

Elektronok, atomok

- 8-1 Elektromágneses sugárzás
- 8-2 Atomi Spektrum
- 8-3 Kvantumelmélet
- 8-4 A Bohr Atom
- 8-5 Az új Kvantummechanika
- 8-6 Hullámmechanika
- 8-7 Kvantumszámok, elektronpályák

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 1 of 60

Tartalom

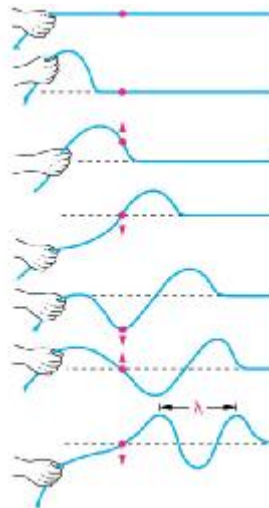
- 8-8 Kvantum számok
- 8-9 A hidrogénatom pályái
- 8-9 Elektron spin
- 8-10 Multi-Elektron atomok
- 8-11 Elektron Konfigurációk
- 8-12 Elektron Konfigurációk és a Periódusos táblázat

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 2 of 60

8-1 Electromágneses sugárzás

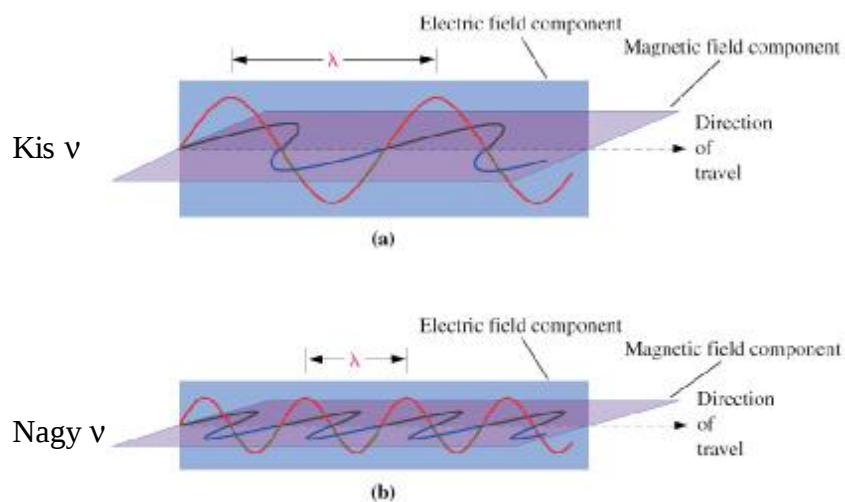
- Elektromos és mágneses mezők hullám alakban terjednek az üres téren vagy a közegen keresztül.
- A hullám energiát visz át.



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 3 of 60

EM sugárzás



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 4 of 60

Frekvencia, Hullámhossz és Sebesség

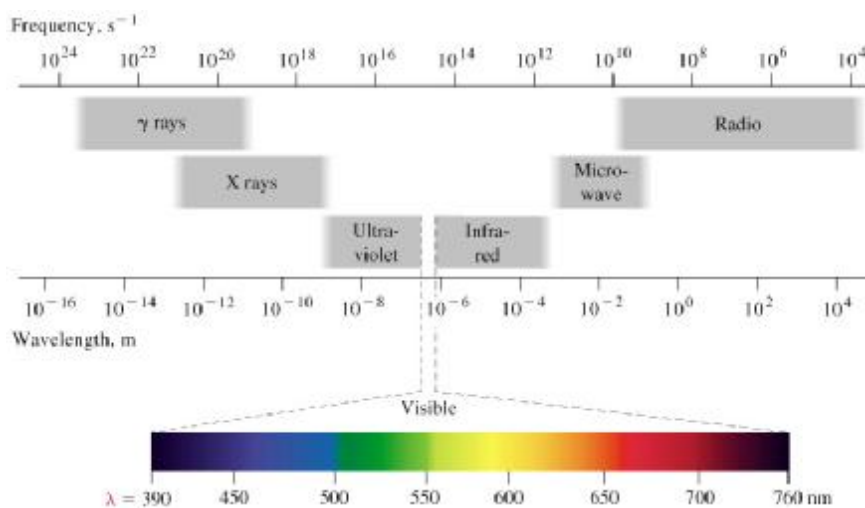
- Frekvencia (ν) in Hertz—Hz vagy s^{-1} .
- Hullámhossz (λ) meter—m.
 - cm μm nm Å pm
 (10^{-2} m) (10^{-6} m) (10^{-9} m) (10^{-10} m) (10^{-12} m)
- Sebesség (c)— $2.997925 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$.

$$c = \lambda \nu \quad \lambda = c/\nu \quad \nu = c/\lambda$$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

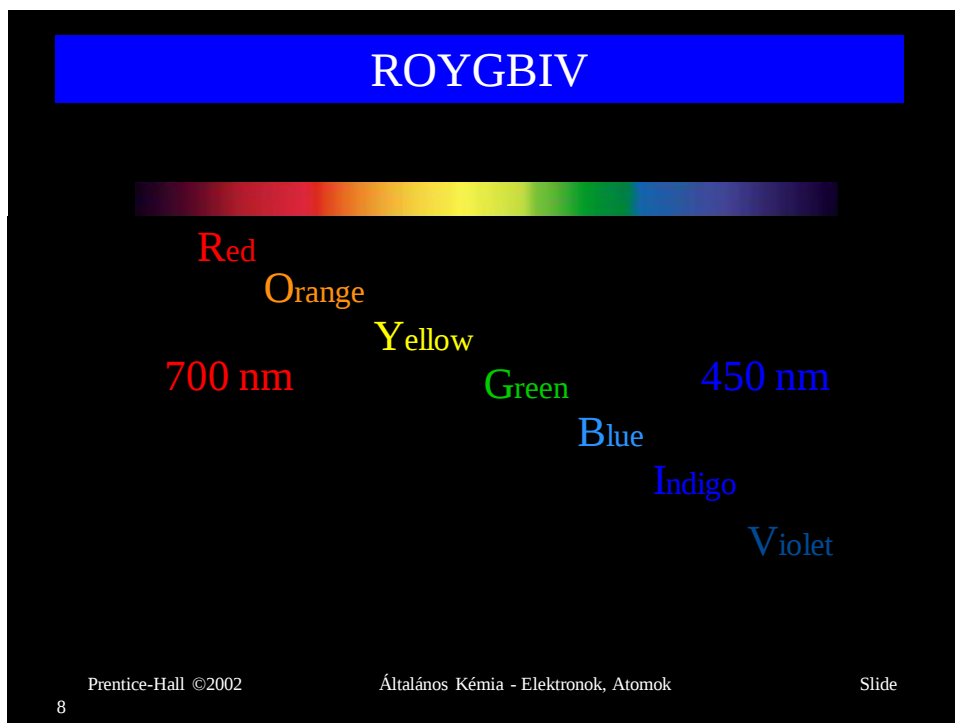
Slide 5 of 60

Electromágneses Spektrum

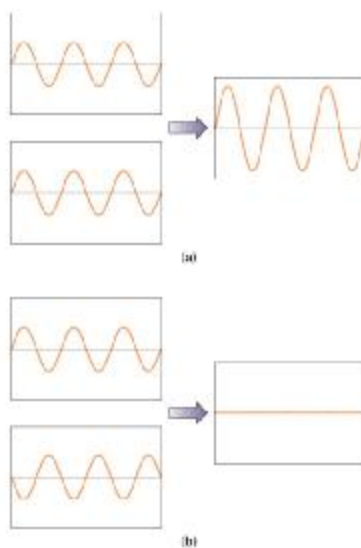


Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 6 of 60



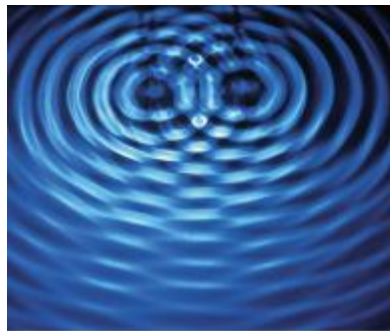
Konstruktív és Destruktív Interferencia



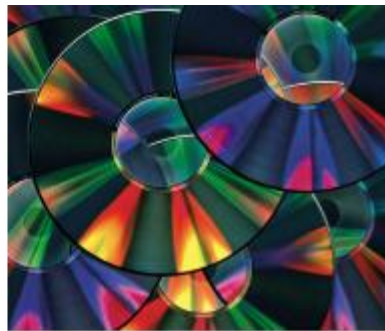
Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 8 of 60

Interferencia



(a)



(b)

Általános Kémia - Elektronok, Atomok

Slide 9 of 60

Fénytörés



(a)

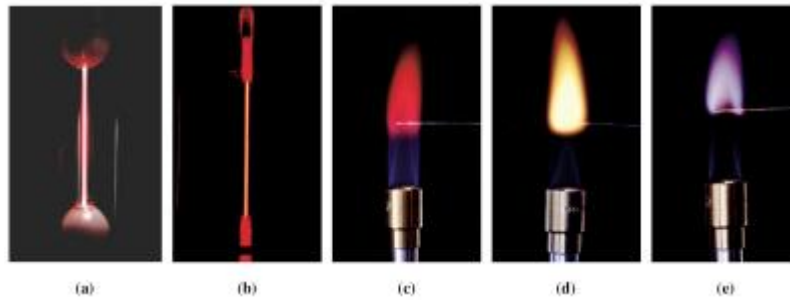


(b)

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 10 of 60

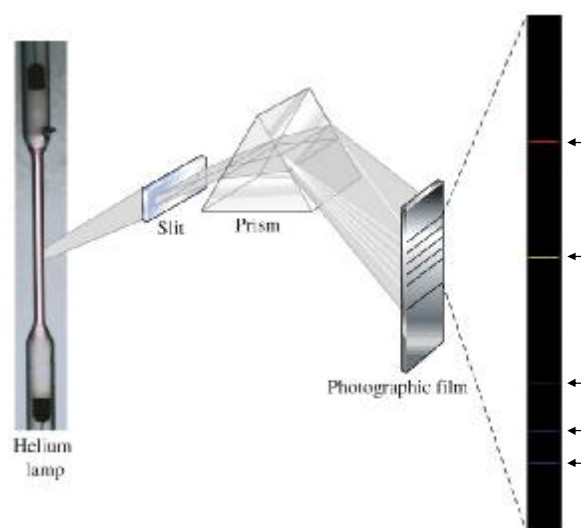
8-2 Atomi Spektrum



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 11 of 60

Atomi spektrum

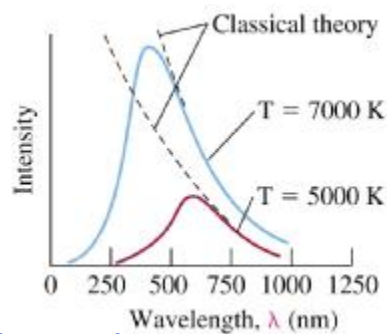


Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 12 of 60

8-3 Kvantumelmélet

Fekete test sugárzás:



Max Planck, 1900:

Energia, az anyaghoz hasonlóan nem folytonos.

$$\epsilon = h\nu$$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 13 of 60

A fotoelektromos hatás

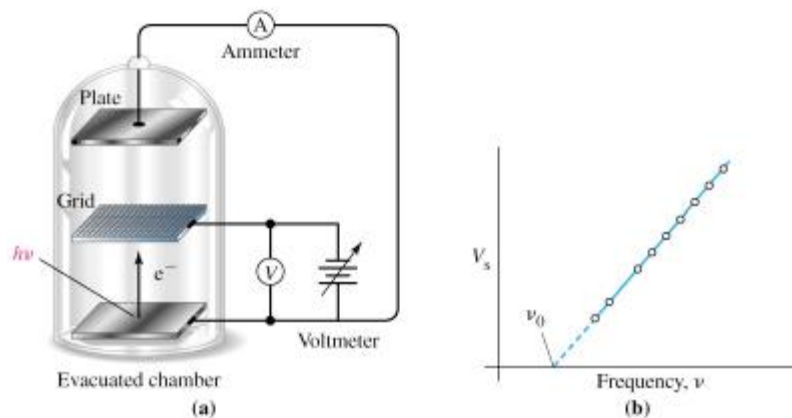
- Bizonyos fémekre beeső elektromágneses sugárzás elektronok kibocsátását eredményezi. **Fotoelektromos hatás (fotoeffektus, fényelektromos jelenség)**

- $\nu > \nu_0$ küszöb frekvencia
- $e^- \sim I$
- $e_k \sim \nu$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 14 of 60

A fotoelektromos hatás



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 15 of 60

A fotoelektromos hatás

- A megállítási feszültség: a kilöködött elektron teljes energiáját fedezi a feszültség.

$$\frac{1}{2}mv^2 = eV_s$$

- Magasabb foton frekvencia (energia) mint ν_0 :

$$V_s = k(\nu - \nu_0)$$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 16 of 60

A fotoelektromos hatás

$$E_k = eV_s \quad E_o = h\nu_o \quad \nu_o = \frac{eV_o}{h}$$

eV_o , és ezért ν_o , jellemző a fémre.

Az energia megmaradás elve szerint:

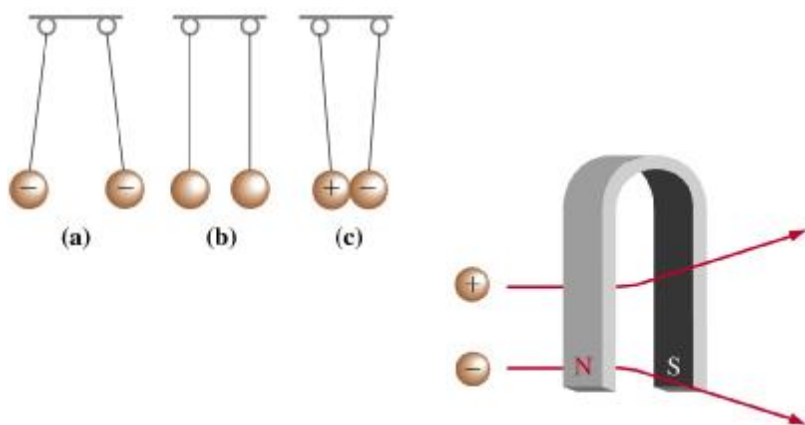
$$E_{\text{photon}} = E_k + E_{\text{binding}} \quad h\nu = \frac{1}{2} mv^2 + eV_o$$

$$E_k = E_{\text{photon}} - E_{\text{binding}} \quad eV_s = \frac{1}{2} mv^2 = h\nu - eV_o$$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 17 of 60

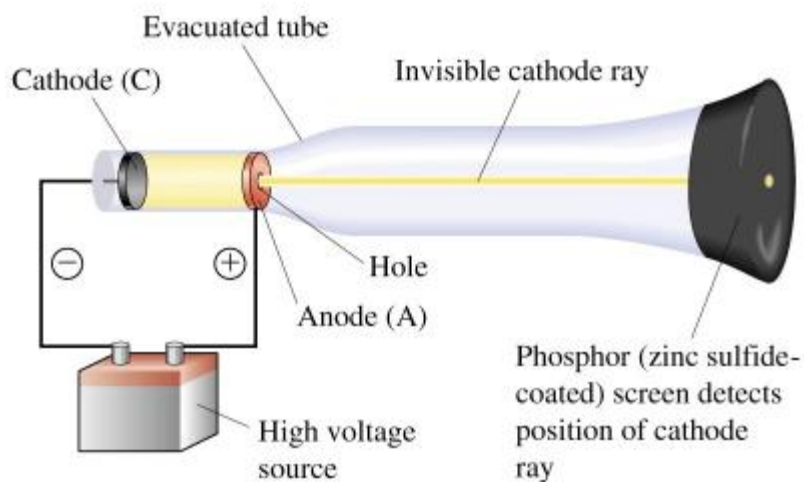
A töltések viselkedése



General Chemistry: Chapter 2

Slide 18 of 25

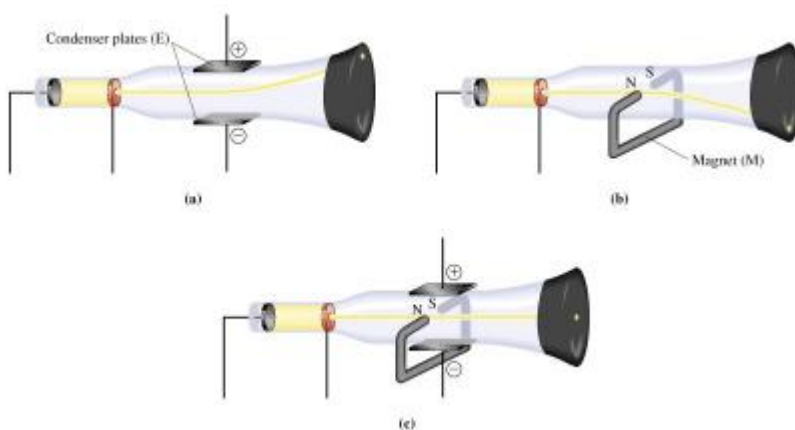
Katódsugárcső



General Chemistry: Chapter 2

Slide 19 of 25

A katódsugárcső tulajdonságai

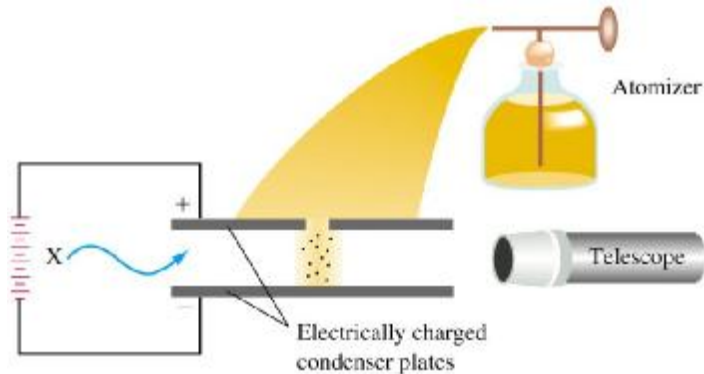


$$\text{Elektron } m/e = -5.6857 \times 10^{-9} \text{ g coulomb}^{-1}$$

General Chemistry: Chapter 2

Slide 20 of 25

Az elektron töltése



- ¶ 1906-1914 Robert Millikan: ionizált olajcseppek esetében elektromos mezővel kiegyensúlyozta a gravitációt.
- ¶ A töltés az elektron töltésének (e) egész számú többszöröse.

General Chemistry: Chapter 2

Slide 21 of 25

Radioaktivitás

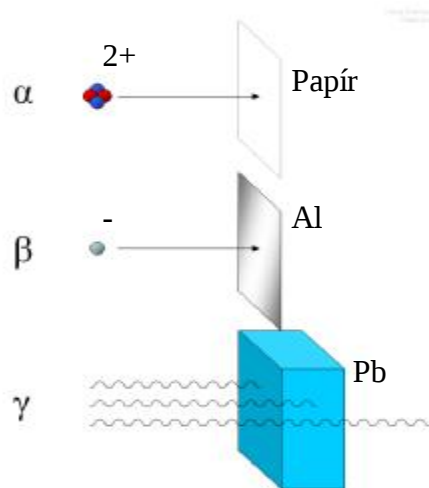
A radioaktivitás a nem stabil (úgynevezett radioaktív) atommagok bomlásának következménye. Nagy energiájú ionizáló sugárzás távozik.

- ¶ α -részecskék: He^{2+} atommag, a papír elnyeli.
- ¶ β -részecskék: a magból kilépő nagy sebességű elektronok, az alumínium lemez elnyeli
- ¶ γ -sugárzás, nagy energiájú, vastag ólomréteg nyeli csak el.

General Chemistry: Chapter 2

Slide 22 of 25

Radioaktivitás



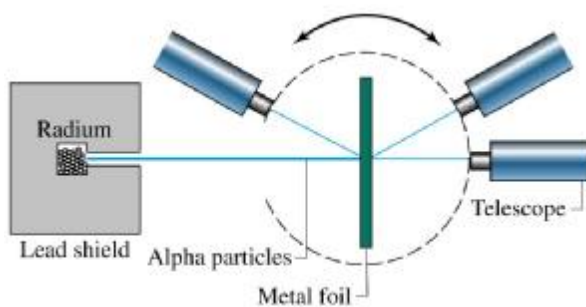
Forrás:Wikipedia.org

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 23 of 60

Az atommag

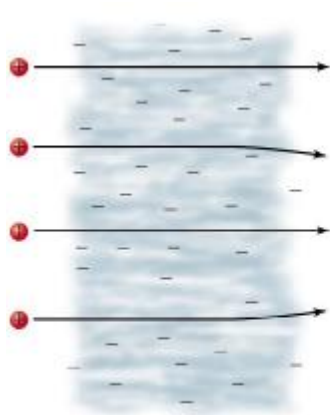
**Geiger és Rutherford
1909**



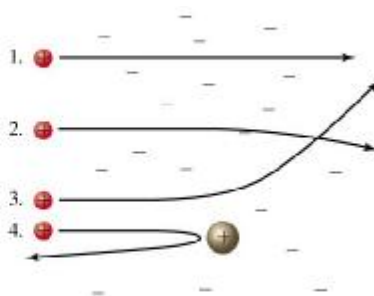
General Chemistry: Chapter 2

Slide 24 of 25

α -részecske kísérlet



¶ Az atom tömegének nagy része és a teljes pozitív töltés az atommagban koncentrálódik.



¶ Az elektronok az atommagtól távolabb helyezkednek el

General Chemistry: Chapter 2

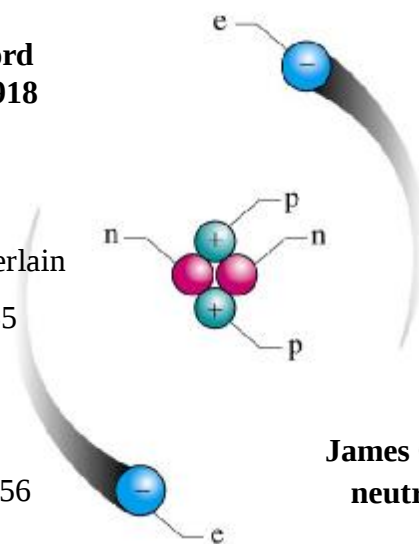
Slide 25 of 25

A maggal rendelkező atom

Rutherford
proton 1918

Segré, Chamberlain
antiproton 1955

Cork
antineutron 1956



James Chadwick
neutron 1932

General Chemistry: Chapter 2

Slide 26 of 25

Az atommag

Az atom átmérője 10^{-10} m
1 Å

Az atommag átmérője 10^{-15} m

Részecske	Nyugalmi tömeg		Töltés	
	kg	amu	Coulomb	(e)
Elektron	9.109×10^{-31}	0.000548	-1.602×10^{-19}	-1
Proton	1.673×10^{-27}	1.0073	$+1.602 \times 10^{-19}$	+1
Neutron	1.675×10^{-27}	1.0087	0	0

General Chemistry: Chapter 2

Slide 27 of 25

Atomi dimenziók

ŰA legnehezebb atom 4.8×10^{-22} g
Átmérője 5×10^{-10} m.

Hasznos egységek:

¶ 1 amu (atomic mass unit) = 1.66054×10^{-24} kg

¶ 1 pm (picometer) = 1×10^{-12} m

¶ 1 Å (Angstrom) = 1×10^{-10} m = 100 pm = 1×10^{-8} cm

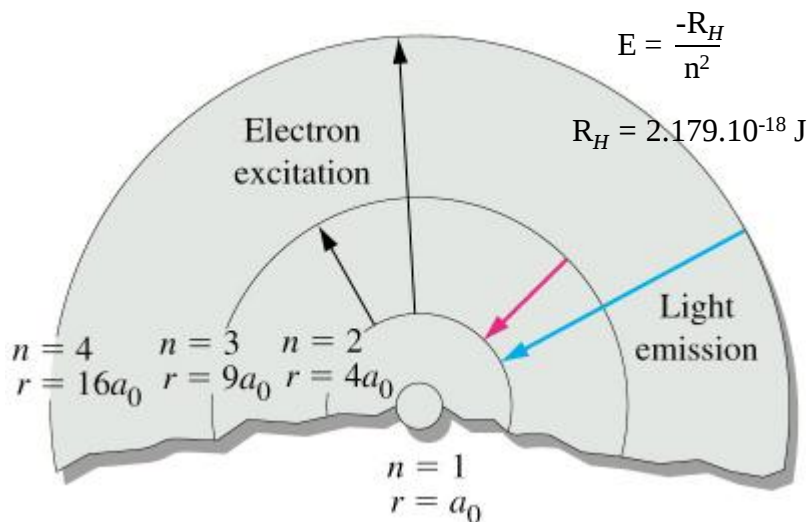
A legnagyobb atom 240 amu és 5 Å .

C-C kötés távolsága 154 pm (1.54 Å)

General Chemistry: Chapter 2

Slide 28 of 25

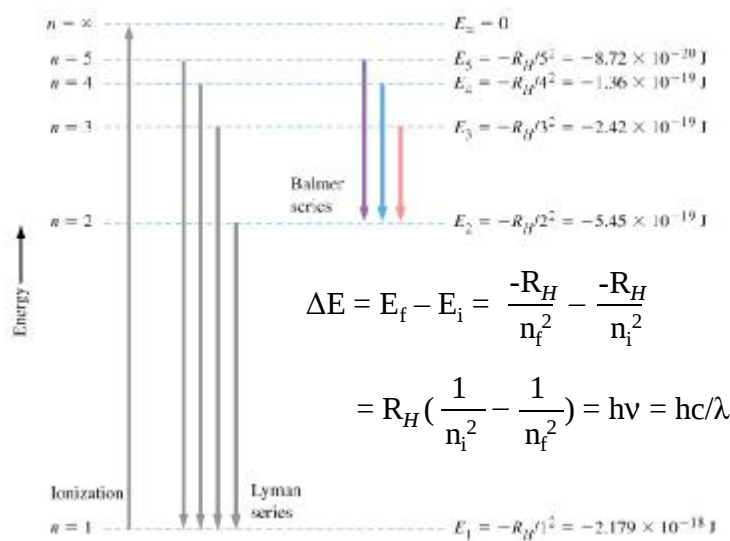
8-4 Bohr Atom



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 29 of 60

Energia szintek



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 30 of 60

A hidrogén ionizációs energiája

$$\Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = h\nu$$

Ha n_f végtelenhez tart :

$$h\nu = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} \right) = R_H$$

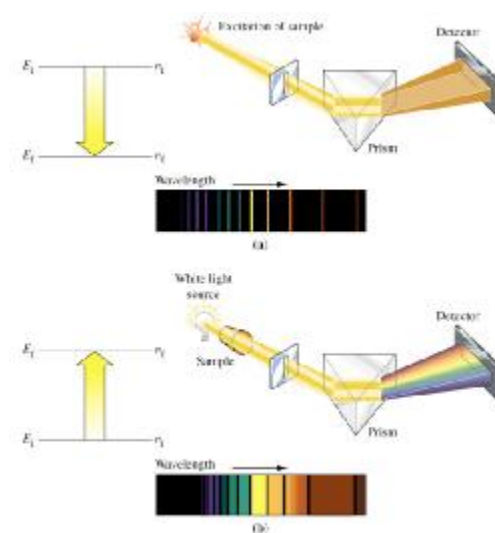
A hidrogénszerű ionokra is érvényes, pl. He^+ és Li^{2+} .

$$h\nu = -Z^2 R_H$$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 31 of 60

Emissziós és abszorpciós spektroszkópia



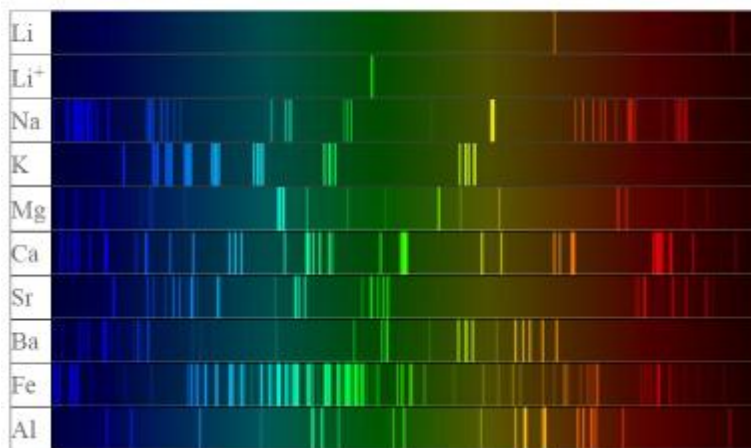
Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 32 of 60

Látható atomi emissziós spektrum

Color coded visible atomic emission spectra lines

wave length: 440-680 nm.



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 33 of 60

8-5 Az új kvantummechanika

- Hullám-részecske természet.
 - Einstein fotonok: ezzel magyarázható a fotoelektromos jelenség.
 - A diffrakció szerint viszont a fény hullám.
- deBroglie, 1924
 - Az anyag kis részecskéi kettős természetűek.

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 34 of 60

deBroglie anyaghullámok

$$E = mc^2$$

$$h\nu = mc^2$$

$$h\nu/c = mc = p$$

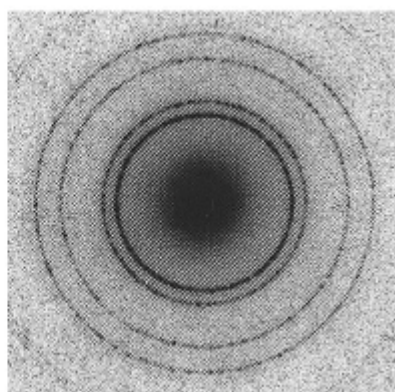
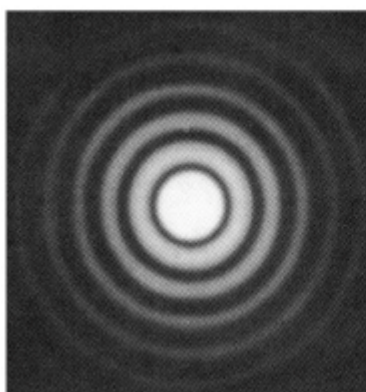
$$p = h/\lambda$$

$$\lambda = h/p = h/mu$$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 35 of 60

X-Ray (Röntgen) Diffrakció



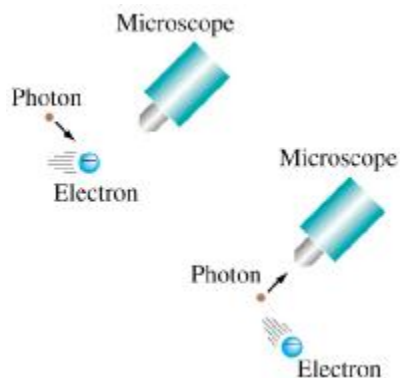
Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 36 of 60

A bizonytalansági elv

- Werner Heisenberg 1927

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

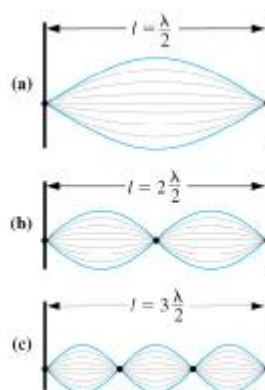


Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 37 of 60

8-6 Hullámmechanika

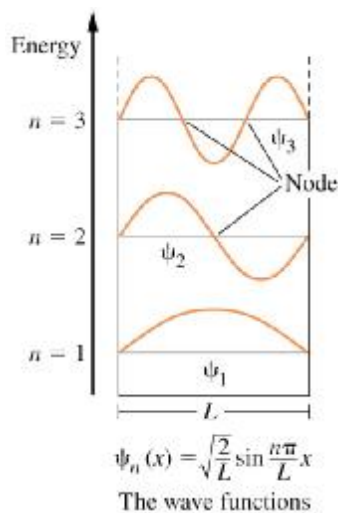
- Álló hullámok.
 - A zérushelyek (csomópontok, angolul: nodes) nem változtatják a helyzetüket.
$$\lambda = \frac{2L}{n}, n = 1, 2, 3 \dots$$



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 38 of 60

Hullámfüggvények



- ψ , pszi, hullámfüggvény.
– Egy álló hullámfüggvény a rendszer határain belül.
- Részecske 1 dimenziós potenciáldobozban:

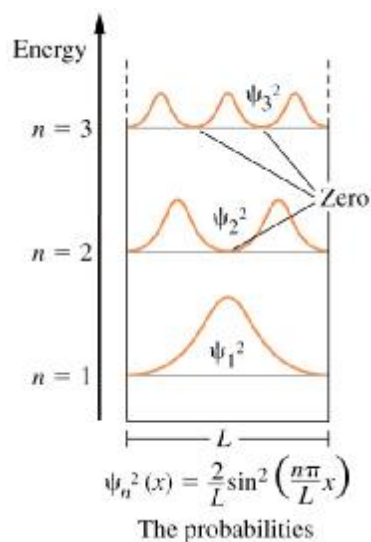
$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$E_n = (n\pi/L)^2 / 2$$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 39 of 60

Az elektron megtalálási valószínűsége



Probability
valószínűség
(az energiaskála nem
méretarányos,)

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 40 of 60

Hidrogénatom hullámfüggvényei

- Schrödinger, 1927 $E\psi = H\psi$

Gömbszimmetrikus potenciáltér

$$V(x,y,z) = -1/r$$

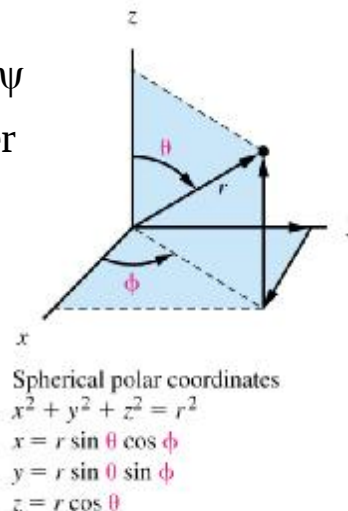
$$-H(x,y,z) \Rightarrow H(r,\theta,\phi)$$

(derékszögű $\Rightarrow$ polár)

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r) Y(\theta,\phi)$$

$R(r)$ radiális hullámfüggvény.

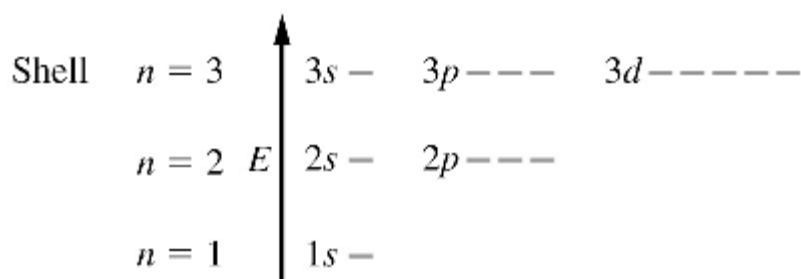
$Y(\theta,\phi)$ szögfüggő hullámfüggvény.



Kvantumszámok

- Fő-kvantumszám (héjak, an. Shell),
 $n = 1, 2, 3 \dots$
- Szögfüggő mellék-kvsz. (alhéjak, an. subshell),
 $l = 0, 1, 2 \dots (n-1)$
 - $l = 0, s$
 - $l = 1, p$
 - $l = 2, d$
 - $l = 3, f$
- mágneses kvantumszám,
 $m_l = -l \dots -2, -1, 0, 1, 2 \dots +l$

Pálya energiák



Subshell $l = 0$ $l = 1$ $l = 2$

Each subshell is made
up of $(2l + 1)$ orbitals.

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

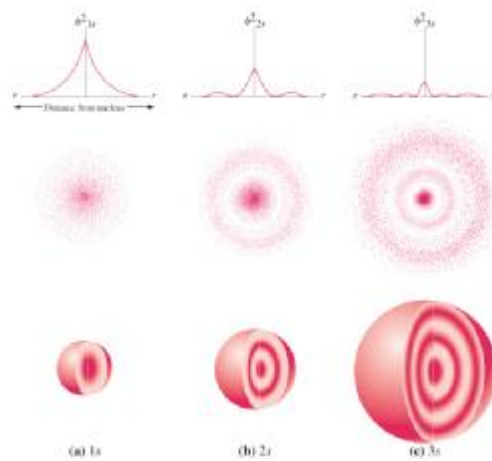
Slide 43 of 60

TABLE 9.1 The Angular and Radial Wave Functions of a Hydrogen-like Atom	
Angular Part $Y(\theta, \phi)$	Radial Part $R_{n,l}(r)$
$Y(s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$R(1s) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma/2}$
$Y(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\phi$	$R(2s) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma)e^{-\sigma/2}$
$Y(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \sin\phi$	$R(3s) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - 6\sigma + \sigma^2)e^{-\sigma/2}$
$Y(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$	$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$
$Y(d_{z^2}) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2\theta - 1)$	$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (4 - \sigma)\sigma e^{-\sigma/2}$
$Y(d_{x^2-y^2}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos 2\phi$	$R(3d) = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/2}$
$Y(d_{xy}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \sin 2\phi$	
$Y(d_{xz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta \cos\phi$	
$Y(d_{yz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta \sin\phi$	
	$\sigma = \frac{2Zr}{na_0}$

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 44 of 60

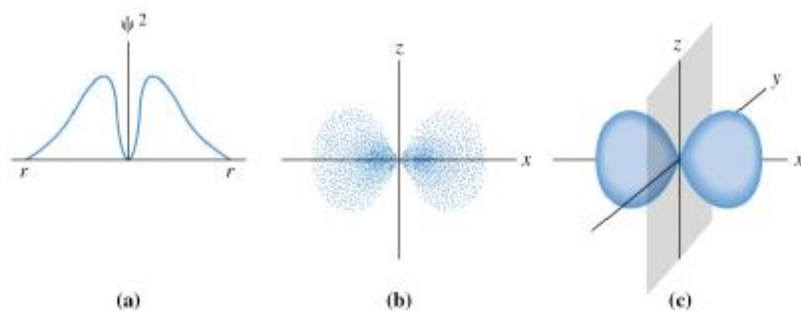
s pályák



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 45 of 60

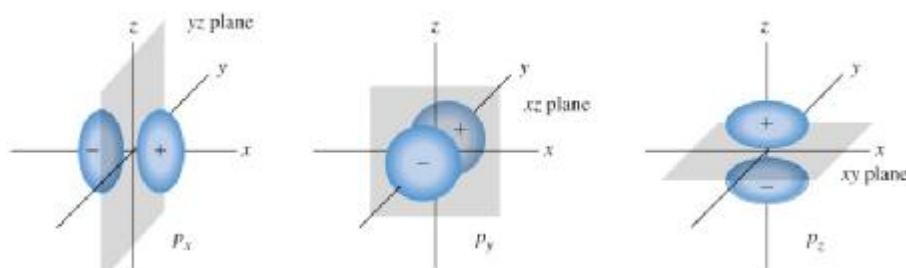
p pályák



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 46 of 60

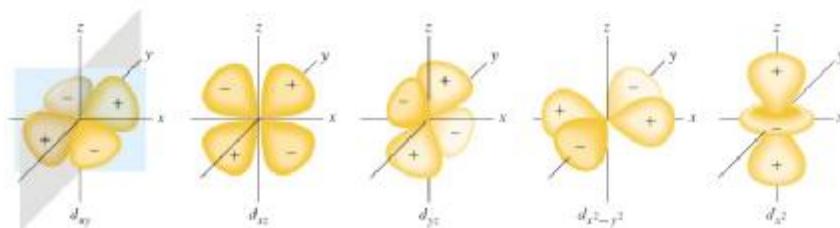
p pályák



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 47 of 60

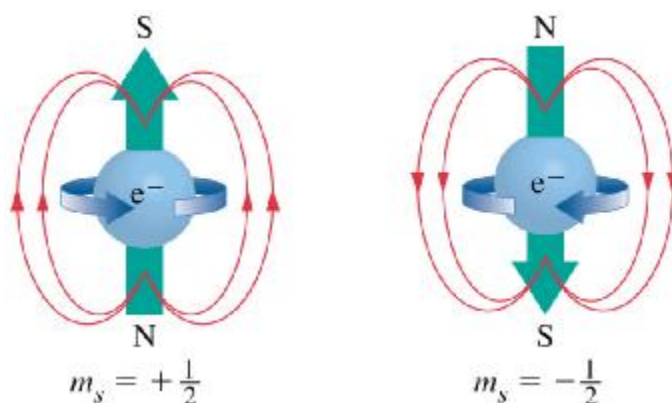
d pályák



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 48 of 60

8-9 Elektron Spin: a negyedik kvantumszám



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 49 of 60

8-10 Multi-Elektron atomok

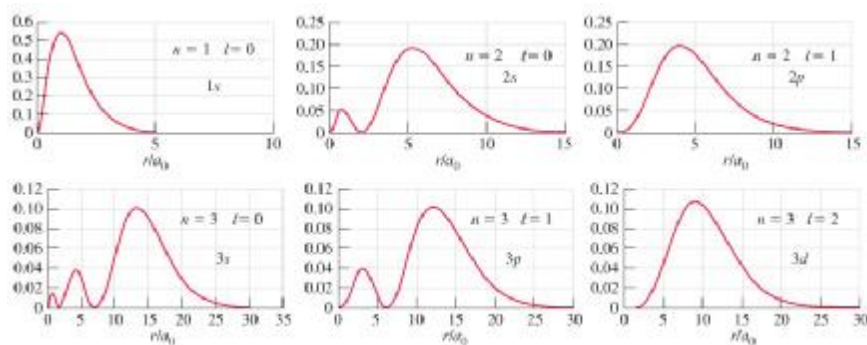
- Az eddig bemutatott megoldások *egyetlen* elektronra vonatkoztak.
- Elektron-Elektron taszítás lép fel több elektronos atomokban.
- A pályákat hidrogén-szerűnek vesszük ezekben is (közelítés).

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 50 of 60

Radiális elektronsűrűség

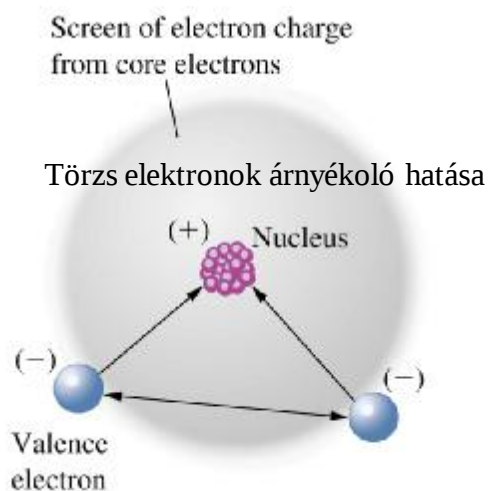
$$\rho(\mathbf{r}) = 4\pi r^2 \psi^2(\mathbf{r})$$



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 51 of 60

Screening (Árnyékolás)



$$Z_{\text{eff}} = Z - S$$

$$E_n = -R_H \frac{Z_{\text{eff}}^2}{n^2}$$

Általános Kémia, Periódikus
tulajdonságok

Slide 52 of 60

Árnyékolás (S)

Slater szabályok: 1s elektron, $S = 0.3$.

s vagy p pályán, $n > 1$, az árnyékolási konstans

$$S = 1.00 \cdot N_2 + 0.85 \cdot N_1 + 0.35 \cdot N_0$$

N_0 a többi elektron száma azonos héjon, N_1 az elektronok száma egy héjjal lejjebb ($n-1$), és N_2 az elektronok száma kettő vagy több héjjal lejjebb ($n-2$ és kisebb).

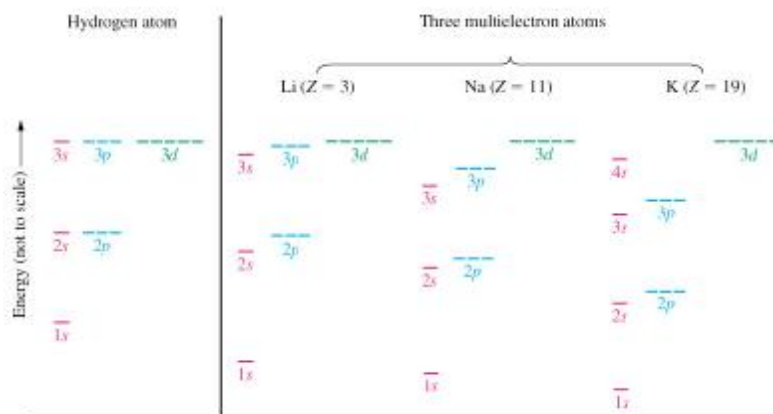
Az effektív magtöltés

$$Z_{\text{eff}} = Z - S$$

8-11 Elektron Konfigurációk

- Aufbau elv.
 - Az alacsonyabb energiájú pályák töltődnek fel előbb.
- Pauli kizárási elv.
 - Nincs két elektron amelynek mind a négy kvatumszáma megegyezik (n, l, m_l, s).
- Hund szabály (maximális multiplicitás).
 - Azonos energiájú pályákat az elektronok egyszeresen betöltve párhuzamos spinnel töltik fel, amíg ez lehetséges.

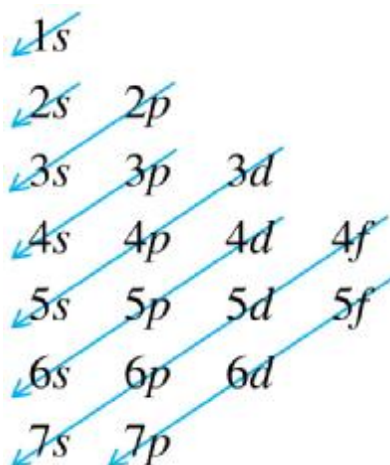
pálya energiák



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 55 of 60

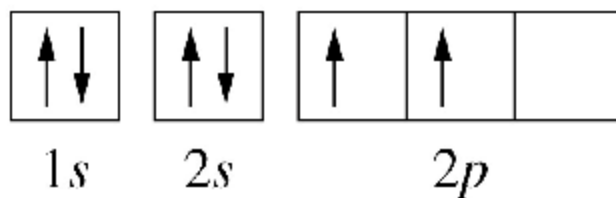
pálya betöltés



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 56 of 60

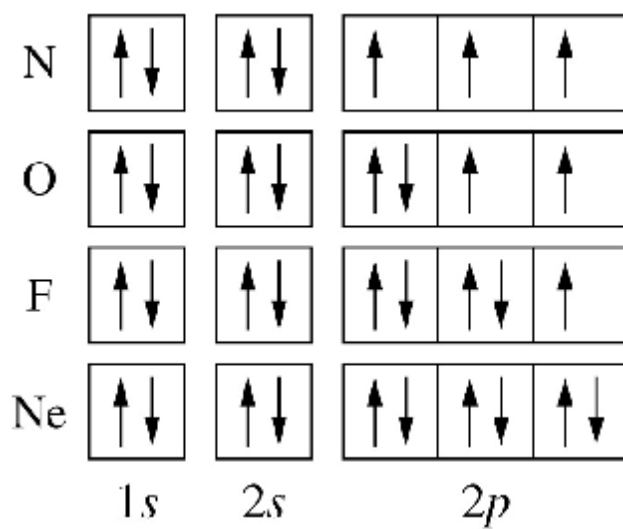
Aufbau elv és Hund szabály



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 57 of 60

p pályák betöltése



Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 58 of 60

d pályák betöltése

Se:	[Ar]		[Ar]3d ⁵ 4s ²
Ti:	[Ar]		[Ar]3d ² 4s ²
V:	[Ar]		[Ar]3d ³ 4s ²
Cr:	[Ar]		[Ar]3d ⁵ 4s ¹
Mn:	[Ar]		[Ar]3d ⁵ 4s ²
Fe:	[Ar]		[Ar]3d ⁶ 4s ²
Co:	[Ar]		[Ar]3d ⁷ 4s ²
Ni:	[Ar]		[Ar]3d ⁸ 4s ²
Cu:	[Ar]		[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹
Zn:	[Ar]		[Ar]3d ¹⁰ 4s ²

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 59 of 60

TABLE 9.2 Electron Configurations of Some Groups of Elements

Group	Element	Configuration
1	H	1s ¹
	Li	[He]2s ¹
	Na	[Ne]3s ¹
	K	[Ar]4s ¹
	Rb	[Kr]5s ¹
	Cs	[Xe]6s ¹
17	Fr	[Rn]7s ¹
	F	[He]2s ² 2p ⁵
	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵
	Br	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵
	I	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵
18	At	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
	He	1s ²
	Ne	[He]2s ² 2p ⁶
	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶
	Kr	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶
	Xe	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶
	Rn	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 60 of 60

8-12 Elektron konfigurációk és a periódusos táblázat

Main-group elements																	
s block		Transition elements										p block					
1	2											13	14	15	16	17	18
1	2											5	6	7	8	9	10
H	He											B	C	N	O	F	Ne
3	4											13	14	15	16	17	18
Li	Be											Al	Si	P	S	Cl	Ar
11	12											31	32	33	34	35	36
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	49	50	51	52	53	54
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	69	70	71	72	73	74
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	81	82	83	84	85	86
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	89	90	91	92	93	94
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	97	98	99	100	101	102
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	103	104	105	106	107	108
Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg		109	110	111	112		
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112						
Fr	Ra	Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									

Inner-transition elements													
f block													
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
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

Általános Kémia - Elektronok,
Atomok

Slide 61 of 60