\ell=0$), p ($\ell=1$), d ($\ell=2$) και f ($\ell=3$). Οι υποστιβάδες έχουν διαφορετικό σχήμα, π.χ. η υποστιβάδα s παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία, η p έχει δυο λοβούς (σχήμα οκτώ), κλπ.

Το γεγονός ότι παρουσία μαγνητικού πεδίου οι φασματικές γραμμές διασπώνται σε περισσότερες συνιστώσες οδήγησε στην αποδοχή ενός τρίτου κβαντικού αριθμού, του μαγνητικού κβαντικού αριθμού m_ℓ . Οι τιμές του κυμαίνονται από $-\ell, -(\ell-1), \dots, 0, \dots, +(\ell+1), +\ell$, δηλαδή $2\ell+1$ τιμές. Συνεπώς σε κάθε υποστιβάδα υπάρχουν $2\ell+1$ ενεργειακές

καταστάσεις (τροχιακά). Για την υποστιβάδα s υπάρχει μια ενεργειακή κατάσταση, ενώ για τις υποστιβάδες p , d και f υπάρχουν 3, 5 και 7 ενεργειακές καταστάσεις αντίστοιχα.

Ο τέταρτος κβαντικός αριθμός, ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός του spin, m_s , συνδέεται με τη στροφορμή του ηλεκτρονίου λόγω αυτοπεριστροφής και μπορεί να πάρει μόνο δυο τιμές, $+1/2$ και $-1/2$. Σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli, κάθε ενεργειακή κατάσταση μπορεί να πάρει δυο ηλεκτρόνια, τα οποία έχουν αντίθετα spin. Συνεπώς, η υποστιβάδα s που έχει μια ενεργειακή κατάσταση μπορεί να έχει το πολύ 2 ηλεκτρόνια, η υποστιβάδα p , η οποία έχει τρεις ενεργειακές καταστάσεις (p_x, p_y, p_z) μπορεί να έχει 6 ηλεκτρόνια, η υποστιβάδα d η οποία έχει πέντε ενεργειακές καταστάσεις ($d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2-y^2}, d_z^2$), μπορεί να έχει 10 ηλεκτρόνια και η υποστιβάδα f , η οποία έχει επτά ενεργειακές καταστάσεις, μπορεί να πάρει 14 ηλεκτρόνια.

Απουσία μαγνητικού πεδίου, οι μαγνητικοί κβαντικοί αριθμοί, m_l και m_s , δεν υφίστανται και οι ενεργειακές καταστάσεις δεν διαφέρουν ενεργειακά, είναι ίδιες. Σε αντίθεση, παρουσία μαγνητικού πεδίου, οι ενεργειακές καταστάσεις αποκτούν ελαφρώς διαφορετικές ενέργειες.

Στον Πίνακα 2.1 παρουσιάζονται συγκεντρωτικά οι κύριες στιβάδες, οι υποστιβάδες, οι ενεργειακές τους καταστάσεις καθώς και ο μεγαλύτερος αριθμός ηλεκτρονίων που μπορούν να τοποθετηθούν, για $n=1, 2, 3, 4$.

Πίνακας 2.1: Κατανομή ηλεκτρονίων σύμφωνα με τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς.

Στιβάδες, n	Υποστιβάδες, ℓ	Ενεργειακές καταστάσεις (τροχιακά)	Ηλεκτρόνια ανά υποστιβάδα	Ηλεκτρόνια ανά στιβάδα
K ($n=1$)	$s(\ell=0)$	1	2	2
L ($n=2$)	$s(\ell=0)$	1	2	8
	$p(\ell=1)$	3 (p_x, p_y, p_z)	6	
M ($n=3$)	$s(\ell=0)$	1	2	18
	$p(\ell=1)$	3 (p_x, p_y, p_z)	6	
	$d(\ell=2)$	5 ($d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2-y^2}, d_z^2$)	10	
N ($n=4$)	$s(\ell=0)$	1	2	32
	$p(\ell=1)$	3 (p_x, p_y, p_z)	6	
	$d(\ell=2)$	5 ($d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2-y^2}, d_z^2$)	10	
	$f(\ell=3)$	7	14	

2.2.4 ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΗ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ ΚΑΙ ΠΕΡΙΟΔΙΚΟΣ ΠΙΝΑΚΑΣ

Η ηλεκτρονιακή διαμόρφωση ενός ατόμου περιγράφει τον τρόπο που τα ηλεκτρόνια συμπληρώνουν τα υπάρχοντα τροχιακά. Σε ένα άτομο τα ηλεκτρόνια συμπληρώνουν πρώτα τα τροχιακά με τις χαμηλότερες ενέργειες, έτσι ώστε το άτομο να περικλείει τη μικρότερη εσωτερική ενέργεια και να έχει μεγαλύτερη σταθερότητα. Η ενέργεια των τροχιακών αυξάνεται με αυξανόμενο κβαντικό αριθμό, n . Για παράδειγμα, το τροχιακό $1s$ έχει μικρότερη ενέργεια από το τροχιακό $2s$ και αυτό μικρότερη από το τροχιακό $3s$. Για τον ίδιο κβαντικό αριθμό, η ενέργεια των υποστιβάδων αυξάνεται με αυξανόμενο τον δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό, l . Η υποστιβάδα $3s$ έχει μικρότερη ενέργεια από την υποστιβάδα $3p$ και αυτή μικρότερη από την $3d$. Τροχιακά γειτονικών στιβάδων μπορεί να επικαλύπτονται με συνέπεια να υπάρχει διαφοροποίηση στην ενέργεια των τροχιακών, π.χ. η ενέργεια του τροχιακού $3d$ είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια του τροχιακού $4s$. Για τις σχετικές ενέργειες των τροχιακών ισχύει η παρακάτω σειρά:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f < 6d < 7p < 6f < 7d$$

Στον Πίνακα 2.2 παρουσιάζονται οι ηλεκτρονιακές διαμορφώσεις των στοιχείων με ατομικό αριθμό από 1 μέχρι 36, για τα στοιχεία υδρογόνο μέχρι κρυπτό. Ο αριθμός των ηλεκτρονίων σε κάθε τροχιακό υποδεικνύεται με ένα εκθέτη. Για παράδειγμα το υδρογόνο έχει ένα ηλεκτρόνιο και η ηλεκτρονιακή του διαμόρφωση είναι $1s^1$, ενώ ο άνθρακας έχει έξι ηλεκτρόνια και η ηλεκτρονιακή του διαμόρφωση είναι $1s^2 2s^2 2p^2$.

Όλα τα στοιχεία με βάση την διάταξη των ηλεκτρονίων στις στιβάδες των ατόμων τους ταξινομούνται στον περιοδικό πίνακα (Πίνακας 2.3). Τα στοιχεία τοποθετούνται κατά αύξουσα σειρά του ατομικού αριθμού τους σε επτά οριζόντιες γραμμές, που ονομάζονται περίοδοι και δεκαοκτώ κάθετες στήλες, που λέγονται ομάδες. Οι ομάδες αποτελούνται από επτά κύριες, συνοδευόμενες από το γράμμα A (IA έως VIIA), επτά δευτερεύουσες, συνοδευόμενες από το γράμμα B (IB έως VIIB), την ομάδα VIII και την ομάδα 0, των ευγενών αερίων. Τα στοιχεία κάθε ομάδας έχουν την ίδια διαμόρφωση ηλεκτρονίων και παρουσιάζουν παρόμοιες φυσικές και χημικές ιδιότητες. Τα στοιχεία που βρίσκονται στην ίδια περίοδο, έχουν τα ηλεκτρόνιά τους κατανεμημένα στον ίδιο αριθμό στιβάδων, και οι ιδιότητές τους μεταβάλλονται βαθμιαία κατά μήκος της κάθε περιόδου.

Συγκρίνοντας την ηλεκτρονιακή διαμόρφωση των στοιχείων (Πίνακας 2.2) με τη θέση τους στον περιοδικό πίνακα (Σχήμα 2.3), βλέπουμε ότι ο αριθμός κάθε περιόδου αντιστοιχεί με τον αριθμό των στιβάδων ηλεκτρονίων, ενώ ο αριθμός της ομάδας είναι ίσος με τον αριθμό ηλεκτρονίων της εξώτατης στιβάδας.

Τα αέρια ήλιο, νέο, αργό, κρυπτό, ξένο και ραδόνιο (ομάδα 0) δεν έχουν την τάση να σχηματίσουν κανενός είδους ένωση και για αυτό ονομάζονται ευγενή αέρια. Αυτά τα αέρια, εκτός του ηλίου, έχουν στην εξωτερική τους στιβάδα συνολικά 8 ηλεκτρόνια, 2 στην s και 6 στην p υποστιβάδα και πιστεύεται ότι αυτός είναι ο λόγος της σταθερότητάς τους. Το ήλιο έχει δύο ηλεκτρόνια που τοποθετούνται στο τροχιακό $1s$.

Πίνακας 2.2: Ηλεκτρονιακή διαμόρφωση των στοιχείων με ατομικό αριθμό 1 μέχρι 36 (υδρογόνο μέχρι κρυπτό).

	Ατομικός Αριθμός	Στοιχείο	Ηλεκτρονιακή διαμόρφωση	
1 ^η Περίοδος	1	Υδρογόνο (H)	1s ¹	αμέταλλο αέριο
	2	Ήλιο (He)	1s ²	ευγενές αέριο
2 ^η Περίοδος	3	Λίθιο (Li)	1s ² 2s ¹	μέταλλο
	4	Βηρύλιο (Be)	1s ² 2s ²	μέταλλο
	5	Βόριο (B)	1s ² 2s ² 2p ¹	ενδιάμεσο*
	6	Άνθρακας (C)	1s ² 2s ² 2p ²	ενδιάμεσο*
	7	Άζωτο (N)	1s ² 2s ² 2p ³	αμέταλλο αέριο
	8	Οξυγόνο (O)	1s ² 2s ² 2p ⁴	αμέταλλο αέριο
	9	Φθόριο (F)	1s ² 2s ² 2p ⁵	αμέταλλο αέριο
	10	Νέο (Ne)	1s ² 2s ² 2p ⁶	ευγενές αέριο
3 ^η Περίοδος	11	Νάτριο (Na)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹	μέταλλο
	12	Μαγνήσιο (Mg)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²	μέταλλο
	13	Αλουμίνιο (Al)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ¹	μέταλλο
	14	Πυρίτιο (Si)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ²	ενδιάμεσο*
	15	Φόσφορος (P)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³	αμέταλλο
	16	Θείο (S)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴	αμέταλλο
	17	Χλώριο (Cl)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶	αμέταλλο αέριο
	18	Αργό (Ar)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶	ευγενές αέριο
4 ^η Περίοδος	19	Κάλιο (K)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹	μέταλλο
	20	Ασβέστιο (Ca)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ²	μέταλλο
	21	Σκάνδιο (Sc)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹ 4s ²	μέταλλο
	22	Τιτάνιο (Ti)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ² 4s ²	μέταλλο
	23	Βανάδιο (V)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ³ 4s ²	μέταλλο
	24	Χρώμιο (Cr)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁵ 4s ¹	μέταλλο
	25	Μαγγάνιο (Mn)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁵ 4s ²	μέταλλο
	26	Σίδηρος (Fe)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁶ 4s ²	μέταλλο
	27	Κοβάλτιο (Co)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁷ 4s ²	μέταλλο
	28	Νικέλιο (Ni)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁸ 4s ²	μέταλλο
	29	Χαλκός (Cu)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹	μέταλλο
	30	Ψευδάργυρος (Zn)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ²	μέταλλο
	31	Γάλλιο (Ga)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	μέταλλο
	32	Γερμάνιο (Ge)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	ενδιάμεσο*
	33	Αρσενικό (As)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	ενδιάμεσο*
	34	Σελήνιο (Se)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	ενδιάμεσο*
	35	Βρώμιο (Br)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	αμέταλλο αέριο
	36	Κρυπτό (Kr)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	ευγενές αέριο

* Τα στοιχεία B, C, Si, Ge, As, Se καλούνται ενδιάμεσα, επειδή παρουσιάζουν ιδιότητες μεταξύ των μετάλλων και αμετάλλων.

Όλα τα στοιχεία με βάση την διάταξη των ηλεκτρονίων στις στιβάδες των ατόμων τους ταξινομούνται στον περιοδικό πίνακα (Πίνακας 2.3). Τα στοιχεία τοποθετούνται κατά αύξουσα σειρά του ατομικού αριθμού τους σε επτά οριζόντιες γραμμές, που ονομάζονται περίοδοι και δεκαοκτώ κάθετες στήλες, που λέγονται ομάδες. Οι ομάδες αποτελούνται από επτά κύριες, συνοδευόμενες από το γράμμα A (IA έως VIIA), επτά δευτερεύουσες, συνοδευόμενες από το γράμμα B (IB έως VIIB), την ομάδα VIII και την ομάδα 0, των ευγενών αερίων. Τα στοιχεία κάθε ομάδας έχουν την ίδια διαμόρφωση ηλεκτρονίων και

παρουσιάζουν παρόμοιες φυσικές και χημικές ιδιότητες. Τα στοιχεία που βρίσκονται στην ίδια περίοδο, έχουν τα ηλεκτρόνια τους κατανομημένα στον ίδιο αριθμό στιβάδων, και οι ιδιότητές τους μεταβάλλονται βαθμιαία κατά μήκος της κάθε περιόδου.

Συγκρίνοντας την ηλεκτρονιακή διαμόρφωση των στοιχείων (Πίνακας 2.2) με τη θέση τους στον περιοδικό πίνακα (Σχήμα 2.2), βλέπουμε ότι ο αριθμός κάθε περιόδου αντιστοιχεί με τον αριθμό των στιβάδων ηλεκτρονίων, ενώ ο αριθμός της ομάδας είναι ίσος με τον αριθμό ηλεκτρονίων της εξώτατης στιβάδας.

Τα αέρια ήλιο, νέο, αργό, κρυπτό, ξένο και ραδόνιο (ομάδα 0) δεν έχουν την τάση να σχηματίσουν κανενός είδους ένωση και για αυτό ονομάζονται ευγενή αέρια. Αυτά τα αέρια, εκτός του ηλίου, έχουν στην εξωτερική τους στιβάδα συνολικά 8 ηλεκτρόνια, 2 στην *s* και 6 στην *p* υποστιβάδα και πιστεύεται ότι αυτός είναι ο λόγος της σταθερότητάς τους. Το ήλιο έχει δύο ηλεκτρόνια που τοποθετούνται στο τροχιακό 1*s*.

Key

- Ατομικός αριθμός
- Σύμβολο
- Ατομικό βάρος

Μέταλλο

Αμέταλλο

Ενδιάμεσο

IA	IIA		VIII																IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	0																	
1 H 1.0080	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 47.88	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 68.72	32 Ge 72.59	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80	53 I 126.905	54 Xe 131.29	87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa (231)	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (242)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (249)	99 Es (254)	100 Fm (253)	101 Md (258)	102 No (254)	103 Lw (262)

Σχήμα 2.2: Περιοδικός Πίνακας Χημικών Στοιχείων.

2.3 ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ

Η πρόσληψη, η αποβολή ή το μοίρασμα των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας των ατόμων (ηλεκτρόνια σθένους), προκειμένου να αποκτήσουν σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση, όπως εκείνες των ευγενών αερίων, αποτελεί τη βάση σχηματισμού των ατομικών δεσμών.

Γενικά οι δεσμοί διακρίνονται σε δυο κατηγορίες στους πρωτεύοντες ή ισχυρούς δεσμούς (χημικοί δεσμοί) και στους δευτερεύοντες ή ασθενείς δεσμούς (φυσικοί δεσμοί).

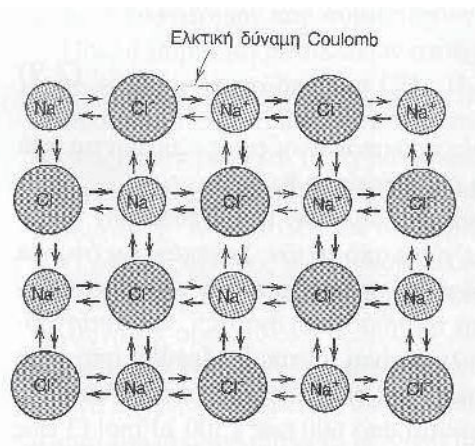
Παρακάτω εξετάζονται τα τρία είδη των κύριων δεσμών, ιοντικός ή ετεροπολικός δεσμός, ομοιοπολικός δεσμός, μεταλλικός δεσμός καθώς και οι δευτερεύοντες δεσμοί.

2.3.1 ΙΟΝΤΙΚΟΣ Η ΕΤΕΡΟΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

Ιοντικοί δεσμοί σχηματίζονται ανάμεσα στα μέταλλα και στα αμέταλλα. Τα άτομα των μετάλλων τείνουν να δώσουν τα ηλεκτρόνια σθένους και έτσι να γίνουν θετικά ιόντα (ηλεκτροθετικά άτομα), ενώ τα αμέταλλα τείνουν να προσλάβουν ηλεκτρόνια και να γίνουν αρνητικά ιόντα (ηλεκτραρνητικά άτομα). Τα θετικά ιόντα έλκονται με τα αρνητικά ιόντα και σχηματίζεται ο ιοντικός δεσμός. Ο ιοντικός δεσμός είναι μη κατευθυντικός δεσμός και η ισχύς του είναι ίδια σε όλες τις κατευθύνσεις.

Όσο πιο μεγάλη είναι η διαφορά ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ των ατόμων, τόσο πιο μεγάλη είναι η τάση τους προς σχηματισμό ιοντικού δεσμού. Τα περισσότερα ηλεκτροθετικά στοιχεία είναι τα αλκάλια (Li, Na, K, κ.λ.π.), ενώ τα περισσότερα ηλεκτραρνητικά στοιχεία είναι το F, O και N.

Το μόριο του χλωριούχου νατρίου NaCl αποτελεί κλασσικό παράδειγμα ιοντικού δεσμού. Το νάτριο έχει ένα ηλεκτρόνιο στην εξωτερική του στιβάδα, $3s$, το οποίο τείνει να το αποβάλλει αποκτώντας τη σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του ευγενούς αερίου νέου. Τα χλώριο έχει επτά ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στιβάδα, $3s^2 3p^5$ και με την πρόσληψη ενός ηλεκτρονίου αποκτά τη σταθερή διαμόρφωση του ευγενούς αερίου αργού. Στο Σχήμα 2.3 απεικονίζεται ο ιοντικός δεσμός.



Σχήμα 2.3: Σχηματική παράσταση του ιοντικού δεσμού.

Ο ιοντικός δεσμός είναι ο επικρατέστερος δεσμός στα κεραμικά υλικά. Οι ενέργειες των δεσμών είναι αρκετά υψηλές, γεγονός που οδηγεί σε υψηλά σημεία τήξης. Για παράδειγμα, η ενέργεια δεσμού στο MgO είναι 940 Kcal/mol και το σημείο τήξης 2800°C. Όσο μεγαλύτερο είναι το μέγεθος των ατόμων, τόσο μικρότερη είναι η ενέργεια του δεσμού. Αυτό συμβαίνει γιατί τα ηλεκτρόνια σθένους βρίσκονται πιο μακριά από τον πυρήνα με συνέπεια τη μείωση των ελκτικών δυνάμεων. Στον Πίνακα 2.3 παρουσιάζονται οι ενέργειες δεσμών και τα σημεία τήξεως για μερικές ιοντικές ενώσεις.

2.3.2 ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

Ομοιοπολικός δεσμός σχηματίζεται μεταξύ των ατόμων ως αποτέλεσμα της αμοιβαίας συνεισφοράς ηλεκτρονίων της εξωτερικής τους στιβάδας, έτσι ώστε καθένα από τα άτομα να αποκτήσει σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση.

Ο ομοιοπολικός δεσμός αντίθετα με τον ιοντικό είναι κατευθυντικός. Η κατεύθυνσή του είναι μεταξύ των ατόμων που συνεισφέρουν τα ηλεκτρόνια.

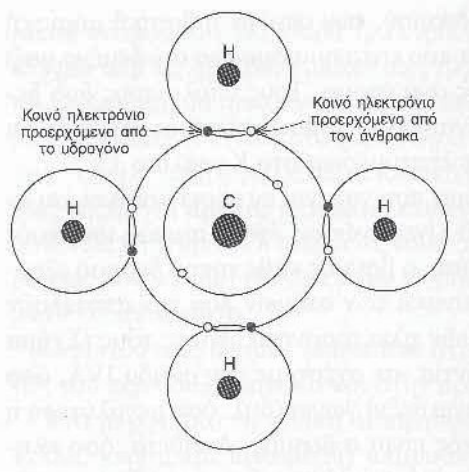
Όταν ο δεσμός πραγματοποιείται μεταξύ ατόμων διαφορετικής ηλεκτραρνητικότητας, τότε το κοινό ζεύγος ηλεκτρονίων έλκεται περισσότερο από το ηλεκτραρνητικότερο άτομο,

με συνέπεια την πόλωση του μορίου, όπως στην περίπτωση των ιοντικών δεσμών. Όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά ηλεκτραρνητικότητας τόσο πιο ιοντικός είναι ο δεσμός.

Ο ομοιοπολικός δεσμός κυρίως συναντάται στις οργανικές ενώσεις, όπως τα πολυμερή. Επίσης συναντάται σε στερεές ανόργανες ενώσεις όπως το διαμάντι, το πυρίτιο και το γερμάνιο.

Παρακάτω παρατίθενται μερικά παραδείγματα ενώσεων ομοιοπολικού δεσμού.

Στο μόριο του υδρογόνου, H_2 , κάθε άτομο υδρογόνου συνεισφέρει το μοναδικό του ηλεκτρόνιο ($1s^1$) αποκτώντας με αυτό τον τρόπο τη διαμόρφωση του ατόμου του ηλίου.



Σχήμα 2.4: Σχηματική παράσταση του ομοιοπολικού δεσμού στο μόριο του μεθανίου (CH_4).

Στο μόριο του μεθανίου, CH_4 , ένα άτομο άνθρακα ενώνεται με τέσσερα άτομα υδρογόνου. Κάθε άτομο άνθρακα έχει τέσσερα ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στιβάδα ($2s^2 2p^2$), τα οποία μοιράζεται με τα τέσσερα άτομα του υδρογόνου. Έτσι ο άνθρακας έχει τώρα οκτώ ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στιβάδα, αποκτώντας τη διαμόρφωση του νέου, ενώ το υδρογόνο δυο ηλεκτρόνια, αποκτώντας τη διαμόρφωση του ηλίου (Σχήμα 2.4).

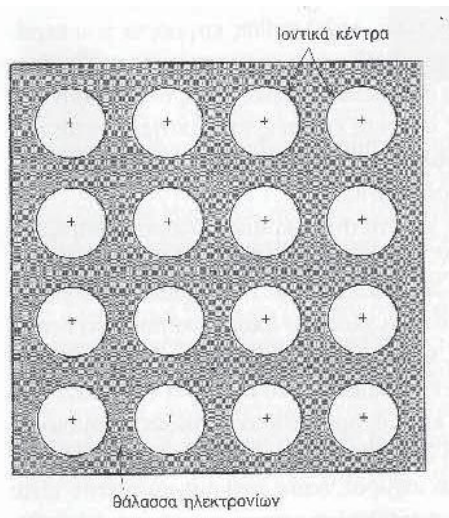
Στο διαμάντι κάθε άτομο άνθρακα συνδέεται με ομοιοπολικούς δεσμούς με τέσσερα άλλα άτομα άνθρακα τα οποία βρίσκονται στις κορυφές ενός κανονικού τετραέδρου.

Ο μόλυβδος έχει 82 ηλεκτρόνια και τα 4 ηλεκτρόνια σθένους βρίσκονται μακριά από τον πυρήνα του και συγκρατούνται με ασθενείς δυνάμεις. Οι ομοιοπολικοί δεσμοί που μπορεί να σχηματίσει ο μόλυβδος είναι επίσης πολύ ασθενείς, με συνέπεια ο μόλυβδος να θεωρείται περισσότερο μέταλλο παρά στοιχείο ομοιοπολικού δεσμού.

Οι ομοιοπολικοί δεσμοί μπορεί να είναι πολύ ισχυροί ή πολύ ασθενείς. Για παράδειγμα, στο διαμάντι η ενέργεια δεσμού είναι 108 Kcal/mol και το σημείο τήξης 2800°C , ενώ ο κασσίτερος σχηματίζει ασθενείς δεσμούς και έχει χαμηλό σημείο τήξης, 232°C . Στον Πίνακα 2.3 παρουσιάζονται οι ενέργειες δεσμών και τα σημεία τήξεως για μερικές ομοιοπολικές ενώσεις.

2.3.3 ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

Ο μεταλλικός δεσμός συναντάται στα μέταλλα και στα κράματά τους. Τα ηλεκτρόνια σθένους των μετάλλων, ένα, δυο ή τρία, δεν συγκρατούνται σταθερά από τα άτομα, αλλά σχηματίζουν ένα “νέφος” ελεύθερων ηλεκτρονίων, τα οποία μπορούν να κινούνται σε όλη τη μάζα του μετάλλου και είναι κοινά για όλα τα θετικά φορτισμένα ιόντα. Μεταξύ των ελεύθερων ηλεκτρονίων και των θετικών ιόντων αναπτύσσονται ελκτικές δυνάμεις. Συνεπώς ο μεταλλικός δεσμός δεν είναι κατευθυντικός (Σχήμα 2.5).



Σχήμα 2.6: Σχηματική παράσταση του μεταλλικού δεσμού.

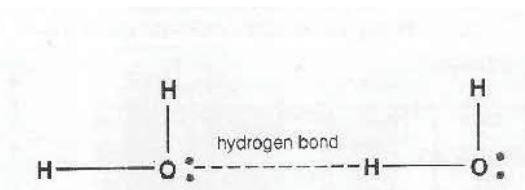
Οι μεταλλικοί δεσμοί μπορεί να είναι πολύ ισχυροί ή πολύ ασθενείς. Για παράδειγμα, στο βολφράμιο η ενέργεια δεσμού είναι 203 Kcal/mol και το σημείο τήξης 3410°C, ενώ στο κάλιο η ενέργεια δεσμού είναι 21.4 Kcal/mol και το σημείο τήξης 63.5°C. Στον Πίνακα 2.3 παρουσιάζονται οι ενέργειες δεσμών και τα σημεία τήξεως για μερικά μέταλλα.

2.3.4 ΔΕΥΤΕΡΕΥΟΝΤΕΣ ΔΕΣΜΟΙ Η ΔΕΣΜΟΙ VAN DER WAALS

Οι δευτερεύοντες δεσμοί είναι ασθενείς δεσμοί και οφείλονται στην έλξη ηλεκτρικών διπόλων που σχηματίζονται σε άτομα ή μόρια. Τα δίπολα μπορεί να είναι μόνιμα ή επαγόμενα. Έτσι έχουμε δεσμούς που προκύπτουν από την ηλεκτροστατική έλξη μεταξύ επαγόμενων διπόλων, ή μεταξύ επαγόμενων και μόνιμων διπόλων, ή μεταξύ μόνιμων διπόλων.

Ο δεσμός υδρογόνου είναι μια περίπτωση δευτερεύοντος δεσμού που οφείλεται στην έλξη μόνιμων διπόλων. Αναπτύσσεται μεταξύ μορίων στα οποία το υδρογόνο είναι συνδεδεμένο με ένα άτομο μεγάλης ηλεκτραρνητικότητας. Τυπικά παραδείγματα αποτελούν τα μόρια του υδροφθορίου, HF, του νερού, H₂O και της αμμωνίας, NH₃. Αυτά τα μόρια παρουσιάζουν ισχυρή πόλωση γιατί τα ηλεκτρόνια έλκονται περισσότερο από τα ηλεκτραρνητικά άτομα. Αυτό έχει ως συνέπεια, το άκρο του μορίου, που βρίσκεται το υδρογόνο, να είναι θετικά φορτισμένο, ενώ το άκρο του μορίου που βρίσκεται το ηλεκτραρνητικό άτομο να είναι αρνητικά φορτισμένο. Ο δεσμός υδρογόνου σχηματίζεται από την έλξη μεταξύ του θετικού τμήματος ενός μορίου και του αρνητικού τμήματος ενός γειτονικού μορίου.

Στο Σχήμα 2.6 απεικονίζεται ο δεσμός υδρογόνου στο μόριο του νερού. Στη θερμοκρασία περιβάλλοντος, 25°C, το νερό είναι υγρό λόγω του δεσμού υδρογόνου που συγκρατεί τα μόρια του σε αυτή την κατάσταση. Επίσης το υψηλό σημείο βρασμού του νερού, λαμβάνοντας υπόψη το χαμηλό μοριακό του βάρος, δικαιολογείται από την ανάπτυξη του δεσμού υδρογόνου.



Σχήμα 2.6: Σχηματική παράσταση του δεσμού υδρογόνου.

Η υγροποίηση και η στερεοποίηση των ευγενών αερίων καθώς και άλλων ουδέτερων και συμμετρικών μορίων οφείλεται σε δευτερεύοντες δεσμούς (έλξη ανάμεσα σε επαγόμενα δίπολα).

Οι ενέργειες των δευτερευόντων δεσμών είναι της τάξης των 2.5 Kcal/mol. Οι δεσμοί υδρογόνου είναι οι πιο ισχυροί δεσμοί αυτού του είδους, με ενέργεια δεσμού της τάξης των 12 Kcal/mol. Στον Πίνακα 2.3 παρουσιάζονται ορισμένα παραδείγματα δευτερευόντων δεσμών.

2.4 ΕΝΕΡΓΕΙΕΣ ΔΕΣΜΩΝ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ ΤΗΞΗΣ

Στον Πίνακα 2.3 παρουσιάζονται η ενέργεια δεσμού και το σημείο τήξης για ιοντικά, ομοιοπολικά και μεταλλικά υλικά, καθώς και για ενώσεις στις οποίες αναπτύσσονται δευτερεύοντες δεσμοί.

Πίνακας 2.3: Ενέργειες ιοντικών, ομοιοπολικών, μεταλλικών και δευτερευόντων δεσμών και σημεία τήξης διάφορων υλικών [1, 2].

Υλικό	Ενέργεια Δεσμού, Kcal/mol	Σημείο Τήξης, °C
Ιοντικός δεσμός		
CaO	846	2580
MgO	940	2800
KCl	164	776
Ομοιοπολικός δεσμός		
C(διαμάντι)	170	>3550
Si	108	1410
Μεταλλικός δεσμός		
W	203	3410
V	123	1730
Ti	113	1812
Cr	95	1903
Fe	99.8	1535
Co	91.4	1490
Ni	101	1455
Cu	81.1	1083
Al	77	660
Hg	16	-39
Δεσμός υδρογόνου		
H ₂ O	12.2	0
NH ₃	8.4	-78
Δεσμός Van der Waals		
Cl ₂	7.4	-101
Ar	1.8	-189

2.5 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΩΝ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΕΣΜΩΝ ΣΤΙΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Οι ιδιότητες των υλικών, τόσο οι φυσικές όσο και οι μηχανικές, κατά ένα μέρος μπορούν να εξηγηθούν από τον τύπο του δεσμού.

Γενικά υψηλή ενέργεια δεσμών συνοδεύεται από υψηλό σημείο τήξης. Σε θερμοκρασία περιβάλλοντος, ουσίες με μεγάλες ενέργειες δεσμών είναι στερεές, με ενδιάμεσες υγρές, ενώ ουσίες με μικρές ενέργειες δεσμών είναι αέριες (Πίνακας 2.3).

Τα μέταλλα είναι καλοί αγωγοί του ηλεκτρισμού και της θερμότητας, λόγω των ελεύθερων ηλεκτρονίων που διαθέτουν. Αντίθετα, τα υλικά που έχουν ιοντικό ή ομοιοπολικό δεσμό, στα οποία τα ηλεκτρόνια κατέχουν συγκεκριμένες θέσεις, είναι ηλεκτρικοί και θερμικοί μονωτές.

Ιδιότητες των μεταλλικών υλικών, όπως η ολκιμότητα και η πλαστικότητα, αναμφίβολα συνδέονται με τη φύση του μεταλλικού δεσμού. Τα μέταλλα αστοχούν με όλκιμο τρόπο, δηλαδή σπάνε αφού πρώτα υποστούν σημαντική παραμόρφωση. Στα μέταλλα, τα θετικά ιόντα βρίσκονται μέσα σε μια «θάλασσα» ηλεκτρονίων και η σχετική μετατόπισή τους είναι δυνατή επιτρέποντας την πλαστική παραμόρφωσή τους.

Αντίθετα, στα ιοντικά και ομοιοπολικά υλικά, όπως τα κεραμικά, οι γωνίες των δεσμών δεν μεταβάλλονται με συνέπεια να μην είναι δυνατή η πλαστική παραμόρφωσή τους. Αυτά τα υλικά είναι ψαθυρά και αστοχούν με θραύση των δεσμών τους.

Γενικά πολύ λίγες ενώσεις έχουν αμιγώς ένα τύπο δεσμού. Ένας δεσμός μπορεί να είναι εν μέρει ιοντικός και εν μέρει ομοιοπολικός. Για παράδειγμα, το υψηλό σημείο τήξης, καθώς και το υψηλό μέτρο ελαστικότητας (E) ορισμένων ενώσεων, όπως του MgO, Al₂O₃, κλπ. αποδίδεται στο μικτό ιοντικό-ομοιοπολικό χαρακτήρα των δεσμών τους.

Για μια ένωση, στην οποία τα άτομά της συνδέονται με έναν μικτό ομοιοπολικό-μεταλλικό δεσμό, η ηλεκτρική και θερμική αγωγιμότητά τους θα εξαρτάται από το ποσοστό του ομοιοπολικού χαρακτήρα του δεσμού.