

ΑΡΓΥΡΗΣ Σ. ΒΑΤΑΛΗΣ
Αναπρωτής Καθηγητής Τ.Ε.Ι. Δυτικής Μακεδονίας

ΧΗΜΙΚΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ



*Σ' αυτούς που μοχθούν
για τη γνώση
και πασχίζουν
για την παραγωγή*

Πρόλογος

Η Χημική Τεχνολογία άρχισε να εμφανίζεται ως ανεξάρτητη επιστήμη κατά το τέλος του 18^{ου} και αρχές του 19^{ου} αιώνα και από τότε παρουσίασε ραγδαία ανάπτυξη ως εφαρμοσμένη επιστήμη μεγάλης πρακτικής σημασίας. Χημική Τεχνολογία είναι η επιστήμη που πραγματεύεται μεθόδους και διεργασίες για την με μέγιστη απόδοση και χαμηλότερο κόστος μετατροπή των πρώτων υλών σε χρήσιμα προϊόντα. Η Χημική Τεχνολογία στηρίζεται στην Ανόργανη και Οργανική Χημεία, Φυσικοχημεία, Φυσική, Θερμοδυναμική και άλλες επιστήμες.

Η Χημική Τεχνολογία υποδιαιρείται σε δύο βασικούς κλάδους:

- Την Ανόργανη Χημική Τεχνολογία με αντικείμενο την παραγωγή ανόργανων οξέων, βάσεων, διαφόρων αλάτων, λιπασμάτων, τσιμέντων, γυαλιού, κεραμικών, μετάλλων και των κραμάτων τους.
- Την Οργανική Χημική Τεχνολογία με αντικείμενο την βιομηχανική παραγωγή προϊόντων βασικής οργανικής σύνθεσης, χρωμάτων, πολυμερών (πλαστικών και ελαστικών) και τις διεργασίες στα στερεά, αέρια και υγρά καύσιμα.

Το βιβλίο αυτό γράφτηκε για να καλύψει διδακτικές ανάγκες του Τμήματος Μηχανολογίας των Τ.Ε.Ι. Επίσης είναι χρήσιμο τόσο για φοιτητές και άλλων Τμημάτων των Τ.Ε.Ι., που στο πρόγραμμα σπουδών τους περιλαμβάνονται μαθήματα που σχετίζονται με τη Χημεία, και αντίστοιχων Τμημάτων Α.Ε.Ι. όσο και για επιστήμονες που ασχολούνται με την παραγωγή.

Από το ευρύ πεδίο θεμάτων που περιλαμβάνει η Χημική Τεχνολογία, που περιγράφουν την παραγωγή ενός τεράστιου αριθμού προϊόντων από τη χημική βιομηχανία και που είναι αδύνατο να συμπεριληφθούν σ' ένα βιβλίο, στο παρόν βιβλίο αναπτύσσεται η τεχνολογία παραγωγής των κατασκευαστικών υλικών, η χημεία και τεχνολογία του νερού που είναι απαραίτητη σε όλες τις βιομηχανικές διεργασίες και η τεχνολογία των καυσίμων. Επίσης κρίθηκε σκόπιμο στην αρχή αυτού του βιβλίου να παρατεθούν στοιχεία από τη θεωρία της δομής των ατόμων και των χημικών δεσμών, λόγω της σημαντικότητάς τους γενικά σε κάθε διαπραγμάτευση θεμάτων που έχουν σχέση με τη Χημεία.

Περιεχόμενα

1	ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΔΟΜΗΣ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ ΚΑΙ ΘΕΩΡΙΑΣ ΤΩΝ ΔΕΣΜΩΝ	11
1.1	Στοιχεία δομής των ατόμων	11
1.1.1	Ατομικά πρότυπα Thomson και Rutherford	11
1.1.2	Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία	12
1.1.3	Το ατομικό πρότυπο του Bohr	13
1.1.4	Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg	16
1.1.5	Η κυματική εξίσωση του Schrödinger	17
1.1.6	Ατομικός αριθμός – Ισότοπα – Ιόντα	19
1.2	Στοιχεία από τη θεωρία των δεσμών	20
1.2.1	Εισαγωγή	20
1.2.2	Θεωρία του Lewis για τον ομοιοπολικό δεσμό. Κανόνας της οκτάδας	20
1.2.3	Θεωρία των μοριακών τροχιακών	21
1.2.4	Ιοντικός δεσμός	24
1.2.5	Μεταλλικός δεσμός	25
2	ΠΡΩΤΕΣ ΥΛΕΣ ΚΑΙ ΑΞΙΟΠΟΙΗΣΗ ΑΥΤΩΝ	27
2.1	Εισαγωγή	27
2.2	Εμπλουτισμός των πρώτων υλών	28
3	ΒΑΣΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ ΤΗΣ ΧΗΜΙΚΗΣ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑΣ – ΧΗΜΙΚΟΙ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΕΣ	35
3.1	Βασικές διεργασίες της χημικής βιομηχανίας	35
3.2	Χημικοί αντιδραστήρες	37
4	ΧΗΜΕΙΑ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΤΟΥ ΝΕΡΟΥ	41
4.1	Γενικά για το νερό	41
4.2	Χημική συμπεριφορά του νερού	42
4.3	Φυσικά νερά	43
4.4	Καθαρισμός του νερού	44

4.5	Σκληρότητα του νερού.....	45
4.6	Αποσκλήρυνση του νερού	45
4.6.1	Μέθοδος καταβύθισης	46
4.6.2	Μέθοδος ιοντοανταλλαγής	47
4.7	Χρήση του νερού στη βιομηχανία	51
4.7.1	Το νερό των λεβήτων και η επεξεργασία του.....	51
4.7.2	Το νερό ψύξης	53
5	ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑ	55
5.1	Μεταλλεύματα	55
5.1.1	Προετοιμασία του μεταλλεύματος	56
5.1.2	Παραγωγή του μετάλλου	56
5.1.3	Καθαρισμός των μετάλλων	60
5.2	Παραγωγή του σιδήρου και του χάλυβα.....	62
5.2.1	Παραγωγή πρωτογενούς χυτοσιδήρου στην υψικάμινο	62
5.2.2	Παραγωγή χάλυβα	65
5.3	Παραγωγή του αλουμινίου	68
5.3.1	Παραγωγή αλουμίνας από τον βωξίτη.....	69
5.3.2	Ηλεκτρολυτική παραγωγή του αλουμινίου με τη μέθοδο Hall - Heroult.....	70
6	ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ ΤΩΝ ΠΥΡΙΤΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ	73
6.1	Γενικά	73
6.2	Κεραμικά υλικά	74
6.3	Τσιμέντα	80
6.3.1	Γενικά	80
6.3.2	Το τσιμέντο Portland	81
6.3.3	Άσβεστος	86
6.3.4	Τσιμέντα γύψου	89
6.4	Ύαλοι.....	89
6.4.1	Γενικά	89
6.4.2	Πρώτες ύλες και παρασκευή της ύαλου	90
7	ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΚΑΥΣΙΜΩΝ.....	93
7.1	Το πετρέλαιο και τα προϊόντα του	93
7.1.1	Γενικά για τη βιομηχανία του πετρελαίου.....	93
7.1.2	Φύση, χημική σύνθεση και είδη αργού πετρελαίου	94

7.1.3	Χαρακτηριστικά ποιότητας αργού πετρελαίου.....	97
7.1.4	Προκατεργασία του αργού πετρελαίου	98
7.1.5	Απόσταξη του αργού πετρελαίου	99
7.1.6	Κατεργασίες μοριακού μετασχηματισμού των κλασμάτων του πετρε- λαίου	102
7.1.6.1	Αναμόρφωση	102
7.1.6.2	Πυρόλυση.....	103
7.1.7	Μέθοδοι εξευγενισμού.....	105
7.1.8	Συνθετικές μέθοδοι παρασκευής βενζινών.....	107
7.1.9	Τελικά προϊόντα απόσταξης του πετρελαίου	108
7.1.9.1	Βενζίνη.....	108
7.1.9.2	Νάφθα	110
7.1.9.3	Κηροζίνη (φωτιστικό πετρέλαιο).....	110
7.1.9.4	Πετρέλαια εσωτερικής καύσης	110
7.2	Στερεά καύσιμα – Ορυκτοί άνθρακες.....	111
7.2.1	Σύσταση και ιδιότητες των γαιανθράκων.....	111
7.2.2	Θερμογόνος δύναμη	113
7.2.3	Κατάταξη ορυκτών ανθράκων.....	114
7.2.4	Τεχνητά στερεά καύσιμα	115
7.3	Αέρια καύσιμα	116
7.3.1	Φυσικό αέριο	116
7.3.2	Τεχνητά αέρια καύσιμα	118
7.3.2.1	Φωταέριο.....	118
7.3.2.2	Αέριο αεριογόνων	120
7.3.2.3	Κυανό υδραέριο	121
7.3.2.4	Αέριο υψικαμίνων.....	121
7.3.2.5	Αέρια από αεριοποίηση του πετρελαίου.....	122
7.3.2.6	Μεθάνιο, αιθάνιο, προπάνιο και βουτάνιο και αέρια διύλισης του πετρελαίου	125
8	ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ	127
8.1	Εισαγωγή	127
8.2	Βασικοί ορισμοί και έννοιες	127
8.3	Μέθοδοι πολυμερισμού	134
8.3.1	Γενικά	134
8.3.2	Πολυμερισμός μάζας	134
8.3.3	Πολυμερισμός διαλύματος	135
8.3.4	Πολυμερισμός γαλακτώματος	135

8.3.5	Πολυμερισμός αιωρήματος	136
8.3.6	Πολυμερισμός μεταξύ φάσεων	136
8.3.7	Πολυμερισμός υψηλής πίεσης	136
8.4	Παραγωγή θερμοπλαστικών πολυμερών	137
8.4.1	Πολυαιθυλένιο	137
8.4.2	Πολυβινυλοχλωρίδιο (PVC)	138
8.4.3	Πολυπροπυλένιο	139
8.4.4	Πολυστυρόλιο	139
8.4.5	Πολυακρυλονιτρίλιο	140
8.4.6	Συμπολυμερές στυρολίου – ακρυλονιτρίλιου (SAN)	141
8.4.7	Συμπολυμερή ακρυλονιτρίλιου – βουταδιενίου – στυρολίου (ABS)	141
8.4.8	Πολυ(μεθακρυλικό μεθύλιο) (PMMA)	141
8.4.9	Πολυτετραφθοροαιθυλένιο (PTFE ή teflon)	142
8.4.10	Πολυαμίδια (nylons)	142
8.4.11	Πολυανθρακικά πολυμερή	144
8.4.12	Πολυακετάλες	146
8.4.13	Θερμοπλαστικοί πολυεστέρες	146
8.5	Παραγωγή θερμοστατικών πλαστικών πολυμερών	148
8.5.1	Φαινολικά θερμοστατικά υλικά (φαινολικές ρητίνες)	148
8.5.2	Εποξυ ρητίνες	148
8.5.3	Ακόρεστοι πολυεστέρες	152
8.5.4	Αμινοπλαστικά (αμινικές ρητίνες)	153
8.6	Ελαστομερή	155
8.6.1	Φυσικό ελαστικό	155
8.6.2	Συνθετικά ελαστικά	157
8.7	Η δομή των πολυμερών	164
	<i>Βιβλιογραφία</i>	167
	<i>Ευρετήριο όρων</i>	169

1^ο Κεφάλαιο

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΔΟΜΗΣ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ ΚΑΙ ΘΕΩΡΙΑΣ ΤΩΝ ΔΕΣΜΩΝ

1.1 Στοιχεία δομής των ατόμων

1.1.1 Ατομικά πρότυπα Thomson και Rutherford

Ο Έλληνας φιλόσοφος Λεύκιππος (450 π.Χ.) και ο μαθητής του Δημόκριτος ήταν οι πρώτοι που υποστήριξαν ότι όλα τα υλικά σώματα αποτελούνται από απειροελάχιστα σωματίδια, άτομα, απλή και αναλλοίωτα, τα οποία ονόμασαν άτομους. Ο Dalton (1803) υποστήριξε ότι τα άτομα είναι αυτοτελή μικρότατα σωματίδια που δεν μπορούν να υποδιαιρεθούν με κανένα τρόπο. Ο Dalton δεχόταν επιπρόσθετα ότι τα άτομα του ίδιου στοιχείου είναι απόλυτα όμοια και ισοβαρή και ότι οι χημικές ενώσεις προκύπτουν με την ένωση ατόμων των διαφόρων στοιχείων με απλές αριθμητικές αναλογίες.

Τα συμπαγή και αδιαίρετα άτομα της θεωρίας Dalton παύουν να ανταποκρίνονται πλήρως στην πραγματικότητα μετά την ανακάλυψη ότι αυτά φέρουν θετικά και αρνητικά φορτία. Ο Thomson το 1898 πρότεινε ένα ατομικό πρότυπο, σύμφωνα με το οποίο τα άτομα είναι συμπαγείς σφαίρες με ακτίνα 10^{-8} cm περίπου. Τα θετικά φορτία, σύμφωνα με τον Thomson, βρίσκονται στην επιφάνεια της σφαίρας, τα δε αρνητικά αμελητέας μάζας βρίσκονται διασπαρμένα στο εσωτερικό της σφαίρας και το σύνολο του ατόμου είναι ηλεκτρικά ουδέτερο.

Το πρότυπο του Thomson εγκαταλείφθηκε γρήγορα μετά τα πειράματα του Rutherford το 1911. Σύμφωνα με τον Rutherford το θετικό φορτίο και όλη σχεδόν η μάζα του ατόμου είναι συγκεντρωμένη σε πολύ μικρό χώρο μέσα στο άτομο που αποτελεί τον πυρήνα και τα ηλεκτρόνια με το αρνητικό ηλεκτρικό φορτίο

κινούνται γύρω από τον πυρήνα σε διάφορες τροχιές με πολύ μεγάλες ταχύτητες, όπως οι πλανήτες γύρω από τον ήλιο.

1.1.2 Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία

Για να γίνει κατανοητή η δομή των ατόμων είναι απαραίτητη η κατανόηση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Το 1864 ο Maxwell διατύπωσε την ηλεκτρομαγνητική θεωρία του φωτός, σύμφωνα με την οποία φως παράγεται από τις κινήσεις δόνησης ενός ηλεκτρικού φορτίου, οπότε παράγονται ένα μεταβαλλόμενο μαγνητικό και ένα μεταβαλλόμενο ηλεκτρικό πεδίο κάθετα μεταξύ τους που διαδίδονται υπό μορφή κυμάτων με την ταχύτητα του φωτός. Τα κύματα αυτά ονομάζονται ηλεκτρομαγνητικά κύματα.

Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία χαρακτηρίζεται από:

- τη *συχνότητα* f , που εκφράζει τον αριθμό των κύκλων ή των ταλαντώσεων που πραγματοποιούνται στη μονάδα του χρόνου.
- Την *ταχύτητα*. Η ταχύτητα διάδοσης όλων των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων στο κενό είναι ίση με $2,997 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.
- Το *μήκος κύματος* λ , που είναι η μικρότερη απόσταση σε δύο γειτονικές θέσεις που βρίσκονται στην ίδια φάση σε ένα κύμα.

Τα ανωτέρω μεγέθη σχετίζονται μεταξύ τους με τη σχέση

$$c = \lambda \cdot f \quad (1.1)$$

Οι ηλεκτρομαγνητικές ακτινοβολίες (ακτίνες X, υπεριώδες, ορατό φως κτλ) είναι της αυτής φύσης και διαφέρουν μόνο ως προς τη συχνότητα, όπως φαίνεται στον Πίνακα 1.1.

Το 1900 ο Planck διατύπωσε την άποψη ότι η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία μπορεί να εκπεμφθεί ή να απορροφηθεί από την ύλη μόνο σε μικρές καθορισμένες ποσότητες που ονομάζονται *φωτόνια* (κβάντα). Η ενέργεια ενός φωτονίου δίνεται από την εξίσωση:

$$E_q = h \cdot f \quad (1.2)$$

όπου f η συχνότητα της ακτινοβολίας και
 h η σταθερά του Planck ($6,6 \times 10^{-34} \text{ Joule} \cdot \text{sec}$).

Επομένως, η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι *κβαντισμένη* σε φωτόνια που παρομοιάζονται με σωματίδια ενέργειας E_q . Ο De Broglie (1924) διατύπωσε μια αντίστροφη σχέση ότι τα σωματίδια μάζας m και

ταχύτητας v συμπεριφέρονται ως κύματα μήκους κύματος $\lambda = h/mv$. Οι Davisson και Germer (1927) καθώς και ο Thomson επιβεβαίωσαν την κυματική φύση των ηλεκτρονίων δείχνοντας ότι μια δέσμη ηλεκτρονίων ίδιας ενέργειας μπορεί να ανακλασθεί από ένα κρύσταλλο.

1.1.3 Το ατομικό πρότυπο του Bohr

Σύμφωνα με τον Bohr το ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου μπορεί να κινείται σε ορισμένες κυκλικές τροχιές (στοιβάδες ή φλοιούς). Κάθε μια από τις τροχιές αυτές αντιστοιχεί σε ορισμένη ενέργεια και αναφέρεται συνήθως ως *ενεργειακό επίπεδο* ή *ενεργειακή κατάσταση*. Η καινοτομία του Bohr συνίσταται στο ότι κατ' αυτόν δεν επιτρέπονται όλες οι δυνατές τροχιές του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα, αλλά μόνο εκείνες για τις οποίες η στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του $h/2\pi$. Η ενέργεια του ηλεκτρονίου δίνεται από την εξίσωση:

$$E_n = \frac{-2\pi^2 m_e e^4}{n^2 h^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV (electronvolts)} \quad (1.3)$$

όπου n είναι ο *κύριος κβαντικός αριθμός* (θετικός ακέραιος) που δηλώνει την ηλεκτρονική στοιβάδα, στην οποία το ηλεκτρόνιο έχει συγκεκριμένη ενεργειακή στάθμη E_n ,

e είναι το φορτίο του ηλεκτρονίου και

m_e η μάζα του.

Ο κβαντικός αριθμός $n=1$ αντιστοιχεί στην ενεργειακή κατάσταση με την μικρότερη ενέργεια (*θεμελιώδης κατάσταση*). Εάν το άτομο απορροφήσει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, το ηλεκτρόνιο είναι δυνατό να μεταβεί από την στοιβάδα με $n=1$, ενεργειακής στάθμης E_1 , σε στοιβάδα με $n=i$ μεγαλύτερης ενεργειακής στάθμης E_i , όταν η συχνότητα της ακτινοβολίας είναι:

$$f = \frac{E_i - E_1}{h} \quad (1.4)$$

Στην περίπτωση αυτή το άτομο βρίσκεται σε *κατάσταση διέγερσης*. Το ηλεκτρόνιο παραμένει για απειροελάχιστο χρονικό διάστημα στη στοιβάδα με $n=i$ και επανέρχεται στη στοιβάδα με $n=1$ είτε με απ' ευθείας μετάβαση, οπότε το άτομο εκπέμπει ακτινοβολία με μορφή φωτονίου συχνότητας $f = (E_i - E_1)/h$ ίσης με τη συχνότητα της ακτινοβολίας που απορρόφησε, είτε με διαδοχικές με-

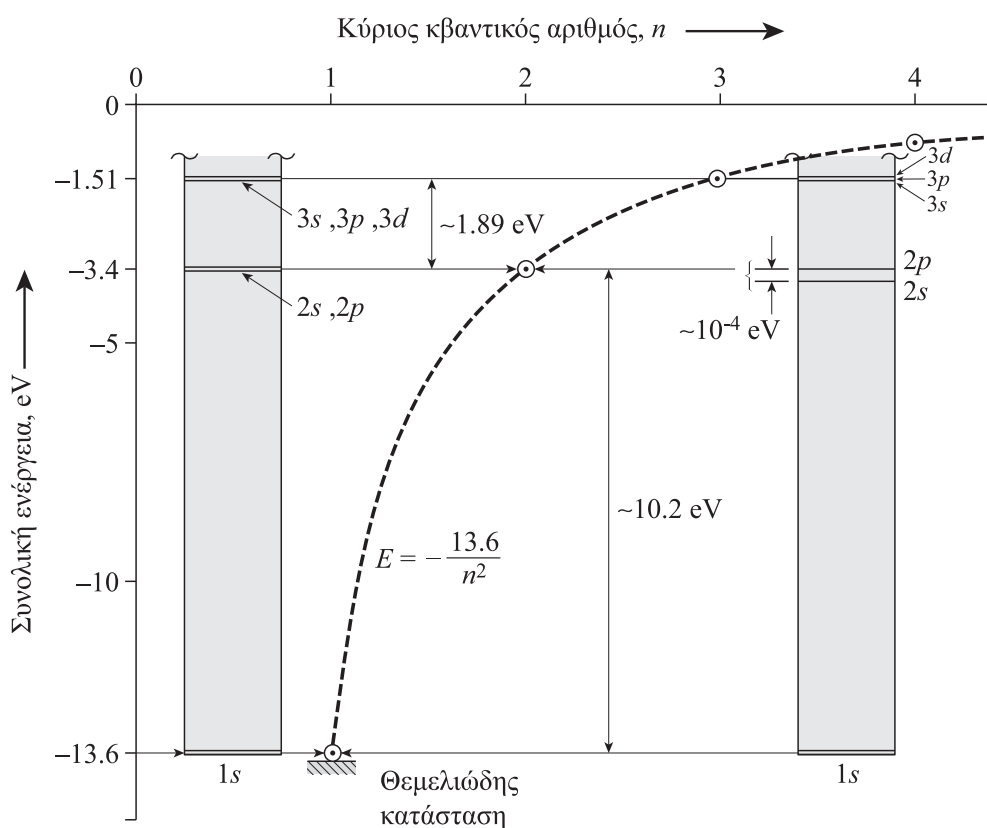
ταβάσεις σε στοιβάδες μειούμενης ενεργειακής στάθμης, οπότε εκπέμπονται φωτόνια διαφόρων συχνοτήτων

$$f_{\kappa} = (E_i - E_{\kappa})/h \quad (1.5)$$

όπου E_i η ενεργειακή στάθμη της κάθε στοιβάδας, από την οποία προέρχεται το ηλεκτρόνιο,

E_{κ} η ενεργειακή στάθμη της κάθε στοιβάδας, στην οποία μεταβαίνει το ηλεκτρόνιο.

Στο Σχήμα 1.1 δίνεται ένα διάγραμμα των ενεργειακών σταθμών για το υδρογόνο.



Σχήμα 1.1 Διάγραμμα ενεργειακών σταθμών του ατομικού υδρογόνου

Όπως είναι γνωστό, το λευκό ηλιακό φως είναι σύνθετο και αναλύεται με ένα πρίσμα σε επτά ορατά χρώματα από το ερυθρό ως το ιώδες. Επειδή τα όρια μεταξύ των διαφόρων χρωμάτων δεν είναι σαφή, το φάσμα που προκύπτει είναι μια

συνεχής σειρά χρωμάτων και για το λόγο αυτό ονομάζεται *συνεχές φάσμα*. Το φως ορισμένης συχνότητας ονομάζεται *μονοχρωματικό*, δεν αναλύεται περαιτέρω και το φάσμα του αποτελείται μόνο από μια γραμμή στη θέση της αντίστοιχης συχνότητας.

Πίνακας 1.1 Χαρακτηριστικά στοιχεία του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος

Φάσμα		Μικροκύματα			Υπέυθο		Ορατό	Υπεριώδες		Ακτίνες Χ	
Μήκος κύματος	(cm)	10	1	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}
	(Å)	10^9	10^8	10^7	10^6	10^5	10^4	10^3	10^2	10	1
Συχνότητα	(Hz)	3×10^9	3×10^{10}	3×10^{11}	3×10^{12}	3×10^{13}	3×10^{14}	3×10^{15}	3×10^{16}	3×10^{17}	3×10^{18}
Αριθμός κυμάτων	(cm ⁻¹)	10^{-1}	1	10	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}
Ενέργεια	(kJ mol ⁻¹)	$1,2 \times 10^{-3}$	$1,2 \times 10^{-2}$	$1,2 \times 10^{-1}$	1,2	$1,2 \times 10$	$1,2 \times 10^2$	$1,2 \times 10^3$	$1,2 \times 10^4$	$1,2 \times 10^5$	$1,2 \times 10^6$

Το λευκό φως, λοιπόν, αποτελείται από πολλές μονοχρωματικές ακτινοβολίες διαφόρων συχνοτήτων. Εάν το ορατό φως αφεθεί να περάσει μέσα από σωλήνα που περιέχει αέριο υδρογόνο και στη συνέχεια αναλυθεί από κατάλληλο πρίσμα, στο λαμβανόμενο φάσμα εμφανίζεται μια σειρά από διακεκριμένες σκοτεινές γραμμές (*γραμμικό φάσμα απορρόφησης* του υδρογόνου). Κάθε γραμμή αντιστοιχεί στην απορρόφηση μιας ορισμένης μονοχρωματικής ακτινοβολίας (από αυτές που αποτελούν το ορατό φως) από τα άτομα του υδρογόνου με διέγερσή τους, της οποίας η συχνότητα δίνεται από τη σχέση 1.5. Το ίδιο αποτέλεσμα, όσον αφορά τις θέσεις των χαρακτηριστικών γραμμών, δίνει και το *φάσμα εκπομπής* του υδρογόνου (Σχήμα 1.2), το οποίο λαμβάνεται αν εφαρμοστεί υψηλή τάση στα άκρα ενός σωλήνα που περιέχει το αέριο.



Σχήμα 1.2 Γραμμικό φάσμα εκπομπής του υδρογόνου

Η θεωρία του Bohr ισχύει για το υδρογόνο όχι όμως και για τα πιο περίπλοκα άτομα, για τα οποία έχουν αναπτυχθεί άλλες θεωρητικές εξηγήσεις. Όμως η ιδέα για την ύπαρξη σειράς ορισμένων ηλεκτρονικών ενεργειακών καταστάσεων ισχύει πάντα αν και η περιγραφή αυτών των καταστάσεων γίνεται πιο πολύπλοκη για βαρύτερα άτομα.

Εκτός από τον κύριο κβαντικό αριθμό n έχουμε τον *δευτερεύοντα ή αζιμουθιακό* κβαντικό αριθμό l , ο οποίος αποτελεί μέτρο της γωνιακής στροφορμής του ηλεκτρονίου και παίρνει τιμές κατά μονάδα μικρότερες από τον n , δηλαδή $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Στο Σχήμα 1.1 χρησιμοποιούνται τα σύμβολα s, p, d που αντιστοιχούν στις καταστάσεις $l = 0, 1$ και 2 αντίστοιχα. Όταν λαμβάνεται το φάσμα ενός στοιχείου τα άτομα του οποίου βρίσκονται μέσα σε ισχυρό μαγνητικό πεδίο, παρατηρείται σχάση των κύριων φασματικών γραμμών σ' έναν αριθμό απλούστερων γραμμών, οι οποίες για να ορισθούν χρειάζεται να εισαχθεί ένας άλλος κβαντικός αριθμός που ονομάζεται *τρίτος ή μαγνητικός* κβαντικός αριθμός m_l . Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός προσδιορίζει τη συνιστώσα της γωνιακής στροφορμής που είναι παράλληλη προς την ένταση του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Ο m_l λαμβάνει τιμές μεταξύ $-l$ και $+l$. Επειδή το ηλεκτρόνιο κινείται και γύρω από τον άξονά του (spin ηλεκτρονίου), δημιουργείται μαγνητική ροπή από αυτή την περιστροφή. Η φορά της μαγνητικής ροπής εξαρτάται μόνο από τη φορά περιστροφής του ηλεκτρονίου, δηλαδή αν το spin είναι δεξιόστροφο ή αριστερόστροφο. Για την περιγραφή αυτού του spin χρησιμοποιείται ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός που ονομάζεται *κβαντικός αριθμός του spin* και μπορεί να πάρει μόνο τις τιμές $+\frac{1}{2}$ και $-\frac{1}{2}$. Οι τέσσερις κβαντικοί αριθμοί περιγράφουν την ενεργειακή κατάσταση ενός ηλεκτρονίου. Σύμφωνα με την *αρχή του Pauli* που αναφέρεται στην κατανομή των ηλεκτρονίων στο χώρο γύρω από τον πυρήνα, δεν είναι δυνατό σε άτομο να υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια που να έχουν και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς τους ίδιους.

1.1.4 Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg

Σύμφωνα με τη θεωρία του De Broglie για την κυματική φύση των μικροσωματιδίων, όπως είναι τα ηλεκτρόνια, δεν είναι δυνατό να προσδιορίσουμε με ακρίβεια την ταχύτητα και τη θέση τους. Σύμφωνα με τον Heisenberg δεν μπορούν να υπολογισθούν με ακρίβεια ταυτόχρονα η θέση και η ορμή ενός σωματιδίου. Υπάρχει πάντοτε μια αβεβαιότητα (σφάλμα) στην ορμή $\Delta p = m \cdot \Delta v$ και στη θέση Δx και το γινόμενο τους δεν μπορεί να είναι μικρότερο από ένα κατώτερο όριο

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{2\pi} \quad (1.6)$$

1.1.5 Η κυματική εξίσωση του Schrödinger

Η μη δυνατότητα καθορισμού της ορμής και της θέσης του ηλεκτρονίου ταυτόχρονα σημαίνει στη Φυσική ότι δεν είμαστε σε θέση να γνωρίζουμε την τροχιά που το ηλεκτρόνιο ακολουθεί. Επομένως, ήταν απαραίτητο να αντικατασταθεί η θεωρία του Bohr, η οποία απαιτεί συγκεκριμένες τροχιές του ηλεκτρονίου. Στη νεότερη θεωρία για τη δομή του ατόμου αντικαθίσταται η τροχιά με το *τροχιακό*.

Το 1926 ο Schrödinger κατέληξε στην ομώνυμη εξίσωσή του που λαμβάνει υπόψη τη διττή φύση του ηλεκτρονίου (σωματίδιο – κύμα) και γι' αυτό περιγράφει με μεγαλύτερη ακρίβεια την κίνηση και την πραγματική του συμπεριφορά. Η εξίσωση του Schrödinger έχει τη μορφή

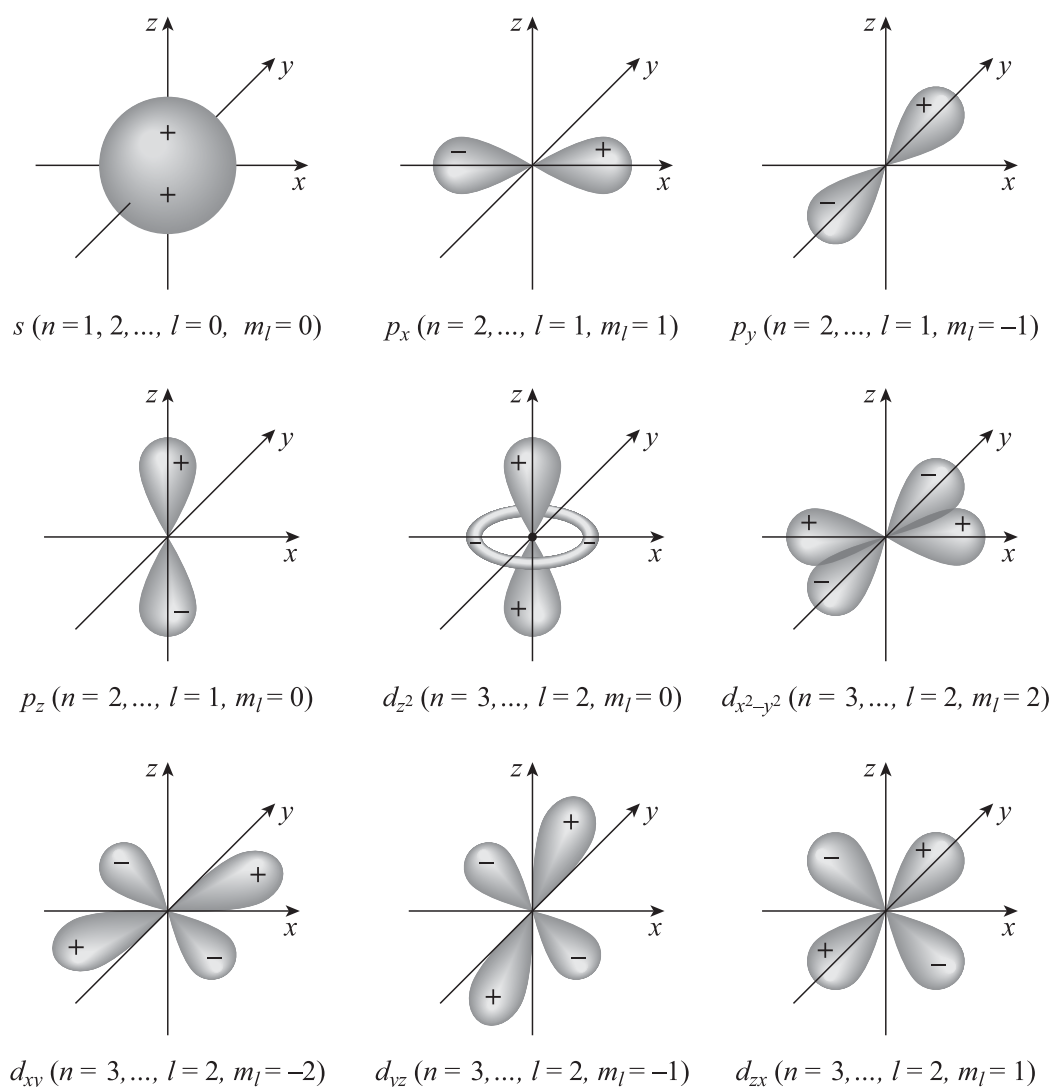
$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + V\Psi = E\Psi \quad (1.7)$$

όπου Ψ είναι η *κυματική συνάρτηση* που περιγράφει την συμπεριφορά του ηλεκτρονίου και είναι συνάρτηση των καρτεσιανών συντεταγμένων x, y και z , E είναι η ολική ενέργεια του ηλεκτρονίου και V η δυναμική του ενέργεια. Οι λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger είναι μαθηματικές συναρτήσεις, έστω $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ που αντιστοιχούν σε ορισμένες τιμές της ενέργειας E : E_1, E_2, E_3, \dots . Οι λύσεις που βρίσκονται κατά τον τρόπο αυτό εξαρτώνται από τρεις ακέραιους αριθμούς που είναι οι τρεις γνωστοί κβαντικοί αριθμοί n, l και m_l . Για κάθε τριάδα κβαντικών αριθμών n, l και m_l υπάρχει μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, y, z)$, της οποίας η γραφική απεικόνιση στο χώρο δίνει την περιοχή στην οποία μπορεί να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε δεδομένη χρονική στιγμή και η οποία ονομάζεται *τροχιακό* και χαρακτηρίζεται από ορισμένη ενέργεια E . Το τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης, $|\Psi(x, y, z)|^2$, δίνει την σχετική πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου σε κάποιο σημείο του χώρου με συντεταγμένες x, y, z .

Επομένως, οι τρεις κβαντικοί αριθμοί n, l, m_l καθορίζουν ένα τροχιακό και την ενέργειά του. Σε κάθε τροχιακό υπάρχουν το πολύ δύο ηλεκτρόνια αντιθέτου κβαντικού αριθμού spin. Απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, τροχιακά με τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς n και l έχουν την ίδια ενέργεια. Γι' αυτό οι ενεργειακές στάθμες των ηλεκτρονίων ορίζονται συμβολικά ως $1s, 2s, 2p, 3s$ κλπ, όπου ο αριθμός δηλώνει τον κύριο κβαντικό αριθμό (ηλεκτρονική κύρια στοιβά-

δα) και το λατινικό γράμμα τον δευτερεύοντα ή αζιμουθιακό κβαντικό αριθμό l (ηλεκτρονική υποστοιβάδα). Κάθε υποστοιβάδα περιλαμβάνει ένα ή περισσότερα τροχιακά ανάλογα με τις δυνατές τιμές του m_l , τα οποία, όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου έχουν την ίδια ενέργεια. Ο αριθμός ηλεκτρονίων που υπάρχει σε κάθε τροχιακό αναγράφεται ως εκθέτης δίπλα στο λατινικό γράμμα, π.χ. $1s^1$ (ένα ηλεκτρόνιο), $1s^2$ (δύο ηλεκτρόνια).

Στο Σχήμα 1.3 δίνονται τα τροχιακά για τις διάφορες τιμές των κβαντικών αριθμών n , l και m_l .



Σχήμα 1.3 Ατομικά τροχιακά

1.1.6 Ατομικός αριθμός – Ισότοπα – Ιόντα

Κάθε άτομο αποτελείται από ένα πυρήνα και ένα αριθμό ηλεκτρονίων. Ο πυρήνας περιέχει όλα τα πρωτόνια και τα νετρόνια, και επομένως σχεδόν όλη τη μάζα του ατόμου. Όλα τα άτομα είναι ηλεκτρικά ουδέτερα και επομένως πρέπει να περιέχουν ίσους αριθμούς ηλεκτρονίων και πρωτονίων. Ο αριθμός των πρωτονίων στον πυρήνα ενός ατόμου ονομάζεται *ατομικός αριθμός* που συνήθως συμβολίζεται ως Z . Κάθε στοιχείο διακρίνεται από όλα τα άλλα από τον ατομικό του αριθμό. Όλα τα άτομα με τον ίδιο ατομικό αριθμό είναι άτομα του ίδιου στοιχείου. Έτσι το στοιχείο με $Z=1$ (ένα πρωτόνιο, ένα ηλεκτρόνιο) είναι το υδρογόνο, ενώ το στοιχείο με $Z=2$ (δύο πρωτόνια, δύο ηλεκτρόνια) είναι το ήλιο κ.ο.κ.

Μπορούμε να εξηγήσουμε πολλές από τις γνωστές χημικές ιδιότητες των στοιχείων, εάν γνωρίζουμε τους ατομικούς τους αριθμούς. Τα ηλεκτρόνια σε ένα ουδέτερο άτομο προσδιορίζουν την χημική συμπεριφορά του. Τα ηλεκτρόνια που τείνουν να παραμένουν πολύ μακριά από τον πυρήνα είναι κυρίως υπεύθυνα για τη χημική συμπεριφορά του ατόμου και ονομάζονται *εξωτερικά* ή *ηλεκτρόνια σθένους*. Άτομα με τον ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων σθένους έχουν παρόμοιες χημικές ιδιότητες και λέμε ότι ανήκουν στην ίδια ομάδα ή οικογένεια. Τα ηλεκτρόνια σθένους συμβολίζονται με τελείες γύρω από το σύμβολο του στοιχείου. Έτσι το αλουμίνιο, $Z=13$, που έχει 3 ηλεκτρόνια σθένους και 10 εσωτερικά ηλεκτρόνια συμβολίζεται $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot}{\text{Al}}}$, ενώ το οξυγόνο, $Z=8$, συμβολίζεται $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}$, διότι έχει 2 εσωτερικά ηλεκτρόνια και 6 ηλεκτρόνια σθένους.

Άτομα που έχουν τον ίδιο αριθμό πρωτονίων, αλλά διαφέρουν στον αριθμό νετρονίων ονομάζονται *ισότοπα*. Για παράδειγμα, υπάρχουν τρία ισότοπα του στοιχείου υδρογόνου, όπως περιγράφεται στον Πίνακα 1.2.

Το σύμβολο ενός ισοτόπου είναι $\overset{A}{Z}$ (*Σύμβολο του στοιχείου*), όπου A είναι ο *μαζικός αριθμός* που είναι το άθροισμα του αριθμού των πρωτονίων και του αριθμού των νετρονίων και Z ο ατομικός αριθμός.

Το φορτισμένο σωματίδιο που προκύπτει όταν ένα άτομο ή ομάδα ατόμων αποβάλει ή προσλάβει ένα ή περισσότερα ηλεκτρόνια ονομάζεται *ión*. Για παράδειγμα, όταν το άτομο του οξυγόνου προσλάβει δύο ηλεκτρόνια, προκύπτει το

αρνητικά φορτισμένο *ión* (*ανιόν*) του οξυγόνου $\overset{2-}{\underset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}}$, ενώ όταν το άτομο του

αλουμινίου αποβάλει τρία ηλεκτρόνια, προκύπτει το θετικά φορτισμένο *ión* (*κατιόν*) του αλουμινίου Al^{3+} .

Πίνακας 1.2 Τα ισότοπα του υδρογόνου

Όνομα του ισοτόπου	Σύμβολο του ισοτόπου	Αριθμός ηλεκτρονίων	Αριθμός πρωτονίων	Αριθμός νετρονίων
Υδρογόνο ή Πρώτιο	1_1H	1	1	0
Δευτέριο	2_1H	1	1	1
Τρίτιο	3_1H	1	1	2

1.2 Στοιχεία από τη θεωρία των δεσμών

1.2.1 Εισαγωγή

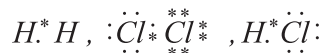
Οποιοδήποτε, ηλεκτρικά ουδέτερο, συγκρότημα ατόμων, στο οποίο τα άτομα συγκρατούνται (ενώνονται) ισχυρά μεταξύ τους, μπορεί να θεωρηθεί ως μια μονάδα που ονομάζεται *μόριο*. Η ελκτική αλληλεπίδραση ανάμεσα στα άτομα μέσα στο μόριο ονομάζεται *χημικός δεσμός*. Ο ατμός π.χ. του νερού αποτελείται από συγκροτήματα (μόρια) δύο ατόμων υδρογόνου και ενός ατόμου οξυγόνου. Στο στερεό χλωριούχο νάτριο δεν υπάρχουν απλά συγκροτήματα που αποτελούνται από λίγα άτομα. Τα ιόντα νατρίου (Na^+) και τα ιόντα χλωρίου (Cl^-) είναι τοποθετημένα στο χώρο σε καθορισμένες θέσεις και συγκρατούνται σ' αυτές λόγω των δυνάμεων ηλεκτροστατικής φύσης που αναπτύσσονται μεταξύ τους, δημιουργώντας έτσι ένα γιγαντιαίο συγκρότημα. Η έννοια του μορίου δεν υπάρχει σ' αυτή την περίπτωση.

1.2.2 Θεωρία του Lewis για τον ομοιοπολικό δεσμό. Κανόνας της οκτάδας

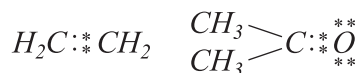
Σύμφωνα με τον Lewis δύο άτομα ενώνονται μεταξύ τους για να αποκτήσει το καθένα από αυτά στην εξωτερική του στοιβάδα την ευσταθέστατη ηλεκτρονική διαμόρφωση με οκτώ ηλεκτρόνια, όπως συμβαίνει στα ευγενή αέρια (εκτός του υδρογόνου που τείνει να αποκτήσει δύο ηλεκτρόνια, οπότε έχει την ηλεκτρονική διαμόρφωση του ευγενούς αερίου ηλίου).

Ομοιοπολικός δεσμός. Το είδος αυτό του χημικού δεσμού είναι αποτέλεσμα της αμοιβαίας συνεισφοράς ηλεκτρονίων από τα δύο άτομα, οπότε σχηματίζεται

ζεύγος ηλεκτρονίων που ανήκει εξίσου στα δύο άτομα που ενώνονται. Στην περίπτωση του απλού ομοιοπολικού δεσμού σχηματίζεται ένα ζεύγος ηλεκτρονίων, π.χ.



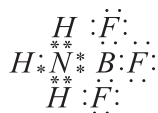
στην περίπτωση του διπλού ομοιοπολικού δεσμού δύο ζεύγη, π.χ.



και στην περίπτωση του τριπλού ομοιοπολικού δεσμού τρία ζεύγη, π.χ.



Είναι δυνατό το κοινό ζεύγος των ηλεκτρονίων να μην προέρχεται από κοινή συνεισφορά, αλλά να προσφέρεται μόνο από ένα από τα δύο άτομα που ενώνονται και ο δεσμός ονομάζεται *ημιπολικός*.



1.2.3 Θεωρία των μοριακών τροχιακών

Σύμφωνα με τη θεωρία αυτή, όταν οι πυρήνες δύο ατόμων πλησιάσουν αρκετά μεταξύ τους σχηματίζεται δεσμός και προκύπτει μόριο με εντελώς διαφορετικές ιδιότητες από τα αρχικά άτομα. Τα ατομικά τροχιακά των ατόμων που ενώνονται συγχωνεύονται και προκύπτουν *μοριακά τροχιακά* που ανήκουν στο μόριο, στα οποία τοποθετούνται τα διαθέσιμα ηλεκτρόνια. Σύμφωνα με τη θεωρία του *Γραμμικού Συνδυασμού Ατομικών Τροχιακών* για την περιγραφή των μοριακών τροχιακών θεωρείται ότι η κυματική συνάρτηση Ψ που εκφράζει το μοριακό τροχιακό προκύπτει από γραμμικό συνδυασμό ατομικών τροχιακών. Έτσι, όταν δύο αρχικά μεμονωμένα άτομα υδρογόνου έστω A και B , με το καθένα να έχει το ηλεκτρόνιό του στο ατομικό τροχιακό $1s$, σχηματίσουν δεσμό και προκύψει μόριο, τα αρχικά ατομικά τροχιακά συγχωνεύονται και προκύπτουν μοριακά τροχιακά που δίνονται από τις σχέσεις:

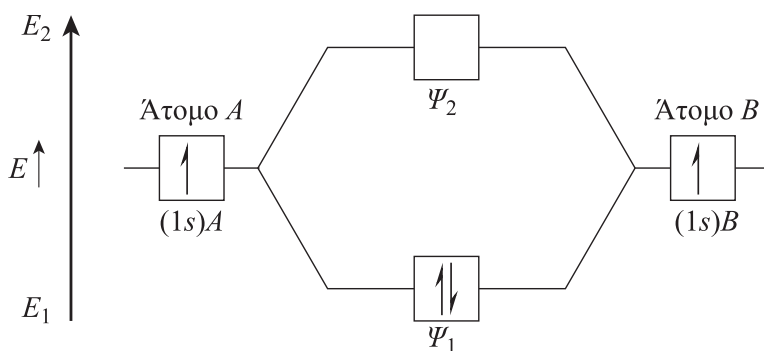
$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{(1s)A} + \Psi_{(1s)B}) \quad (1.8)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{(1s)A} - \Psi_{(1s)B}) \quad (1.9)$$

όπου $\Psi_{(1s)A}$ και $\Psi_{(1s)B}$ οι κυματοσυναρτήσεις των ατομικών τροχιακών $1s$ των δύο ατόμων υδρογόνου.

Αυτά τα μοριακά τροχιακά αντιστοιχούν σε ορισμένες τιμές της ενέργειας που μπορούν να υπολογισθούν, εάν στην εξίσωση του Schrödinger (1.7) αντικατασταθούν οι σχέσεις (1.8) και (1.9) στις θέσεις της Ψ .

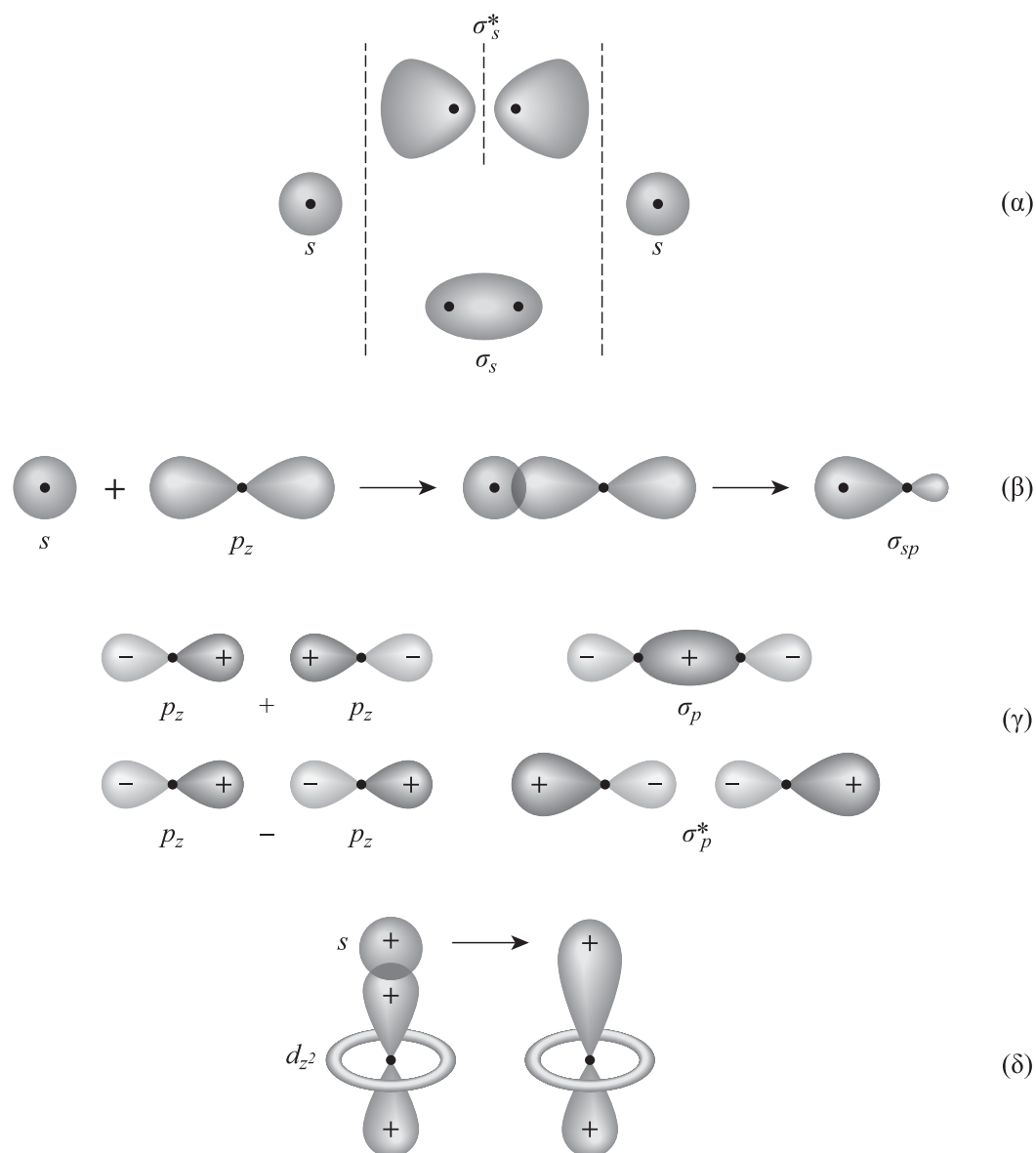
Στο Σχήμα 1.4 παριστάνεται το ενεργειακό διάγραμμα των μοριακών τροχιακών του μορίου του υδρογόνου. Το μοριακό τροχιακό Ψ_1 αντιστοιχεί σε χαμηλότερη ενέργεια, E_1 , από αυτή των αρχικών ατομικών τροχιακών $(1s)A$ και $(1s)B$, ονομάζεται *δεσμικό* και παριστάνεται με σ , ενώ το Ψ_2 σε υψηλότερη, E_2 , ονομάζεται *αντιδεσμικό* και παριστάνεται ως σ^* . Στη θεμελιώδη κατάσταση του μορίου του υδρογόνου τα δύο ηλεκτρόνια βρίσκονται στο δεσμικό μοριακό τροχιακό σ με αντιπαράλληλα spin. Το αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό σ^* υπάρχει δυνητικά, έστω και αν δεν κατέχεται από ηλεκτρόνια, και αντιστοιχεί στην ενεργειακή στάθμη, στην οποία θα μεταβεί ένα ηλεκτρόνιο μετά από διέγερση του μορίου του υδρογόνου με ενέργεια $\Delta E = E_2 - E_1$. Κατά τη συγχώνευση ατομικών τροχιακών προκύπτουν τόσα μοριακά τροχιακά όσα ήταν και τα ατομικά. Από αυτά τα μισά είναι δεσμικά και τα άλλα μισά αντιδεσμικά.



Σχήμα 1.4 Ενεργειακό διάγραμμα των μοριακών τροχιακών του μορίου του υδρογόνου

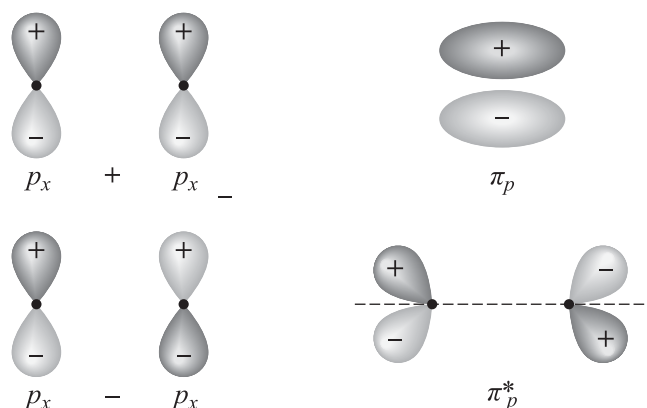
Γενικά σ μοριακά τροχιακά είναι αυτά για τα οποία η κατανομή της ηλεκτρονιακής πυκνότητας είναι συμμετρική ως προς τον άξονα συμμετρίας που συνδέει τους δύο πυρήνες (κυλινδρική συμμετρία) και σχηματίζονται με επικα-

λύψεις s ατομικών τροχιακών (Σχήμα 1.5α), ενός s και ενός p τροχιακού (Σχήμα 1.5β), δύο p τροχιακών (Σχήμα 1.5γ), καθώς και ενός s και ενός d τροχιακού (Σχήμα 1.5δ) κ.ο.κ.



Σχήμα 1.5 Σχηματισμός σ μοριακών τροχιακών με επικαλύψεις
 (α) δύο s ατομικών τροχιακών, (β) ενός s και ενός p τροχιακού,
 (γ) δύο p τροχιακών, (δ) ενός s και ενός d τροχιακού

Τα p τροχιακά μπορούν να επικαλυφθούν και με παράλληλο τρόπο (πλάγια αλληλοεπικάλυψη), οπότε έχουμε τη δημιουργία ενός δεσμικού μοριακού τροχιακού που συμβολίζεται με π και ενός αντιδεσμικού π^* (Σχήμα 1.6). Τα π μοριακά τροχιακά δεν έχουν κυλινδρική συμμετρία γύρω από τον άξονα που συνδέει τους δύο πυρήνες, αλλά υπάρχει ίση ηλεκτρονιακή πυκνότητα γύρω από αυτόν. Μοριακά τροχιακά π σχηματίζονται επίσης με επικαλύψεις d τροχιακών με p τροχιακά ή d τροχιακών μεταξύ τους.



Σχήμα 1.6 Σχηματισμός π μοριακών τροχιακών με επικάλυψη δύο p τροχιακών

1.2.4 Ιοντικός δεσμός

Στην περίπτωση του ιοντικού δεσμού συμβαίνει ολική μεταφορά ενός ή περισσότερων ηλεκτρονίων από ένα άτομο σε άλλο σε αντίθεση με τον ομοιοπολικό δεσμό, όπου τα ηλεκτρόνια διαμοιράζονται ανάμεσα στα άτομα. Η μεταφορά αυτή των ηλεκτρονίων έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία αντίθετα φορτισμένων ιόντων που οι ηλεκτροστατικές δυνάμεις μεταξύ τους δημιουργούν τον *ιοντικό δεσμό*. Ο ιοντικός δεσμός εμφανίζεται μεταξύ ατόμων χαμηλής ενέργειας ιοντισμού (μέταλλα) και ατόμων μεγάλης ηλεκτρονιακής συγγένειας (αμέταλλα).

Όπως αναφέρθηκε προηγούμενα, στις *ιοντικές ενώσεις* (που σχηματίζονται με ιοντικό δεσμό) δεν υπάρχει η έννοια του μορίου. Στο στερεό χλωριούχο νάτριο π.χ. δεν υπάρχουν απλά συγκροτήματα που αποτελούνται από λίγα άτομα. Τα ιόντα νατρίου (Na^+) και τα ιόντα χλωρίου (Cl^-), που προκύπτουν με μεταφορά ενός ηλεκτρονίου από το άτομο του νατρίου στο άτομο του χλωρίου, είναι τοποθετημένα στο χώρο σε καθορισμένες θέσεις (*κρυσταλλικό πλέγμα*) και συγκρατούνται σ' αυτές λόγω των δυνάμεων ηλεκτροστατικής φύσης που αναπτύσσονται μεταξύ τους, δημιουργώντας έτσι ένα γιγαντιαίο συγκρότημα (*κρύσταλλος*),

το οποίο είναι χαμηλότερης ενέργειας από τα μεμονωμένα άτομα λόγω των ηλεκτροστατικών έλξεων μεταξύ σωματιδίων (ιόντων) αντίθετου φορτίου. Στο Σχήμα 1.7 παρίσταται ένα τμήμα ενός κρυστάλλου χλωριούχου νατρίου, όπου φαίνεται η τοποθέτηση των ιόντων χλωρίου (μεγάλες σφαίρες) και των ιόντων νατρίου (μικρές σφαίρες).



Σχήμα 1.7 Ένα τμήμα ενός κρυστάλλου χλωριούχου νατρίου, όπου φαίνεται η τοποθέτηση των ιόντων χλωρίου (μεγάλες σφαίρες) και των ιόντων νατρίου (μικρές σφαίρες)

1.2.5 Μεταλλικός δεσμός

Τα μέταλλα, όπως είναι γνωστό, είναι σώματα κρυσταλλικά στη στερεή κατάσταση. Τα άτομα τους τοποθετούνται σε μια τρισδιάστατη, κανονική και συμμετρική διάταξη που επαναλαμβάνεται στο χώρο. Το τρισδιάστατο αυτό δίκτυο είναι γνωστό ως κρυσταλλικό πλέγμα.

Προκειμένου να εξηγηθούν οι χαρακτηριστικές ιδιότητες των μετάλλων, πρέπει να γίνει αντιληπτή η φύση του δεσμού μεταξύ των ατόμων του μετάλλου στο κρυσταλλικό πλέγμα.

Δύο είναι τα κυριότερα χαρακτηριστικά των ατόμων των μετάλλων: η μικρή ενέργεια ιονισμού (είναι η ενέργεια που πρέπει να προσφερθεί σ' ένα μεμονωμένο άτομο στοιχείου στην αέρια φάση, για να αποσπασθεί ένα ηλεκτρόνιο και να προκύψει ένα θετικό ιόν) σε σύγκριση με τα αμέταλλα και ο μικρός αριθμός ηλεκτρονίων που υπάρχουν στα τροχιακά της εξωτερικής στοιβάδας.

Στα κρυσταλλικά πλέγματα των μετάλλων κάθε άτομο έχει 8 ή 12 γειτονικά

άτομα (αριθμός σύνταξης), ακόμα ο αριθμός των ηλεκτρονίων σθένους (ηλεκτρονίων της εξωτερικής στοιβάδας) κάθε ατόμου είναι μικρότερος του 4, και συνήθως μόνο 1 ή 2. Είναι προφανώς αδύνατο τα άτομα του μετάλλου να συνδεθούν μεταξύ τους με συνήθεις ομοιοπολικούς δεσμούς, στους οποίους δύο άτομα μοιράζονται ένα ζεύγος ηλεκτρονίων, γιατί ένας σχετικά μικρός αριθμός ηλεκτρονίων πρέπει να μοιρασθεί από 8 ή περισσότερα άτομα. Ο μεταλλικός δεσμός δεν είναι ούτε ομοιοπολικός ούτε ιοντικός, αλλά είναι ένας ισχυρός δεσμός γι' αυτά τα περισσότερα μέταλλα έχουν υψηλά σημεία τήξης.

Στην αέρια κατάσταση τα αμέταλλα είναι διατομικά ή μικρά πολυατομικά μόρια, όπως O_2 , N_2 , Cl_2 , I_2 , P_4 και S_8 , στα οποία ένας ομοιοπολικός δεσμός συνδέει δύο άτομα. Αντίθετα, η αέρια κατάσταση των περισσότερων μετάλλων (αλλά όχι όλων) είναι μονοατομική. Στη στερεή κατάσταση, ωστόσο, η σταθερότητα επιτυγχάνεται με το γεγονός ότι τα ηλεκτρόνια σθένους ενός ατόμου μοιράζονται από πολλούς άλλους πυρήνες. Λόγω της σχετικά μικρής ενέργειας ιονισμού των ατόμων των μετάλλων, τα ηλεκτρόνια σθένους σ' ένα στερεό μεταλλικό κρύσταλλο είναι ελεύθερα να διέρχονται από το ένα άτομο στο άλλο και έτσι μοιράζονται μεταξύ διαφόρων ατόμων. Ο μεταλλικός δεσμός θεωρείται ότι αποτελείται από ευκίνητα, μη εντοπισμένα μόνο σε ένα άτομο ηλεκτρόνια που «μοιράζονται» κατ' ουσία από όλα τα άτομα ενός δείγματος μετάλλου. Η ηλεκτρονική δομή των μεταλλικών κρυστάλλων περιγράφεται συνήθως ως ένα σύνολο μεταλλικών ιόντων (που προκύπτουν από τα άτομα με την διαφυγή των ηλεκτρονίων σθένους) εμβαπτισμένων σε μια «θάλασσα» ευκίνητων ηλεκτρονίων σθένους.

Οι χαρακτηριστικές ιδιότητες των στερεών μετάλλων, όπως υψηλή ηλεκτρική και θερμική αγωγιμότητα και μεταλλική λάμψη, αποδίδονται σ' αυτά τα σχετικά ευκίνητα ηλεκτρόνια σθένους. Αυτές οι μεταλλικές ιδιότητες δεν υπάρχουν στην αέρια φάση των μετάλλων, όπου δεν είναι δυνατό να υπάρξει μεταλλικός δεσμός.