

MÜHENDİSLİK FAKÜLTESİ




MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ

MAK221-Malzeme Bilgisi I
Doç.Dr. Mevlüt GÜRBÜZ

Atom yapısı, atomlararası bağlar
ve fiziksel özelliklere etkisi

MAK221-Malzeme Bilgisi I

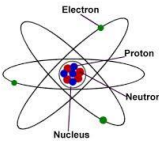
Hafta-2



Bağ Yapısına Doğadan Örnekler




ATOM YAPISI



Elektronlar (özellikle dış yörüngedekiler) atomun elektriksel, mekanik, kimyasal ve ısı özelliklerini belirlemektedir. Bu nedenle atom yapısının bilinmesi mühendislik malzemeleri için oldukça önemlidir.

Proton, Nötron ve Elektronun Kütle ve Yükleri		
	Kütle, gram (g)	Yük, coulomb (C)
Proton	1.673×10^{-24}	$+1.602 \times 10^{-19}$
Nötron	1.675×10^{-24}	0
Elektron	9.109×10^{-28}	-1.602×10^{-19}

Atom Yapısı

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 (molekülü) veya kütlesi dikkate alınarak belirlenir. Buna göre, bir **mol** maddede $6,023 \times 10^{23}$ (Avogadro sayısı) kadar atom veya molekül vardır.

Bütün maddeler kimyasal elementlerden oluşur. Elementler ise atomlardan meydana gelir. **Klasik fiziğin atom modelinde bir atom, çekirdekte ve bu çekirdeğin etrafını saran eksi yüklerin sardığı örtü tabakasından oluşur. Çekirdekte pozitif yüklü protonların yanında elektrik yüklü olmayan nötronlarda bulunur.**

Proton ve nötronların kütleleri elektronlarınkine göre çok daha büyüktür. Bir protonun kütlesi bir nötronun kütlesine yaklaşık olarak eşit olmasına karşın elektronun kütlesinin tam 1836 katıdır. Protonun kütlesi yaklaşık olarak 1.673×10^{-24} g, nötronun kütlesi 1.675×10^{-24} g ve elektronun kütlesi 9.11×10^{-31} g'dir.

Çekirdek yarıçapı 10^{-12} cm mertebesinde olup, bu değer 1°A (10^{-8} cm) mertebesindeki atom çapından çok daha küçüktür. **Nötr, yani dışa karşı herhangi bir elektrik yükü görünmeyen atomda elektron sayısı adet olarak proton sayısına eşittir. Çünkü bir elektron yükü, ters işaretli olarak proton yüküne eşittir.** O durumda yükler karşılıklı olarak dengelenmiş olurlar.



Elementlerin periyodik sistemde sahip oldukları **atom numarası Z, proton adedine** ve bununla beraber her atomun kendi **elektronlarının adetine eşittir.** Atomun kütle sayısı A, proton adedi Z ve nötron adedi N'nin toplamına eşittir.

$$A = Z + N$$

Bir elementin farklı kütle sayısına sahip atomlarına o elementin **izotopları** denir. Aynı elementin izotopları o elementin atom numarasına, dolayısıyla o elementin proton sayısına sahip olacaktır. Kütle sayılarını farklı yapan unsur nötron sayılarının farklılığıdır. Doğada bulunan elementler farklı izotoplardan oluşur. Bu nedenle bir elementin atom ağırlığı izotoplarının ortalama ağırlığı olup, bu değer tam sayı olmayabilir. Bir elementin atom ağırlığı, C'nun atom ağırlığına göre belirlenir.

Elementin kimyasal özelliklerini, o elementlerin elektronları belirler. Proton adetleri eşit olan atomlar eşit elektronlara da sahip olacakları için aynı kimyasal özelliktedirler. **Yani bir elementin hangi izotopu alınırsa alınsın, aynı kimyasal özellikler beklenmelidir.** Fakat bu izotopların bazı fiziksel özellikleri birbirlerinden farklılık gösterebilirler. Örneğin bazı izotoplar radyoaktif olmalarına karşın diğerleri değildir.



Atom numaraları birbirlerine yakın elementlerin bazı izotoplarının kütle sayıları birbirlerine eşit düşebilir. Proton adedi farklı, fakat kütle sayıları eşit olan atomlara izobar denir. Kütle sayıları peş peşe gelen farklı elementlerin izotoplarına da izoton denir.

Kısaca :

Z elektron => elektron örtü tabakası
Z proton +N nötron => A atom çekirdeği
Atom çekirdeği + Elektron örtü tabakası => ATOM

Örtü tabakalarını oluşturan elektronların adedi, atomun proton adedinden fazla ise negatif yüklü iyon, az ise pozitif yüklü iyon ortaya çıkar. Kimyasal reaksiyonlardaki yük değişimi protonların eksilmesi veya artmasıyla değil, sadece ve sadece dışardan elektron alıp vermesiyle gerçekleşir.



Bağıl atom ağırlığı: Bir elementin atom ağırlığı denince bağıl atom ağırlığı anlaşılır. Bağıl olduğu için birimsizdir. Burada kullanılan bağıllık, kütle sayısı 12 olan karbon izotopundan, yani C12'den gelmektedir. C12 karbonun doğada en çok bulunan izotopudur ve proton sayısı nötron sayısına eşittir. Diğer atomların kütle sayıları bu karbon atomun kütle sayısının 1/12 sine bölünür ve çıkan değer o elementin atom ağırlığı olarak verilir.

Gerçek atom ağırlığı: Burada atomun gerçek ağırlığı olan tartı ağırlığını anlamak gerekir. Birimi gram veya kg dir. Bağıl atom ağırlığının Avagadro sayısına bölünmesiyle elde edilir.



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.



Yörünge elektronu

Şekil 2.1 Bohr atomunun sematik gösterimi

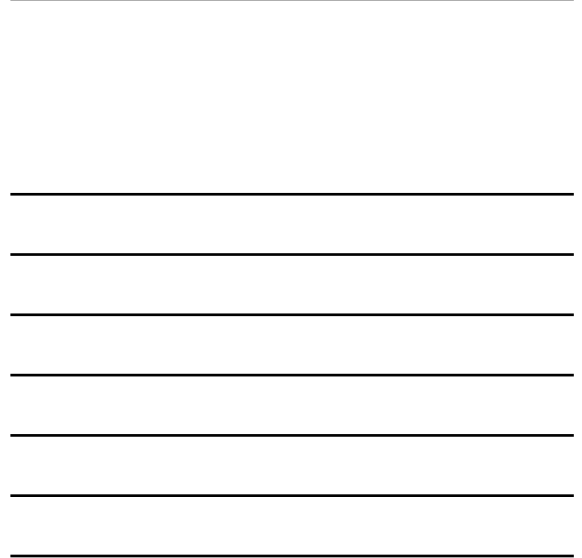
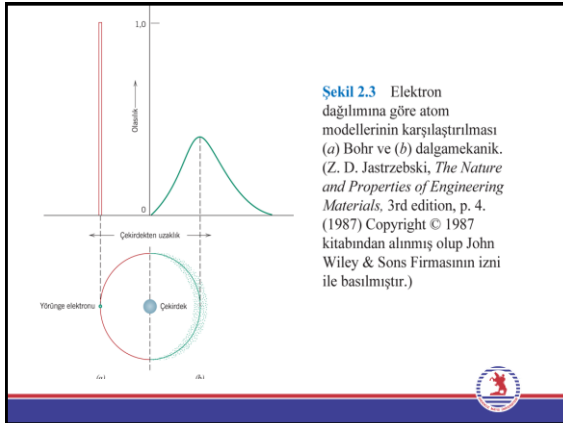
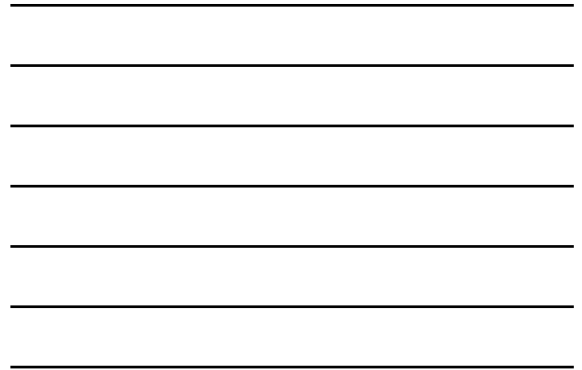
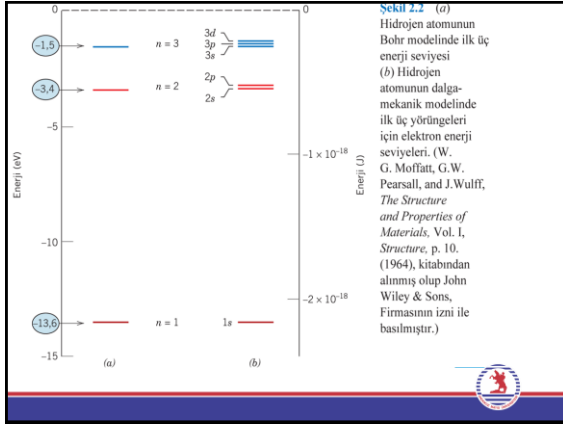
ŞEKİL 2.2 (a) Dışta, yüksek bir yörüngeye sıçrayan hidrojen elektronu; (b) hidrojen elektronunun yüksekliki bir enerji yörüngesinden daha alttaki bir yörüngeye geçişine bunun bir sonucu olarak bir emisyonun bir elektronun açığı olması.

(a) Yüksek enerji (b) Düşük enerji

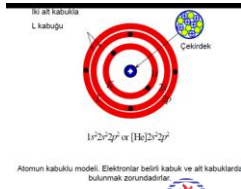
$$\Delta E = h\nu \quad (2.1)$$

Burada h = Plank sabiti = 6.63×10^{-34} jul-saniyedir (J · s). Elektromagnetsiz ışığın için $c = \lambda\nu$ olduğundan (c ışığın hızı, 3.00×10^8 metre/saniye, λ ise dalga boyudur) fotonun neden olduğu enerji değişimi ΔE şu şekilde ifade edilir:

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.2)$$



- Elektronlar ile ilgili bazı olayları açıklamada yetersiz kalan Bohr modelinin bazı önemli sınırlamalara sahip olduğu anlaşılmıştır. Bunun için elektronun hem dalga hem de parçacık özelliğini gösterdiği dikkate alınarak, **dalga-mekanik modeli** ortaya atılmıştır. Bu modelle, bir elektronun konumu, çekirdek etrafında değişik bölgelerde bulunma ihtimalinden daha çok, belirli bir yörüngede hareket eden bir parçacık olarak düşünülmüştür.



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	
		s	1	2	
4	N	p	3	6	32
		d	5	10	
		f	7	14	
		s	1	2	

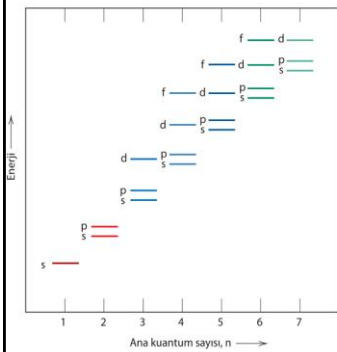


Bir atomun kimyasal özellikleri, çekirdeği saran örtü tabakasındaki elektronların dizilişi ile etkilenir. Örtü tabakasının tamamı, farklı enerjili elektronların yer aldığı tabakalar oluşturur. En düşük enerjiye, yarı çapı en küçük olan K tabakasındaki elektronlar sahiptir. Artan enerjiye göre sıralanan ana elektron tabakaları şunlardır:

K, L, M, N, O, P, Q tabakaları

Atomların ana elektron tabakaları ve ve bunlarda bulunabilecek en çok elektron sayıları

Anatabakalar	K	L	M	N	O	P	Q
Anakuantum sayısı (n)	1	2	3	4	5	6	7
Her tabakaya düşen en çok elektron adedi ($2n^2$)	2	8	18	32	50	72	98



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)



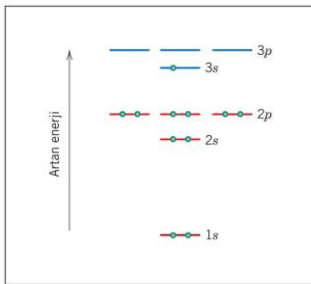
Elektron Diziliřleri

- Önceki bölümde özellikle elektronların bulunabileceđi enerji seviyeleri **elektron konumları** incelenmiřtir. Elektronların bu enerji seviyelerine yerleřme řekillerini belirlenmesinde bir bařka kuantum-mekanik kavramı, **Pauli dıřlama prensibi** kullanılır. Bu prensip, bir enerji seviyesinde zıt spinli iki elektrondan fazla elektronun bulunamayacađını zorunlu kılmaktadır.



- Bütün elektronlar en düşük enerji seviyelerine yerleřtiklerinde, atomun **en düşük enerji (taban) durumunda** olduđu söylenir.
- Bir atomun **elektron diziliři** veya yapısı, bu enerji seviyelerinin elektronlarca nasıl iřgal edildiđini gösterir.





řekil 2.5 Bir sodyum atomunda elektronların yerleřtiđi ve boş kalan enerji seviyelerinin řematik gösterimi



Elektron düzenlerine örnekler;

Li $1s^2 2s^2$
 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$
 Cl $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
 Ti $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
 Ga $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
 Kr $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$
 K $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^0 4s^1$
 Ca $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^0 4s^2$

Niçin bazı malzemeler manyetiklik bazıları ise yüksek ergime sıcaklığı gösterir?

Valans elektronları, kimyasal reaksiyonlar süresince kendi atomunu terk edebilecek ara tabakasını tam dolduramamış elektronlardır.

Table 2.2 Yaygın Olan Bazı Elementlerin Elektron Yapıları*

Element	Sembol	Atom Numarası	Elektron Dizilişi
Hidrojen	H	1	1s ¹
Helium	He	2	1s ²
Lityum	Li	3	1s ² 2s ¹
Berylium	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
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
Cinko	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
Bromun	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

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

PERİYODİK TABLO

Periyodik cetvel elementlerin artan atom numaralarına göre dizilimini gösteren bir tablodur. Bu tabloda belli kimyasal özellikleri birbirine yakın olan elementler, belli gruplarda toplanmıştır.

- Yatay sütun → Periyot : 7 tane periyot vardır
- Düşey Sütun → Grup : 8 tane a grubu ve 8 tanede b grubu vardır. "b" grubu elementlerine geçiş elementleri denir.

Öncelikle periyodik cetvelin bazı gruplarını inceleyelim:



PERİYODİK TABLO

Anahtar																		Mental		Ametal		Arametal															
29																		30		31		32		33		34		35		36							
Z																		37		38		39		40		41		42		43		44					
Cu																		Zn		Ga		Ge		As		Se		Br		Kr							
63.55																		65.38		72.64		74.92		75.94		78.96		79.90		83.80							
A																		B		C		N		O		F		Ne									
1																		2		3		4		5		6		7		8							
H																		He		Li		Be		B		C		N		O		F		Ne			
1.008																		4.0026		6.941		9.0122		10.811		12.011		14.007		15.999		18.998		20.180			
IA																		IIA		IIIB		IVB		VB		VIB		VIIB		VIII		IB		IIB			
Na																		Mg		Sc		Ti		V		Cr		Mn		Fe		Co		Ni			
22.990																		24.305		44.956		47.87		50.942		51.996		54.938		55.845		58.933		58.69			
K																		Ca		Sc		Ti		V		Cr		Mn		Fe		Co		Ni		Cu	
39.098																		40.08		44.956		47.87		50.942		51.996		54.938		55.845		58.933		58.69		63.55	
Rb																		Sr		Y		Zr		Nb		Mo		Tc		Ru		Rh		Pd		Ag	
85.47																		87.62		88.91		91.22		92.91		95.94		98.906		101.07		102.905		106.4		107.87	
Cs																		Ba		La		Ce		Pr		Nd		Pm		Sm		Eu		Gd		Tb	
132.91																		137.33		138.91		140.91		141.91		143.91		144.91		145.91		147.91		148.91		150.91	
Fr																		Ra		Ac		Th		Pa		U		Np		Pu		Am		Cm		Bk	
223																		226		227		232		238		244		247		251		252		257		261	
Nadir toprak serisi																		138.91		140.91		141.91		143.91		144.91		145.91		147.91		148.91		150.91		151.96	
Aktif serisi																		89		90		91		92		93		94		95		96		97		98	
132.91																		137.33		138.91		140.91		141.91		143.91		144.91		145.91		147.91		148.91		150.91	



- 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 sağdakiler **elektronegatif** elementlerdir; diğer bir ifadeyle, negatif iyon oluşturmak için kolaylıkla elektron alır veya bazen elektronları diğer atomlarla paylaşırlar.



SOY GAZLAR

- Periyodik cetvelin 8a grubu elementleridir.
- He , Ne , Ar , Kr , Xe , Rn bu grubun elementleridir.
- Grupta He dışındaki tüm elementler kararlı elementlerdir.
- Erime ve kaynama noktaları çok düşüktür. Grupta yukarıdan aşağıya gidildikçe erime ve kaynama noktaları yükselir.

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
K	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Cu	Ni	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra		Rf	Ha	Hs	Ht											
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er						
Ak	Tm	Yb	Lu														

SOY GAZLAR

- Tümü tek atomlu renksiz gaz halindedir.
- Yalnız Rn radyoaktif olup çekirdeği dayanaksızdır.
- Doğada çok az bulunurlar.
- İyonlaşma enerjileri, sıralarında, en yüksek olan elementlerdir.

ALKALİ METALLER

- Periyodik cetvelin 1a grubu elementleridir
- Li , Na , K , Rb , Cs , Fr bu grubun elementleridir.
- En yüksek temel enerji düzeylerinde bir elektron vardır.
- Bileşiklerinde (+1) değerlik alırlar.
- Yumuşak, bıçakla kesilebilen, hafif metallere dir.
- Elektrik akımı ve ısıyı iyi iletirler.

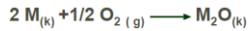
H																
Li	Be											B	C	N	O	F
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Cu	Ni	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At
Fr	Ra		Rf	Hs	Ht											
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er					
Ak	Tm	Yb	Lu													

ALKALİ METALLER

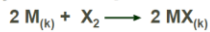
- Erime ve kaynama noktaları diğer metallere den düşüktür. Grupta yukarıdan aşağıya doğru erime ve kaynama noktaları düşer.
- Özkütleleri düşük olan elementlerdir.
- İyonlaşma enerjileri, sıralarında, en düşük olan elementlerdir.
- Tepkime verme yetenekleri çok fazladır.
- Doğada daha çok bileşikleri halinde bulunurlar.

ALKALİ METALLER

- ☐ Alkali metallere , havanın oksijeni ile etkileşerek oksit oluşturlar.



- ☐ Halojenlerle birleşerek tuzları oluşturlar.



- ☐ Su ile hızlı tepkimeye girerler ve hidrojen gazı (H₂) oluşturlar.



TOPRAK ALKALİ METALLER

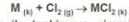
- Periyodik cetveli 2a grubunda yer alan elementlere toprak alkali metaller adı verilir.
- Be , Mg , Ca , Sr , Ba , Ra bu grubun elementleridir.
- Bileşiklerinde +2 değerliklidirler.
- Isı ve elektrik akımını iyi iletirler.
- Alkali metallerden daha sert erime ve kaynama noktaları daha yüksektir.
- İyonlaşma enerjileri alkali metallerden daha yüksektir.

TOPRAK ALKALİ METALLER

- Özküteleri de alkali metallerden daha büyüktür
- Oksijenle birleşerek oksitleri oluştururlar.



- Halojenlerle birleşerek tuzları oluştururlar.



- Su ile tepkimeye girerek hidrojen gazı (H_2) oluştururlar.



HALOJENLER

- Periyodik cetvelin 7a grubunda yer alan elementlerdir.
- F, Cl, Br, I, At bu grubun elementleridir.
- Bileşiklerinde -1 ile +7 arasında çeşitli değerlikler alabilirler. Ancak F bileşiklerinde sadece -1 değerlik alır.
- Erime ve kaynama noktaları grupta aşağı yukarıya doğru azalır.
- Elektron alma istekleri en fazla olan elementte

HALOJENLER

- Tümü renklidir.
- Tümü zehirli ve tehlikelidir.
- Element halinde 2 atomlu moleküllerden oluşurlar. ($F_2, Cl_2, Br_2, I_2, At_2$)
- At (astatin) doğada bulunmayan, ancak radyoaktif olaylarla oluşan bir elementtir.
- Oda koşullarında F ve Cl gaz, Br sıvı, I ise katı haldedir.



ÜÇÜNCÜ SIRA ELEMENTLERİ

Periyodik cetvelin üçüncü sırası Na (sodyum) metali ile başlar Ar (argon) ile biter.

Periyodik cetvelin aynı grubundaki elementlerin değerlik elektron sayıları aynı, özellikleri de birbirine benzerdir. Ancak bir sırada bulunan elementlerin başta değerlik elektron sayıları olmak üzere birçok özellikleri farklılık gösterir. Dolayısıyla da Fiziksel ve kimyasal özelliklerde önemli değişiklikler söz konusudur.

Buradan sonuç olarak sodyumdan başlayarak argona kadar devam eden elementler birbirleri----- bakımından ayrılmışlardır.



ÜÇÜNCÜ SIRA ELEMENTLERİ

- Üçüncü sıranın elementleri şunlardır: Na , Mg , Al , Si , P , S , Cl , Ar
- Üçüncü sıranın ilk üç elementi Na , Mg ve Al metal,dördüncü element olan silisyum yarı metal,daha sonra gelen P , S, Cl ve Ar elementleri ise ametaldir.
- Na , Mg ve Al elektrik akımını ve ısıyı iyi iletir.P , S , Cl ve Ar elementleri ısıyı ve elektriği iletmez.
- Soldan sağa doğru sırada özkütle,erime ve kaynama noktası gibi özelliklerde büyük farklılık vardır.Yine soldan sağa doğru genel olarak iyonlaşma enerjileri arttığından metal özelliği azalıp ametal özelliği artar.



DÖRDÜNCÜ SIRA GEÇİŞ ELEMENTLERİ

Buraya kadar incelediğimiz gruplar ve sırada değerlik elektronları s ya da p orbitallerinde bulunuyordu.Yani a gruplarındaydı. Geçiş elementlerindeyse değerlik elektronları d orbitallerinde bulunur ve bu elementler 2a ve 3a grubu arasında yer alır.

Periyodik cetvelin 21 atom numaralı skandiyum ile başlayıp 30 atom numaralı çinko ile biten sıradaki elementler ile bunların altında kalan tüm elementler, geçiş elementleri grubuna girer.

H																												He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne												
Na	Mg																Al	Si	P	S	Cl	Ar							
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr												
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe												
Cs	Ba	**	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn												
Fr	Ra	**	Rf	Ha	Uns	Uns																							

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Mn	Lr	



DÖRDÜNCÜ SIRA GEÇİŞ ELEMENTLERİ

- Dördüncü sıra geçiş elementleri:Se , Ti , V , Cr , Mn , Fe , Co ,Ni , Cu , Zn .
- Tümü metaldir.
- 1a ve 2a grubu metallerinden farklı olup,sert ve özkütlesi büyük metallerdir.
- Erime ve kaynama noktaları çok yüksektir.
- Elektrik akımı ve ısıyı iyi iletirler.
- Kimyasal tepkimelere yatkınlık bakımından aralarında çok büyük farklılık vardır.



İyonlaşma Enerjisi

Bir atomdan elektron uzaklaştırmak için atoma enerji verilir. Verilen bu enerji bir büyüklüğe ulaştınca atomdan bir elektron kopar. Kopan bu elektron çekirdek tarafından en zayıf kuvvetle çekilen yani atom çekirdeğinden en uzakta bulunan elektrondur.

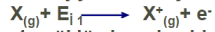
Bir atomdan elektron koparmak için gerekli enerjiye İyonlaşma Enerjisi (E_i) denir.

Çekirdekle elektron arasında çekme kuvveti ne kadar fazla ise iyonizasyon enerjisi o kadar artar.

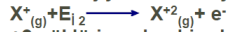


İyonlaşma Enerjisi

Bir atomdan ilk elektronu koparmak için gerekli olan enerjiye Birinci İyonlaşma Enerjisi (E_{i1}) denir.



+1 yüklü iyonlardan, bir elektron koparmak için gerekli enerjiye de İkinci İyonlaşma Enerjisi denir.



+2 yüklü iyonlardan bir elektron (üçüncü elektron) koparmak için gereken enerjiye de Üçüncü İyonlaşma Enerjisi denir.



İyonlaşma Enerjisi

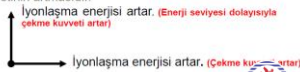
Bir atomda kaç tane elektron bulunuyorsa, o kadar iyonlaşma enerjisi vardır. Bunlardan en küçüğü birinci iyonlaşma enerjisidir. Çünkü ilk kopan elektron yüksüz bir elektrondan kopmaktadır. İkinci elektron +1 yüklü bir iyonlardan kopması için bir elementin ikinci iyonlaşma enerjisi, birinci iyonlaşma enerjisinden daha büyüktür. Atom çapı küçülmekte, elektron koparmak güçleşmektedir.

İyonlaşma Enerjisi

İyonun yükü arttıkça atom çapı küçülür. İyonlaşma enerjisi artar. Buna göre de;

$$E_{i1} < E_{i2} < E_{i3} < E_{i4} < \dots$$

İyonlaşma enerjisi periyodik cetvelde aşağıdan yukarıya, soldan sağa doğru artar. Bunun nedeni çekim kuvvetinin artmasıdır.



Ortalama Atomik Yarıçapı

Bir atomda en üst enerji seviyesindeki atomların atom çekirdeğine olan ortalama uzaklığına Ortalama Atomik Yarıçap denir.

Periyodik cetvelde soldan sağa doğru gittikçe atom numarası (çekirdek yükü jarttığundan en dıştaki elektron daha çok çekilir,ortalama atomik yarıçap küçülür. Gruplarda ise yukarıdan aşağıya gidildikçe temel enerji seviyesi arttığundan dıştaki elektronlar daha az çekilir,ortalama atomik yarıçap artar.

Ortalama Atomik Yarıçap

↑ Ortalama atomik yarıçap azalır. **(Elektron seviyesi azalır.)**
 → Ortalama atomik yarıçap azalır.

- Elektron veren atomun yarıçapı küçülür.
- İzotop atomlarda (proton sayıları aynı olan atomlarda) kütle numarası büyük olan atomun yarıçapı daha küçüktür.
- Elektron sayıları aynı olan atomlarda proton sayısı büyük olan atomun yarıçapı daha küçüktür.



Elektron İlgisi (Elektron Affinitesi):

Gaz fazındaki 1 mol nötral atoma 1 mol elektron bağlandığı zaman açığa çıkan enerjinin miktarına elektron ilgisi ya da elektron affinitesi (E_{ea}) denir.

Periyodik cetvelde soldan sağa , yukarıdan aşağıya doğru gidildikçe elektron ilgisi artar.Çünkü çekim arttığı için elektronun bağlanması kolaylaşır.

↑ Elektron ilgisi azalır.

→ Elektron ilgisi artar.

Metalik Özellikler

Metalik özelliği elementlerin iyonlaşma enerjisi ile ilgilidir.İyonlaşma enerjisi düşük olan elementler metalik özelliğe sahip,iyonlaşma enerjisi yüksek olan elementler ise metalik özelliğe sahip değildir.

Periyodik cetvelde soldan sağa,yukarıdan aşağı gidildikçe metalik özellik azalır.

↑ Metalik özellik azalır.

→ Metalik özellik azalır.



5.Elektronegatiflik:

Elektronegatiflik; elektronu çekme kapasitesine denir.Elektron ilgisi arttıkça elektronegatiflik artar.Elektron ilgisi fazla olan elementler daha elektronegatifdir.Bilinen en elektronegatif element flordur (F).

Elektronegatiflik;periyodik cetvelde soldan sağa,aşağıdan yukarıya doğru artar.

↑ Elektronegatiflik artar.

→ Elektronegatiflik artar.



Sonsuz mesafe uzaklıkta bulunan atomların birbirlerine karşı çekme ve itme gibi bir etkisi olmadığından **potansiyel enerji sıfırdır**. Herhangi bir etki ile bu atomlar birbirlerine yaklaşırlarsa, bu iki atom arasında bir çekme etkisi meydana gelecek ve **kinetik enerji artarken potansiyel enerji azalacaktır**.

Aralarındaki mesafe azaldıkça, bu sefer itme kuvveti oluşacaktır. Öyle bir an gelir ki artık itme ve çekme kuvvetleri birbirlerine eşit yani bileşke kuvvet sıfır olduğunda atomlar denge haline gelir. İşte atomların denge halinde olduğu mesafeye **atomlar arası denge mesafesi** denir. Atomlar denge halin geldiklerinde aralarında çeşitli bağlar oluştururlar.

Enerji diyagramında $F_1=0$ hali $dE/dr=0$ haline karşılık gelir.

Diğer bir ifade ile iki atomdan oluşan sistemin potansiyel enerjisi minimumdur.

Çekme, kimyasal bağın fiziksel anlamı olup, kinetik enerji ile ilgilidir. **İtme** ise kısa mesafelerde kendini gösterir ve atomlar arası denge mesafesinin oluşmasını sağlar.



Potansiyel enerji çukurunun şekline göre ne tür bilgiler alınabilir?

Dar ve derin enerji çukuru elastisite modülünün yüksek olduğu, elastisite modülünün yüksekliği de **ergime sıcaklığını yüksek** ve **düşük genleşme katsayısı** anlamına gelir. Dolayısıyla mukavemet yüksektir. Aksine geniş olan enerji çukurlarında ise, düşük ergime sıcaklığı, yüksek genleşme katsayısı ve düşük elastisite modülü görülür.

Kimyasal bağ, iki ve daha fazla atomun yeni bir madde oluşturmak için birleşmesidir.

İki veya daha çok atom çekirdeğinin elektronlarına yaptıkları çekme kuvvetlerine "**Birincil bağ** (iyonik ; σ , π , Δ kovalent ve metalik bağlar) ", moleküller arasındaki etkileşimden doğan bağa da "**İkincil bağlar** (van der Waals)" denir. **Birincil bağların oluşması için atomlar arasındaki itme ve çekme kuvvetlerinin birbirine eşit olması, yani minimum potansiyel enerjinin sağlanması gerekir.**



İki atom için kuvvet-potansiyel enerji ilişkisi

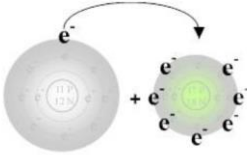
$$E = \int F dr$$

- Net enerji eğrisindeki minimum nokta, eğride 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.



Niçin atomlar bağ yapmak isterler?

Atomlar daha kararlı bir hale gelebilmek için ya elektron alırlar, ya verirler yada ortak kullanılırlar. Yani soy gazlara benzemek isterler.



Elektron nokta diyagramı, Lewis yapılar



• Noktalar Valans elektronlarını gösterir.

• Atomların ne çeşit bağla bağlanacaklarını valans elektronları belirler. Valans elektron sayısı periyodik cetveldeki konumdan belirlenir.

• Valans elektronlarını göstermek için Lewis diyagramı kullanılır. Bu diyagramda elementin ismi ve çevresinde en dış enerji seviyesindeki valans elektronlarını gösterir.

Atomların Lewis yapıları

Atom için kimyasal simge valans elektron sayısına karşılık gelen noktaların sayısı ile çevrilidir.

Number of Valence Electrons	1	2	3	4	5	6	7	8
Example	Hydrogen Group I (alkali metal)	Helium Group II (diatomic inert)	Group III Group III	Group IV Group IV	Group V Group V	Group VI Group VI	Group VII Group VII (Halogens)	Group VIII inert Noble Gases (Noble Gases)
Lewis Structure (electron dot diagram)	$H \cdot$	$Li \cdot$	$He \cdot$	$B \cdot$	$C \cdot$	$N \cdot$	$O \cdot$	$F \cdot$

Valans elektronları, kimyasal reaksiyonlar süresince kendi atomunu terk edebilecek ara tabakasını tam doldurmamış elektronlardır. Yani son kabukta elektronlar



■ **Bağ çeşitleri**

- Metal-metal olmayan (iyonik bağ)
- Metal olmayan-metal olmayan (Kovalent bağ)
- Metal-metal (Metalik bağ)

Key:

- Metals
- Nonmetals
- Metalloids



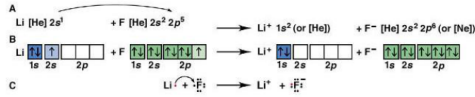
ATOMLARARASI BİRİNCİL BAĞLAR

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.



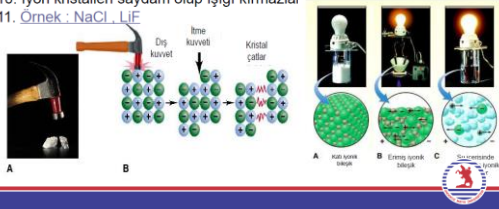
1. Metal ve ametal arasında görülür.
2. Elektron alışverişi esasına dayanır.
3. Son yörüngesi elektron dengesi bakımından dengesiz, elektron ilgisi düşük (elektropozitif) bir metal ile son yörüngesini elektronla doldurma isteğinde olan yani elektron ilgisi yüksek olan (elektronegatif) bir ametal arasında mevcut elektronların alışverişiyle kararlı bir yapı oluşturulması söz konusudur. Sonuç olarak iyon bağının oluşabilmesi için iki atomun elektronegativite değerleri arasında çok fark olmalıdır.
4. Oluşan iyonik yapıda, elektron veren atom + iyon haline, elektron alan da - iyon haline geçerler.

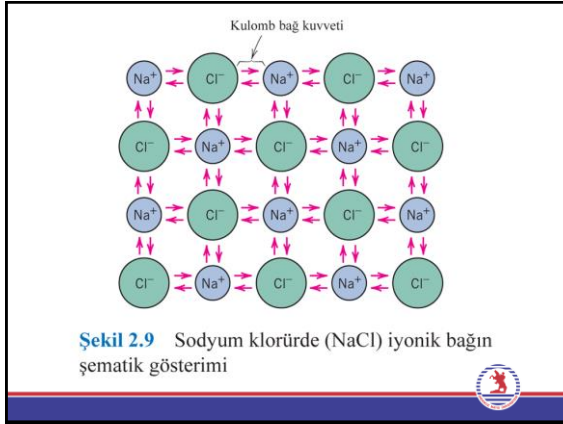


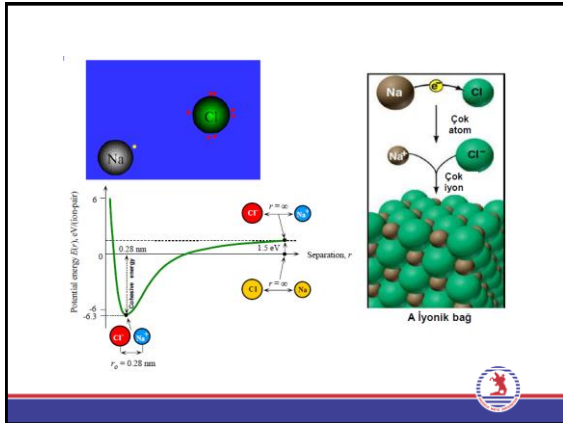
Bağ kuvveti bu iyonlar arasında ki elektrostatik çekmeden doğar.



5. Oluşan iyonik bağ simetrik (**elektron dağılımı homojen**) bir yapı gösterir. Dolayısıyla bağda açılı oluşumu söz konusudur. Simetriklikten uzaklaştıkça kovalent bağ oluşma eğilim artar.
6. Katı halde iyon bileşikleri elektriği çok az iletirken, ergimis halde elektrik akımını iyi iletirler.
7. İyon bileşiklerinin ergime ve kaynama noktaları çok yüksektir.
8. İyon bileşikleri düzenli kristal yapıdadırlar.
9. İyon kristalleri kırılğan yapı sergilerler.
10. İyon kristalleri saydam olup ışığı kırmazlar!
11. Örnek : NaCl, LiF







Çekim enerjisi-
atomlararası mesafe
ilişkisi

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

İtme enerjisi-
atomlararası mesafe
ilişkisi

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

Tablo 2.3 Bazı Maddelerin Bağ Enerjileri ve Ergime Sıcaklıkları

Bağ Tipi	Madde	Bağ Enerjisi		Ergime Sıcaklığı (°C)
		kJ/mol	eV/Atom, İyon, Molekül	
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
Van der Waals	W	849	8,8	3410
	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

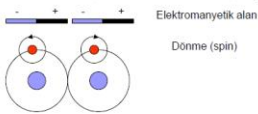


Kovalent Bağ

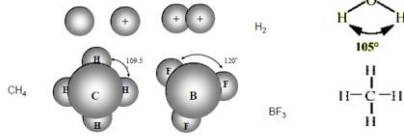
- **Kovalent bağda**, komşu iki atom elektronlarını ortaklaşa kullanmak suretiyle kararlı elektron yapılarını oluşturdukları varsayılmaktadır.
- Kovalent bağ yapısını oluşturan iki atom, bağ oluşumuna en az bir elektron kadar katkıda bulunmakta ve paylaşılan elektronların her iki atoma ait olduğu düşünülmektedir.



1. Elektron alışverişi söz konusu olmayıp elektron ortaklaşmasına ya da girişimine dayanır. Atomlar son yörüngelerindeki valans elektronlarını ortaklaşa kullanarak güçlü bağ oluştururlar.
2. Özellikle N, O, H, F ve Cl gibi ametaller arasında görülür. Si, Ge, Sb ve Se gibi metaller arasında da kısmen kovalent bağ da oluşur. 3B-7B arasındaki geçiş elementleri arasında da kısmen kovalent bağlı bileşikler oluşabilir.
3. Kovalent bağın oluşabilmesi için son kabuktaki orbitallerde en az bir elektron boşluğu olması gerekir.
4. Bu şekilde bağlanan bileşiklerini oluşturan atomlar arasındaki elektronegativite farkı düşüktür. Bu fark arttıkça iyonik özellik artar.

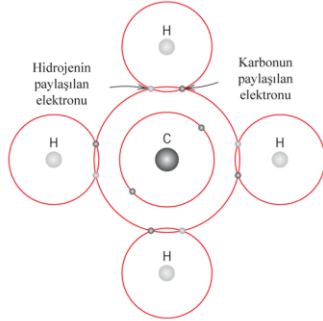
H₂ molekülü ve elektronların spinleri

5. Bu bağlar açılı yani ayrıktır, dolayısıyla elektron dağılımı asimetriktir.
6. Bağı oluşturan atomların aynı olup olmadıklarına göre Apolar (genelde aynı cins atomlar arasında) ve Polar (farklı cins atomlar arasında) ikiye ayrılırlar. Son yörüngedeki elektronların hangi tür orbitalden bağ oluşturmalarına göre de σ (s-s ve s-p arasında), π (p-p arasında), Δ (d orbitalleri arasında)
7. Bir elementteki kovalent bağ sayısı 8 - Grup No değerine eşittir.
8. Kovalent bağlı bileşikler hem katı hem de sıvı halde elektriği iyi iletmezler.



Soru: Kovalent bağlı yani iletkenler (Si, Ge, Sn gibi) elektriği iyi iletir neden?



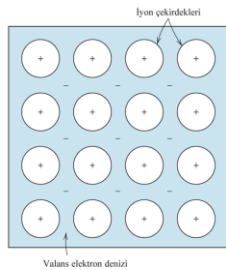


Şekil 2.10 Metan (CH_4) molekülünde kovalent bağın şematik gösterimi



Metalik Bağ

- Birincil atom bağlarının sonucunda oluşan **metalik bağ**, metal ve alaşımlarında bulunan bir bağ türüdür.




Şekil 2.11 Metalik bağın şematik gösterimi

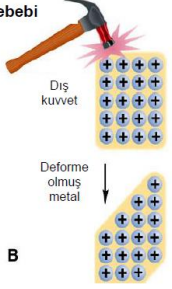


1. Metal atomları arasında görülür.
2. Metalik bağda da kovalent bağda olduğu gibi atomların birbirlerine yaklaşarak enerjilerini düşürme eğilimi vardır.
3. Kovalent bağ iki atom arasında gerçekleşebilirken, metalik bağ çok sayıda atom arasında gerçekleşir.
4. Bağlanmada serbest elektron ya da delokalize elektronların pozitif çekirdekler arasında bir elektron denizi oluşmaları ve bu elektron denizinin pozitif çekirdekler tarafından ortak olarak paylaşılması söz konusudur. Elektron denizi pozitif çekirdekleri birarada tutmaktadır. Hiçbir elektron bağı oluşturan herhangi bir metal atomuna aitir denilemez. Bir atom her taraftan eşit kuvvetlerin etkisi altındadır.
5. Metalik bağlarda yönelme söz konusu değildir.
6. Metallerde elektronların serbest kalma özellikleri nedeniyle çekirdek yükleri de azalmıştır. Bu nedenle elektronların serbestçe hareket etmeleri kolaydır. Ayrıca bu elektronların son kabuktan ayrılmış olması dağa boyaların yükselmesi ve frekanslarının da azalması anlamına gelir ki bu da kinetik enerjilerinde düşme demektir. Elektronların metal içerisinde çok serbest hareket etmeleri yapı içerisindeki potansiyel farkları da minimum olması anlamına gelir, yani potansiyel enerjide düşüktür. O halde metalik bağlarda elektronların kinetik ve potansiyel enerjileri de düşüktür.
7. Elektriksel anlamda çekirdek çabızbesinden nispeten uzaklaşmış serbest elektronların herhangi bir elektriksel, mekanik ve ısı enerjisiyle tahrik edilmesi halinde birbirlerini itmesi de elektriksel ve ısı iletkenlik ve sekilendirilebilirlik anlamında elektronların birbirlerini itmesi ile gerçekleşir.
8. Atomların valans elektronları ne kadar az ise, bu elektronların serbest kalma ihtimali o kadar fazladır, dolayısıyla elektriksel ve ısı iletkenlik artar. İşlenebilirlikleri iyidir. Valans elektron sayısı artınca kovalent bağ yapma ihtimali ve çekirdek yükü artar. Bu nedenle valans elektron sayısı yüksek olan Fe, Ni, W ve Ti gibi elementlerin atomlarının yapıları metalik bağlanmalar sonucunda bu metallerin ergime dereceleri yüksek olmaktadır, yani kısmen kovalent özellik göstererek yönelimleri söz konusu olabilir.

Metal deformasyonunun sebebi



A

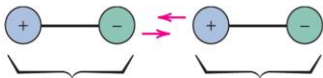


B

Metal bağına bir çok örnek

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.



Atomik veya moleküler dipoller

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

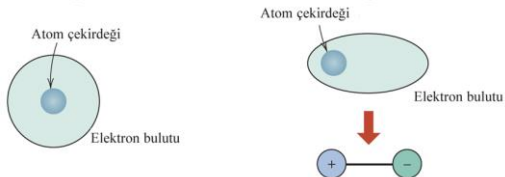
1. Moleküller arası olan ikincil bağlardır.
2. Elektronik kutuplaşmaya dayanır.
3. Dış yörüngesi tam dolmuş soygazlar ya da tam dolmamış element atomlarının, kovalent iyonik bağlı bileşiklerin kendi aralarında oluşan kutuplaşmalardan çekme etkisi olur.
4. Bu çekme son yörüngesi tam dolu olan soygazlarda ve simetrik moleküllerde geçici kutuplaşma ile gerçekleşir. Herhangi bir etki neticesinde elektronların konumlarını değiştirmesiyle, salınımlarıyla ani kutuplaşmalar olur.
5. Bu çekme özellikle kovalent bağlı bileşiklerde yönlü olarak kaynaklanan asimetrik yük dağılımından (molekül kutuplaşması) dolaydır. Bu nedenle elektronların hareketi, titreşim vs. gibi sebeplerle salınım yapar, yani dipoller (kutuplaşmalar) meydana gelir. Bir bölgede çok küçük zaman dilimlerinde elektron yük dağılımı değişir. Yani potansiyel enerji değişir. Bu potansiyel enerjinin minimum edilmesi adına van der Waals bağları oluşur.
6. Molekül kutuplaşması ile oluşan van der Waals bağları geçici kutuplaşma ile oluşan van der Waals bağlarından güçlüdür.
7. Örnek: H_2O (molekül kutuplaşması) , sıvı azot (geçici kutuplaşma)



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

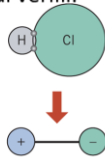


Değişim Kaynaklı Dipol Bağları



Polar-Molekül Kaynaklı Dipol Bağları

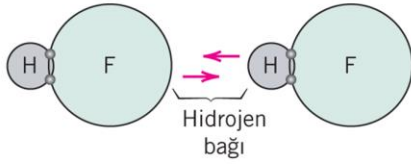
- Bazı moleküllerde pozitif ve negatif yüklü bölgelerin simetrik olmayan dağılımından dolayı, kalıcı dipol momentleri mevcuttur, bu şekildeki moleküllere **polar molekül** adı verilir.



Polar bir hidroklorik asit (HCl) molekülünün şemasini.



Kalıcı Dipol Bağları



Şekil 2.15 Hidrojen flüorürde (HF) hidrojen bağının şematik gösterimi



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.

