

BMM 205

Malzeme Biliminin Temelleri

Atom Yapısı ve Atomlar Arası Bağlar



Dr. Ersin Emre Ören

**Biyomedikal Mühendisliği Bölümü
Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Mühendisliği Bölümü**

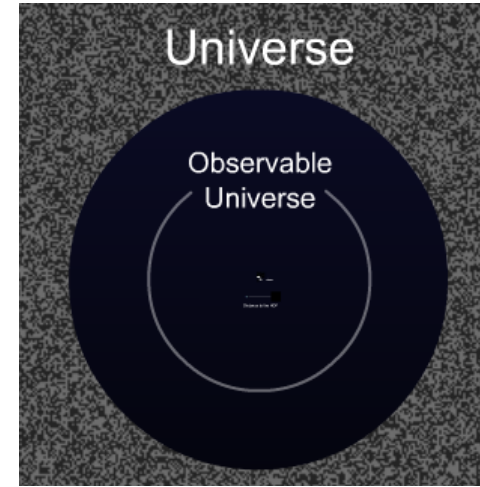
**TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi
Ankara - TÜRKİYE**

eeoren@etu.edu.tr
<http://eeoren.etu.edu.tr>

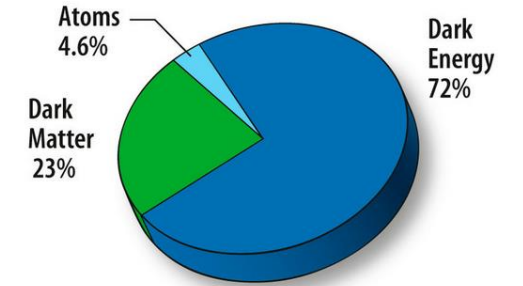
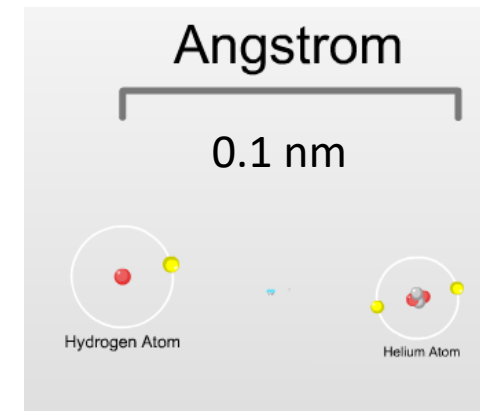
ATOM YAPISI ve ATOMLAR ARASI BAĞLAR

Uzunluk:

Birim		10 ⁿ	Adı
Ad	Sembol		
yotta	Y	24	septillion
zetta	Z	21	sextillion
exa	E	18	quintillion
peta	P	15	quadrillion
tera	T	12	trillion
giga	G	9	billion
mega	M	6	million
kilo	k	3	thousand
hecto	h	2	hundred
deca	da	1	ten
		0	one
deci	d	-1	tenth
centi	c	-2	hundredth
milli	m	-3	thousandth
micro	μ	-6	millionth
nano	n	-9	billionth
pico	p	-12	trillionth
femto	f	-15	quadrillionth
atto	a	-18	quintillionth
zepto	z	-21	sextillionth
yocto	y	-24	septillionth



250 Ym



<https://www.youtube.com/watch?v=DWouw3Hxmk>

Atom:

átomos (ἄτομος Yunanca): "Uncuttable" veya "Bölünemez" anlamına gelir.

Yaklaşık M.Ö. 440 yılında, *Demokritos* atom kavramını ortaya attı.

Tamamen Hint ve Yunan felsefi kavramlarına dayalı olmasına rağmen, modern bilim Demokritos tarafından verilen bu adı korudu.

Romalı şair *Lucretius* (M.Ö. 95-55)
De Rerum Natura (Şeylerin Doğası Üzerine):

“What seems to us the hardened and condensed
Must be of atoms among themselves more hooked,
Be held compacted deep within, as it were
By branch-like atoms- of which sort the chief
Are diamond stones, despisers of all blows,
And stalwart flint and strength of solid iron...”

T. LUCRETII CARI DE RERUM NATURA *Liber Primus.*



ENEADUM genatrix, hominum di-
vumque voluptas,
Alma Venus, coeli subter labentia
signa
Quae mare navigerum, quae terras fru-
giferentis.

Concelebras : per te quoniam genus omne animantium
Concipitur, visusque exortum lumina solis :
Te, Dea, te fugiunt venti, te nubila coeli,
Advenantque tuum : tibi sitaveis dædala tellus
Summittit flores, tibi rident aequora ponti,
Placatumque nitet diffuso lumine coelum.
Num simul ac species patefacta 'st verna diei,
Et referata viget genitabilis aura Favoni :
Aeris primum volucres te, diva, tuumque
Significant intum percussa corda tua vi,
Iude feræ pecudes perfructant pabula læta,
Et rapidos tranant amneis : ita capta lepore;
Ulectrisque tuis omnis natura animantium

B

Te

Atom:

Antoine Lavoisier (1743-1794)

Modern Kimyanın kurucusu; elementlerin kimyasal olarak daha alt bileşenlere ayrılamayacağını ve kimyasal reaksiyonlarda kütlenin korunduğunu buldu.



Antoine Lavoisier
1743-1794

John Dalton (1766-1844)

1805 yılında, İngilizce öğretmeni ve doğa bilimleri filozofu John Dalton, elementlerin tek tip atomlardan oluştuğunu ve bu atomların kimyasal bileşikleri oluşturmak için birbirine bağlanabildiğini önerdi.

Dalton modern atom teorisinin kurucusu olarak kabul edilir.



John Dalton
1766-1844

19. yy'da elementlerin atomlardan oluştuğu bilim dünyasında genel kabul görmüştür. Ama atomun ne olduğu hakkında ise hemen hemen hiçbirşey bilinmiyordu.

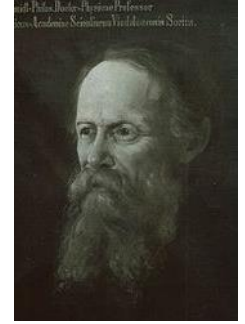
1905 *Brownian Motion*

Atom hipotezi için önemli destek sağlamıştır.

1912 *X-ışınları kırınımı*

Atom:

1865: Johann Josef Loschmidt havadaki moleküllerin yaklaşık çapını hesapladı.



Johann Josef Loschmidt
1821-1895

1827: Robert Brown mikroskop altında su içerisindeki toz parçacıklarının tamamen rastsal bir şekilde hareket ettiğini gözlemledi.

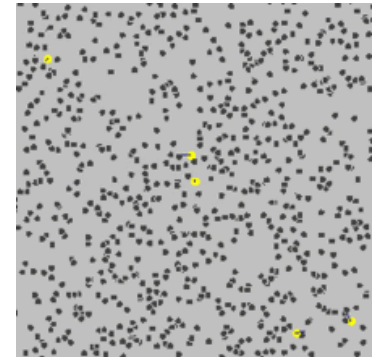


Robert Brown
1773-1858

1877: J. Desaulx bu rastsal hareketin su moleküllerinin termal hareketi sonucu olduğu hipotezini ortaya attı ve bu harekete **Brownian Motion** adını verdi.

1905: A. Einstein Brownian Motion'u tanımlayan matematiksel denklemleri geliştirdi.

1908: J. Perrin Einstein'ın matematiksel analizinin doğruluğunu deneysel olarak gösterdi. 1926'da bu çalışması sonucunda Nobel Fizik Ödülünü aldı.



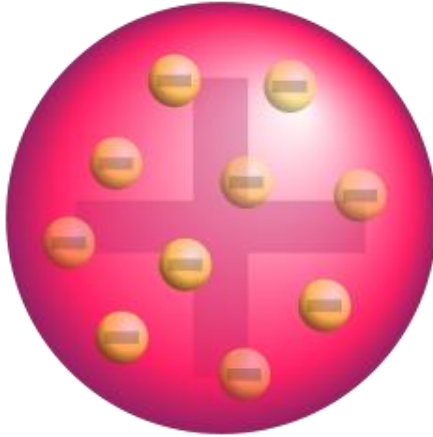
Temel Atom Modelleri

1897: J. J. Thompson katot ışınları üzerindeki çalışmaları sırasında elektronu keşfetti. Ve deney sonucunda tüm atomların elektron içerdiği sonucuna vardı.

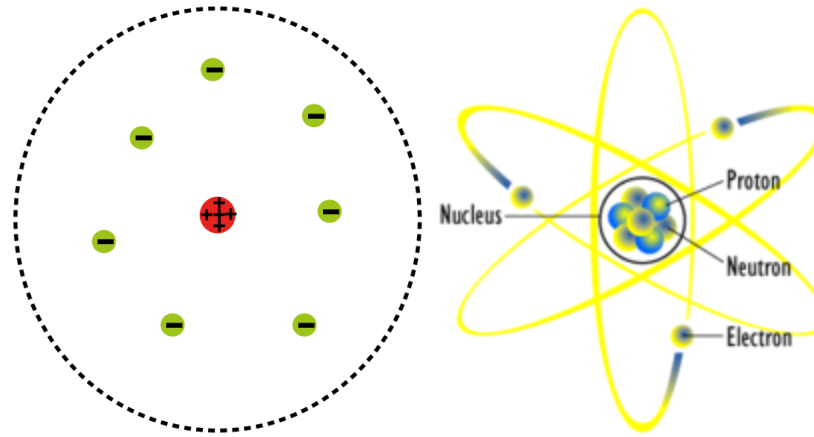


Joseph J. Thompson
1856-1940

Plum Pudding Modeli (1904)



Rutherford Modeli (1911)



Ernest Rutherford
1871-1937



Hans Geiger
1882-1945

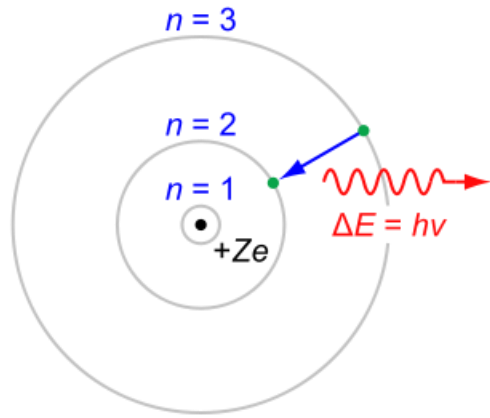


Ernest Marsden
1889-1970

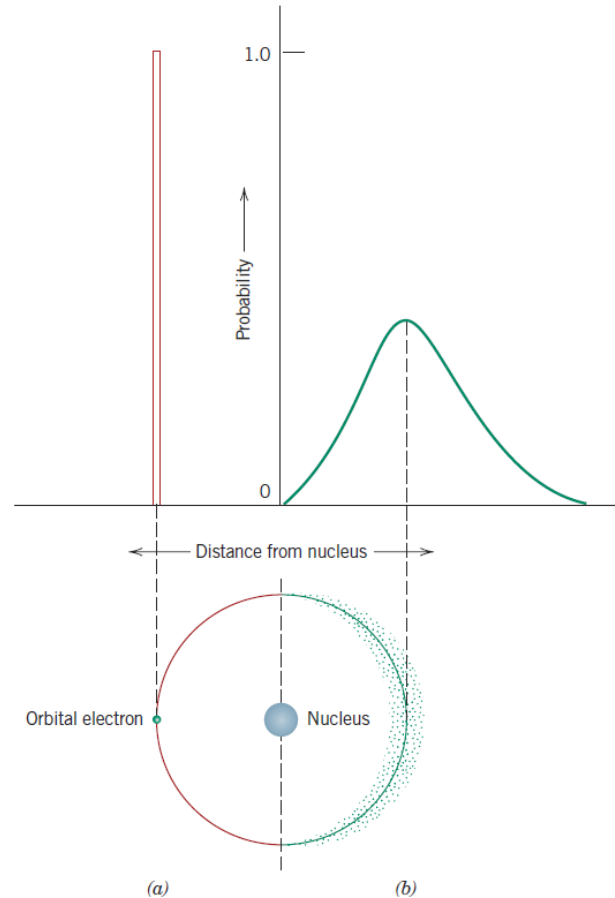
1909: Deneyler artı yüklerin atom içerisinde merkezde çok küçük bir bölgede yoğunlaştığını aynı zamanda bu bölgenin atomun toplam kütesinin neredeyse tamamını oluşturduğunu gösterdi.

Temel Atom Modelleri

Bohr Modeli (1913)



Kuantum (Dalga Mekanikği) Modeli



Kuantum sayıları Schrödinger denkleminin çözümü sonucu elde edilirler.

Max Planck (1858-1947)
Albert Einstein (1879-1955)

Niels Bohr (1885-1962)
Louis de Broglie (1892-1987)

Max Born (1882-1970)
Paul Dirac (1902-1984)

Werner Heisenberg (1901-1976)
Wolfgang Pauli (1900-1958)

Erwin Schrödinger (1887-1961)
Richard Feynman (1918-1988)



Temel Atom Modelleri

$$F = ma = m \frac{dv}{dt} = m \frac{d^2r}{dt^2}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r,t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r,t) \right] \Psi(r,t)$$

n: Birincil kuantum sayısı (1-7 arası değer alır)

l: İkincil kuantum sayısı

m_l: Miknatıssal kuantum sayısı

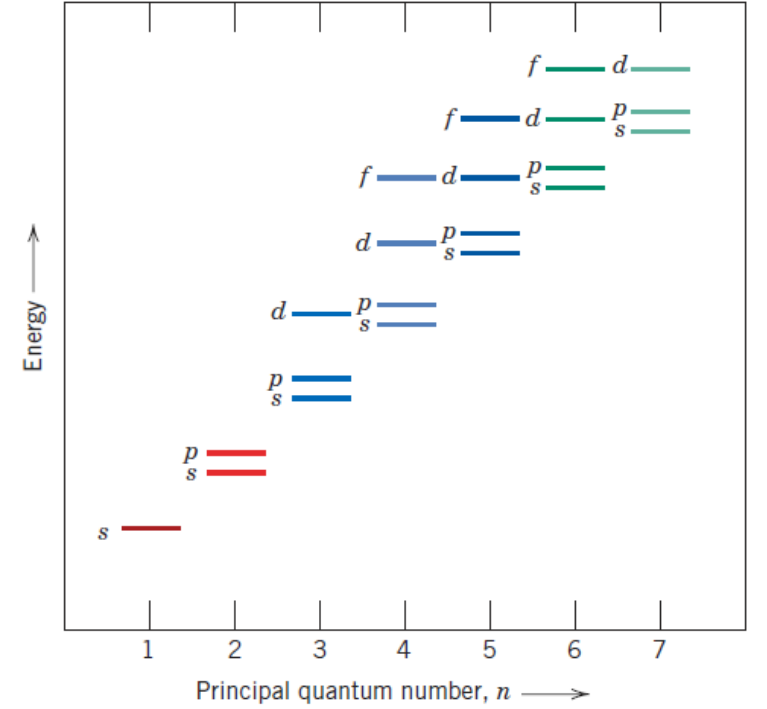
m_s: Döngü kuantum sayısı

Değerlilik (Valance) Elektronu: En dış yörüngedeki elektrondur ve atomlar arası bağlardaki rolü nedeni ile çok önemlidirler.

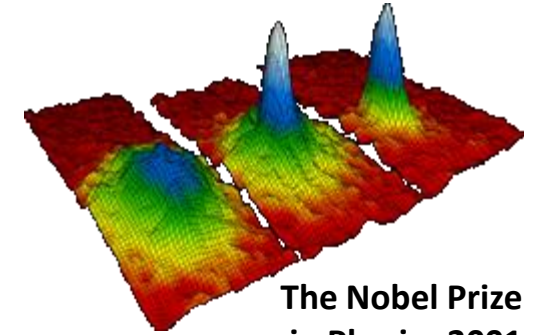
Pauli Dışlama Prensi: Bir atom içerisinde aynı kuantum durumunda (dört kuantum sayısı) birden fazla elektron bulunamaz.

Heisenberg Belirsizlik İlkesi: Bir atomik parçacığın yeri ve momentumu aynı anda belirlenemez.

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}; \quad \hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

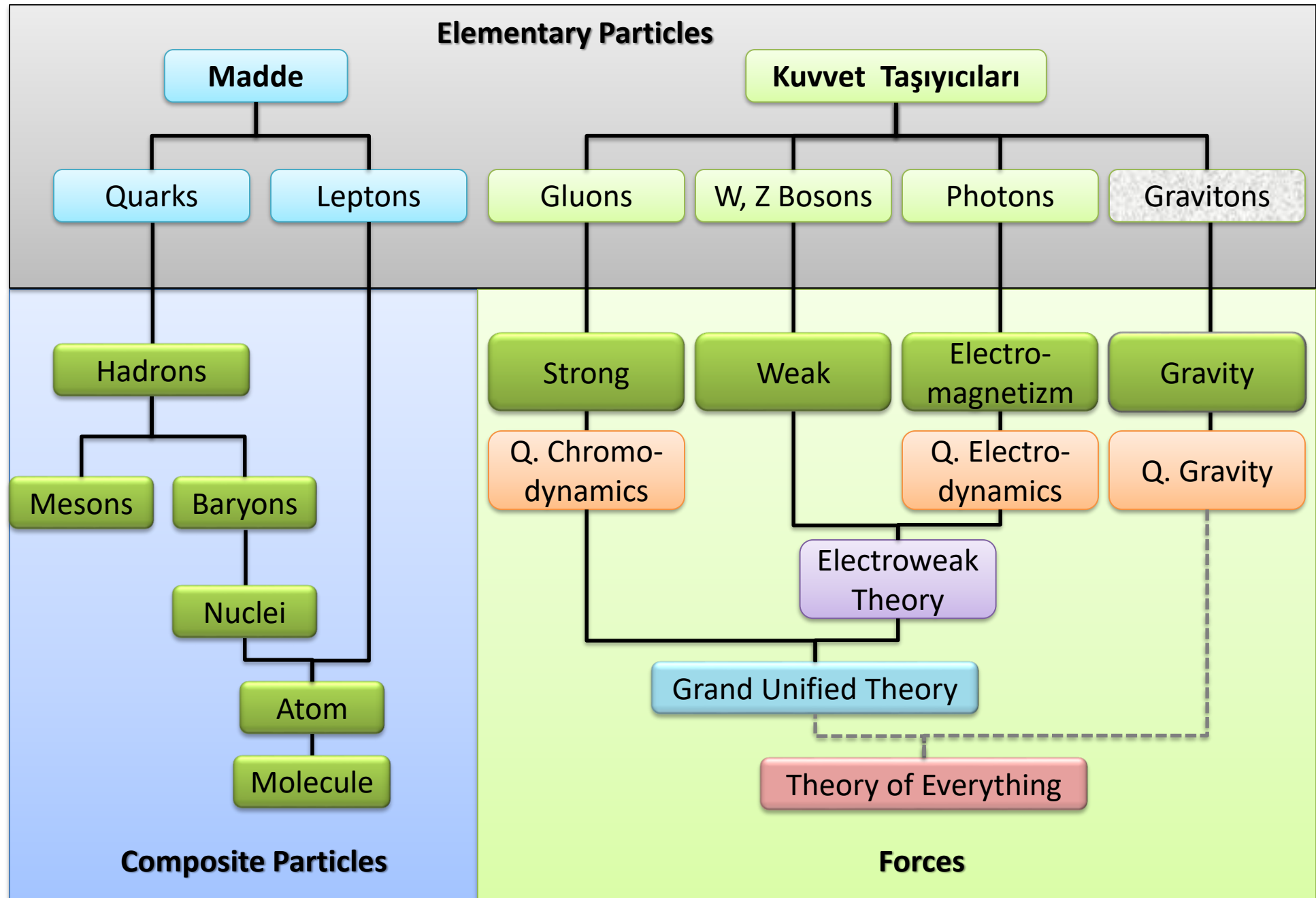


Bose-Einstein Condensatı



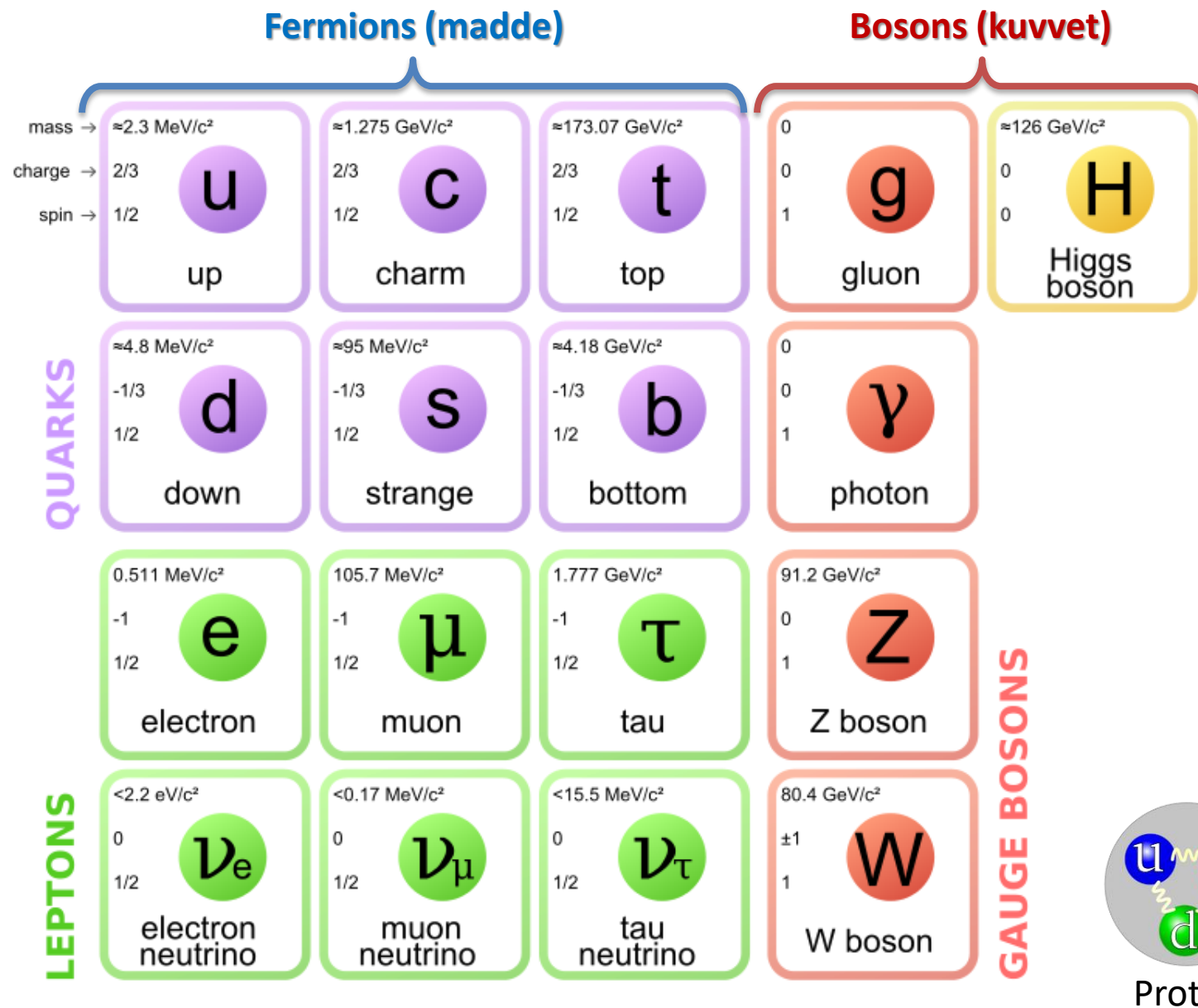
The Nobel Prize
in Physics 2001

<https://www.youtube.com/watch?v=nAGPAb4obs8>



ATOM YAPISI ve ATOMLAR ARASI BAĞLAR

Standart Model



Enrico Fermi
1901-1954



Satyendra N. Bose
1894-1974

Temel Kavramlar

Atom Yapısı

Elektron, proton, nötron, atom, kuantum mekaniği, elektron durumları, periyodik tablo

Atom = Çekirdek + Elektron

Atom = Çekirdek (Proton + Nötron) + Elektron

Kütleleri:

Elektron 9.109×10^{-31} kg

Proton 1.673×10^{-27} kg

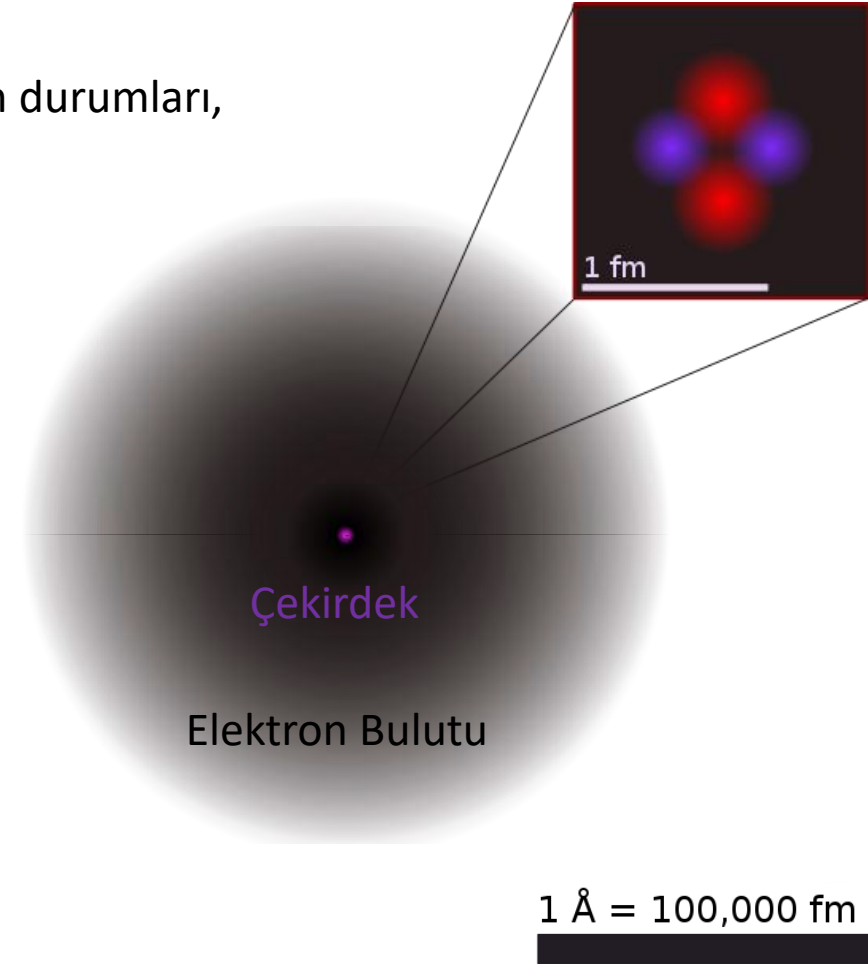
Nötron 1.675×10^{-27} kg

Elektrik Yükleri:

Elektron -1.6×10^{-19} Coulomb (C)

Proton $+1.6 \times 10^{-19}$ Coulomb (C)

Nötron yüksüz



He atomu

Temel Kavramlar

Atom Sayısı: proton sayısı (yüksüz bir atomda elektron sayısı)

H için 1

U için 92

Atom Kütlesi: Çekirdek içerisindeki Proton ve Nötronların kütleleri toplamı

$$A \cong Z + N$$

Atom Kütle Birimi (u): ^{12}C atomunun kütlelerinin 1/12'sidir.

İzotop: Belirli bir kimyasal elementin (nötron sayıları farklı) türevleridir .

Bir elementin atom ağırlığı: Doğal izotoplarının atom kütlelerinin ağırlıklı ortalamasıdır.

$$m_E = \sum_{i=1}^n (X_i \cdot m_{E_i})$$

Karbon Atomu ve İzotopları

Carbon-12	
Full table	
General	
Name, symbol	Carbon, ¹² C
Neutrons	6
Protons	6
Nuclide Data	
Natural abundance	98.89%
Half-life	Stable
Isotope mass	12 u
Spin	0
Excess energy	0 ± 0 keV
Binding energy	92,161.753 ± 0.014 keV

Carbon-13	
Full table	
General	
Name, symbol	Carbon-13, ¹³ C
Neutrons	7
Protons	6
Nuclide data	
Natural abundance	1.109%
Isotope mass	13.00335 u
Spin	-½

Carbon-14	
Full table	
General	
Name, symbol	radiocarbon, ¹⁴ C
Neutrons	8
Protons	6
Nuclide data	
Natural abundance	1 part per trillion
Half-life	5,730 ± 40 years
Isotope mass	14.003241 u
Spin	0+
Decay mode	Decay energy
Beta	0.156476 ^[1] MeV

$$m_C = 0.9889 \times 12 + 13.00335 \times 0.0111 = 12.011$$

Temel Kavramlar

Avogadro sayısı: $6.02214129 \times 10^{23}$

1811 yılında, *Amedeo Avogadro*: Bir gazın hacmi (belirli bir basınç ve sıcaklıkta) niteliğine bakılmaksızın atom ya da molekül sayısı ile orantılıdır.



Amedeo Avogadro
1776-1856

1909 yılında Fransız fizikçi *Jean Perrin* (Fizik 1926 Nobel Ödülü) tarafından Avogadro onuruna sabit adlandırma önerilmiştir.



Jean Perrin
1870-1942

Mol: gram cinsinden kütlenin atomların atomik kütesine (u) eşit olduğu madde miktarıdır.

1 mol karbon (C) 12 gramlık bir kütleyle sahiptir.

1 mol içerisindeki atom sayısı Avogadro Sayısı (6.022×10^{23} atom/mol) kadardır.

$$1 \text{ u/atom} = 1 \text{ gram/mol}$$

Örnek:

Atom ağırlığı verilen bir element için atomlarının gram cinsinden kütlesi nedir?

$$m_{Fe} = 55.845 \text{ gr/mol}$$

$$m_{Fe} = \frac{55.845 \text{ g/mol}}{6.022 \times 10^{23} \text{ atom/mol}} = 9.273 \times 10^{-23} \text{ g/atom}$$

Atom ağırlığı ve yoğunluğu verilen bir elementin 1 cm³'ünde kaç atom bulunur?

Atom ağırlığı ve yoğunluğu verilen bir elementin atomları arasındaki ortalama uzaklık ne kadardır?

ATOM YAPISI ve ATOMLAR ARASI BAĞLAR

Periyodik Tablo

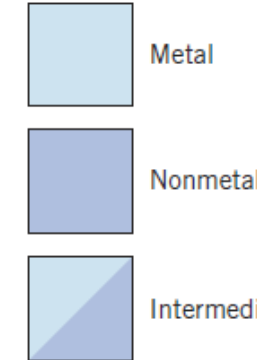
1869, Dmitri Ivanovich Mendeleev

4/1/1869
31,5
11°
2-1/18
1/2 6/1
G=52?
2-1/18
2-1/18
G=72

Letonca Arada
G = 51.3
Zn = 35.9? 2/18
Al = 74.2
Fe = 55.8
Mn = 54.9
Ni = 58.7
Cu = 63.5
Zn = 65.4
Ga = 70
Ge = 72.6
As = 74.9
Se = 78.9
Br = 79.9
Kr = 83.8
Rn = 222

Key

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



IA		IIA										0							
1	3	4											5	6	7	8	9	10	
H	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
1.0080	6.941	9.0122											10.811	12.011	14.007	15.999	18.998	20.180	
11	12							VIII						13	14	15	16	17	18
Na	Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B					IB	IIB	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
22.990	24.305													26.982	28.086	30.974	32.064	35.453	39.948
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
39.098	40.08	44.956	47.87	50.942	51.996	54.938	55.845	58.933	58.69	63.54	65.41	69.72	72.64	74.922	78.96	79.904	83.80		
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
85.47	87.62	88.91	91.22	92.91	95.94	(98)	101.07	102.91	106.4	107.87	112.41	114.82	118.71	121.76	127.60	126.90	131.30		
55	56	Rare earth series		72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
Cs	Ba			Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
132.91	137.34			178.49	180.95	183.84	186.2	190.23	192.2	195.08	196.97	200.59	204.38	207.19	208.98	(209)	(210)	(222)	
87	88	Actinide series		104	105	106	107	108	109	110									
Fr	Ra			Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds									
(223)	(226)			(261)	(262)	(266)	(264)	(277)	(268)	(281)									

Rare earth series

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
138.91	140.12	140.91	144.24	(145)	150.35	151.96	157.25	158.92	162.50	164.93	167.26	168.93	173.04	174.97

Actinide series

89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
(227)	232.04	231.04	238.03	(237)	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(258)	(259)	(262)

ATOM YAPISI ve ATOMLAR ARASI BAĞLAR

Gerçek Periyodik Tablo

	s ¹ s ²												p ¹ p ² p ³ p ⁴ p ⁵ p ⁶																			
1	1 H	2 He																														
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne														
3	11 Na	12 Mg											d ¹ d ² d ³ d ⁴ d ⁵ d ⁶ d ⁷ d ⁸ d ⁹ d ¹⁰										13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar				
4	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				
5	37 Rb	38 Sr	f ¹	f ²	f ³	f ⁴	f ⁵	f ⁶	f ⁷	f ⁸	f ⁹	f ¹⁰	f ¹¹	f ¹²	f ¹³	f ¹⁴	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
6	55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	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
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo

Alkali metals	Alkaline earth metals	Lanthanides	Actinides	Transition metals
Poor metals	Metalloids	Nonmetals	Halogens	Noble gases

State at standard temperature and pressure

Atomic number in **red**: gas

Atomic number in **blue**: liquid

Atomic number in black: solid

solid border: at least one isotope is older than the Earth (Primordial elements)

dashed border: at least one isotope naturally arise from decay of other chemical elements and no isotopes are older than the earth

dotted border: only artificially made isotopes (synthetic elements)

no border: undiscovered

Periyodik Tablo

Elektronegatiflik: bir atomun elektronları kendisine çekme derecesi olarak tanımlanabilir.

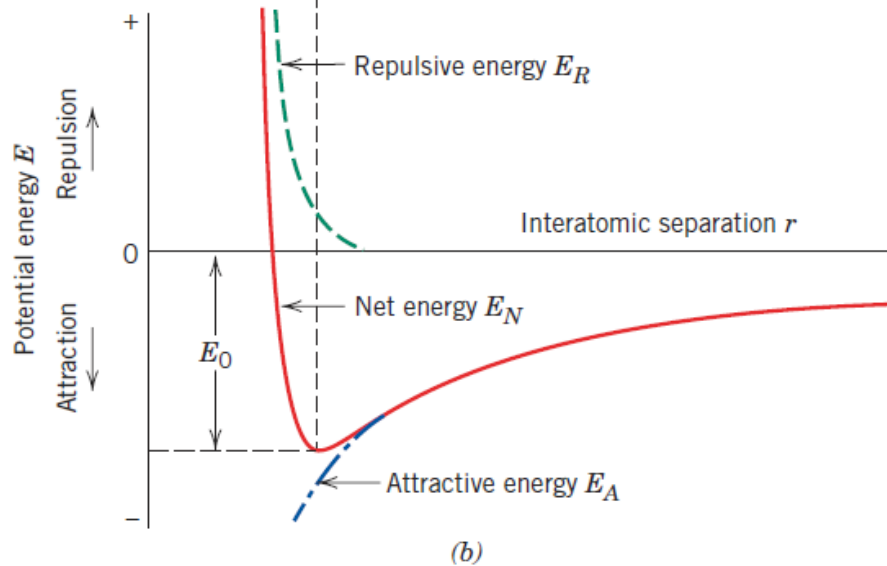
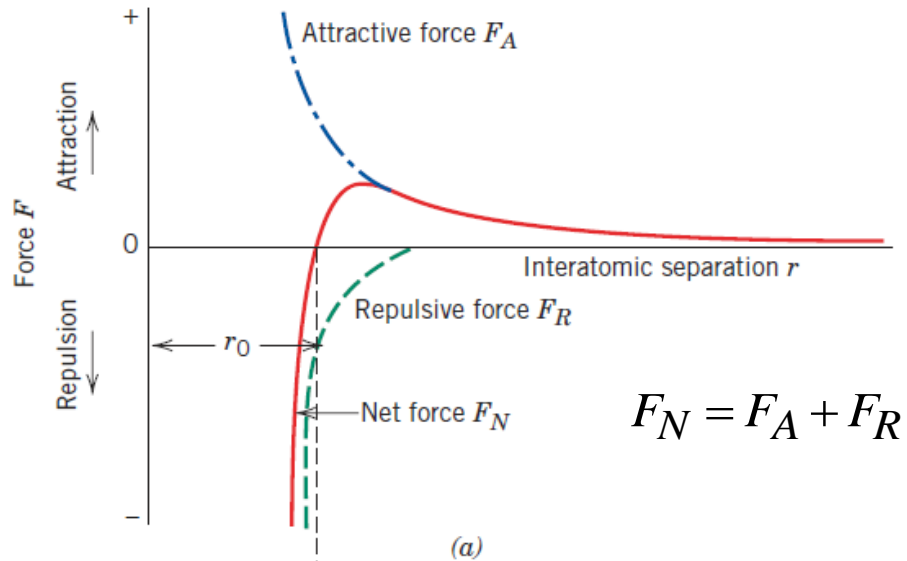
IA 1 H 2.1	IIA												0 2 He -				
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2	III B	IV B	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 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															



Elektropozitif

Elektronegatif

Atomlar Arası Bağlar



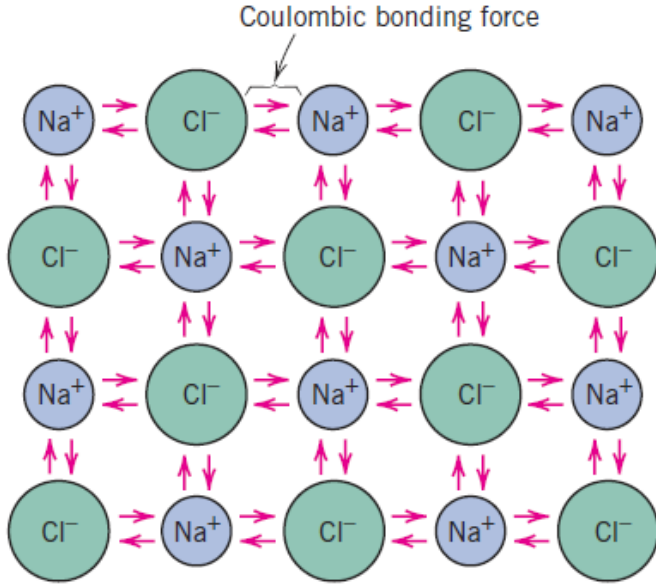
$$\begin{aligned}
 E_N &= \int_{\infty}^r F_N dr \\
 &= \int_{\infty}^r F_A dr + \int_{\infty}^r F_R dr \\
 &= E_A + E_R
 \end{aligned}$$

$$F_A = -\frac{A}{r}$$

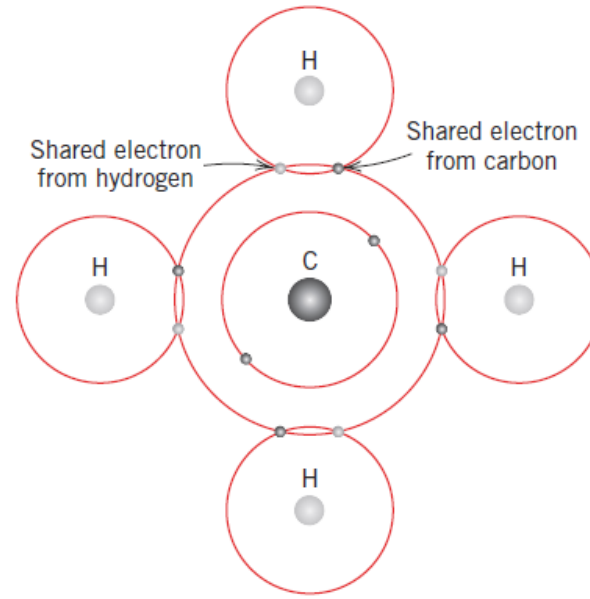
$$F_R = \frac{B}{r^n}$$

Atomlar Arası Bağlar

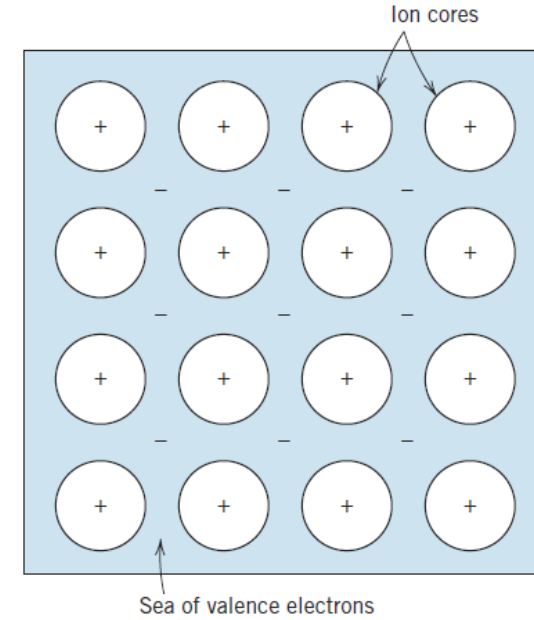
Birincil Atom Bağları



İyonik

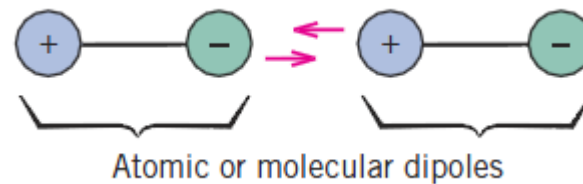


Kovalent



Metalik

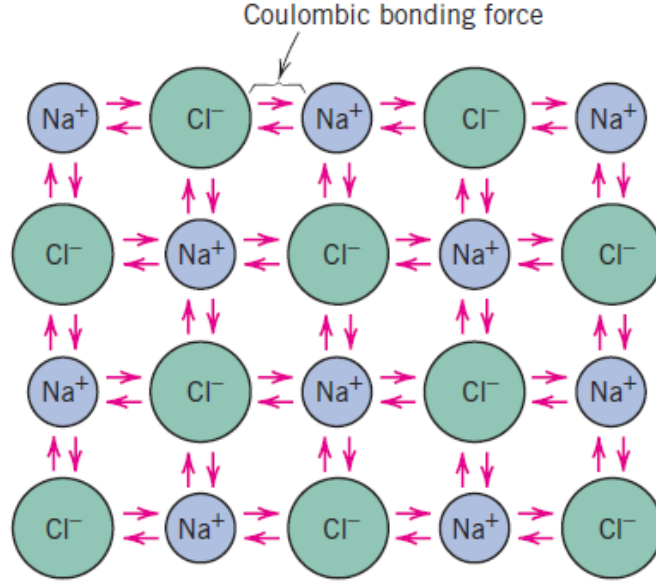
İkincil Atom Bağları



van der Waals

Atomlar Arası Bağlar

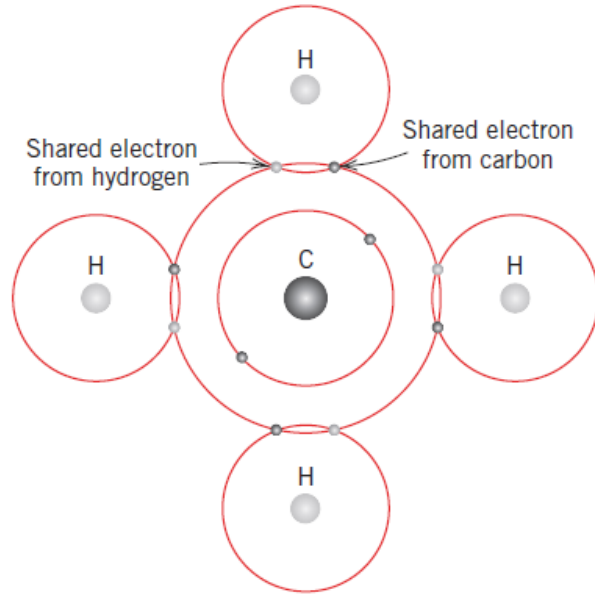
Birincil Atom Bağları: 1. İyonik Bağ



- Elektron transferi gerekir;
- Sonuçta + ve – yüklü iyonlar oluşur;
- Çekim kuvveti (Coulombic) tir;
- Yüksek elektropozitif (metalik) elementler ile yüksek elektronegatif (metal olmayan) elementler arasında oluşur;
- Nispeten kuvvetlidir;
- Yön bağımsızdır (izotropik);
- İyonik malzemeler sert, kırılğan, elektrik ve ısı iletimi düşüktür.

Atomlar Arası Bağlar

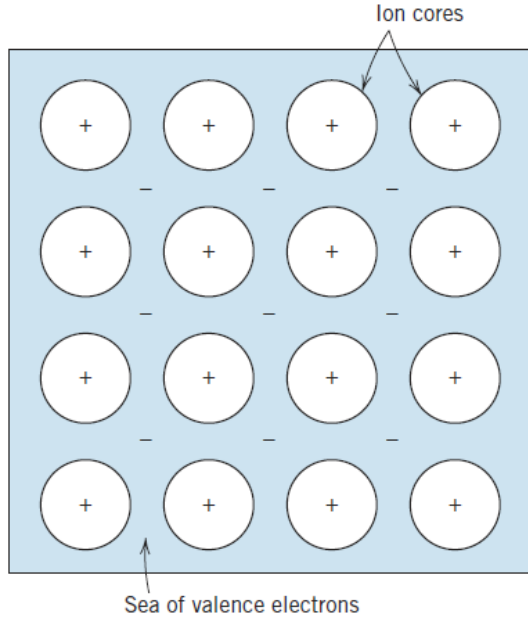
Birincil Atom Bağları: 2. Kovalent Bağ



- Elektronlar ortak kullanılır;
- Ortak kullanılan atomlar her iki atomda ait olurlar;
- Kovalent bağ sayısı değerlilik elektronlarının sayısına bağlıdır ($8-N'$);
- Yön bağımlıdır (izotropik değildir);
- Kovalent malzemelerin bağ enerjileri çok yüksek ve çok düşük olabilir.

Atomlar Arası Bağlar

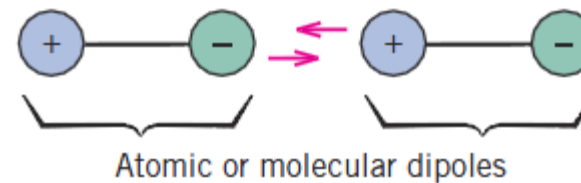
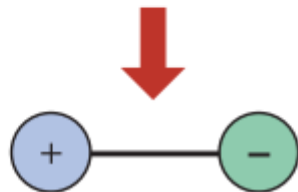
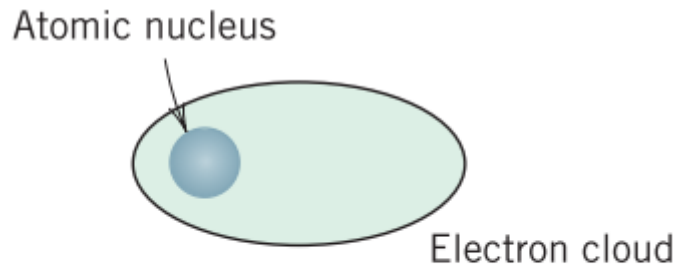
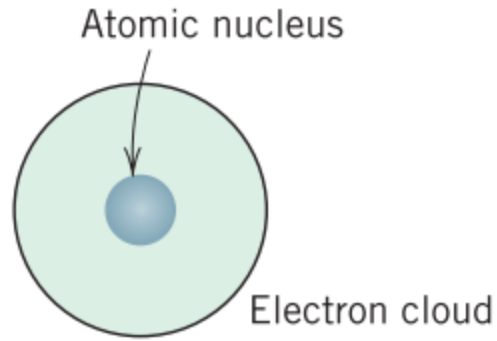
Birincil Atom Bağları: 3. Metalik Bağ



- Değerlik elektronları atomlardan ayrılarak bir elektron denizi oluşturur;
- Bu elektron denizi pozitif metal iyonlarını bir arada tutar;
- Atomların hareketi ile bağlar kopmaz bu nedenle ciddi miktarda plastik deformasyona uğrarlar ve sünekler;
- Yön bağımsızdır (izotropik);
- Elektrik ve ısı iletimi çok yüksektir.
- Cu, Al, Au, Ag vb.
- Transition metalleri metalik bağ yanında kovalent bağda yaparlar bu nedenle daha kırılğındırlar.

Atomlar Arası Bağlar

İkincil Atom Bağları: 1. van der Waals Bağları



- Tüm atom ve moleküller arasında bulunur;
- Birincil bağların bulunması nedeni ile engellenebilirler;
- Atomlar ve moleküller arasındaki elektrik çift-kutuplar sonucu oluşurlar;
- Yön bağımlıdır (izotropik değildir);
- Bağ enerjileri çok düşüktür.

Atomlar Arası Bağlar

Bağ Tipi	Bağ Enerjisi	Yorumlar	Bağ Enerjisi (kcal/mol)
<i>İyonik</i>	Büyük!	Yön bağımsız (seramikler)	150-370
<i>Kovalent</i>	Değişken Büyük-Elmas Küçük-Bizmut	Yön bağımlı Yarı iletkenler, seramikler Polimer zinciri	125-300
<i>Metalik</i>	Değişken Büyük-volfram Küçük-Civa	Yön bağımsız (metaller)	25-200
<i>İkincil</i>	En küçük	Yön bağımlı Zincirler arası (polimer) moleküller arası	<10

Atomlar Arası Bağlar

Table 2.3 Bonding Energies and Melting Temperatures for Various Substances

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<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
	W	849	8.8	3410
van der Waals	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

1 cal = 4.184 J

Önümüzdeki Ders Saatinde
Ders Kitabımızın 3. Bölümündeki
KRİSTALLİ KATILARIN YAPILARI
adlı konuya başlayacağız!