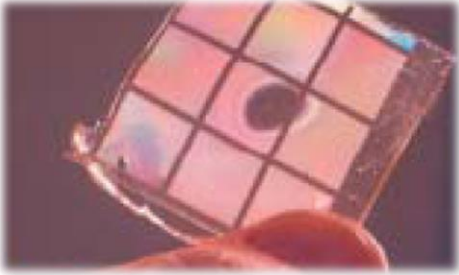
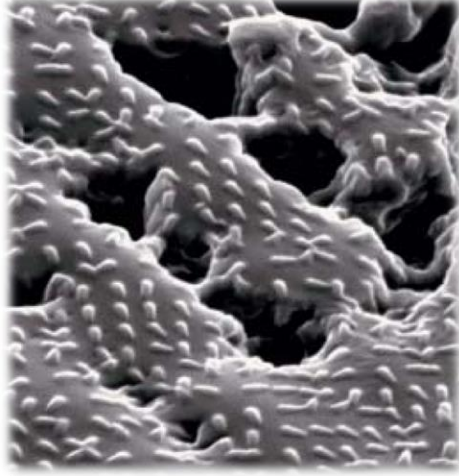


Bölüm 2

Atomal Yapı ve Atomlararası Bağ



Atom Yapısı

2.2 TEMEL KAVRAMLAR

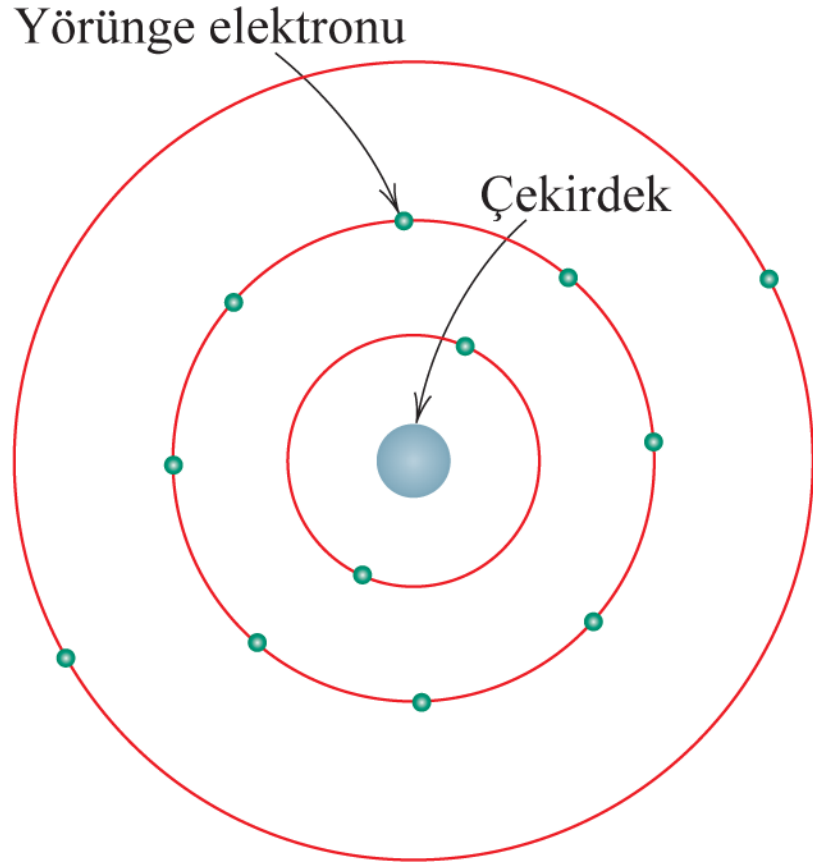
- Her bir kimyasal element, atom çekirdeği içerisindeki proton sayıları veya **atom numarası (Z)** ile karakterize edilir.
- Verilen bir elementin tüm atomlarında proton sayıları aynı olmasına rağmen, nötron sayıları (N) değişebilir. Bu nedenle, bazı elementlerin atomları iki veya daha fazla farklı atom kütlelerine sahiptir ve bunlar **izotop** olarak adlandırılır.

- Bir elementin **atom ağırlığı** doğal olarak meydana gelen izotop atomlarının atom kütlelerinin ortalama ağırlığına eşittir ve **atomik kütle birimi (a.k.b)** atom ağırlığı hesaplamalarında kullanılabilir.
- Bir elementin atom ağırlığı veya bir bileşiğin molekül ağırlığı a.k.b cinsinden malzemenin atomu (moleköl) veya kütlesi dikkate alınarak belirlenir. Buna göre, bir **mol** maddede $6,023 \times 10^{23}$ (Avogadro sayısı) kadar atom veya molekül vardır.

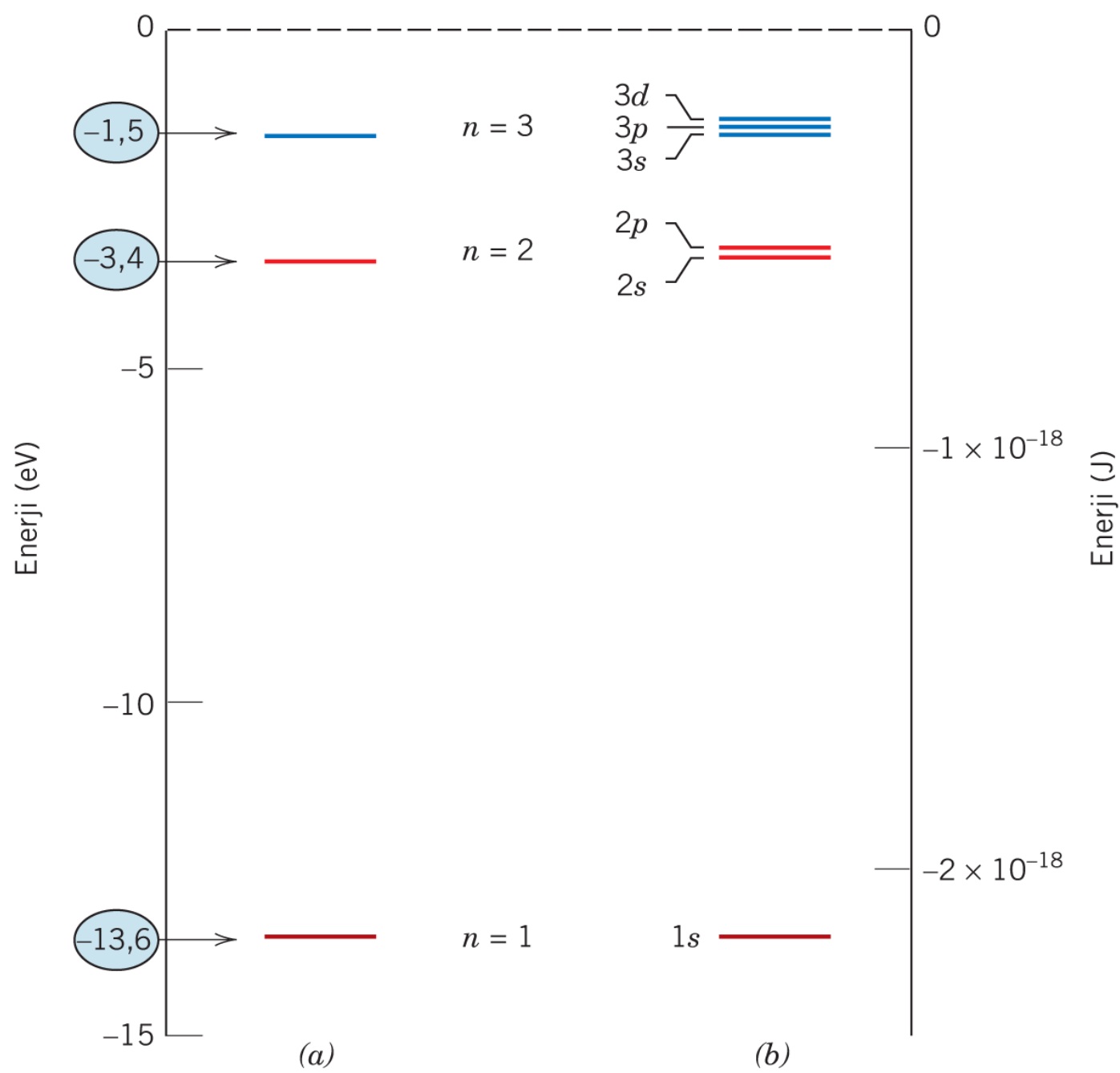
2.3 ATOMLARDA ELEKTRONLAR

Atom Modelleri

- On dokuzuncu yüzyılın ikinci yarısında, katılarda, elektronlar ile ilgili birçok olayın klasik mekaniğe göre açıklanamayacağı anlaşılmıştır. Daha sonra **kuantum mekaniği** olarak bilinen, atom ve atom altı sistemlerini kontrol eden bir prensip geliştirilmiştir.
- Kuantum mekaniğinin ilk olarak ortaya koyduğu olgu basitleştirilmiş **Bohr atom modelidir**, burada elektronların atom çekirdeği etrafında farklı yörüngelerde döndükleri varsayılmakta ve bir elektronun konumu bulunduğu yörüngeye göre tanımlanmaktadır.



Şekil 2.1 Bohr atomunun şematik gösterimi

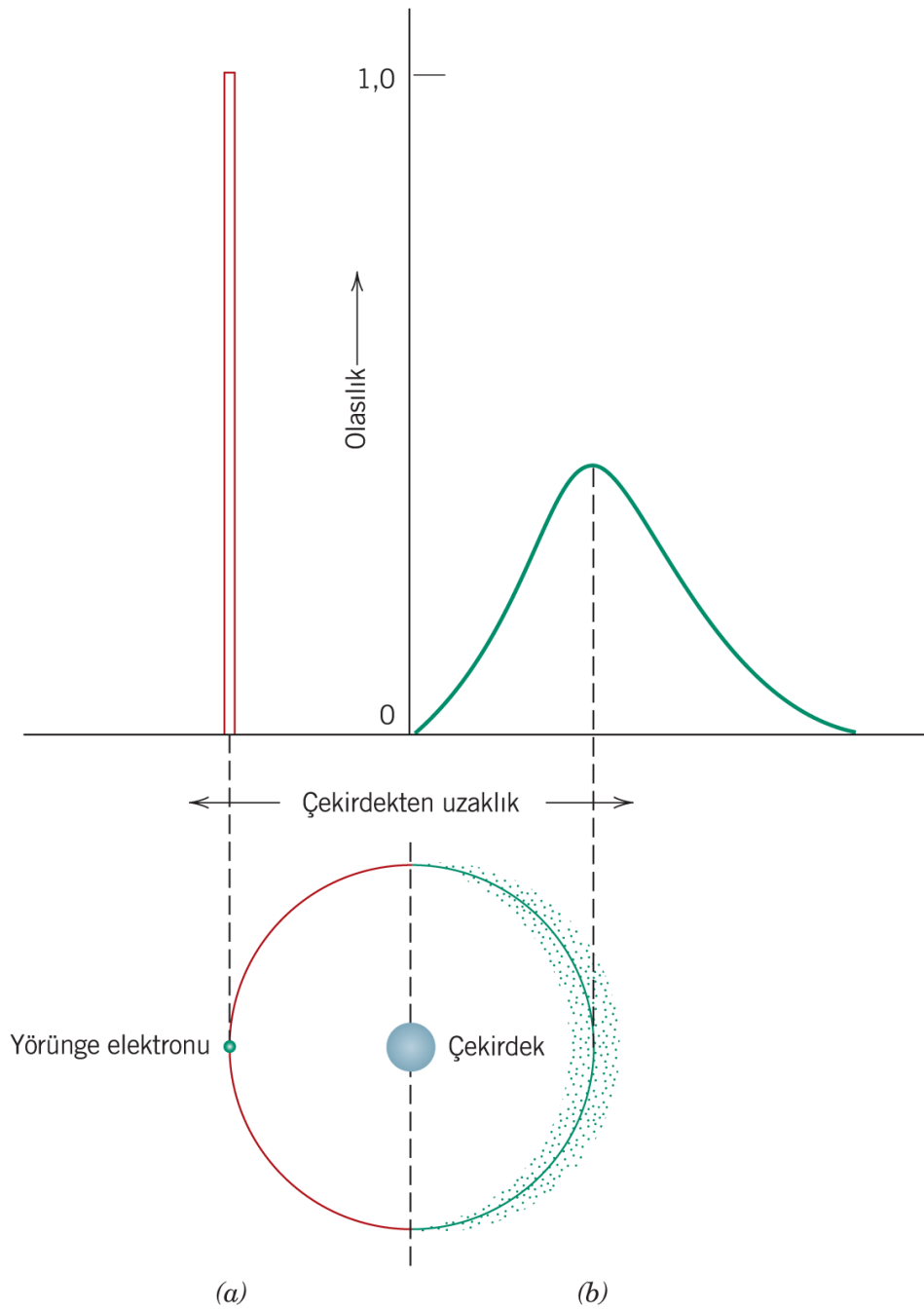


Şekil 2.2 (a)

Hidrojen atomunun Bohr modelinde ilk üç enerji seviyesi

(b) Hidrojen atomunun dalga-mekanik modelinde ilk üç yörüngeleri için elektron enerji seviyeleri.

(W. G. Moffatt, G.W. Pearsall, and J.Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 10. (1964), kitabından alınmış olup John Wiley & Sons, Firmasının izni ile basılmıştır.)



Şekil 2.3 Elektron dağılımına göre atom modellerinin karşılaştırılması (a) Bohr ve (b) dalgamekanik. (Z. D. Jastrzebski, *The Nature and Properties of Engineering Materials*, 3rd edition, p. 4. (1987) Copyright © 1987 kitabından alınmış olup John Wiley & Sons Firmasının izni ile basılmıştır.)

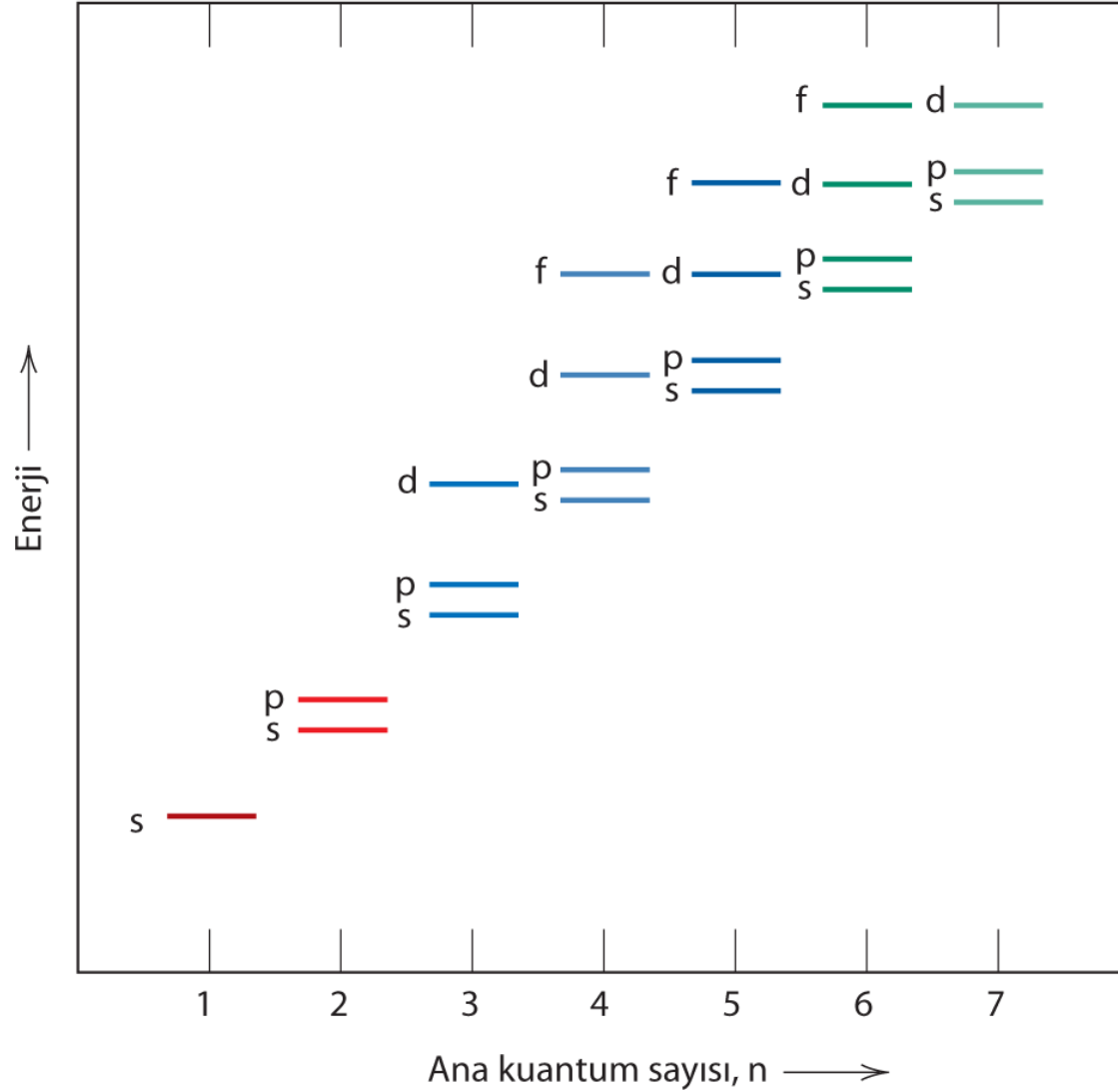
- Elektronlar ile ilgili bazı olayları açıklamada yetersiz kalan Bohr modelinin bazı önemli sınırlamalara sahip olduđu anlaşılmıřtır. Bunun için elektronun hem dalga hem de parçacık özelliđini gösterdiđi dikkate alınarak, **dalga-mekanik modeli** ortaya atılmıřtır. Bu modelle, bir elektronun konumu, çekirdek etrafında deđişik bölgelerde bulunma ihtimalinden daha çok, belirli bir yörüngede hareket eden bir parçacık olarak düşünölmüřtür.

Kuantum Sayıları

- Dalga mekaniği modeline göre, bir atomda her bir elektron, **kuantum sayısı** olarak adlandırılan dört parametreyle belirtilir.

Tablo 2.1 Elektron Yörünge ve Alt Yörüngelerde Bulunan Elektronların Sayısı

Ana Kuantum Sayısı, n	Yörünge Adı	Alt Yörüngeler	Enerji Seviyesi Sayısı	Elektronların Sayısı	
				Alt Yörüngede	Yörüngede
1	K	s	1	2	2
2	L	s	1	2	8
		p	3	6	
3	M	s	1	2	18
		p	3	6	
		d	5	10	
4	N	s	1	2	32
		p	3	6	
		d	5	10	
		f	7	14	

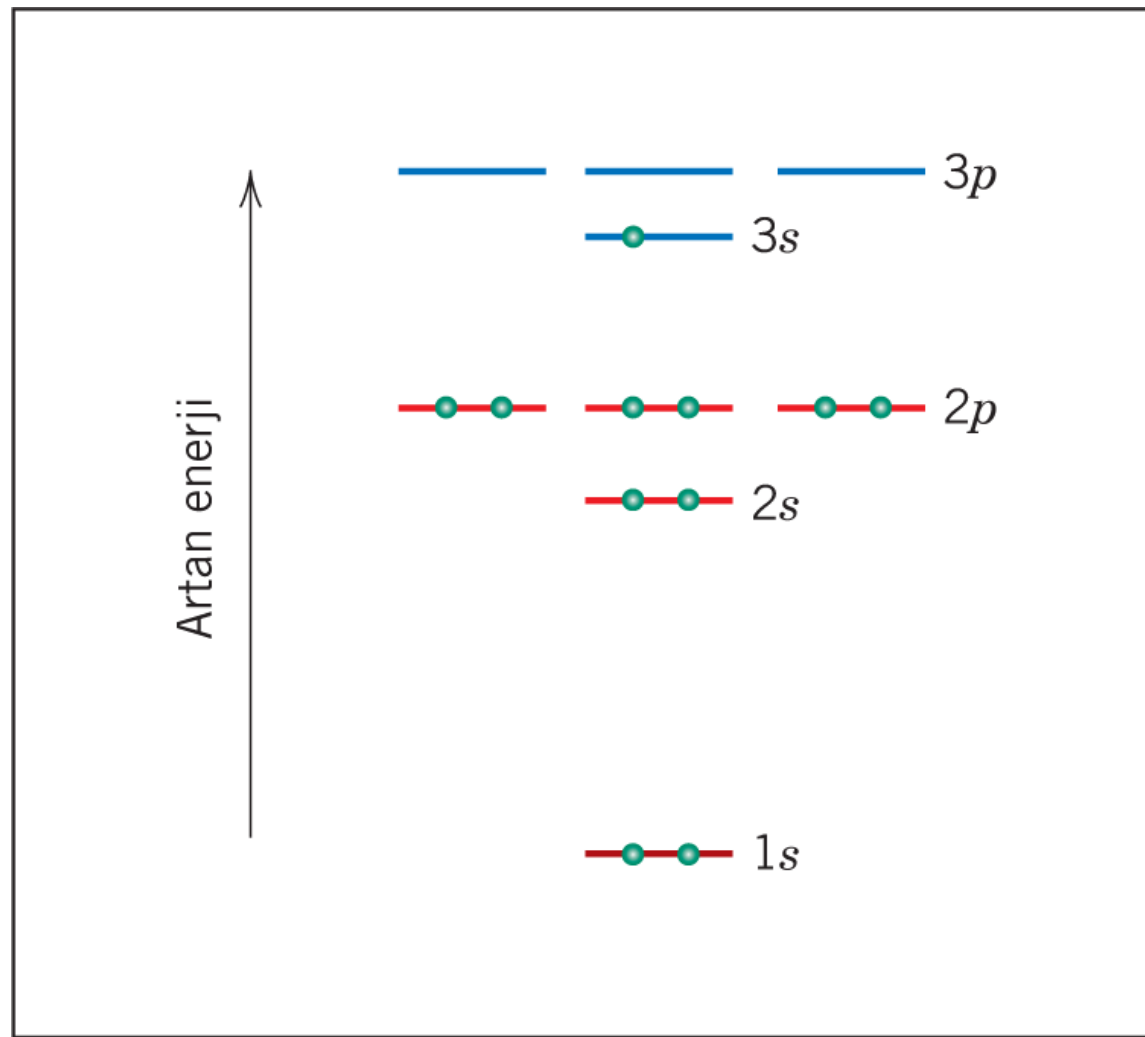


Şekil 2.4 Çeşitli yörünge ve alt yörüngelerde elektronların bağlı enerjilerinin şematik gösterimi (K. M. Ralls, T. H. Courtney, and J. Wulff, *Introduction to Materials Science and Engineering*, p. 22. Copyright 1976 kitabından alınmış olup John Wiley & Sons Firmasının izni ile basılmıştır)

Elektron Diziliřleri

- Önceki bölümde özellikle elektronların bulunabileceđi enerji seviyeleri **elektron konumları** incelenmiştir. Elektronların bu enerji seviyelerine yerleşme şekillerini belirlenmesinde bir başka kuantum-mekanik kavramı, **Pauli dışlama prensibi** kullanılır. Bu prensip, bir enerji seviyesinde zıt spinli iki elektrondan fazla elektronun bulunamayacağını zorunlu kılmaktadır.

- Bütün elektronlar en düşük enerji seviyelerine yerleştiklerinde, atomun **en düşük enerji (taban) durumunda** olduğu söylenir.
- Bir atomun **elektron dizilişi** veya yapısı, bu enerji seviyelerinin elektronlarca nasıl işgal edildiğini gösterir.



Şekil 2.5 Bir sodyum atomunda elektronların yerleştiği ve boş kalan enerji seviyelerinin şematik gösterimi

Table 2.2 Yaygın Olan Bazı Elementlerin Elektron Yapıları^a

<i>Element</i>	<i>Sembol</i>	<i>Atom Numarası</i>	<i>Elektron Dizilişi</i>
Hidrojen	H	1	$1s^1$
Helyum	He	2	$1s^2$
Lityum	Li	3	$1s^2 2s^1$
Berilyum	Be	4	$1s^2 2s^2$
Bor	B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$
Karbon	C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
Azot	N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$
Oksijen	O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
Flor	F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Neon	Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Sodyum	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Magnezyum	Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Alüminyum	Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Silisyum	Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
Fosfor	P	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
Kükürt	S	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Klor	Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Argon	Ar	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Devam ediyor...

Potasyum	K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
Kalsiyum	Ca	20	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
Skandiyum	Sc	21	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
Titanyum	Ti	22	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
Vanadyum	V	23	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
Krom	Cr	24	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$
Mangan	Mn	25	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$
Demir	Fe	26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
Kobalt	Co	27	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$
Nikel	Ni	28	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$
Bakır	Cu	29	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$
Çinko	Zn	30	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$
Galyum	Ga	31	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
Germanyum	Ge	32	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$
Arsenik	As	33	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$
Selenyum	Se	34	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4$
Bromium	Br	35	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$
Kripton	Kr	36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$

^a Bazı elementler kovalent bağlı olduğu zaman *sp* hibridlerini oluştururlar. Bu özellikle C, Si ve Ge için geçerlidir.

- Öncelikle, **valans elektronları**, en dış yörüngede bulunan elektronlar olduğu belirtilmelidir. Bu elektronlar çok önemli olup atom ve molekül kümelerini oluşturmak için atomlar arasında bağların oluşmasını sağlar.

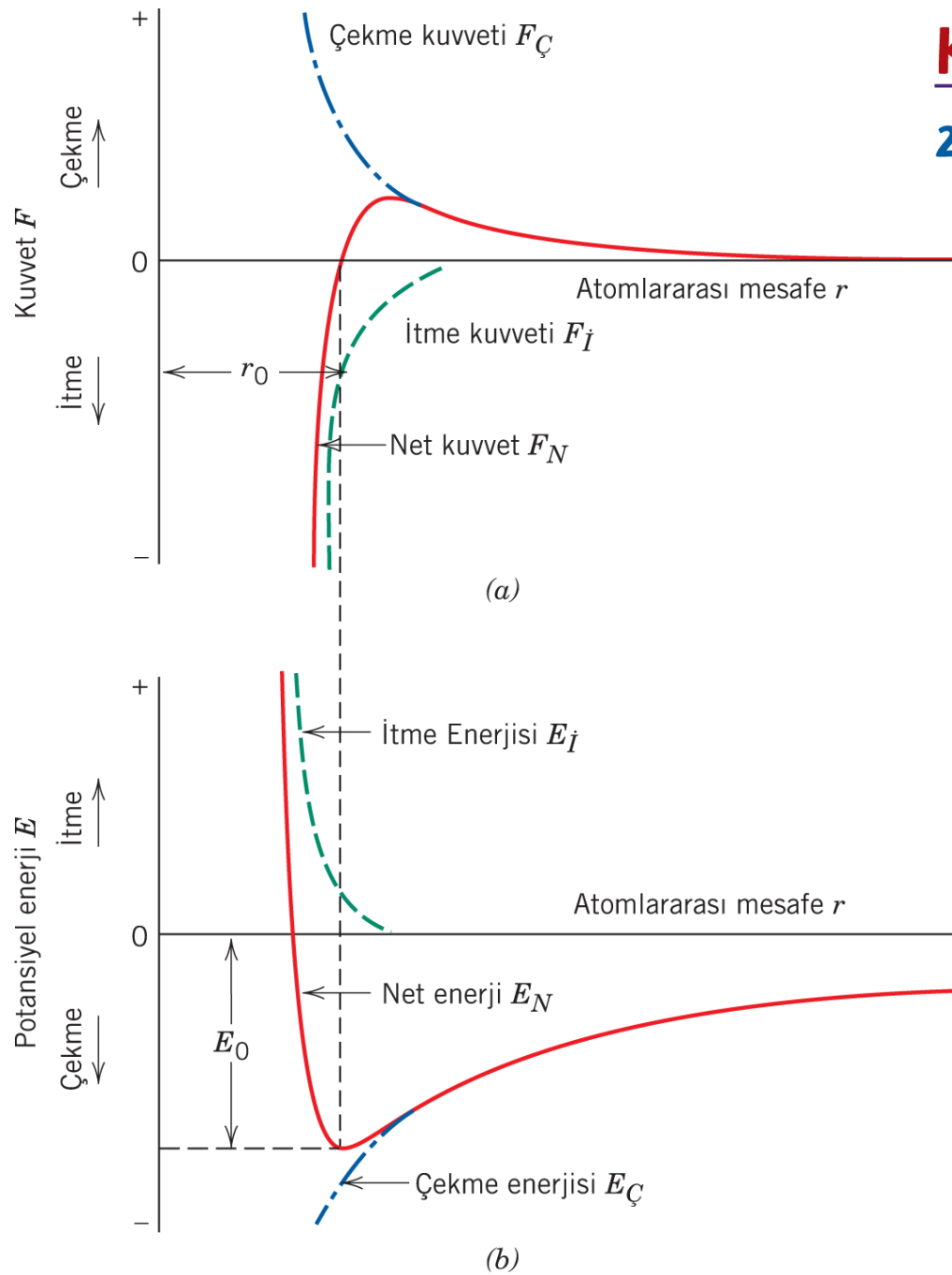
- Bütün elementler elektron yapılarına göre **periyodik tabloda** sınıflandırılır.
- Periyodik tablodan görülebileceği gibi, elementlerin çoğu metal olarak sınıflandırılabilir. Bunlar, birkaç valans elektronunu verme kabiliyetine sahip olduklarından, **elektropozitif** elementler olarak ifade edilir.
- Ayrıca, periyodik tablonun sağındakiler **elektronegatif** elementlerdir; diğer bir ifadeyle, negatif iyon oluşturmak için kolaylıkla elektron alır veya bazen elektronları diğer atomlarla paylaşırlar.

IA 1 H 2.1																O 2 He -	
	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	
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	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	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															

Şekil 2.7 Elementlerin elektronegativite değerleri (*The Nature of the Chemical Bond*, 3rd edition. (1939 and 1940) Yayın hakkı Cornell Üniversitesine ait olup yine bu Üniversitenin izni ile basılmıştır.)

Katılarda Atomsal Bağ

2.5 BAĞ KUVVETLERİ VE ENERJİLERİ



Şekil 2.8 İzole iki atomda, atomlararası mesafenin (a) itme ve çekme kuvvetleri üzerine (b) itme, çekme ve net potansiyel enerjileri üzerine olan etkisi

İki atom için kuvvet- potansiyel enerji ilişkisi

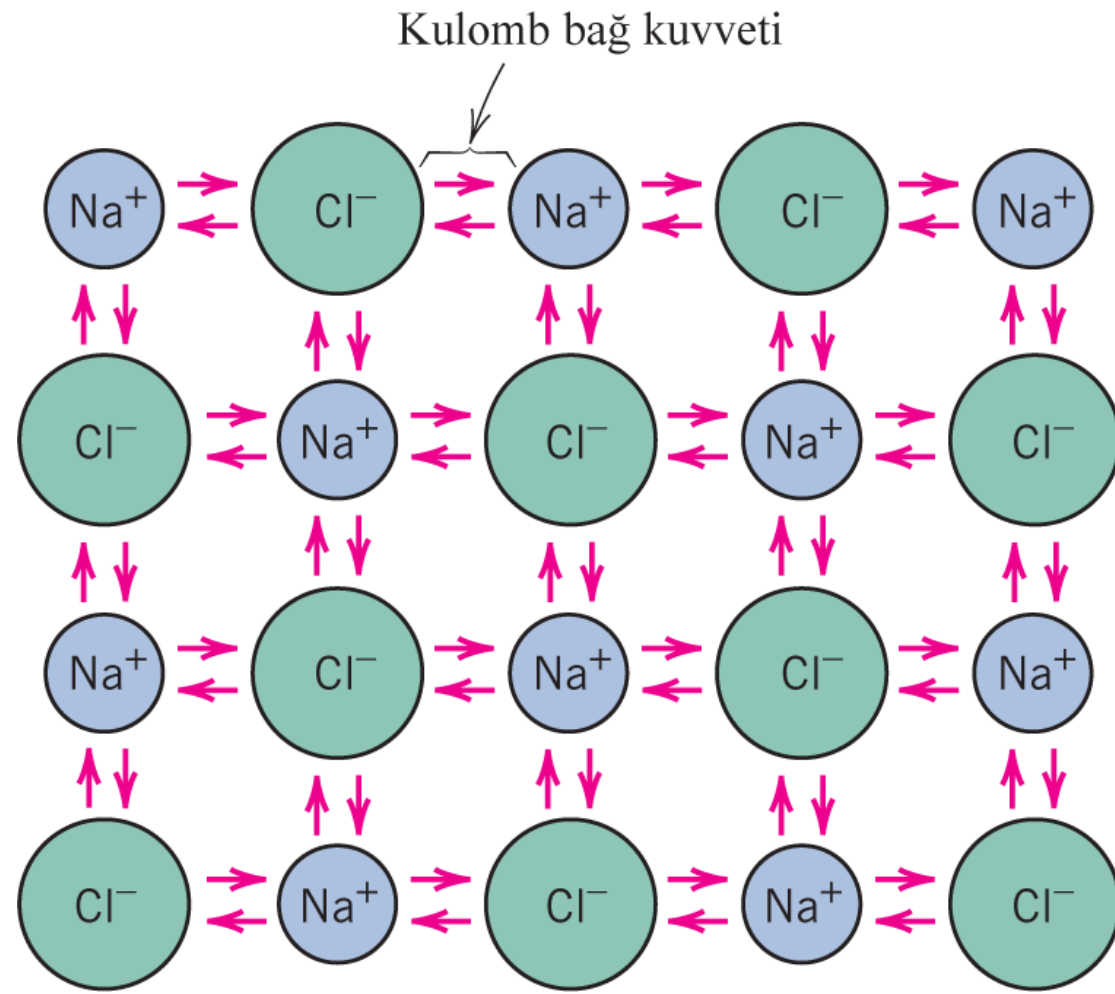
$$E = \int F dr \quad (2.4)$$

- Net enerji eğrisindeki minimum nokta, eğerde r_0 denge mesafesine karşılık gelir. Ayrıca, bu iki atom için **bağ enerjisi** E_0 , atomları birbirlerinden sonsuz mesafeye uzaklaştırmak için gerekli olan enerji olup [Şekil 2.8b](#)'de görüldüğü gibi, minimum noktadaki enerjiye karşılık gelir.
- Katılarda iyonik, kovalent ve metalik olmak üzere üç farklı **birincil bağ** veya kimyasal bağ bulunur.

2.6 ATOMLARARASI BİRİNCİL BAĞLAR

İyonik Bağ

- **İyonik bağ** belki de tanımlanması en kolay olan bağ tipidir. Bu bağ, periyodik tabloda metalik ve metalik olmayan (ametal) elementlerin oluşturduğu bileşiklerde bulunurlar.
- Atomlararası bağ çekim kuvvetleri **kulomb** türü kuvvetlerdir; yani pozitif ve negatif iyonlar, net elektrik yükü ile orantılı olarak birbirlerini çeker.



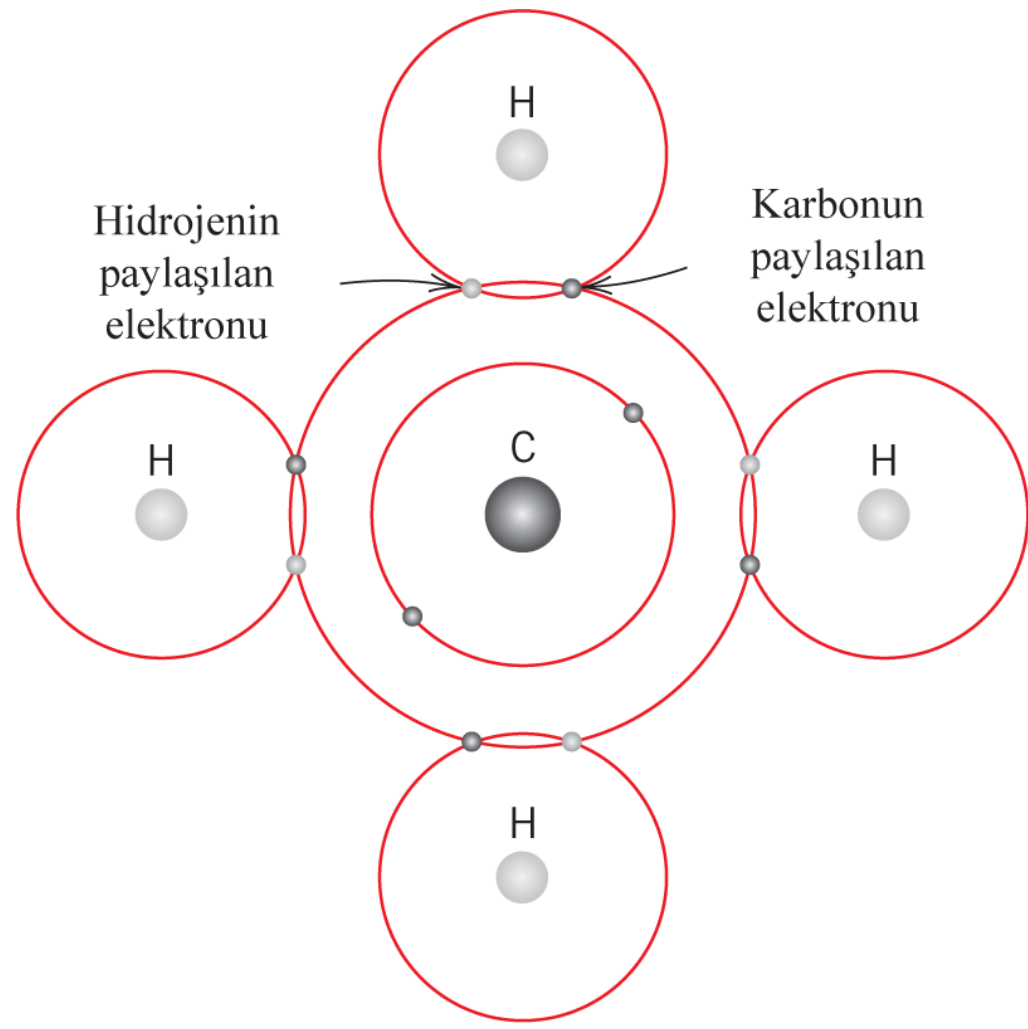
Şekil 2.9 Sodyum klorürde (NaCl) iyonik bağın şematik gösterimi

Tablo 2.3 Bazı Maddelerin Bağ Enerjileri ve Ergime Sıcaklıkları

<i>Bağ Tipi</i>	<i>Madde</i>	<i>Bağ Enerjisi</i>		<i>Ergime Sıcaklığı (°C)</i>
		<i>kJ/mol</i>	<i>eV/Atom, İyon, Molekül</i>	
İyonik	NaCl	640	3,3	801
	MgO	1000	5,2	2800
Kovalent	Si	450	4,7	1410
	C (elmas)	713	7,4	>3550
Metalik	Hg	68	0,7	-39
	Al	324	3,4	660
	Fe	406	4,2	1538
	W	849	8,8	3410
Van der Waals	Ar	7,7	0,08	-189
	Cl ₂	31	0,32	-101
Hidrojen	NH ₃	35	0,36	-78
	H ₂ O	51	0,52	0

Kovalent Bağ

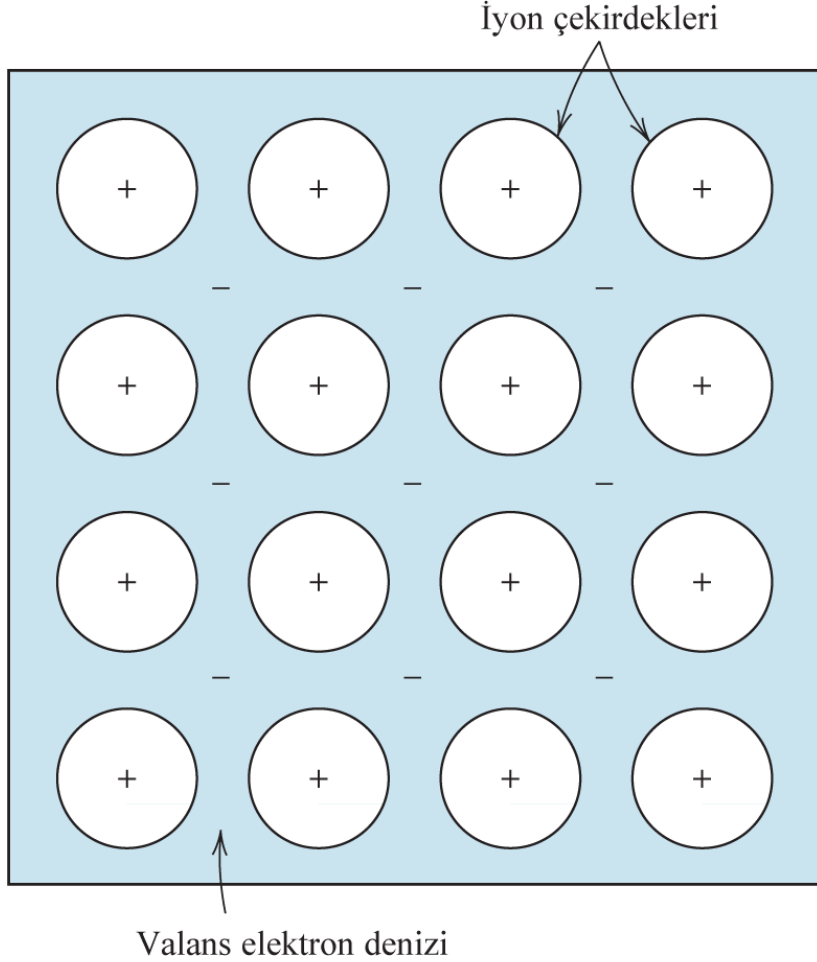
- **Kovalent bağda**, komşu iki atom elektronlarını ortaklaşa kullanmak suretiyle kararlı elektron yapılarını oluşturdukları varsayılmaktadır.
- Kovalent bağ yapısını oluşturan iki atom, bağ oluşumuna en az bir elektron kadar katkıda bulunmakta ve paylaşılan elektronların her iki atoma ait olduğu düşünülmektedir.



Şekil 2.10 Metan (CH₄) molekülünde kovalent bağın şematik gösterimi

Metalik Baę

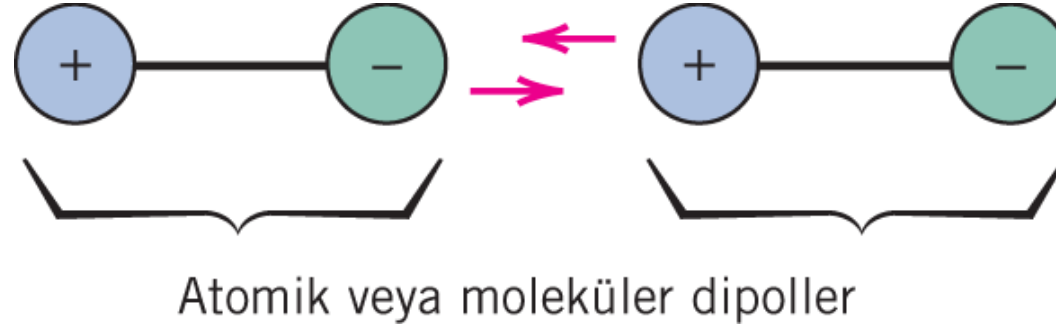
- Birincil atom baęlarının sonuncusu olan **metalik baę**, metal ve alaşımlarında bulunan bir baę türüdür.



Şekil 2.11 Metalik baęın şematik gösterimi

2.7 İKİNCİL VEYA VAN DER WAALS BAĞLAR

- **İkincil, van der Waals** veya fiziksel **bağlar**, birincil veya kimyasal bağlara nispeten daha zayıftırlar ve bunların bağ enerjileri 10 kJ/mol (0,1 eV/atom) mertebesindedir.



Şekil 2.12 İki dipol arasındaki van der Waals bağın şematik gösterimi.

- İkincil bağ kuvvetleri atomsal veya moleküle ait **dipollerden** kaynaklanır.
- **Hidrojen bağı** ikincil bağların özel bir tipi olup, bağın bileşenlerinden birisi hidrojen moleküllü ise bu tür bağ oluşur.

2.8 MOLEKÜLLER

- Yaygın olan birçok molekül, kuvvetli kovalent bağ ile birbirine bağlanmış atom gruplarından oluşur. Bu kapsama çift atomlu basit moleküllerin (F_2 , O_2 , H_2 vs.) yanı sıra çoğu bileşikler de (H_2O , CO_2 , HNO_3 , C_6H_6 , CH_4 vs.) girmektedir.