Class: 1st
Subject: Engineering Materials
Lecturer: M.Sc Haneen Mohammed Hadi
E-mail: haneen.mohammed.hadi@mustaqbal-college.edu.iq

Inter atomic Bonding

There are four important mechanisms by which atoms are bonded in engineered materials. These are:

1. Metallic bond.
2. Covalent bond.
3. Ionic bond.
4. Van der Waals bond.

هناك اربع اليات ميكانيكية مهمة لارتباط الذرات في المواد الهندسية وهي:
1- الآصرة المعدنية
2- الآصرة التساهمية
3- الآصرة الايونية
4- اصرة فاندرفالز

In the first three of these mechanisms, bonding is achieved when the atoms fill their outer **S** and **P** levels. These bonds are relatively strong and are known as **primary bonds** (relatively strong bonds between adjacent atoms resulting from the transfer or sharing of outer orbital electrons). The van der Waals bonds are secondary bonds and originate from a different mechanism and are relatively weaker.

في الآليات الثلاثة الأولى ، يتحقق الترابط عندما تملأ الذرات مستوياتها الخارجية s و p. هذه الروابط قوية نسبيًا وتُعرف باسم الروابط الأولية (روابط قوية نسبيًا بين الذرات المتجاورة الناتجة عن نقل أو مشاركة الإلكترونات المدارية الخارجية). روابط **van der Waals** هي روابط ثانوية وتنشأ من آلية مختلفة وهي أضعف نسبيًا.

1. **The Metallic Bond:** It is the atomic bonding mechanism in pure metals and metal alloys. The metallic bond forms when atoms give up their valence electrons, which then form an electron sea. The positively charged atom cores are bonded by mutual attraction to the negatively charged electrons.

هي آلية الترابط الذري في المعادن النقية والسبائك المعدنية. تتشكل الرابطة المعدنية عندما تتخلى الذرات عن إلكترونات التكافؤ الخاصة بها ، والتي تشكل بعد ذلك بحرًا إلكترونيًا. ترتبط نوى الذرة (atom cores) موجبة الشحنة عن طريق الجذب المتبادل للإلكترونات سالبة الشحنة.

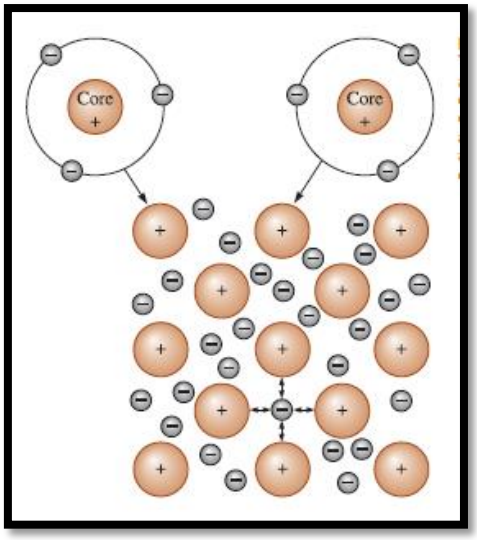

Figure 1. Diagrammatic Representation of the "Metallic Bond".

Because their **valence electrons** are not fixed in any one position, most pure metals are good electrical conductors of electricity at relatively low temperatures (**T < 300 K**). Under the influence of an applied voltage, the valence electrons move, causing a current to flow if the circuit is complete. Because of the general distribution of electrons and their freedom to move within the metal, metallic bonding provides typical properties of materials characterized such as good electrical conductivity , good conduction of heat and good ductility.

نظرًا لأن إلكترونات التكافؤ الخاصة بهم ليست ثابتة في موضع واحد ، فإن معظم المعادن النقية هي موصلات كهربائية جيدة عند درجات حرارة منخفضة نسبيًا (T <300 K).
تحت تأثير الجهد المسلط **(applied voltage)** ، تتحرك إلكترونات التكافؤ **(valence electrons)**، مما يتسبب في تدفق التيار**(current)** إذا اكتملت الدائرة. بسبب التوزيع العام للإلكترونات وحريتهم في التحرك داخل المعدن ، يوفر الترابط المعدني خصائص نموذجية للمواد المعدنية مثل التوصيل الكهربائي والحراري الجيد والليونة الجيدة.

2. **The Covalent Bond**: In the covalent bond, electrons are shared (as opposed to transferred) between atoms in their **outermost shells** to achieve a stable set of eight. For example, a **silicon atom**, which has a valence of **four**, gets **eight** electrons in its outer energy shell by sharing its electrons with **four** surrounding silicon atoms (Figure 2). Each instance (case) of sharing represents one covalent bond; thus, each silicon atom is bonded to four neighboring atoms by four covalent bonds. Solids with covalent bonding generally possess high hardness and low electrical conductivity.

الرابطة التساهمية: في الرابطة التساهمية ، يتم تقاسم الإلكترونات على عكس المنقولة بين الذرات في غلافها الخارجي لتحقيق مجموعة مستقرة من ثمانية. على سبيل المثال ، ذرة السيليكون ، التي لها تكافؤ أربعة ، تحصل على ثمانية إلكترونات في غلاف الطاقة الخارجي من خلال مشاركة إلكتروناتها مع أربع ذرات سيليكون محيطة (الشكل 2). تمثل كل حالة (case) للمشاركة رابطة تساهمية واحدة ؛ وهكذا ، ترتبط كل ذرة سيليكون بأربع ذرات مجاورة**(neighboring atoms)** بواسطة أربع روابط تساهمية. من أجل تكوين الروابط التساهمية ، يجب ترتيب ذرات السيليكون بحيث يكون للروابط علاقة اتجاهية ثابتة مع بعضها البعض. تمتلك المواد الصلبة ذات الترابط التساهمي عمومًا صلابة عالية وموصلية كهربائية منخفضة.

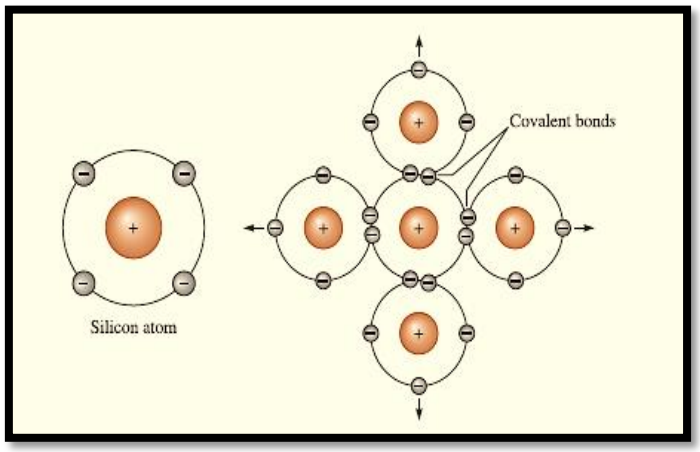

Figure 2. Covalent bonding requires that electrons be shared between atoms in such a way that each atom has its outer **sp** orbital filled. In silicon, with a valence of four, four covalent bonds must be formed for every atom.

3- **The Ionic Bond:** In the ionic bond, when more than one type of atoms is present in a material, one atom may donate its valence electrons to a different atom, filling the outer energy shell of the second atom. Both atoms now have filled (or emptied) outer energy levels, but both have acquired an electrical charge and behave as ions. The atom that contributes the electrons is left with a net positive

charge and is called a **cation**, while the atom that accepts the electrons acquires a net negative charge and is called an **anion**. The oppositely charged ions are then attracted to one another and produce the **ionic bond**. This bond is naturally provides a very strong bond between atoms and as a properties of solid materials with the ionic bonding include low electrical conductivity and poor ductility.

الرابطة الأيونية: في الرابطة الأيونية ، عندما يوجد أكثر من نوع واحد من الذرات في مادة ما ، يمكن لذرة واحدة أن تمنح إلكترونات التكافؤ الخاصة بها إلى ذرة مختلفة ، وتملأ غلاف الطاقة الخارجي للذرة الثانية. الان مستويات الطاقة الخارجية لكلتا الذرتين امتلات (أو أفرغت) ، لكن كلاهما اكتسب شحنة كهربائية ويتصرفان كأيونات. تبقى الذرة التي تساهم في الإلكترونات بشحنة موجبة صافية وتسمى الكاتيون ، بينما تكتسب الذرة التي تقبل الإلكترونات شحنة سالبة صافية وتسمى الأنيون. ثم تنجذب الأيونات المشحونة عكسيا إلى بعضها البعض وتنتج الرابطة الأيونية. توفر هذه الرابطة بشكل طبيعي رابطة قوية جدًا بين الذرات وكخصائص المواد الصلبة ذات الترابط الأيوني تشمل الموصلية الكهربائية المنخفضة والليونة الضعيفة.

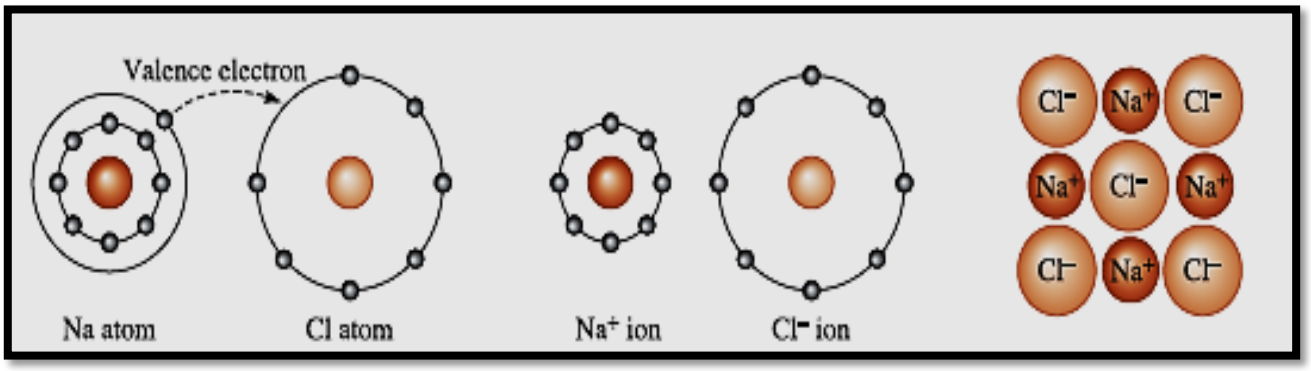

Figure 3. An ionic bond is created between two unlike atoms with different electronegativities. When sodium donates its valence electron to chlorine, each atom becomes an ion, and the ionic bond is formed.

Solids that exhibit considerable ionic bonding are also often mechanically strong because of the strength of the bonds. Electrical conductivity of ionically bonded solids is very limited. A large fraction of the electrical current is transferred via the movement of ions. Owing to their size, ions typically do not move as easily as electrons. However, in many technological applications we make use of the electrical conduction that can occur via movement of ions as a result of increased temperature, chemical potential gradient, or an electrochemical driving force. Examples of these include lithium ion batteries that make use of lithium cobalt oxide, conductive indium tin oxide (**ITO**) coatings on glass for touch sensitive displays, and solid oxide fuel cells (**SOFC**) based on compositions based on zirconia ($\mathbf{ZrO_2}$).

غالبًا ما تكون المواد الصلبة التي ترتبط ارتباطًا أيونيًا كبيرًا أيضًا قوية ميكانيكيًا بسبب قوة الروابط. الموصلية الكهربائية للمواد الصلبة المرتبطة أيونيًا محدودة للغاية. يتم نقل جزء كبير من التيار الكهربائي عبر حركة الأيونات. نظرًا لحجمها ، لا تتحرك الأيونات عادةً بسهولة مثل الإلكترونات. ومع ذلك ، في العديد من التطبيقات التكنولوجية ، نستفيد من التوصيل الكهربائي الذي يمكن أن يحدث عن طريق حركة الأيونات نتيجة لزيادة درجة الحرارة ، أو التدرج الكيميائي المحتمل ، أو القوة الدافعة الكهروكيميائية. تشمل الأمثلة على ذلك بطاريات أيونات الليثيوم التي تستخدم أكسيد الكوبالت الليثيوم ، طلاءات أوكسيد القصدير والإنديوم (ITO) على زجاج الشاشات الحساسة للمس ، وخلايا الوقود الأوكسيد الصلب (SOFC) المعتمدة على التركيبات القائمة على الزركونيا (ZrO2).

EXAMPLE.1 Describing the Ionic Bond Between Magnesium and Chlorine.
Describe the ionic bonding between magnesium and chlorine?

SOLUTION

The electronic structures and valences are

Mg: $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ valence electrons = 2
Cl: $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^5$ valence electrons = 7

Each magnesium atom gives up its two valence electrons, becoming a $\mathbf{Mg^{+2}}$ ion. Each chlorine atom accepts one electron, becoming a $\mathbf{Cl^-}$ ion. To achieve the ionic bonding, there must be twice as many chloride ions as magnesium ions present, and a compound, $\mathbf{MgCl_2}$, is formed.

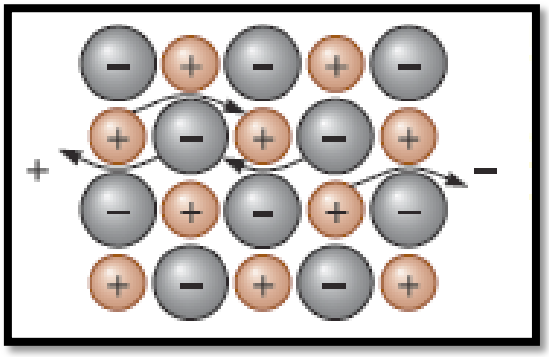

Figure 4. When voltage is applied to an ionic material, entire ions must move to cause a current to flow. Ion movement is slow and the electrical conductivity is poor at low temperatures (for Example 1).

3. **Van der Waals Bonding:** They are very small forces of attraction acting between atoms in cases where the formation of ionic or covalent bonds is not possible. Basically similar forces also act between atoms which are already bounded in neighboring molecules, giving rise to weak Van der Waal's forces between long-chain molecules in polymers.

هي قوى جذب صغيرة جدًا تعمل بين الذرات في الحالات التي يكون فيها تكوين الروابط الأيونية أو التساهمية غير ممكن. تعمل قوى مماثلة بشكل أساسي أيضًا بين الذرات المرتبطة بالفعل في الجزيئات المجاورة ، مما يؤدي إلى ضعف قوى van der waals بين الجزيئات طويلة السلسلة في البوليمرات.

Mixed Bonding: In most materials, bonding between atoms is a mixture of two or more types. **Iron**, for example, is bonded by a combination of metallic and covalent bonding
في معظم المواد ، يكون الترابط بين الذرات مزيجًا من نوعين أو أكثر. الحديد ، على سبيل المثال ، مرتبط بمزيج من الترابط المعدني والتساهمي.

Compounds formed from two or more metals (intermetallic compounds) may be bonded by a mixture of metallic and ionic bonds, particularly when there is a large difference in electronegativity between the elements. Because **lithium** has an electronegativity of **1.0** and **aluminum** has an electronegativity of **1.5**, we would expect **Al-Li** to have a combination of metallic and ionic bonding. On the other hand, because both **aluminum** and **vanadium** have electronegativities of **1.5**, we would expect $\mathbf{Al_3V}$ to be bonded primarily by metallic bonds.
المركبات المكونة من معدنين او اكثر (intermetallic compound) يمكن ان ترتبط بمزيج من الاواصر المعدنية والايونية ، خصوصا عندما يكون هناك اختلاف كبير في الكهربائية بين العناصر. نظرًا لأن الليثيوم له كهروسلبية تبلغ 1.0 وللألمنيوم كهروسلبية 1.5 ، من المتوقع أن يكون لـ Al-Li مزيج من الترابط المعدني والأيوني. من ناحية أخرى ، نظرًا لأن كلاً من الألمنيوم والفاناديوم لهما كهروسلبية تبلغ 1.5 ، نتوقع أن يتم ربط Al_3V بشكل أساسي بواسطة روابط معدنية.

Many **ceramic** and **semiconducting compounds**, which are combinations of metallic and nonmetallic elements, have a mixture of covalent and ionic bonding. As the electronegativity difference between the atoms increases, the bonding becomes more ionic. The fraction of bonding that is covalent can be estimated from the following equation:

$$\textbf{Fraction covalent} = \exp\left(-0.25\,\Delta E^2\right)$$

Where

ΔE is the difference in electronegativities.