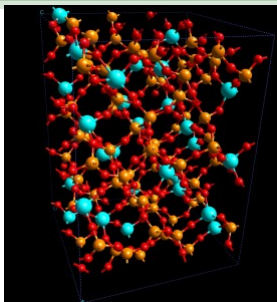




Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης
Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
Προπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών Τμήματος ΗΜΜΥ
Ακαδ. Έτος 2023-2024

ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ

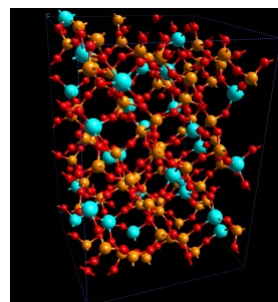


Διάλεξη 2
Αρχές κβαντομηχανικής - Θεωρία
Δεσμών

1

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

- Εισαγωγικά κβαντομηχανικά στοιχεία
- Χημικοί δεσμοί
- Ατομικές δυνάμεις
- Τύποι υλικών



Για την κατανόηση των δεσμών απαιτούνται
βασικά κβαντομηχανικά στοιχεία

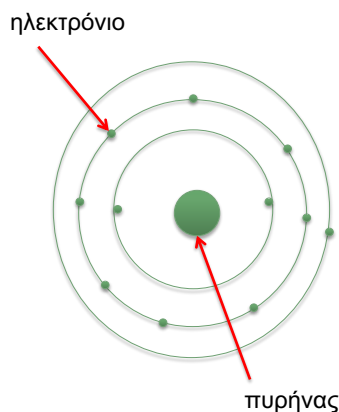
2

Ιστορία της κβαντομηχανικής

- Πρόβλημα μέλανος σώματος
- Θεώρηση του Planck - κβαντισμένα ποσά ενέργειας για την αλληλεπίδραση ακτινοβολίας - ύλης
- Εξήγηση φωτοηλεκτρικού φαινομένου Einstein: δυσμός του φωτός, κβαντισμός της ενέργειας και στην ίδια την ακτινοβολία, έννοια της ορμής των φωτονίων, δυσμός του φωτός
- Θεωρία του ατόμου του Bohr: κβαντισμός ενεργειακών σταθμών του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα
- Εξίσωση Schrödinger: κυματική εξίσωση της ακτινοβολίας

3

Άτομο του Bohr



- **Βασικές παραδοχές:**
 - Δεν μπορεί το ηλεκτρόνιο να καταλαμβάνει όποια ενέργεια θέλει. Μόνο συγκεκριμένες
 - Μηδενική θεωρείται η ενέργεια του ηλεκτρονίου που δεν είναι δεσμευμένο με το άτομο. Άρα όταν είναι δεσμευμένο σε ένα τροχιακό του ατόμου, απαιτείται θετική ενέργεια για να αποδεσμευτεί. Συνεπώς έχει αρνητική ενέργεια (σύμβαση)
- **Αυτό είναι το άτομο του Bohr, το οποίο όμως δεν ισχύει!!**
- 1) Σύμφωνα με το παραπάνω, η θέση και η ενέργεια ενός ηλεκτρονίου είναι γνωστά (Πρόβλημα η αρχή της απροσδιοριστίας του Heisenberg)
- 2) Τι συμβαίνει με την ακτινοβολία αφού επιταχύνεται συνεχώς;
- 3) Όταν μεταβαίνει από ενέργεια σε ενέργεια γιατί δεν ακτινοβολεί σε όλες τις συχνότητες;

4

Βασικές εξισώσεις

- Σχέσεις De Broglie $p = \frac{h}{\lambda}$ $E = hf$ ή ισοδύναμα $p = \hbar k$ $E = \hbar \omega$

Σύνδεση μεταξύ σωματιδιακών (ορμή) και κυματικών (μήκος κύματος) ιδιοτήτων

Κβαντισμένες συχνότητες σε κύματα υπάρχουν στην κλασσική θεωρία;

Θυμηθείτε την εξίσωση του κύματος σε μία διάσταση

$$E(x, t) = E_0 \sin(kx - \omega t)$$

Κυματοσυνάρτηση ηλεκτρικού πεδίου

Πειραματικά μετράμε μόνο την ένταση $|E(x, t)|^2$

5

Εξίσωση του Schrödinger

- Χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger σε μία διάσταση

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

Κινητική ενέργεια

Δυναμική ενέργεια

Ολική ενέργεια

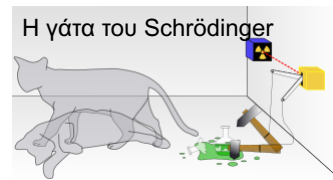
Σε τρεις διαστάσεις χρησιμοποιούμε τον τελεστή Laplace $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Ο υπολογισμός της συνάρτησης $|\psi(x, y, z)|^2$ από τη λύση της εξίσωσης μας δίνει την κατανομή πιθανότητας στο χώρο και την ενέργεια του ηλεκτρονίου κάτω από ένα δυναμικό $V(x, y, z)$ (**Ισοδύναμο του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα**)

6

Κυματοσυνάρτηση

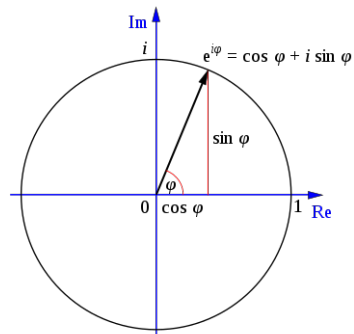
- Κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{t})$ είναι μιγαδική (άρα μη πραγματική)
 - Το μέγεθος $|\psi(x, y, z, t)|^2$ εκφράζει την πιθανότητα να βρίσκεται ένα σωματίδιο σε χρόνο t σε συγκεκριμένο όγκο $d\mathbf{x}d\mathbf{y}d\mathbf{z}$
- Λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger μπορεί να προκύψει από την υπέρθεση διαφορετικών κυμάτων



7

Μικρή παρένθεση!

- Η εξίσωση του Euler



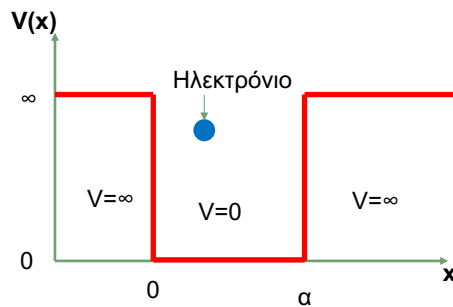
$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$$

8

Πηγάδι δυναμικού

- Επίλυση της εξίσωσης του Schrodinger ηλεκτρονίου σε πηγάδι δυναμικού ($V=0$)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E\psi(x) = 0$$



Λύσεις της μορφής:

$$\psi(x) = Ae^{jkx} + Be^{-jkx}$$

Οριακές συνθήκες:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(\alpha) = 0$$

Λόγω της πρώτης συνθήκης $A=-B$ και άρα

$$\psi(x) = 2A\sin(kx)$$

Αν αντικαταστήσουμε την $\psi(x)$ στην εξίσωση του Schrodinger

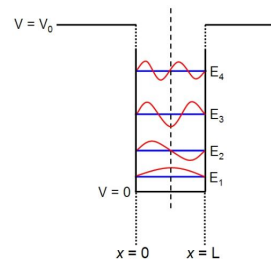
$$-2Aj^2k^2 \sin(kx) + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)E(2A\sin(kx)) = 0$$

9

Πηγάδι δυναμικού

- Για την ενέργεια προκύπτει ότι $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ και ισοδύναμα για την ορμή $p = \pm \hbar k$
- Λόγω της δεύτερης οριακής συνθήκης $\psi(\alpha) = 2A\sin(k\alpha) = 0$ και συνεπώς $k = \frac{n\pi}{\alpha}$ όπου $n=1,2,3,4,\dots$
- Συνεπώς οι δυνατές ενέργειες (ιδιοτιμές ενέργειας) θα είναι

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}$$



The Infinite Square Well Potential

10

Φαινόμενο σήραγγας

- Όταν μία κυματοσυνάρτηση με ενέργεια E οδεύει προς ένα εμπόδιο δυναμικού V_0 (όπου $E < V_0$) τότε υπάρχει πιθανότητα T να διέλθει μέσα από αυτό!

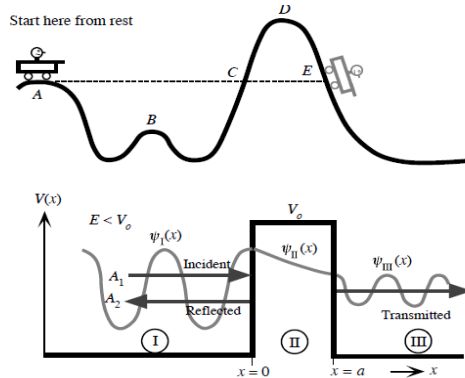
Αποδεικνύεται ότι

$$T = T_0 \exp(-2K_2 a)$$

Όπου

$$T_0 = \frac{16(V_0 - E)}{V_0^2}$$

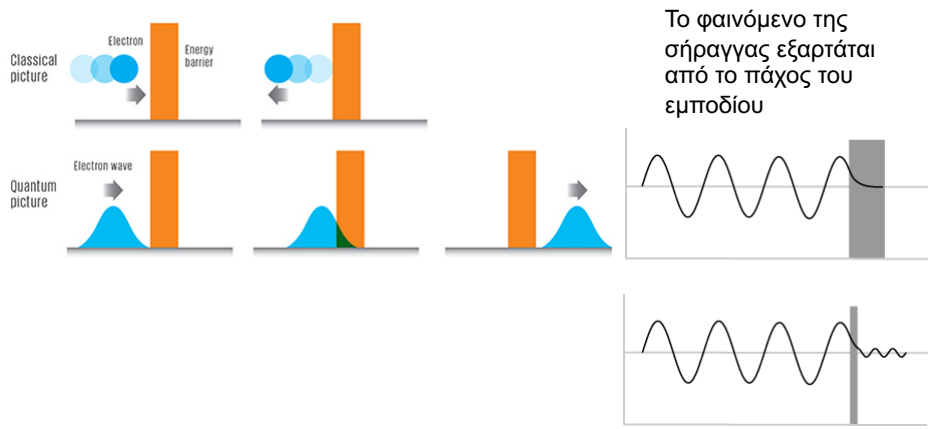
$$\text{και } K_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)(2\pi)^2}{h^2}}$$



11

Φαινόμενο σήραγγας

- Εφαρμογές: Ηλεκτρονική μικροσκοπία, μνήμες flash, δίοδοι σήραγγας, τρανζίστορ σήραγγας,



12

Κουτί δυναμικού

- Τι θα συμβεί σε ένα κουτί δυναμικού (έστω κύβος πλευράς a);
- Μπορεί εύκολα να αποδειχθεί ότι οι ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές ενέργειας θα είναι

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = A \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{a}\right)$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{h^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)}{8m a^2}$$

Ερωτήσεις:

- Ποια είναι η χαμηλότερη ενέργεια που μπορεί να πάρει το ηλεκτρόνιο;
- Ποια η διαφορά της ψ_{121} και ψ_{211} ή ψ_{112} ;

13

Αρχή απροσδιοριστίας Heisenberg

- Αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg
 - Δεν μπορούμε ταυτόχρονα να γνωρίζουμε και την θέση και την ορμή ενός σωματιδίου

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \quad \text{ή} \quad \Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$$

- Αν δηλαδή γνωρίζουμε την ορμή του με ακρίβεια τότε δεν ξέρουμε που βρίσκεται!
- Επίσης, αν προσδιορίσουμε με ακρίβεια τη θέση του τότε θα έχει αποκτήσει τεράστια ορμή!

14

Άτομο υδρογόνου

Σε μία διάσταση, χωρίς εξάρτηση από το χρόνο:
$$-\frac{\hbar}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Στο Υδρογόνο ο πυρήνας δημιουργεί ηλεκτρικό πεδίο
$$V(r) = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Αν επιλυθεί η εξίσωση του Schrodinger για ένα υδρογονοειδές άτομο σε σφαιρικές συντεταγμένες προκύπτουν 3 κβαντικοί αριθμοί N, l, m_l .

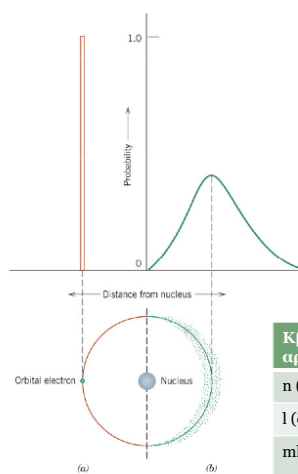
Η κυματοσυνάρτηση Ψ_{n,l,m_l} ονομάζεται τροχιακό (orbital) και χαρακτηρίζεται από ορισμένη ενέργεια E που ονομάζεται ενεργειακή στάθμη (ή ενεργειακή κατάσταση)

Έτσι προκύπτουν οι στοιβάδες, υποστοιβάδες, τροχιακά

Το $|\Psi_{n,l,m_l}(x,y,z)|^2$ δίνει την **πιθανότητα** να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στη θέση με συντεταγμένες r, θ, ϕ

15

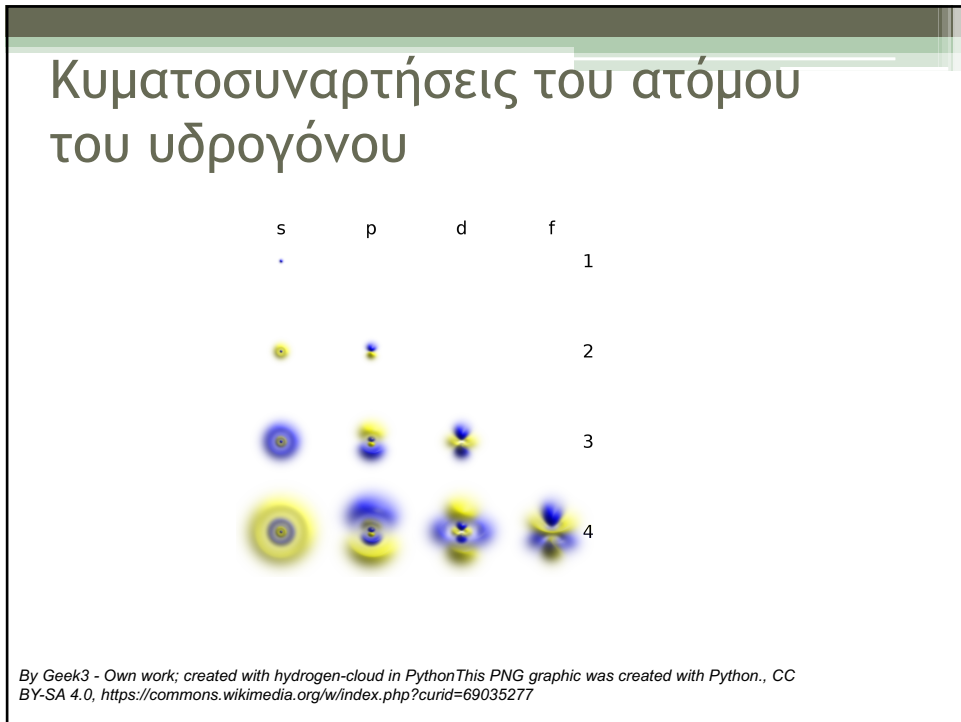
Άτομο υδρογόνου



- Κάθε ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε διαφορετική ενεργειακή κατάσταση που περιγράφεται με 3 κβαντικούς αριθμούς που καθορίζουν το μέγεθος, σχήμα και το χωρικό προσανατολισμό της πυκνότητας της πιθανότητας ενός ηλεκτρονίου.

Κβαντικός αριθμός	Εκφράζει	Τιμές	Ονομασία
n (κύριος)	Στοιβάδα	1, 2, 3, ...	K, L, M, N, ..
l (δευτερεύων)	Υποστοιβάδα	0, 1, 2, 3, ..., $n-1$	s, p, d, f, ...
m_l (μαγνητικός)	Τροχιακό	-1, ..., +1	Για την υποστοιβάδα p (px, py, pz)
m_s (περιστροφή)	Ιδιοπεριστροφή	$1/2, -1/2$	

16



17



18

Τιμές ενέργειας στο άτομο του υδρογόνου

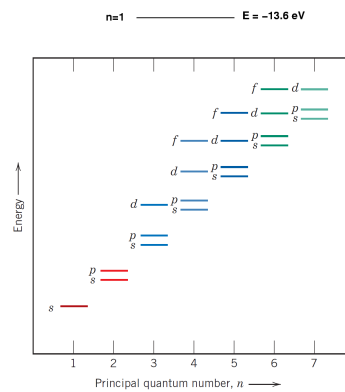
$n = \infty$	-----	$E = 0$
$n = 4$	=====	$E = -0.85 \text{ eV}$
$n = 3$	=====	$E = -1.51 \text{ eV}$
$n = 2$	=====	$E = -3.40 \text{ eV}$

Η μικρότερη ενέργεια που καταλαμβάνει ηλεκτρόνιο ενός ατόμου υδρογόνου είναι 13.6 eV.

Σκεφτείτε ότι η ενέργεια του περιβάλλοντος σε θερμοκρασία δωματίου (300 K) είναι περίπου 26 meV.

Πόσο μεγάλη είναι η πιθανότητα να διεγερθεί ένα άτομο υδρογόνου σε θερμοκρασία δωματίου;

Τι μας λέει για τη σταθερότητα της φύσης;



19

Ηλεκτρονική διαμόρφωση ατόμων (παραδείγματα)

- Άνθρακας
 - Ατομικός αριθμός 6
 - $1s^2 2s^2 2p^2$ ή $[\text{He}] 2s^2, 2p^2$
- Πυρίτιο
 - Ατομικός αριθμός 14
 - $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ ή $[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$
- Πειραματιστείτε σίτι σας με τα παρακάτω
 - **P (Φώσφορος)**
 - **O (Οξυγόνο)**
 - **B (Βόριο)**

20

Periodic table of the elements

group	1*	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
	Ia**	IIa	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb	VIIIb	VIIIb	Ib	IIb	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0	
1	H																	He	
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg		(Uub)	(Uut)	(Uuq)	(Uup)	(Uuh)		
			lanthanide series																
			58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
			actinide series																
			90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

* Numbering system adopted by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC).
 ** Numbering system widely used, especially in the U.S., from the mid-20th century.
 *** Discoveries of elements 112–116 are claimed but not confirmed. Element names and symbols in parentheses are temporarily assigned by IUPAC.

© 2006 Encyclopædia Britannica, Inc.

21

ΔΕΣΜΟΙ ΑΤΟΜΩΝ

Γιατί τους μελετάμε? Καθορίζουν του τύπο του υλικού-επιηρεάζουν τις ιδιότητες

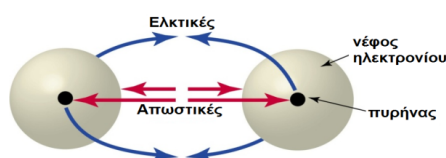
- Συμμετέχουν τα ηλεκτρόνια σθένους της εξωτερικής στοιβάδας (ηλεκτρόνια σθένους) για να βρεθούν σε ελάχιστη ενέργεια
- Έτσι κάθε άτομο έχει 8 ηλεκτρόνια στην εξωτερική στοιβάδα (ηλεκτρονική δομή ευγενών αερίων)

Τρεις τύποι δεσμών (κύριοι δεσμοί) ανάλογα με την ηλεκτρονική δομή των ατόμων :

1. Ιοντικός: μεταφορά ενός ή περισσότερων ηλεκτρονίων από ένα άτομο (μέταλλο) στο άλλο (αμέταλλο)
2. Ομοιοπολικός : μερικά ηλεκτρόνια σθένους μοιράζονται μεταξύ των ατόμων (αμέταλλα)
3. Μεταλλικός: τα ηλεκτρόνια σθένους είναι κοινά για όλα τα άτομα (ηλεκτρονικό νέφος στα μέταλλα)

Δυνάμεις δεσμών και ενέργειες


Ελκτικές Δυνάμεις Coulomb F_A
 Απωστικές Δυνάμεις: F_R
 Είναι πολύ ισχυρές σε μικρές αποστάσεις
 Η συνολική δύναμη F μεταξύ δύο ατόμων : $F = F_A + F_R$



Εργαλεία για υπολογισμούς: Ηλεκτρικές δυνάμεις- Ενέργεια
 Στοιχειώδεις έννοιες κβαντομηχανικής

22

Γενικά για κάθε τύπο δεσμού -Ενέργεια



Απόσταση r

Ηλεκτροστατική ενέργεια E

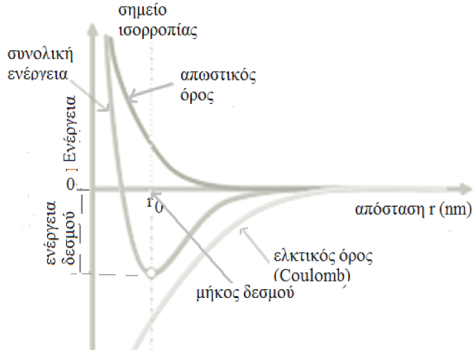
$$E = E_A + E_R = \frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

E_A και E_R : ελκτική και απωστική όπου A, B είναι σταθερές με $A, B > 0$ με $n < m$

Φυσική σημασία: η απωθητική δύναμη πρέπει να είναι μικρότερης εμβέλειας από την ελκτική (π.χ. στο δεσμό Van der Waals, $n=6$ και $m=12$)

$$F(r) = -\frac{\partial E(r)}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow r_0}$$

Μήκος δεσμού r_0




Ενέργεια δεσμού μεταξύ δύο ατόμων για κάθε τύπο δεσμού

23

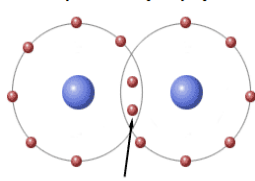
Τύποι Δεσμών

Ιοντικός δεσμός



ένα ηλεκτρόνιο μεταφέρεται


Ομοιοπολικός δεσμός



κοινό ζεύγος ηλεκτρονίων

Μεταλλικός δεσμός

ιοντικά κέντρα

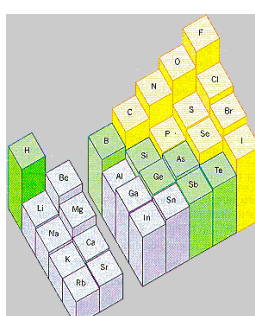


νέφος ηλεκτρονίων

*Ηλεκτροαρνητικότητα: μέτρηση της ικανότητας ενός ατόμου, μορίου να έλκει ηλεκτρόνια
 Ανάλογα με την τιμή στη διαφορά της ηλεκτροαρνητικότητας των ατόμων, ο δεσμός είναι:

- 1.7 - 4.0: Ιοντικός
- 0.3 - 1.7: Πολικός ομοιοπολικός
- 0.0 - 0.3: Μη-πολικός ομοιοπολικός

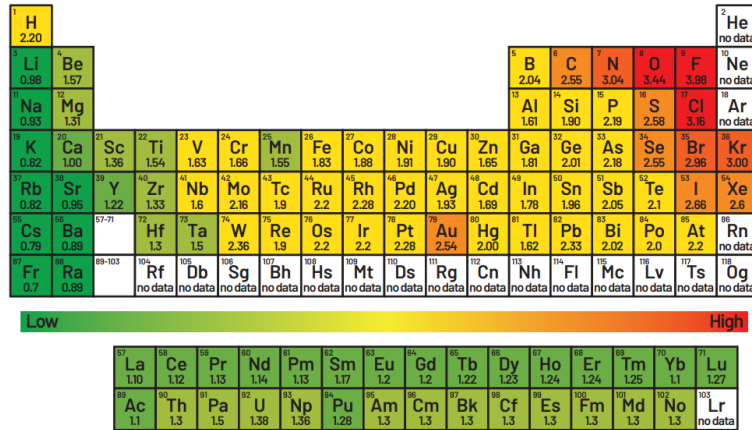
Πολικός ομοιοπολικός δεσμός : το κέντρο του θετικού φορτίου δεν συμπίπτει με του αρνητικού φορτίου

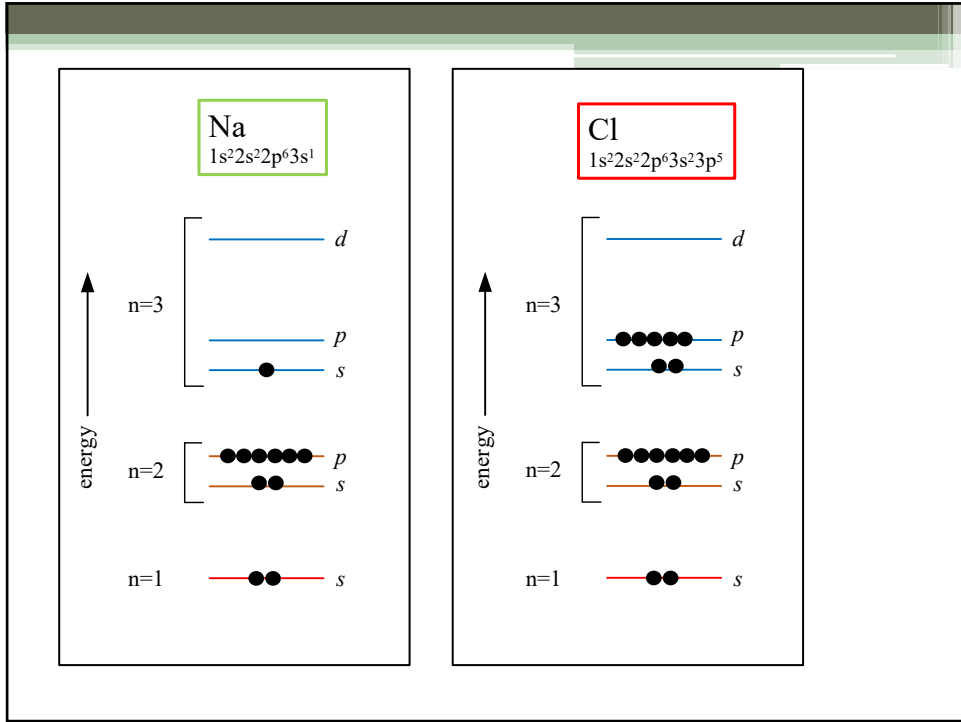


24

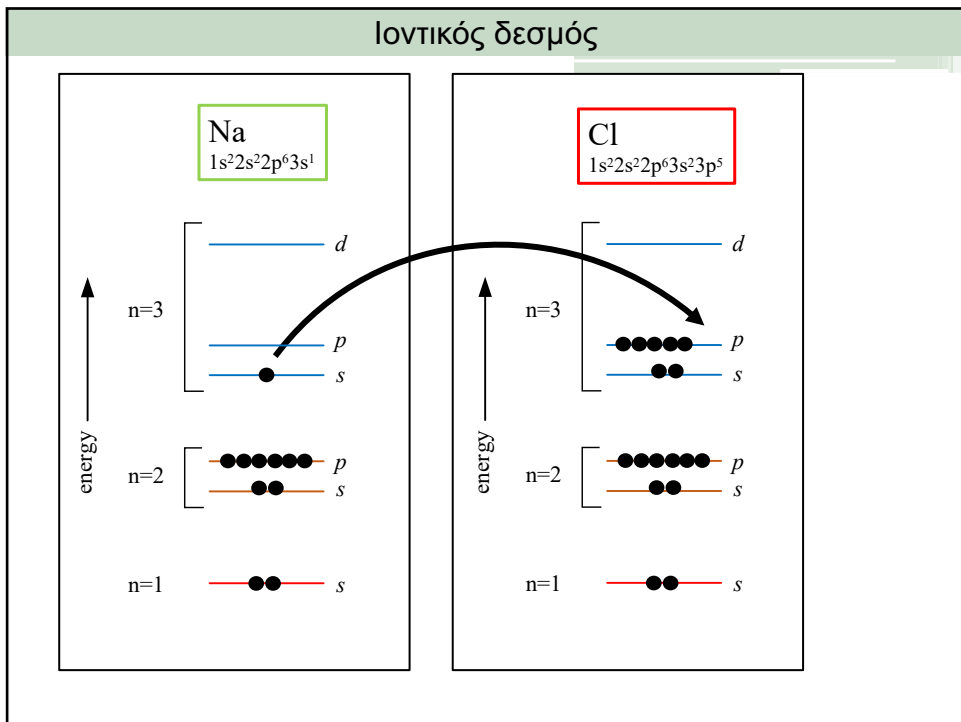
Ηλεκτραρνητικότητα

Electronegativity of the Elements

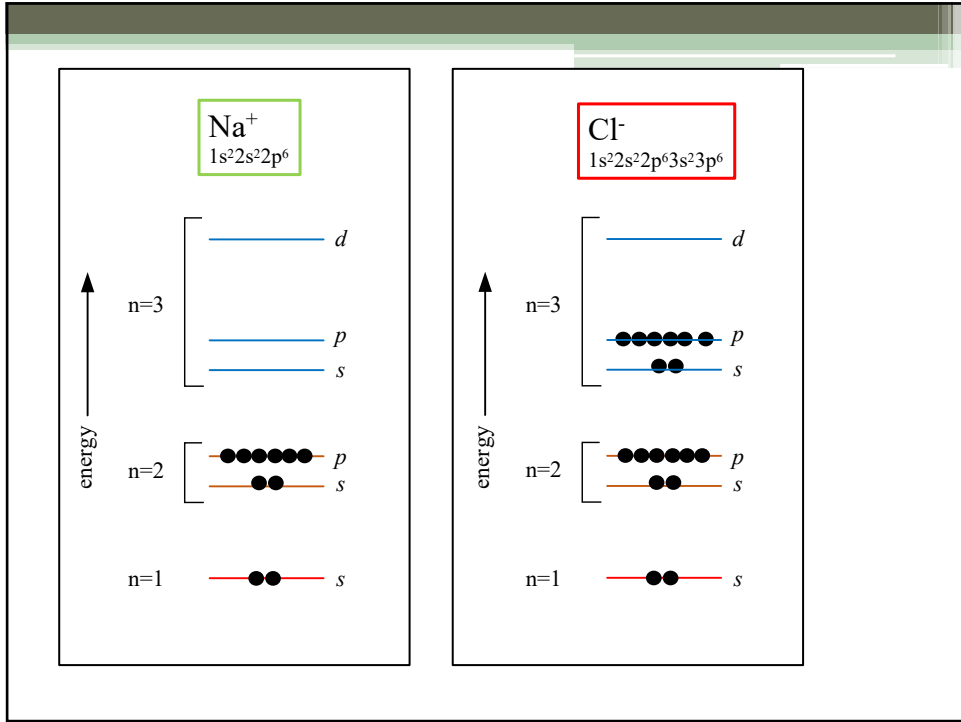




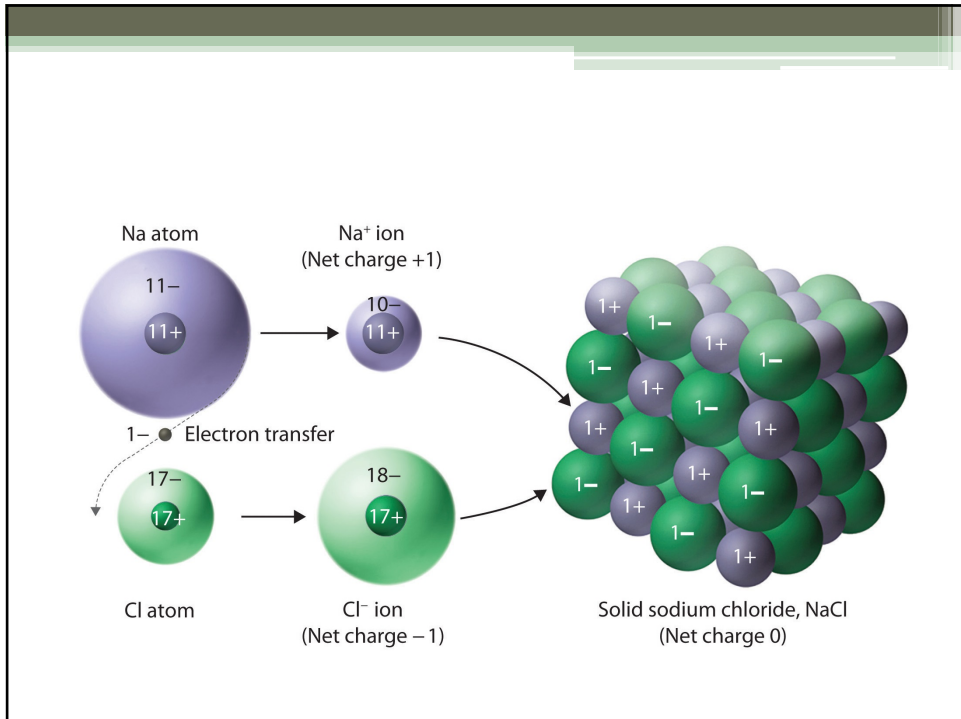
27



28

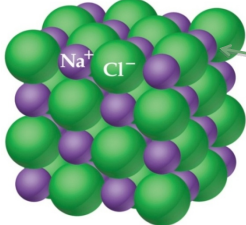


29




30

Ιοντικά κρυσταλλικά υλικά



Διάταξη των ιόντων σε τμήμα κρυστάλλου χλωριούχου νατρίου



Κρυστάλλος χλωριούχου νατρίου

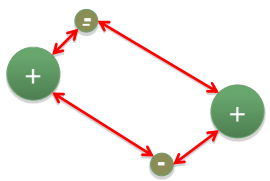
1. Επειδή ενώνονται ιόντα, για να προκύψει σταθερή δομή χρειάζεται κάθε κατιόν να περιβάλλεται από μέγιστο αριθμό ανιόντων και αντίστροφα.
2. **Επειδή δεν υπάρχουν ελεύθερα ηλεκτρόνια** έχουν μικρή ηλεκτρική και θερμική αγωγιμότητα
3. Καλή οπτική διαπερατότητα σε μεγάλο τμήμα του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος.
4. Η οπτική απορρόφηση είναι περιορισμένη εκτός αν η ενέργεια των φωτονίων είναι αρκετά μεγάλη ~ 6 eV που αντιστοιχεί στο τέλος της περιοχής του υπεριώδους

31

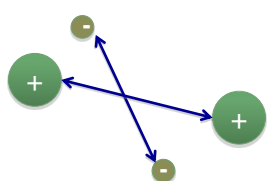
Ομοιοπολικός δεσμός

- μερικά ηλεκτρόνια σθένους μοιράζονται μεταξύ των ατόμων, αμέταλλα (παραδείγματα H₂, F₂, O₂, H₂, κλπ.)
- Οι απωστικές δυνάμεις μεταξύ των ηλεκτρονίων μειώνονται λόγω των αντίθετων ιδιοπεριστροφών (spin) των ηλεκτρονίων, έτσι τα άτομα έρχονται πιο κοντά με ισχυρότερες ελκτικές δυνάμεις, μέχρι το σημείο που οι απωστικές των πυρήνων γίνονται ισχυρές.
- Κατευθυντικός δεσμός: εξασκείται σε συγκεκριμένη κατεύθυνση

Ελκτικές δυνάμεις

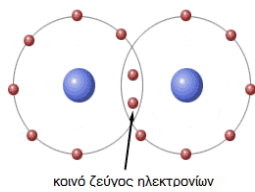


Απωστικές δυνάμεις

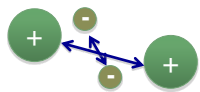


Μόριο υδρογόνου

Ομοιοπολικός δεσμός



κοινό ζεύγος ηλεκτρονίων



Λόγω διαφορετικής Ιδιοπεριστροφής των ηλεκτρονίων ανάμεσα στους πυρήνες

32

Ομοιοπολικός δεσμός- Θεωρία μοριακών τροχιακών

Υβριδισμός των τροχιακών : Τα τροχιακά s και p μπορεί μαθηματικώς να συνδυαστούν και να σχηματίσουν νέα ισοδύναμα τροχιακά, τα υβριδισμένα τροχιακά

Αριθμός τροχιακών = αριθμός συγχωνευμένων τροχιακών

Δύο ηλεκτρόνια σε κάθε υβριδικό τροχιακό δεσμού

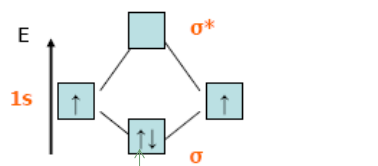
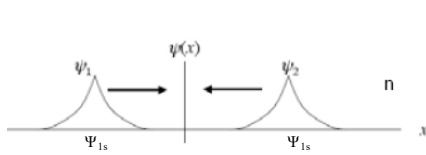
Τύποι υβριδικών τροχιακών: sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d

Π.χ. μόριο μεθανίου, στους κρύσταλλους διαμαντιού, πυριτίου, γερμανίου, GaAs, κ.λπ.

33

Θεωρία μοριακών τροχιακών-Το μόριο του υδρογόνου

Τα 2 τροχιακά $1s(\Psi_{1s})$ των 2 ατόμων υδρογόνου συνενώνονται στο μόριό του και προκύπτουν δύο νέα μοριακά τροχιακά (κοινά για τα δύο άτομα) τα σ και σ^* , όπου τοποθετούνται τα διαθέσιμα ηλεκτρόνια

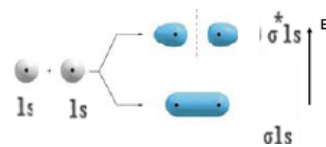


Κάθε τετράγωνο παριστάνει ένα τροχιακό Ψ . Το βέλος ένα ηλεκτρόνιο



Ενεργειακές στάθμες των ατομικών τροχιακών $1s$

Ενεργειακές στάθμες των μοριακών τροχιακών : δεσμικό σ και αντιδεσμικό σ^* τροχιακό στο μόριο του υδρογόνου



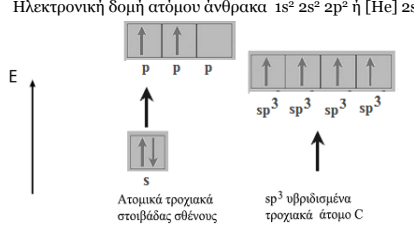
Κατανομή ηλεκτρονικής πυκνότητας των μοριακών τροχιακών σ και σ^* στο μόριο υδρογόνου

34

Ομοιοπολικοί δεσμοί - Διαμάντι

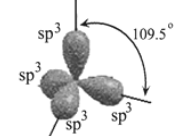
Υβριδισμός στο άτομο άνθρακα στο διαμάντι:
 Δομή διαμαντιού: κάθε άτομο άνθρακα έχει 4 υβριδισμένα τροχιακά sp^3 και συνδέεται με 4 πλησιέστερα γειτονικά άτομα άνθρακα στις κορυφές ενός τετραέδρου

Ηλεκτρονική δομή ατόμου άνθρακα $1s^2 2s^2 2p^2$ ή $[He] 2s^2, 2p^2$



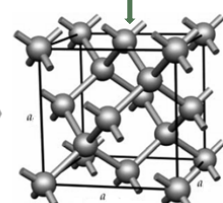
Ατομικά τροχιακά στοιβάδας σθένους ατόμου C

sp^3 υβριδισμένα τροχιακά ατόμου C



tetραεδρική διάταξη των 4 υβριδισμένων τροχιακών

Η δομή του, διαμαντιού



Τετραεδρική διάταξη των δεσμών

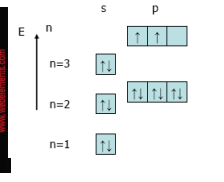
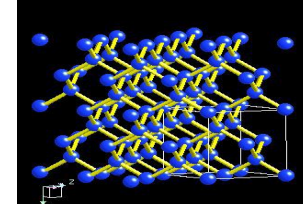
*Κρύσταλλος :Περιοδικά επαναλαμβανόμενη διάταξη ατόμων σε τρεις διαστάσεις από την μία άκρη του στερεού ως την άλλη

Στα στοιχεία Si, Ge, ενώσεις SiC, AlSb, κάθε άτομο έχει 4 sp^3 υβριδικά τροχιακά. Τα αντίστοιχα υλικά έχουν την δομή του διαμαντιού

35

Κρυσταλλικό πυρίτιο Si: ημιαγωγός καθιερωμένος στην ηλεκτρονική βιομηχανία


Ηλεκτρονική δομή ατόμου πυριτίου Si:
 Τέσσερα ηλεκτρόνια στην εξωτερική Στοιβάδα
 Τροχιακά: $[1s^2 2s^2 2p^6] 3s^2 3p^2$

Ανιστροπική δομή: Οι ιδιότητες εξαρτώνται από τη διεύθυνση μέσα στον κρύσταλλο

Διάταξη των ατόμων σε τμήμα κρυστάλλου Si

Στον κρύσταλλο Si
 Υβριδικά τροχιακά sp^3
 Γωνία δεσμού: 109.5°
 Μήκος δεσμού: 0,235nm



Κρύσταλλος πυρίτιο

Από την γεωμετρία προκύπτουν οι ιδιότητες Στερεομετρία

Επίπεδη παράσταση των τετραέδρων Si

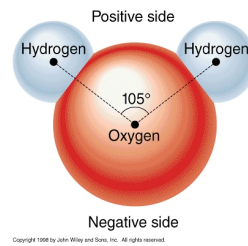
Γιατί Κρύσταλλος πυριτίου ?
 Καλύτερος & φθηνότερος ημιαγωγός
 Εξαιρετικές ηλεκτρικές & θερμικές ιδιότητες
 Φίλικό στο περιβάλλον

36

Πολικοί δεσμοί και μόρια

- Όταν οι δεσμοί μεταξύ των ατόμων δημιουργούν ανομοιομορφία στην κατανομή του φορτίου, τότε ονομάζονται πολικοί
- Παραδείγματα: H_2O , HCl , CO_2 , κ.ά.
- Λόγω της πολικότητάς τους μπορούν να συνδεθούν με δευτερογενείς δυνάμεις συνοχής
- Τα πολικά μόρια μπορούν να συνισφέρουν στην αποσύνθεση ιοντικών δεσμών

Παράδειγμα: διάλυση αλατιού σε νερό.



37

Μεταλλικός δεσμός. Μέταλλα

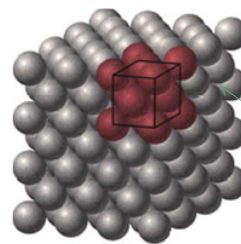
1. Όλα τα άτομα μοιράζονται τα ηλεκτρόνια σθένους
2. Ελεύθερη κίνηση των ηλεκτρονίων με τη μέση θερμική ταχύτητα
3. Δυνάμεις Coulomb μεταξύ κατιόντων και ηλεκτρονικού νέφους

Μεταλλικός δεσμός \rightarrow Όχι καθορισμένη διεύθυνση \rightarrow Ισχυρός προς όλες τις διευθύνσεις \rightarrow Πυκνότερη δυνατή διάταξη μεταλλικών ιόντων



Θετικοί μεταλλικοί ιοντικοί πυρήνες

Ελεύθερα ηλεκτρόνια σθένους
Το ηλεκτρονικό νέφος



Δομή μεταλλικού κρυστάλλου

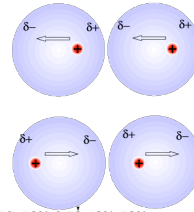
Ιδιότητες μετάλλων

Επειδή τα ηλεκτρόνια είναι ελεύθερα να κινηθούν μέσα σε ηλεκτρικό πεδίο, είναι καλοί αγωγοί του ηλεκτρισμού και της θερμότητας
Είναι αδιαφανή και σπλινά
Σχηματίζουν εύκολα κράματα
Παρουσιάζουν μικρή αντίσταση σε τάσεις ολίσθησης, μεγάλη πλαστικότητα

38

Δευτερεύοντες δεσμοί

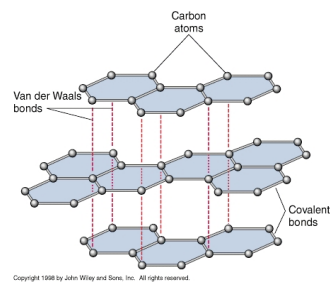
- Van der Waals:
 - Οφείλονται στην έλξη και άπωση λόγω της δημιουργίας διπολικών συστημάτων
 - Περιστασιακά, κάποια μόρια (ή άτομα) μπορούν να παρουσιάσουν μετατόπιση του φορτίου τους με αποτέλεσμα την εμφάνιση ηλεκτρικής διπολικότητας η οποία επάγει διπολικότητα σε διπλανά μόρια (ή άτομα).
 - Είναι ασθενείς δεσμοί
- Δεσμοί υδρογόνου
 - Παράλληλοι με τους van der Waals, απλά συνδέονται με την πολικότητα του ατόμου του υδρογόνου (π.χ. Νερό)
 - Ασθενείς δεσμοί
- Πάγος: υλικό που στηρίζεται στους δευτερεύοντες δεσμούς. Εύκολα λειώνουν!!



39

Μικτοί δεσμοί

- Το παράδειγμα του γραφίτη
- Σε κάθε επίπεδο, ο άνθρακας ενώνεται με ομοιοπολικούς δεσμούς.
- Τα επίπεδα ενώνονται με δεσμούς van der Waals



- Γι'αυτό το λόγο, κατάφεραν οι επιστήμονες να διαχωρίσουν τα επίπεδα μεταξύ τους και να δημιουργήσουν

Το γραφένιο

40

Σύνοψη δεσμών

Είδος δεσμού	Ενέργεια δεσμού	Ιδιότητες
Ιοντικός	Υψηλή	Μη-κατευθυντικός (κεραμικά)
Ομοιοπολικός	Εξαρτάται -Διαμάντι – υψηλή -Βισμούθιο – χαμηλή	Κατευθυντικός (ημιαγωγοί, κεραμικά, πολυμερή)
Μεταλλικός	Εξαρτάται -Βολφράμιο – υψηλή -Υδράργηρος – χαμηλή	Μη κατευθυντικοί (μέταλλα)
Δευτερεύοντες (van der Waals, υδρογόνου)	Χαμηλή (π.χ. Νερό)	Κατευθυντικοί (πολυμερή), ενδομοριακοί

Το είδος και οι ιδιότητες των δεσμών εξαρτούν τις ιδιότητες των μακροσκοπικών υλικών!!

41



Ευχαριστώ για
την προσοχή σας

42