

Elektronok, atomok

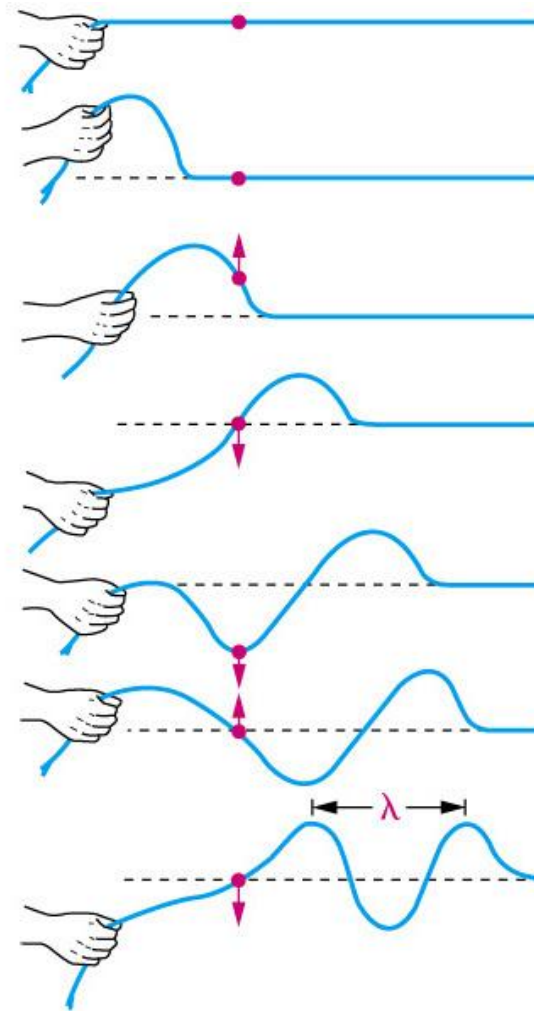
- 2-1 Elektromágneses sugárzás
- 2-2 Atomi Spektrum
- 2-3 Kvantumelmélet
- 2-4 A Bohr Atom
- 2-5 Az új Kvantummechanika
- 2-6 Hullámmechanika
- 2-7 Kvantumszámok

Tartalom

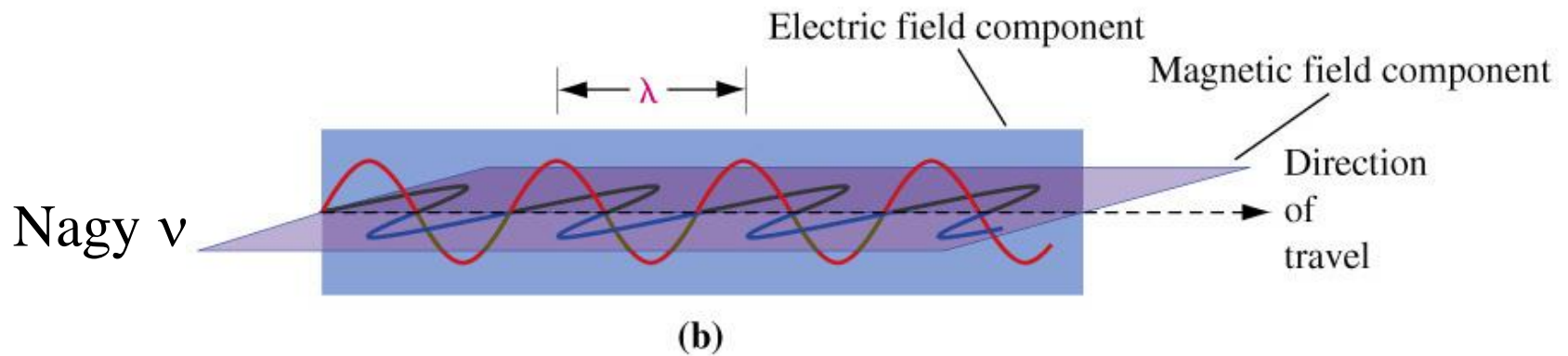
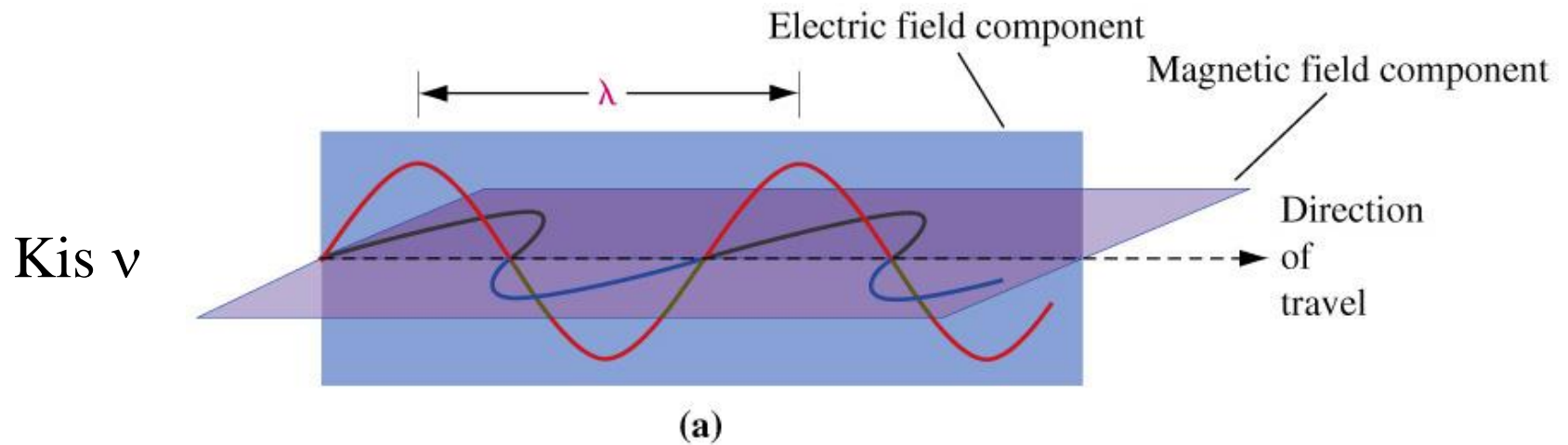
- 2-8 Elektronsűrűség
- 2-9 A hidrogénatom pályái
- 2-9 Elektron spin
- 2-10 Több elektronos atomok
- 2-11 Elektron Konfigurációk
- 2-12 Elektron Konfigurációk és a Periódusos táblázat

2-1 Electromágneses sugárzás

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



EM sugárzás



Frekvencia, Hullámhossz és Sebesség

- Frekvencia (ν) Hertz—Hz vagy s^{-1} .

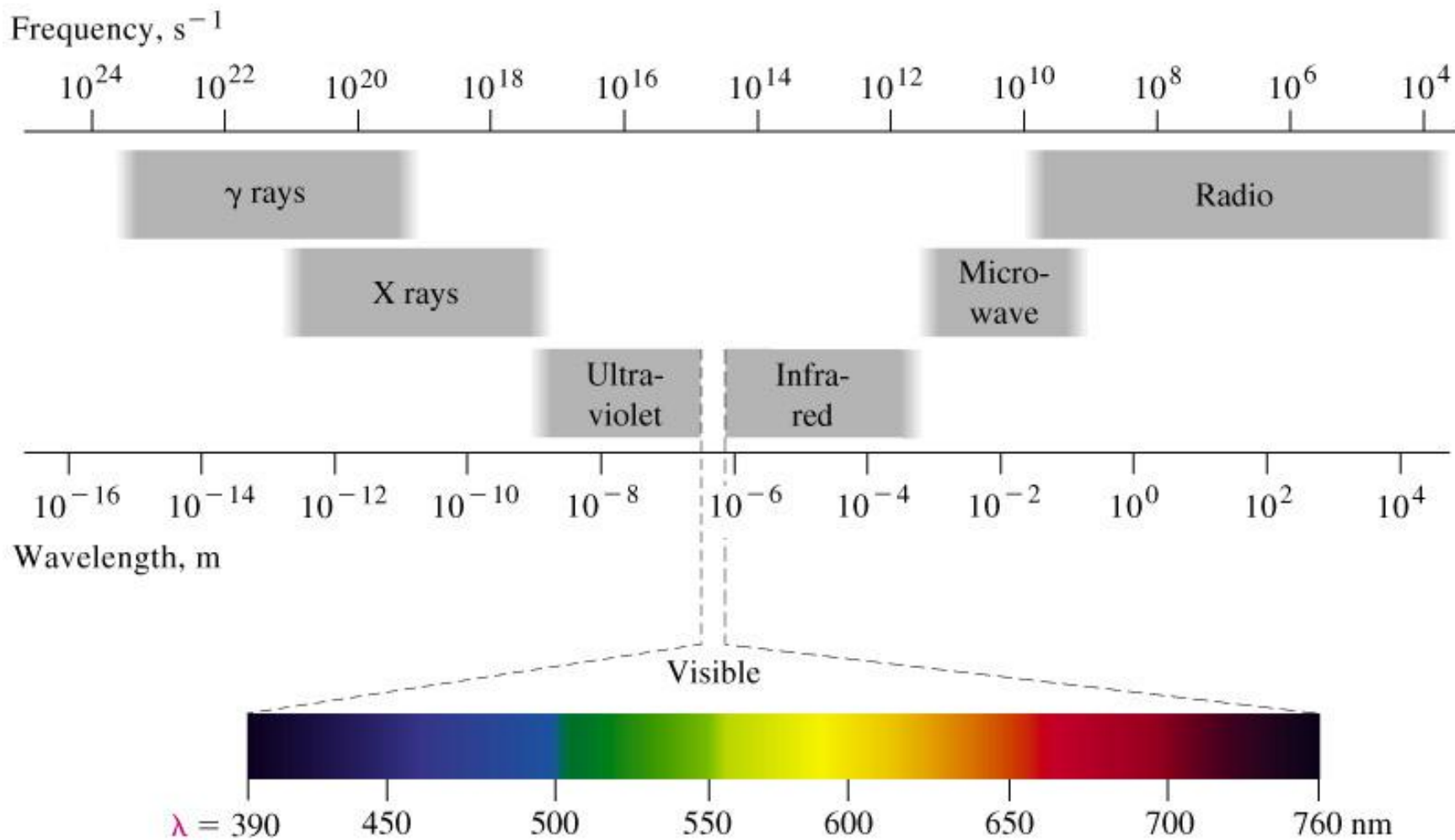
- Hullámhossz (λ) méter—m.

- cm μm nm Å pm
(10^{-2} m) (10^{-6} m) (10^{-9} m) (10^{-10} m) (10^{-12} m)

- Sebesség (c)— $2.997925 \cdot 10^8$ m s^{-1} .

$$c = \lambda \nu \qquad \lambda = c/\nu \qquad \nu = c/\lambda$$

Electromágneses Spektrum



ROYGBIV



Red

Orange

Yellow

700 nm

Green

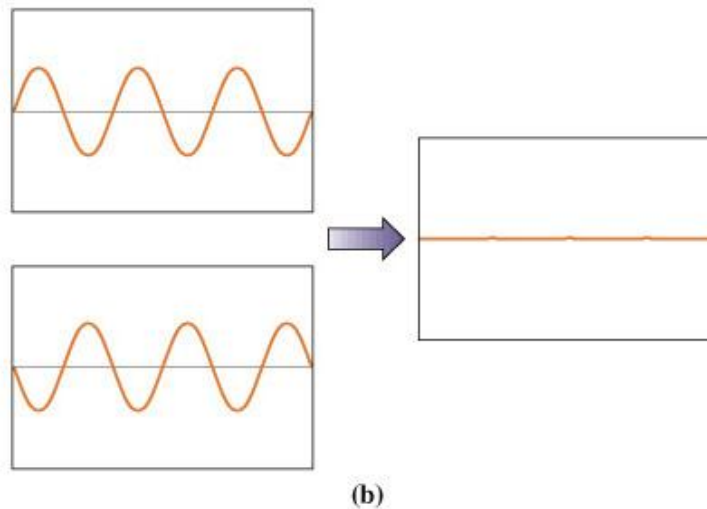
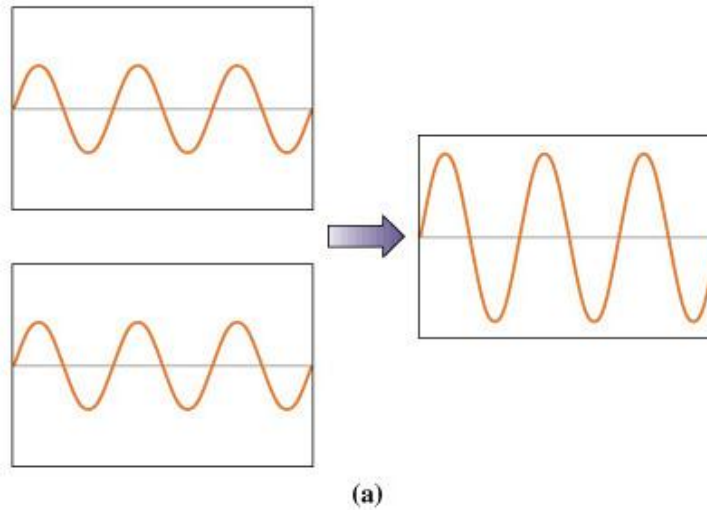
450 nm

Blue

Indigo

Violet

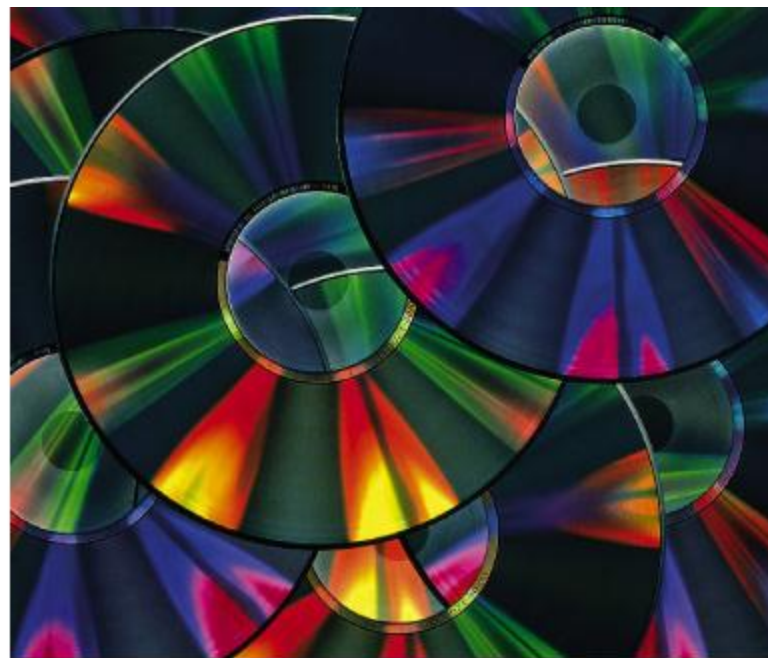
Konstruktív és Destruktív Interferencia



Interferencia

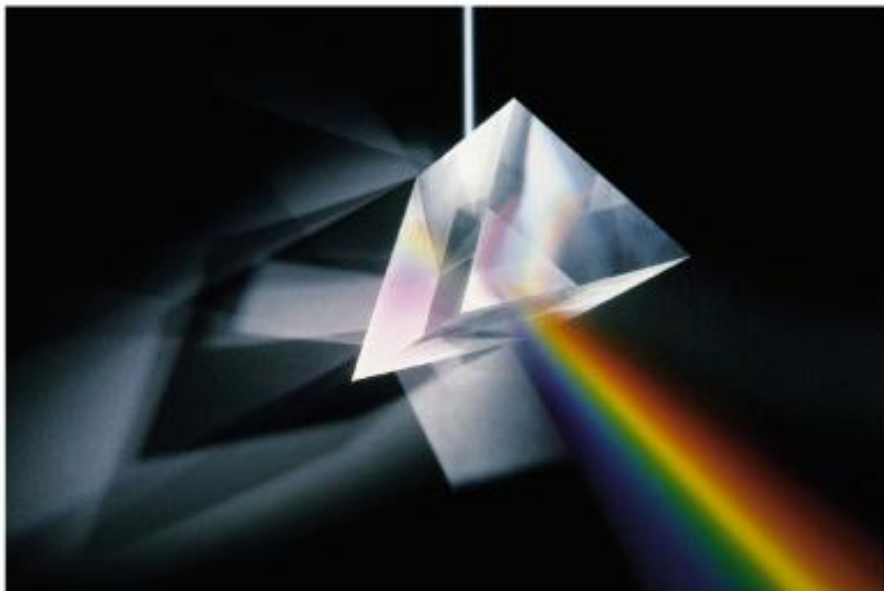


(a)



(b)

Fénytörés



(a)



(b)

2-2 Atomi Spektrum



(a)

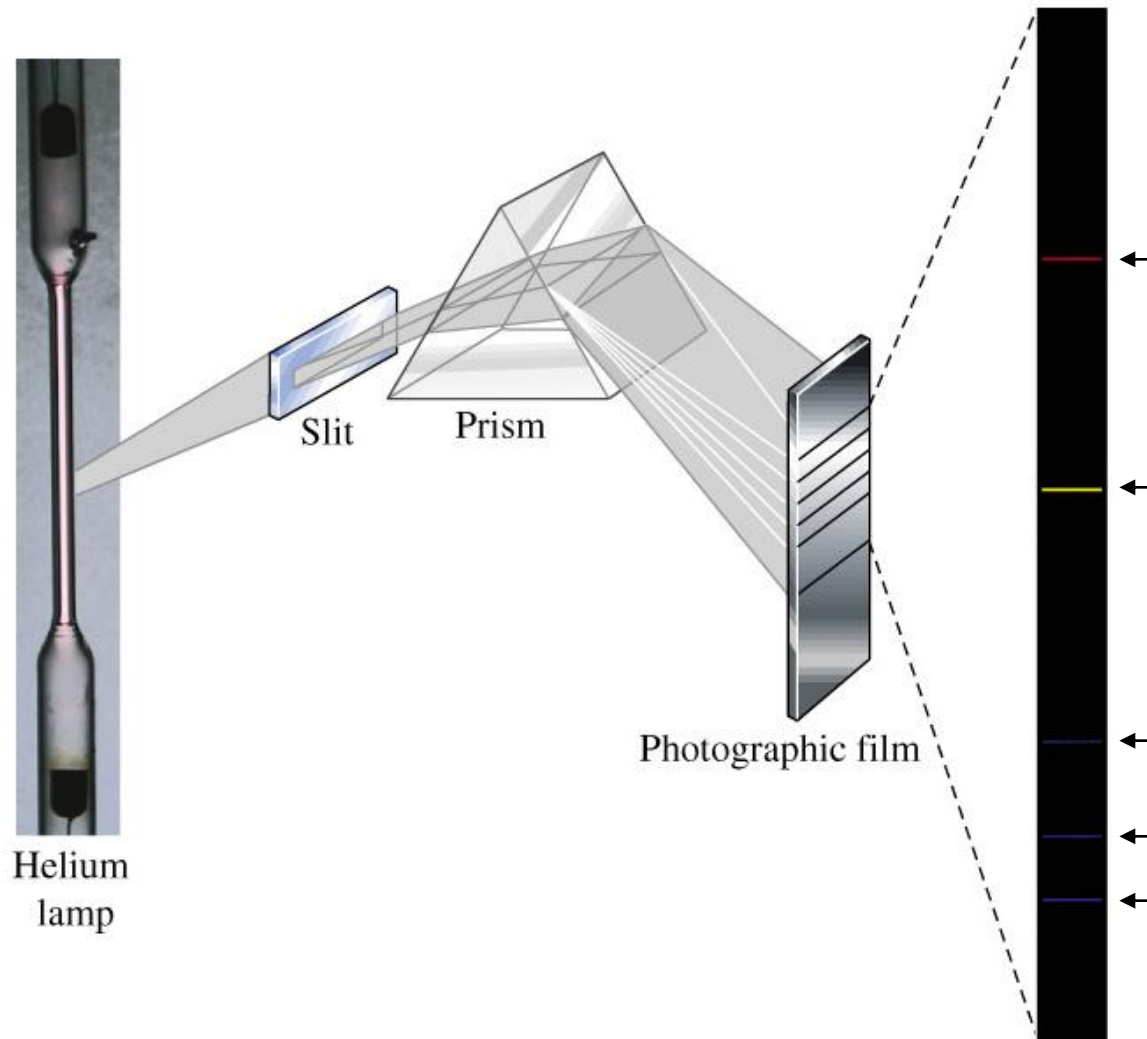
(b)

(c)

(d)

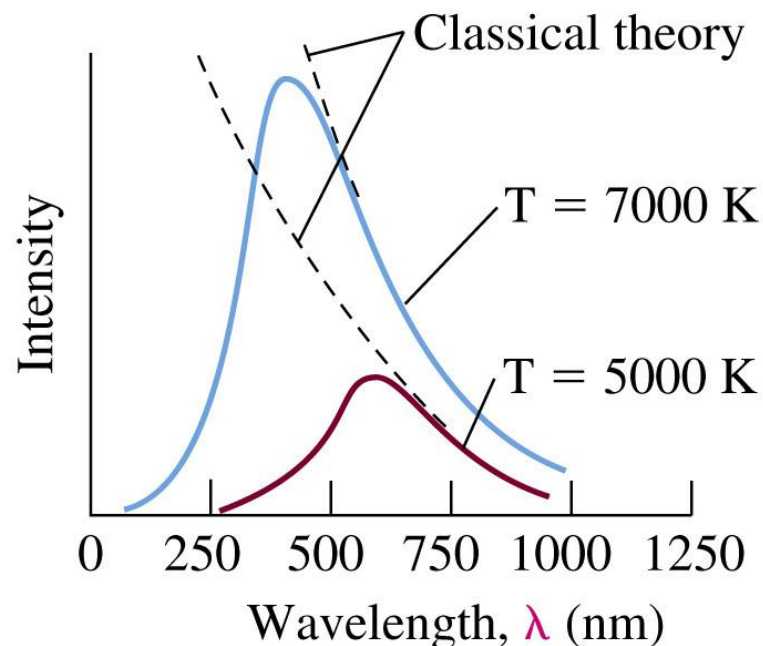
(e)

Atomi spektrum



2-3 Kvantumelmélet

Fekete test sugárzás:



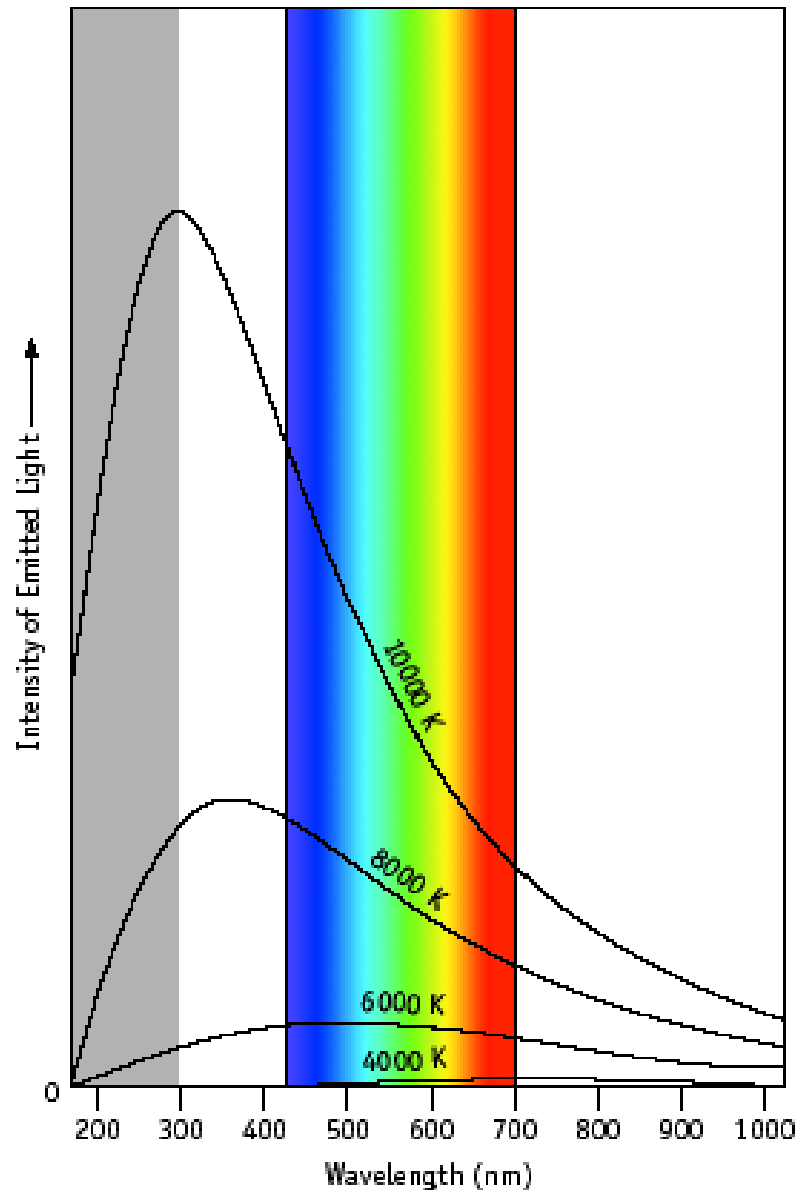
Max Planck, 1900:

Energia, az anyaghoz hasonlóan nem folytonos.

$$\epsilon = h\nu$$

Fekete test spektruma

- A hőmérséklet emelkedésével a kibocsátott fény színe változik.
- Vörös felől a kék felé tolódik el.



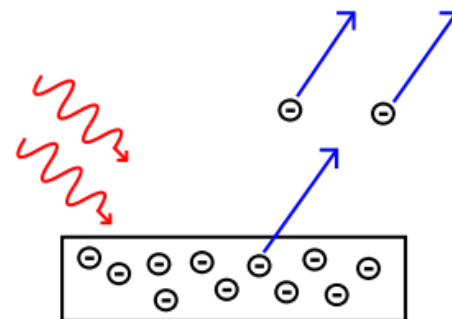
A fotoelektromos hatás (Einstein – Nobel díj 1921)

- Bizonyos fémekre beeső elektromágneses sugárzás elektronok kibocsátását eredményezi,
- ha a fény frekvenciája nagyobb mint a küszöb frekvencia:
 - $\nu > \nu_0$ (küszöb frekvencia)
 - $e^- \sim I$ (áramerősség)
 - $e_k \sim \nu$ (az elektron kinetikus energiája)

A fotoelektromos hatás

- A foton energiája az elektron kilépésére és gyorsítására fordítódik.
- A kilöködött elektron kinetikus energiája mérhető:

$$e_k = \frac{1}{2}mv^2 = e \cdot V_s$$

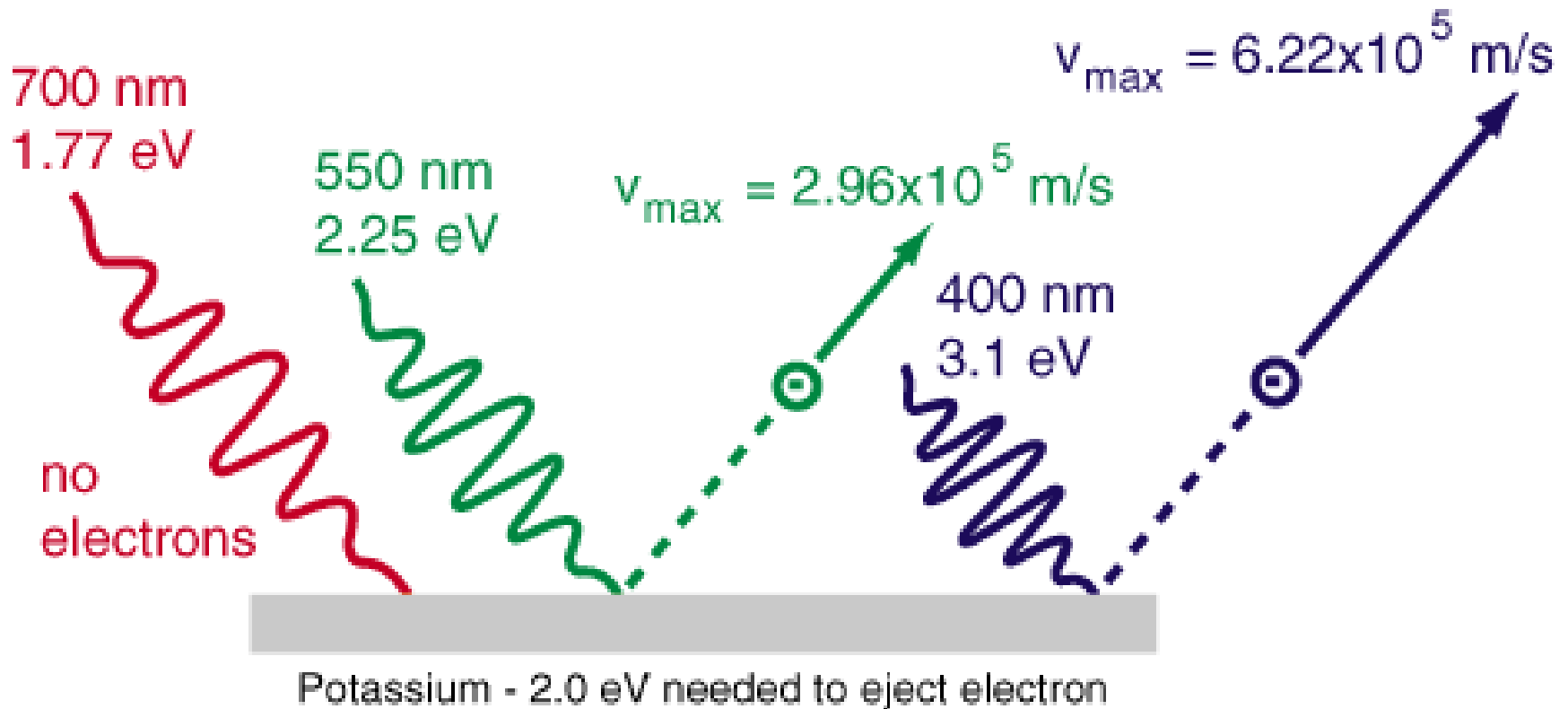


- Ahol V_s az elektron megállítási feszültség
- A foton frekvencia nagyobb kell legyen mint ν_0 :

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

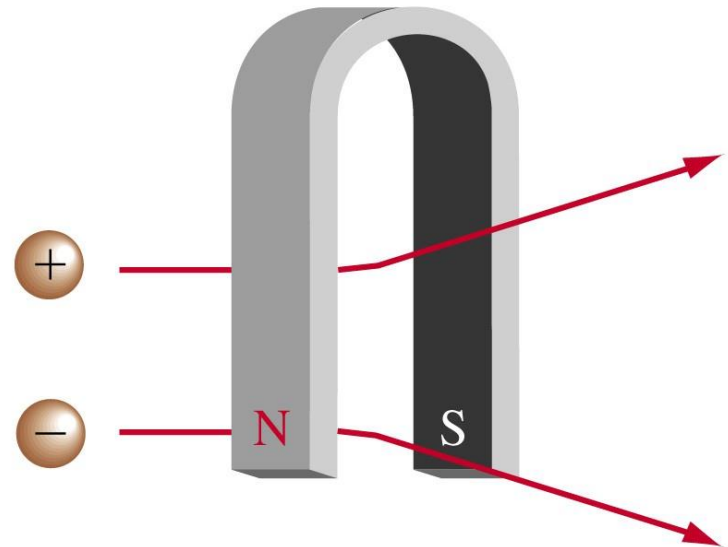
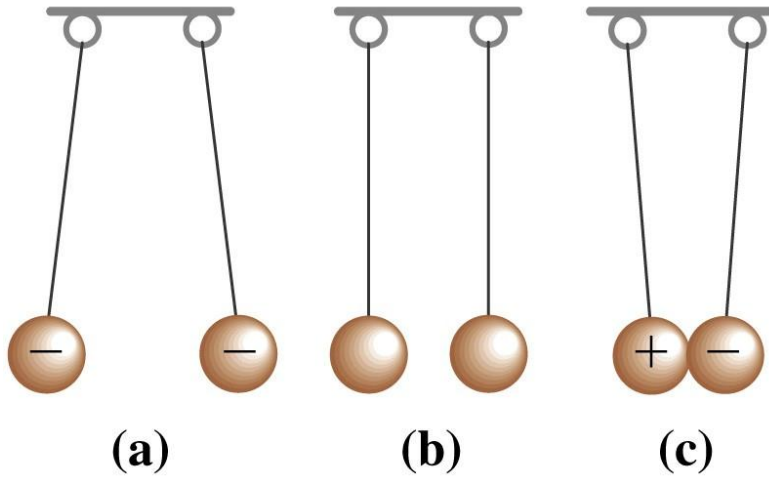
A fotoelektromos hatás

$$E_{\text{photon}} = h\nu$$

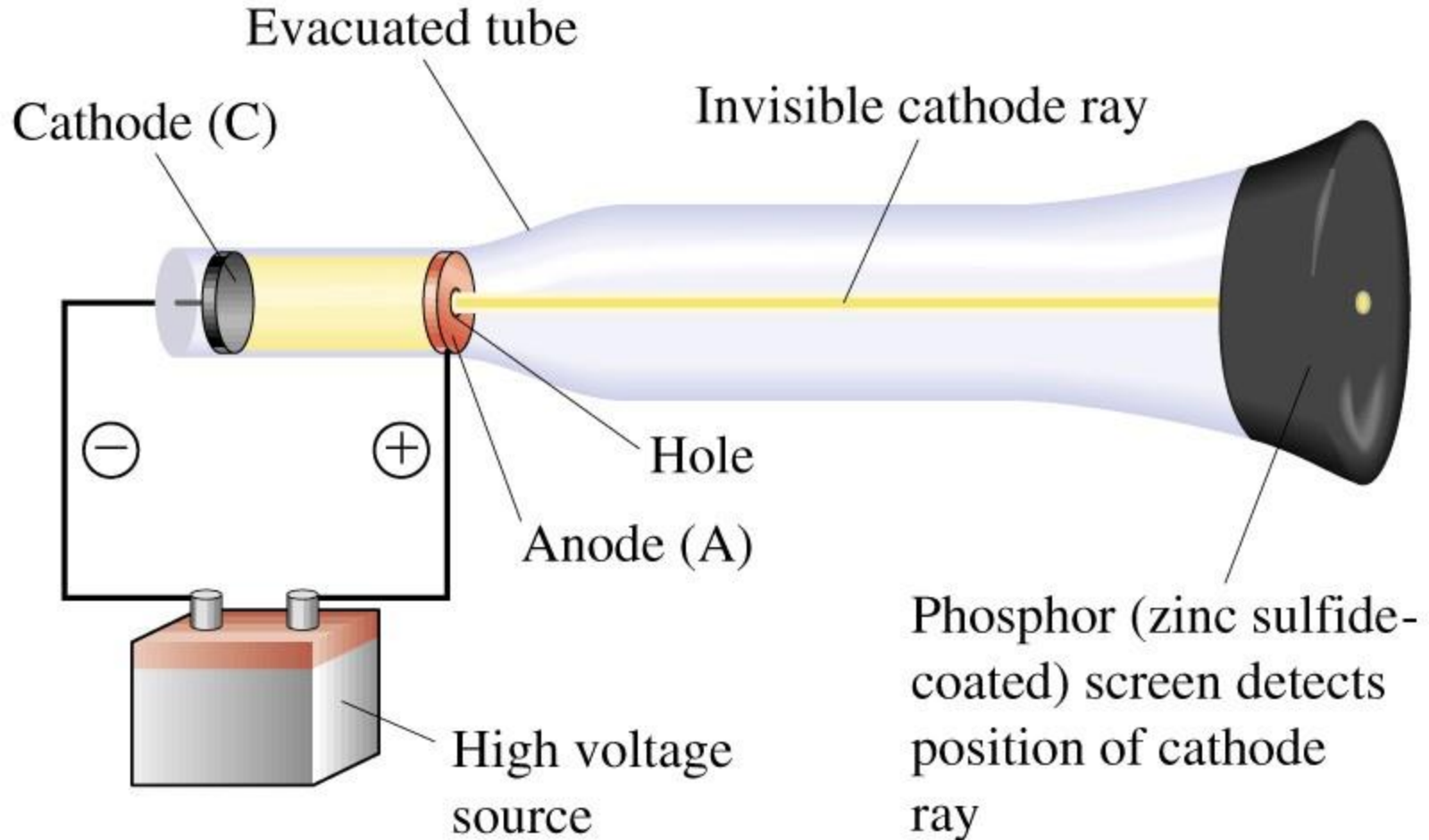


Photoelectric effect

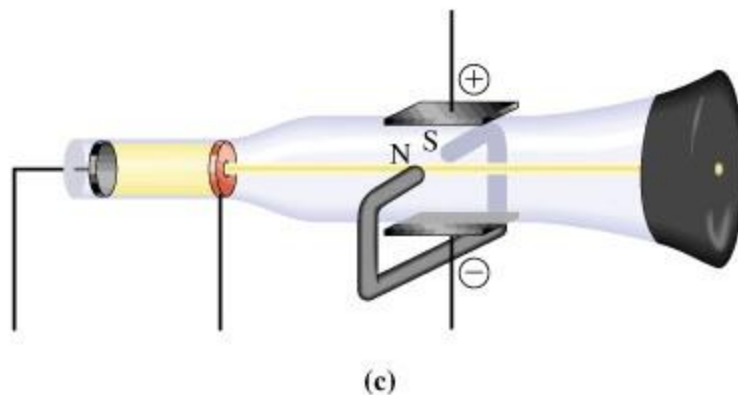
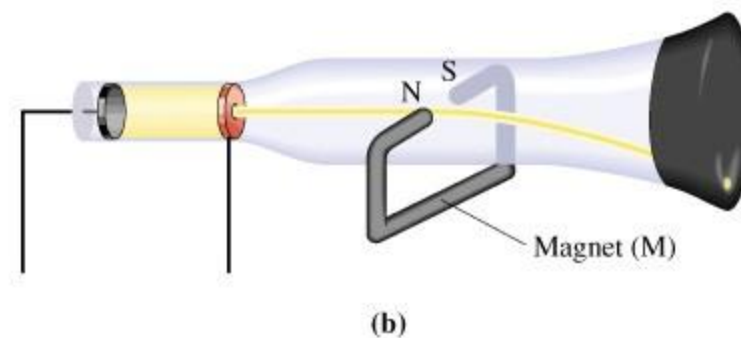
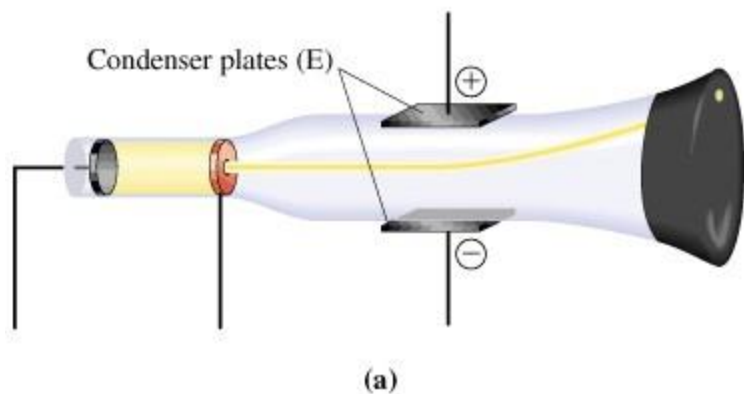
A töltések viselkedése



Katódsugárcső

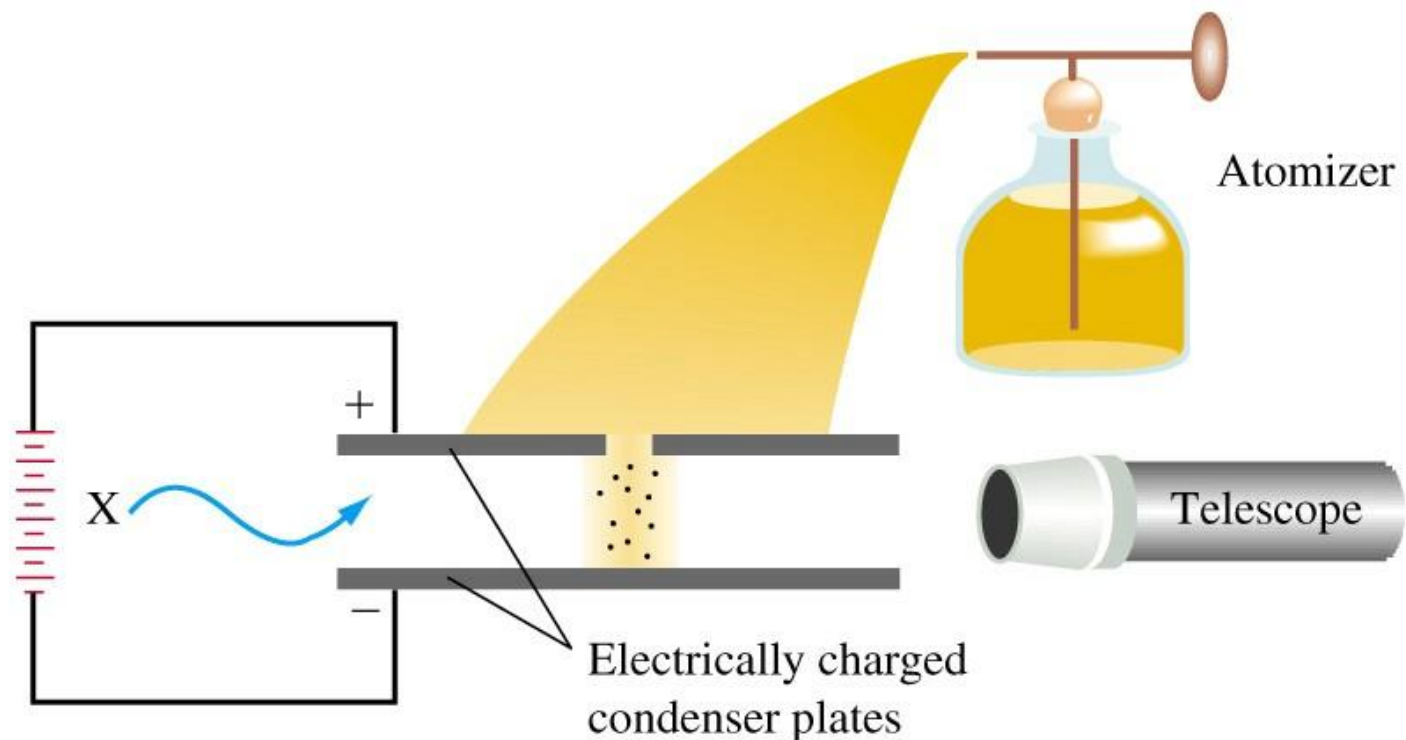


A katódsugárcső tulajdonságai



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

Az elektron töltése



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

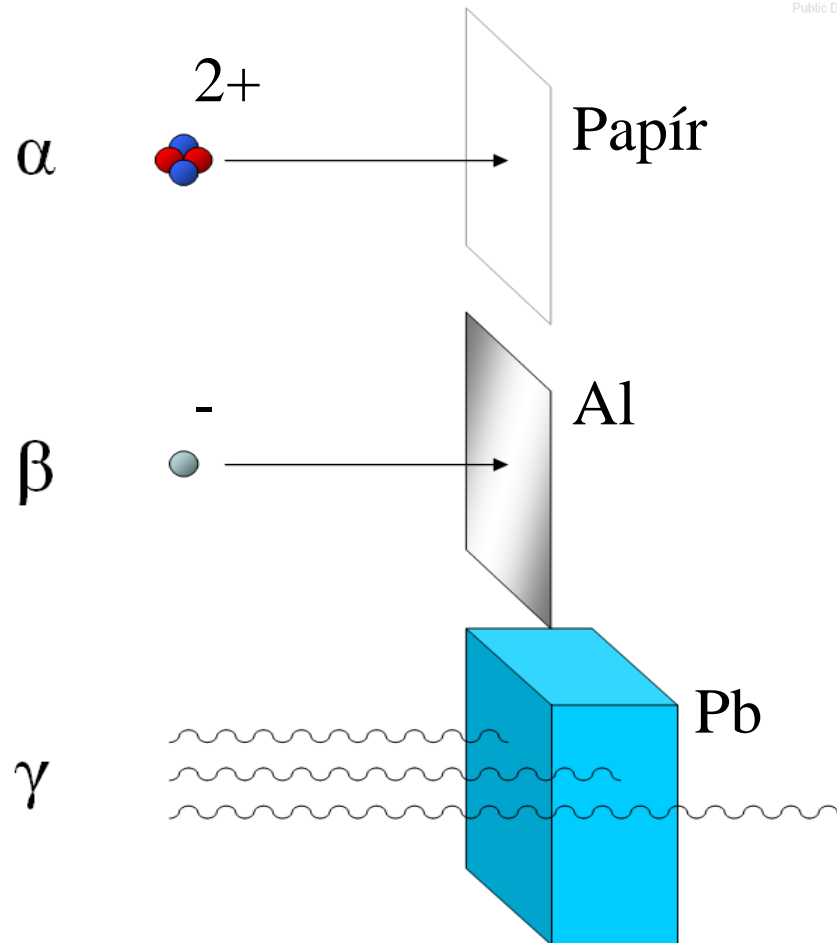
Radioaktivitás

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.**

Radioaktivitás

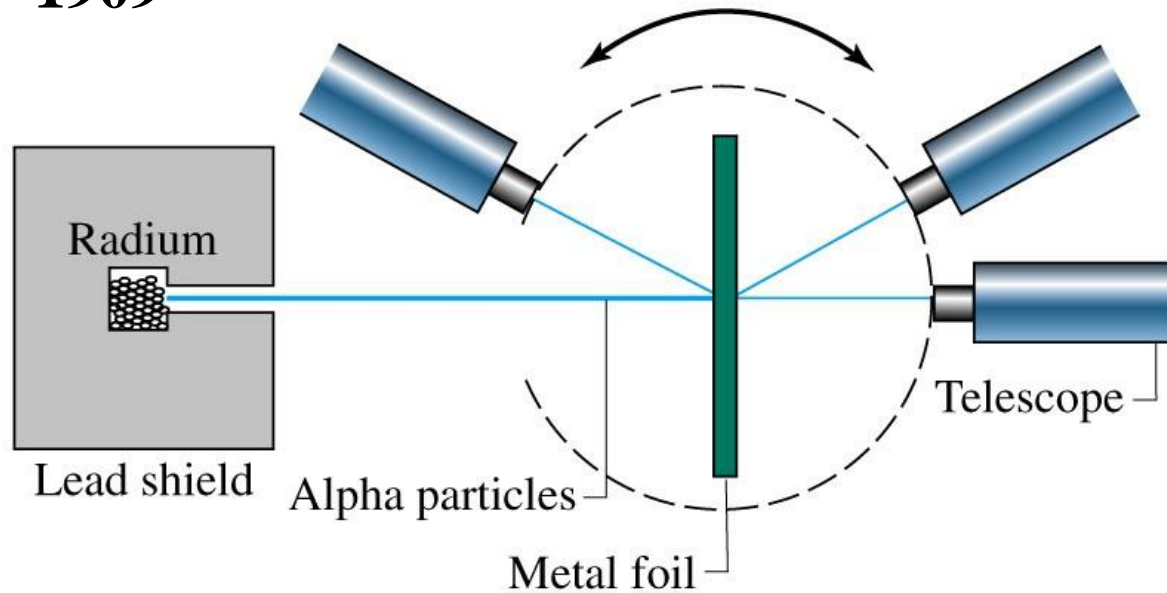
Pekka Tuominen '05
Public Domain



Forrás: Wikipedia.org

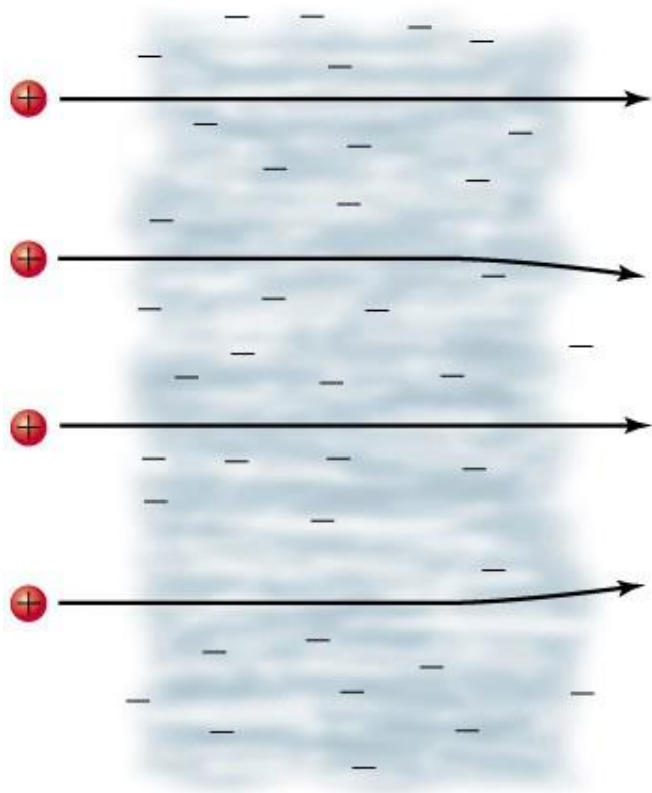
Az atommag

**Geiger, Mardsen és
Rutherford
1909**

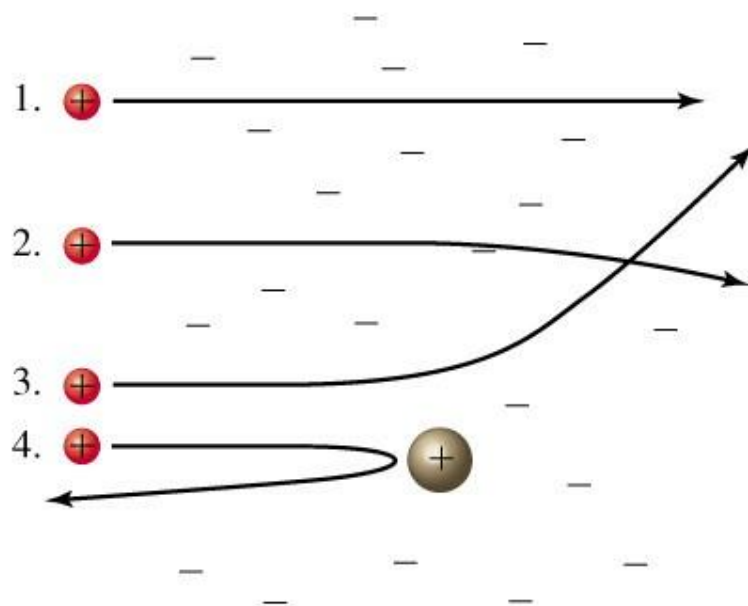


[A kísérlet filmen](#)

α -részecske kísérlet



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



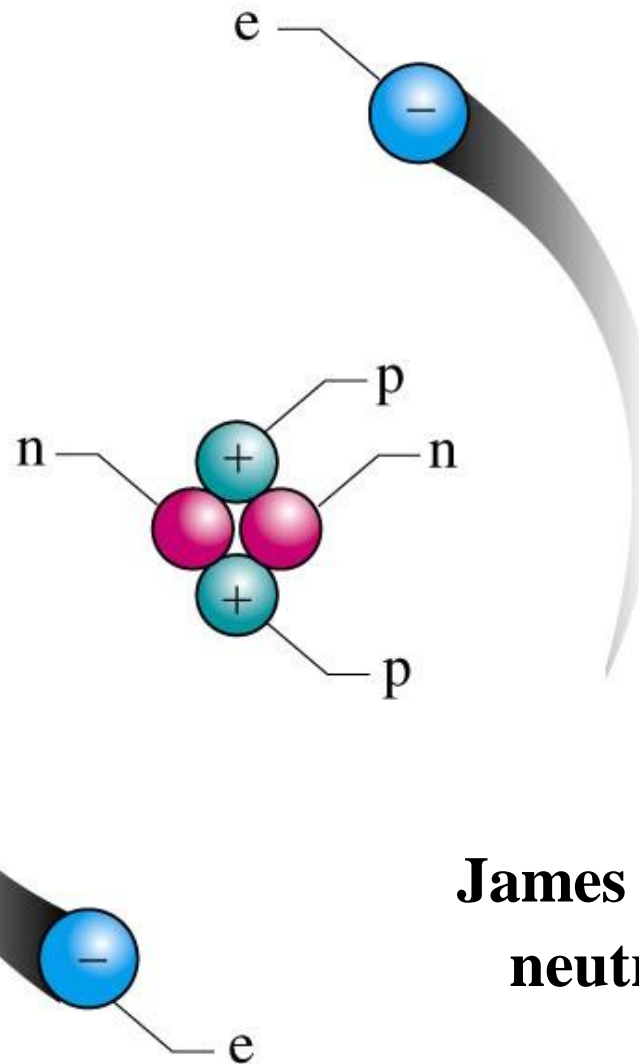
☆ Az elektronok az atommagtól távolabb helyezkednek el

A maggal rendelkező atom

Rutherford
proton 1918

Segré, Chamberlain
antiproton 1955

Cork
antineutron 1956



James Chadwick
neutron 1932

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

Atomi dimenziók

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

Hasznos egységek:

☆ **1 amu (atomic mass unit) = 1.66054×10^{-27} kg**

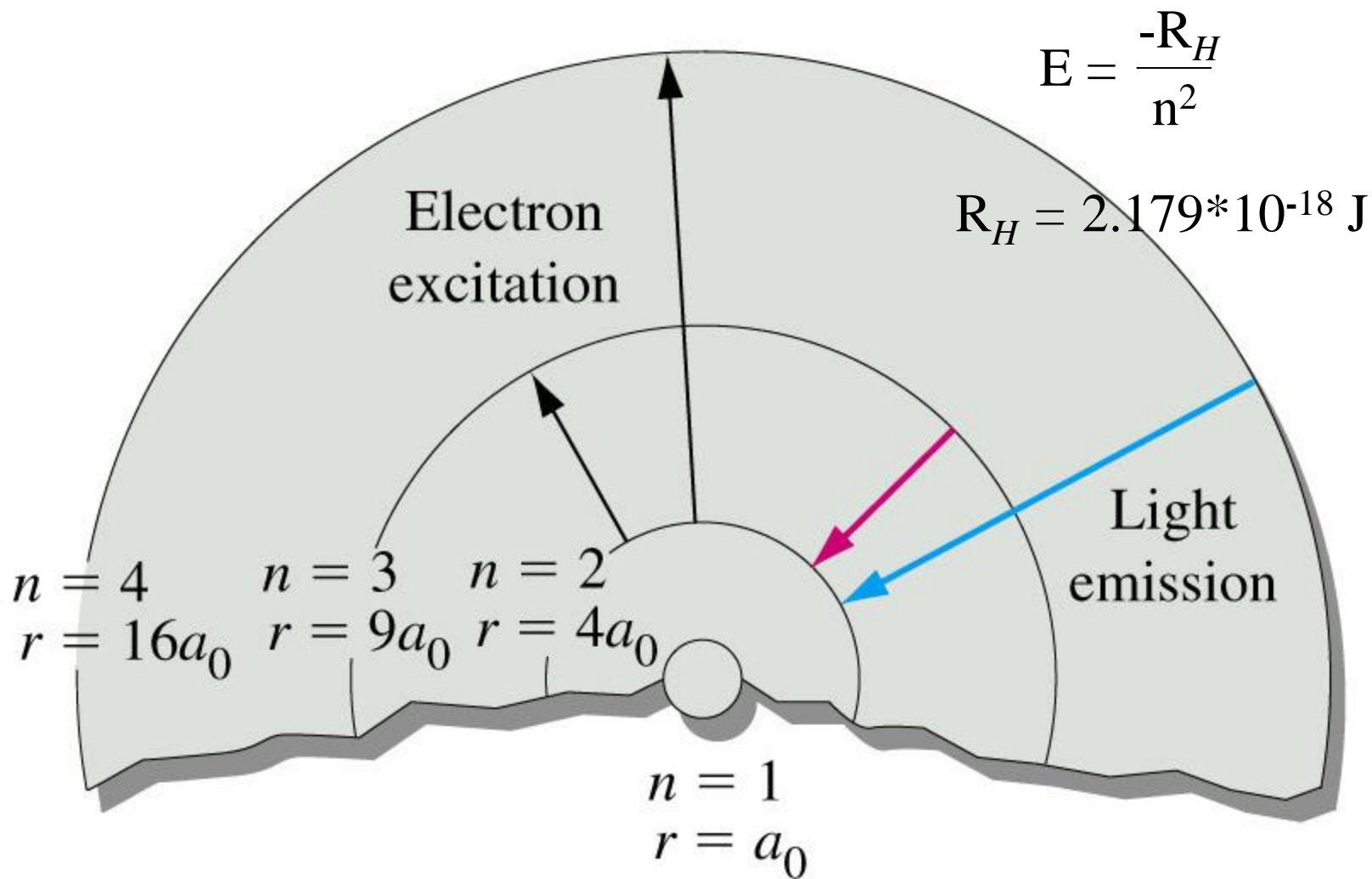
☆ **1 pm (picometer) = 1×10^{-12} m**

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

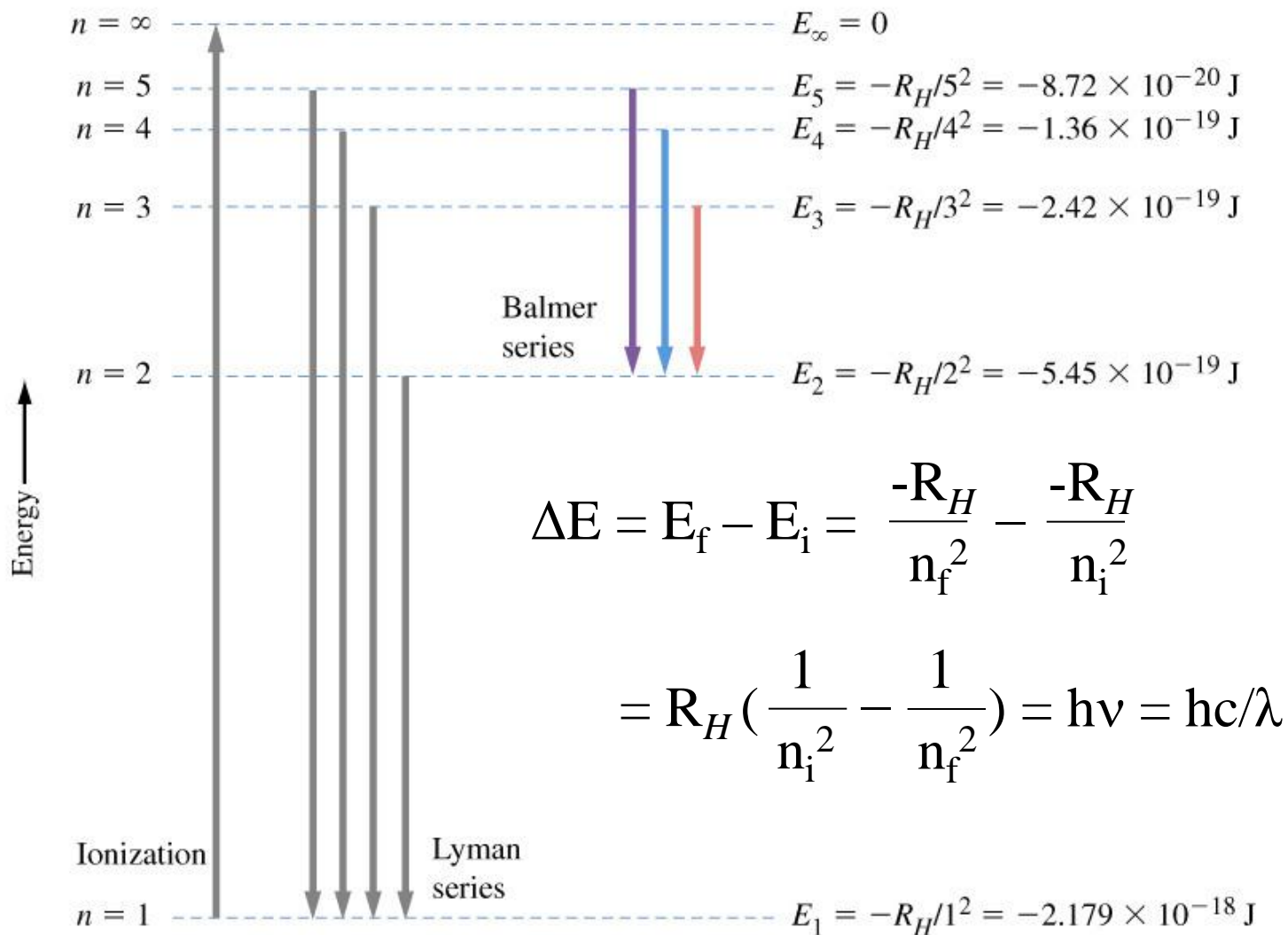
A legnagyobb atom 240 amu és 5 Å .

C-C kötés távolsága 154 pm (1.54 Å)

2-4 Bohr Atom



Energia szintek



A hidrogén ionizációs energiája

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

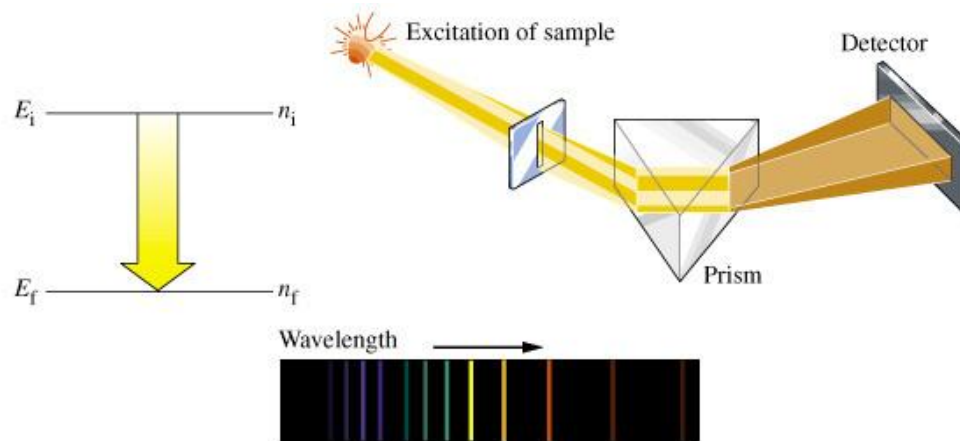
Ha n_f végtelenhez tart :

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

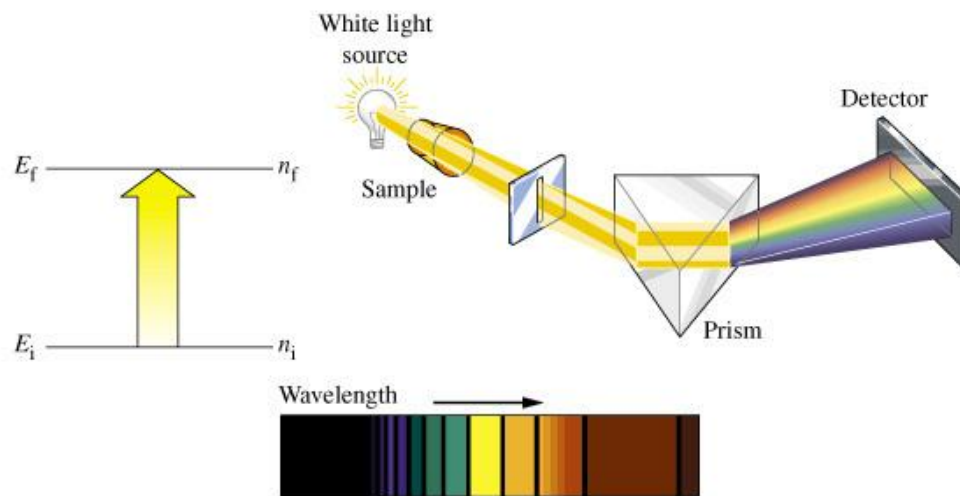
A hidrogénszerű ionokra is érvényes, pl. He^+ , Li^{2+} ...

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

Emissziós és abszorpciós spektroszkópia



(a)

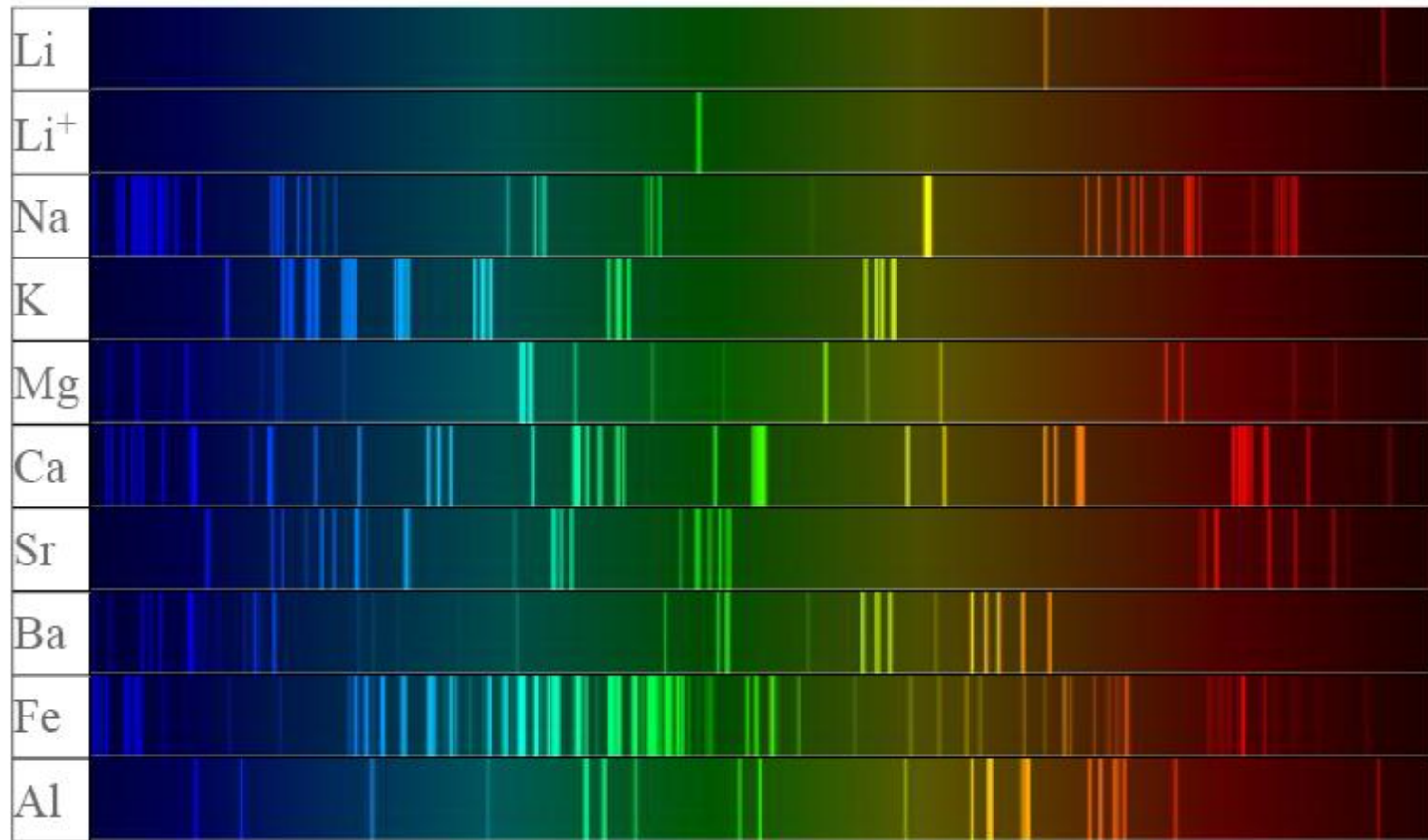


(b)

Látható atomi emissziós spektrum

Color coded visible atomic emission spectra lines

wave length: 440-680 nm.



2-5 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.

deBroglie anyaghullámok

$$E = mc^2$$

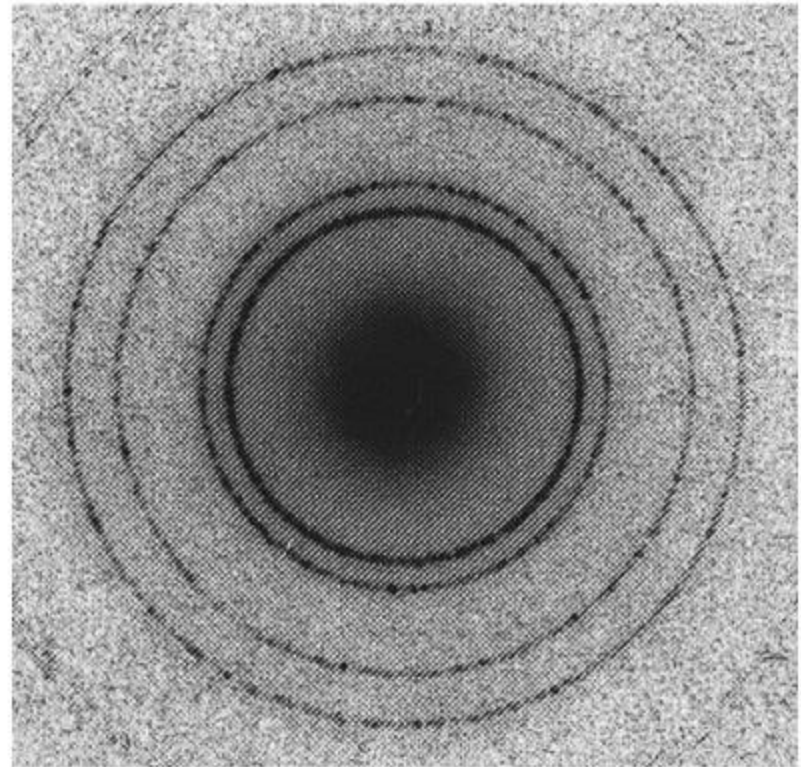
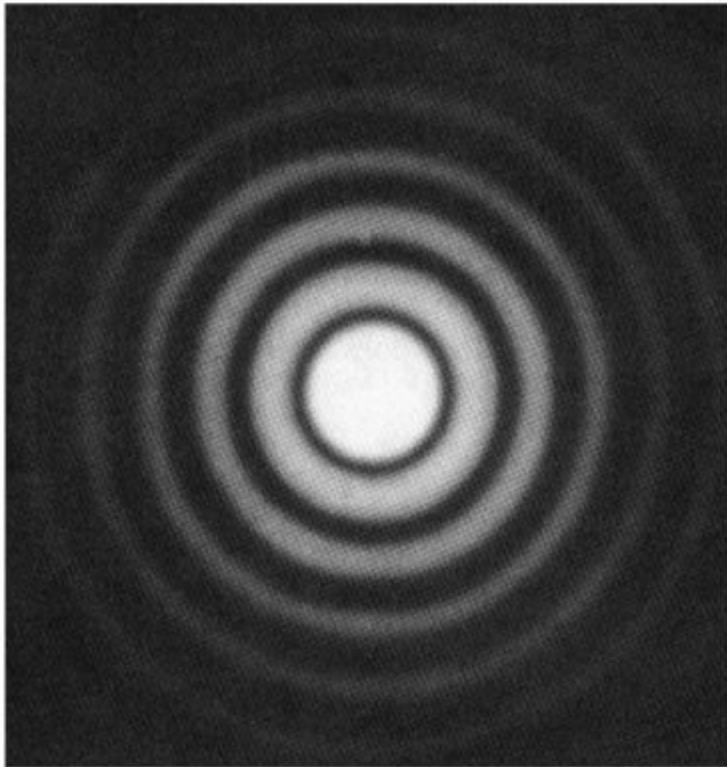
$$h\nu = mc^2$$

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

$$p = h/\lambda$$

$$\lambda = h/p = h/mv$$

X-Ray (Röntgen) Diffrakció



A bizonytalansági elv

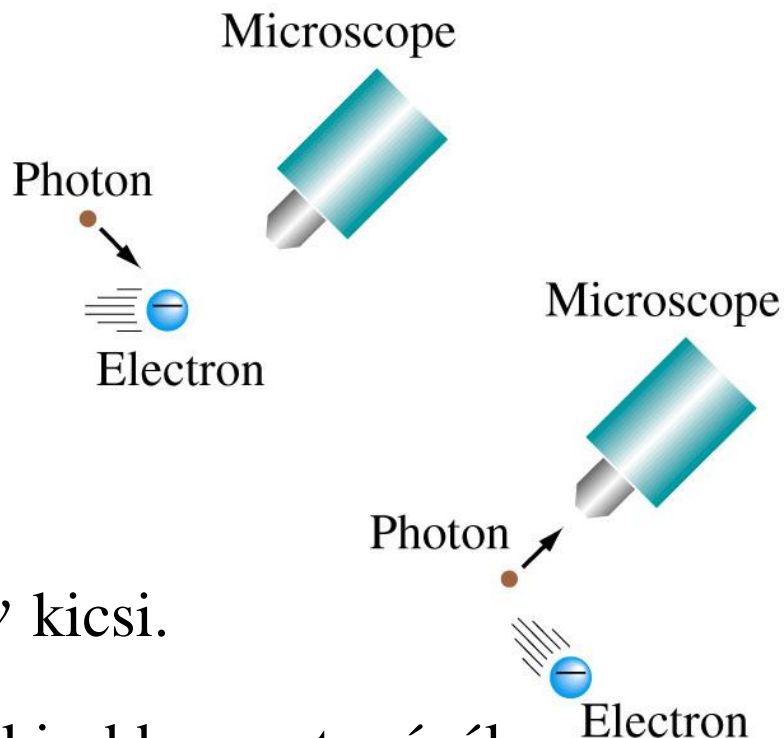
- Werner Heisenberg 1927

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

$$\Delta x \cdot m \cdot \Delta v \geq \frac{\hbar}{2}$$

Ha nagy tömeg (m) a $\Delta x \cdot \Delta v$ kicsi.

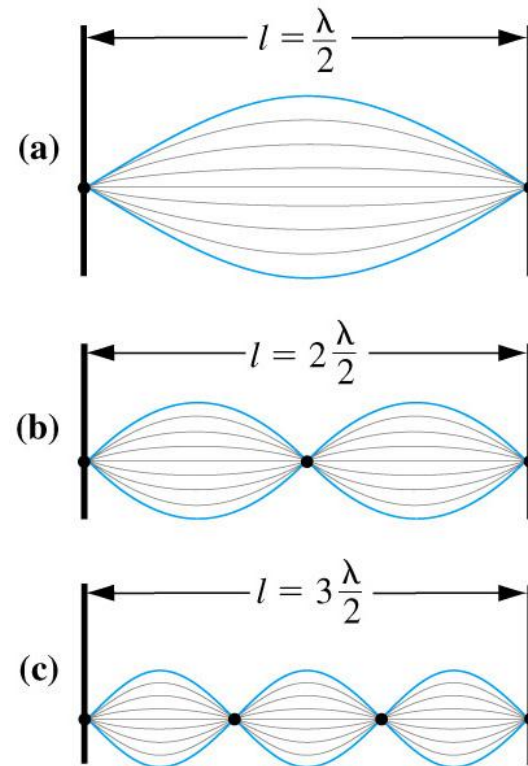
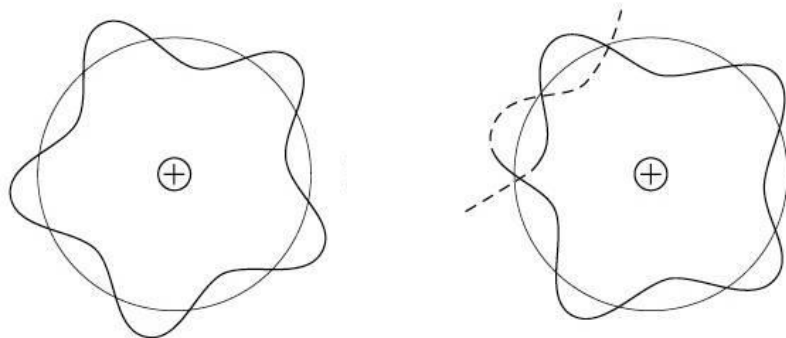
Az elektron tömege 2000-szer kisebb a protonénál, ezért az elektron esetében ez a bizonytalanság jobban érzékelhető



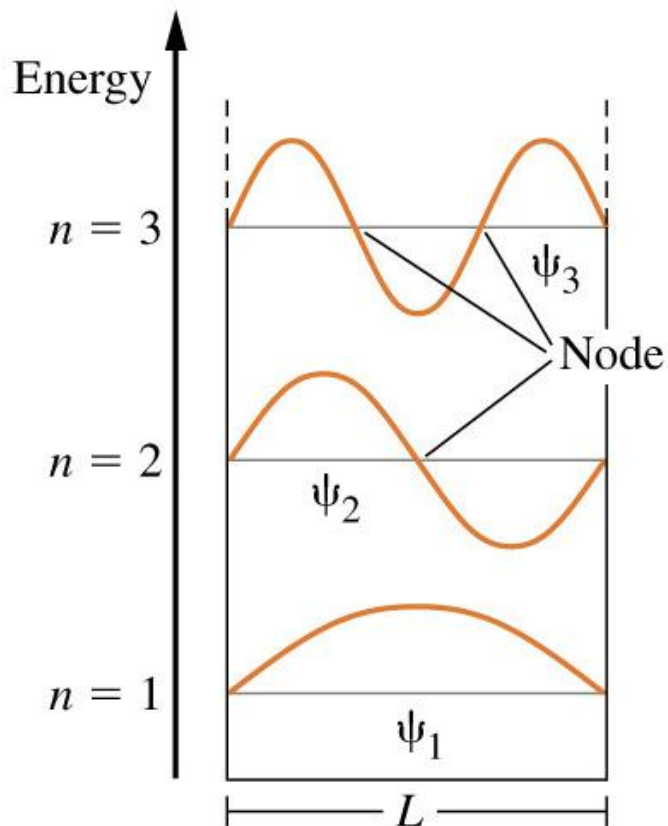
2-6 Hullámmechanika

- Álló hullámok.
 - A zérushelyek (csomópontok ,
angolul: nodes)
nem változtatják a helyzetüket.

$$\lambda = \frac{2L}{n}, n = 1, 2, 3 \dots$$



Hullámfüggvények



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

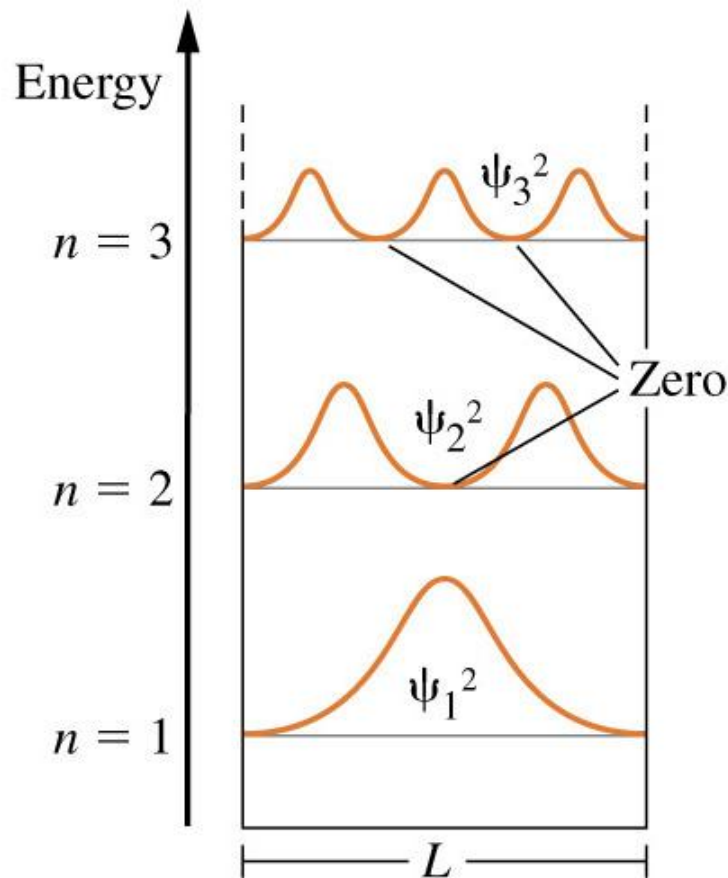
The wave functions

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

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

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

Az elektron megtalálási valószínűsége



Probability
valószínűség

(az energiaskála nem
méretarányos,)

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

The probabilities

Hidrogénatom hullámfüggvényei

- Schrödinger, 1927: $\hat{H}\psi = E\psi$

Gömbszimmetrikus potenciáltér

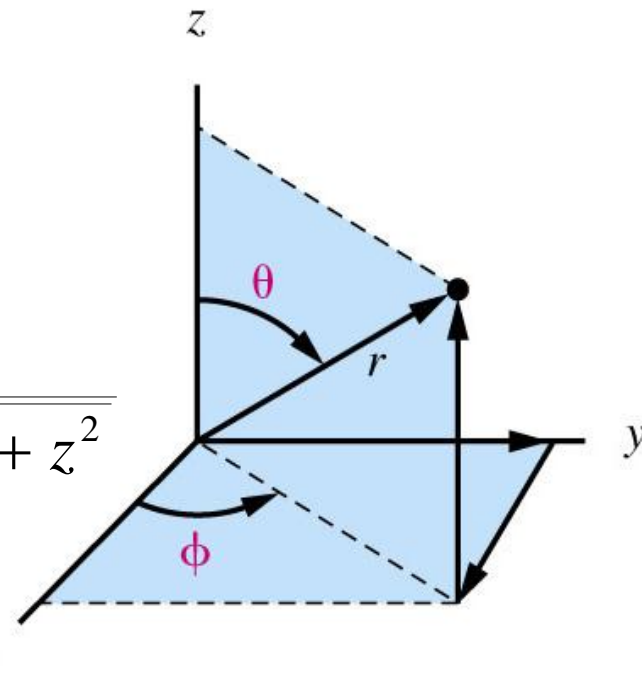
$$V(x,y,z) = -1/r \quad -\frac{1}{r} = \frac{-1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

– $\mathcal{H}(x,y,z) \Rightarrow \mathcal{H}(r,\theta,\phi)$
(derékszögű \Rightarrow polár)

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

$R(r)$ radiális hullámfüggvény.

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



Spherical polar coordinates

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

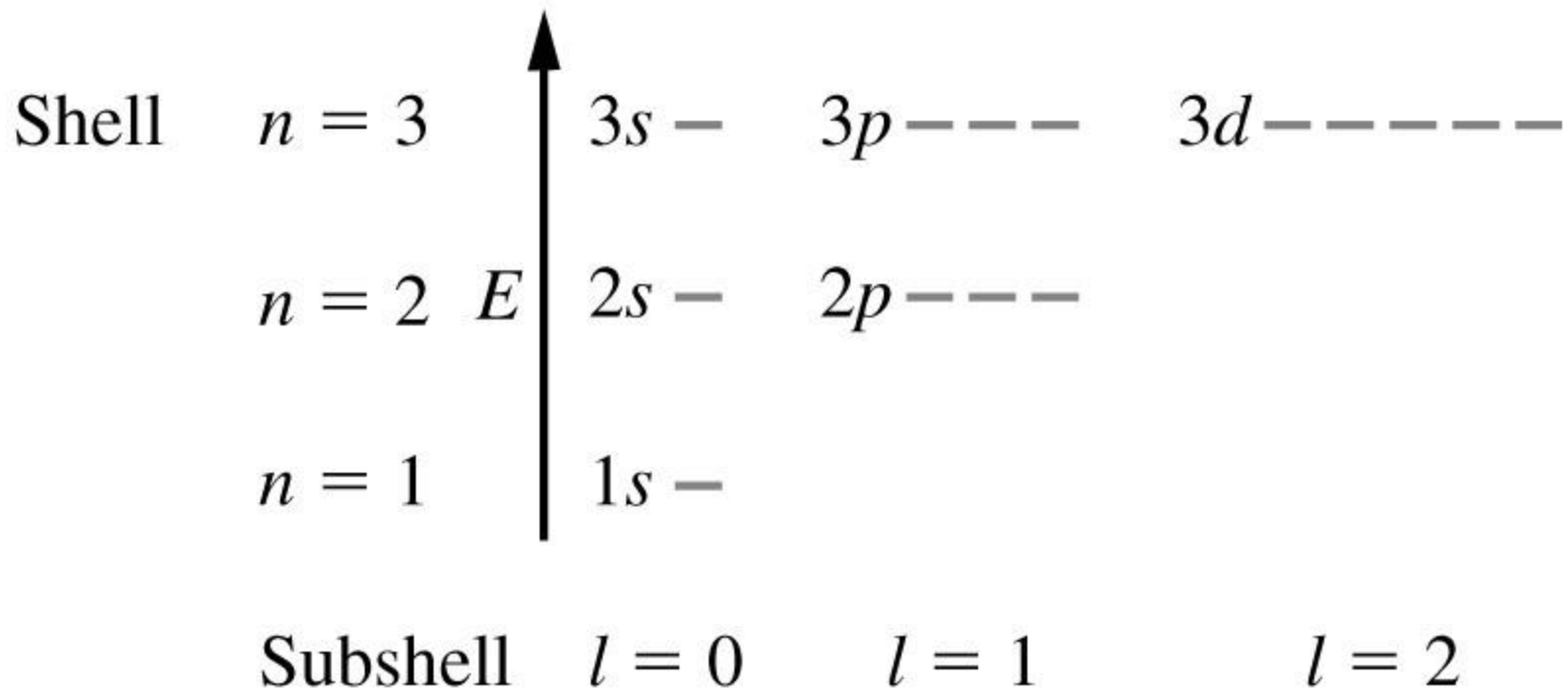
$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

2-7 Kvantumszámok

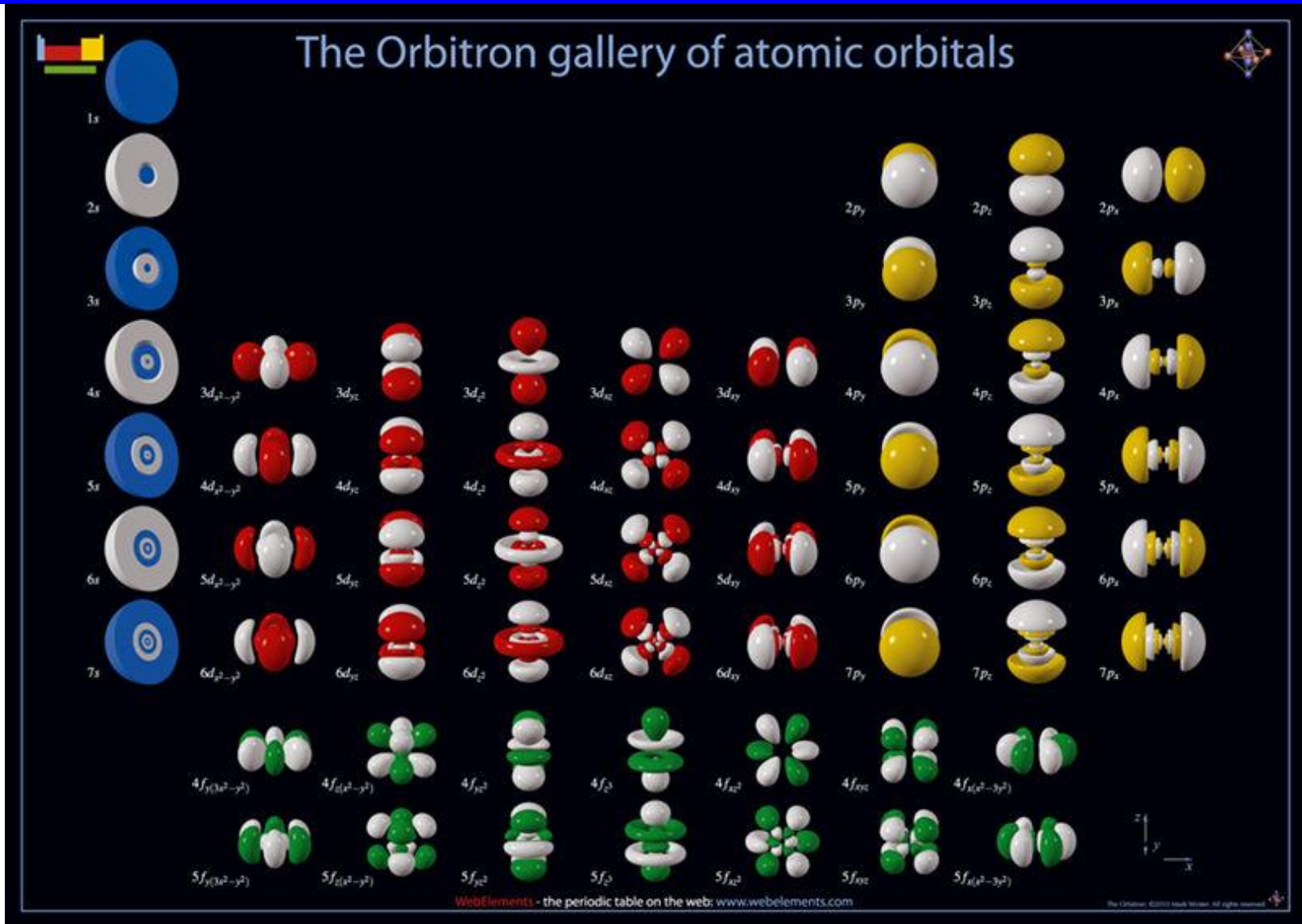
- Fő-kvantumszám (héjak),
 $n = 1, 2, 3 \dots$
- Szögfüggő mellék-kvsz. (alhéjak),
 $\ell = 0, 1, 2 \dots (n-1)$
 - $\ell = 0, s$
 - $\ell = 1, p$
 - $\ell = 2, d$
 - $\ell = 3, f$
- mágneses kvantumszám,
 $m_1 = -\ell \dots -2, -1, 0, 1, 2 \dots +\ell$

Pálya energiák



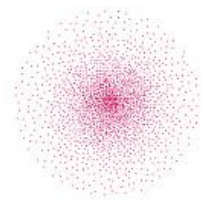
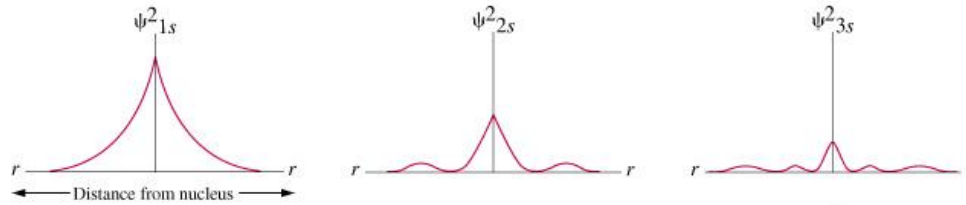
Each subshell is made up of $(2l + 1)$ orbitals.

Az atompályák alakja



2-8 Elektronsűrűség

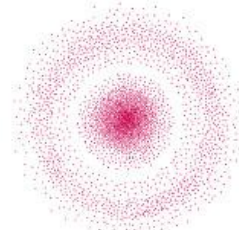
s pályák



$$\psi^2_{1s}$$



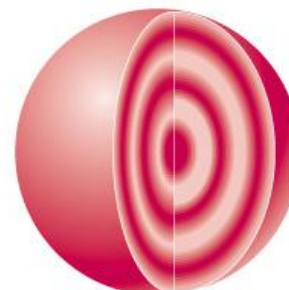
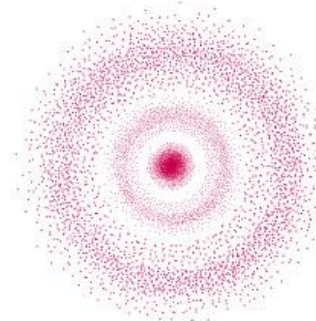
(a) 1s



$$\psi^2_{2s}$$

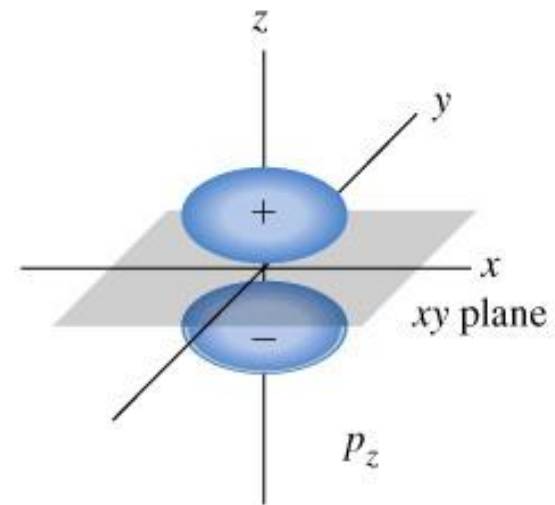
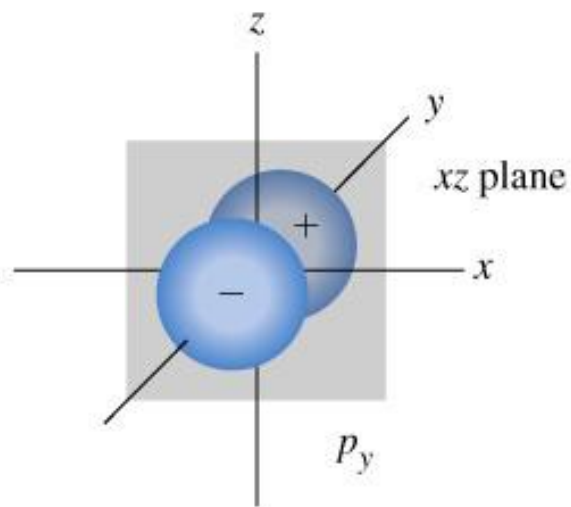
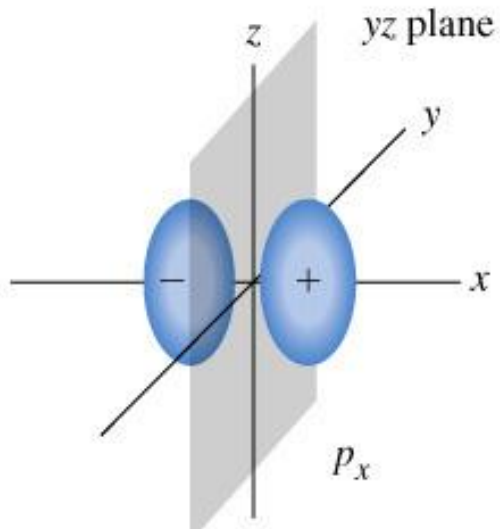


(b) 2s



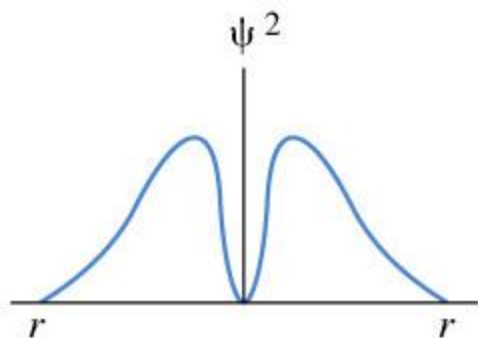
(c) 3s

p pályák

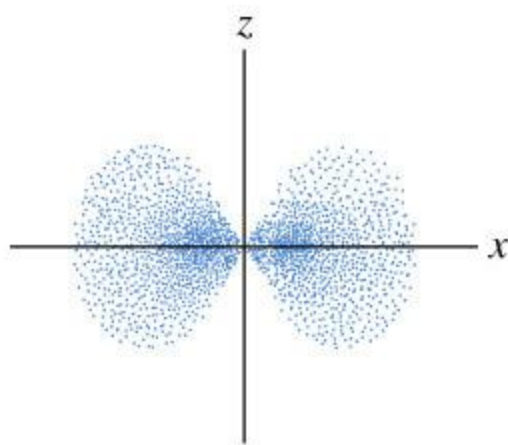


p pályák

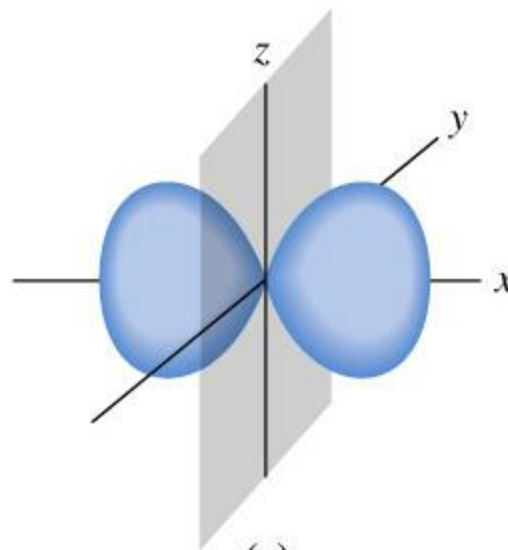
$$\psi_{2p_x}^2$$



(a)

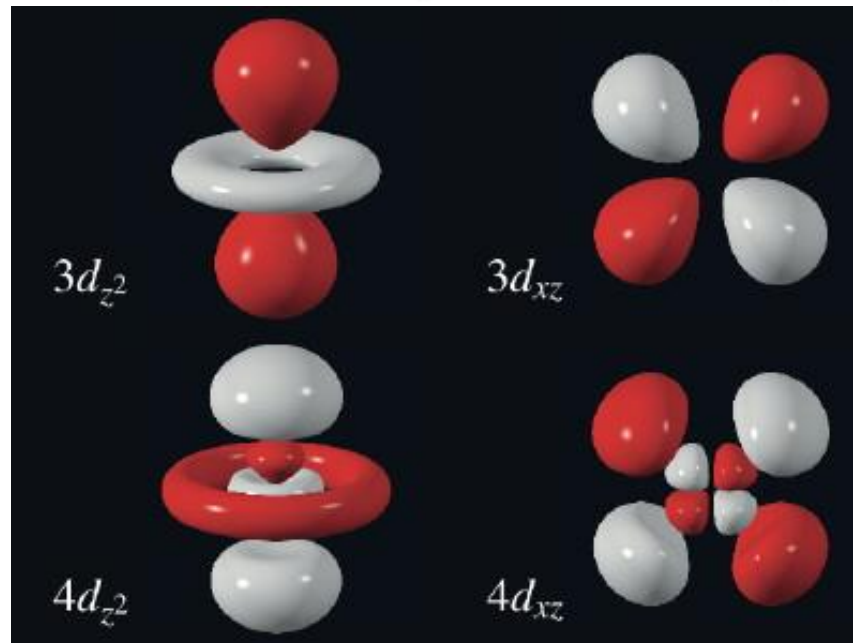
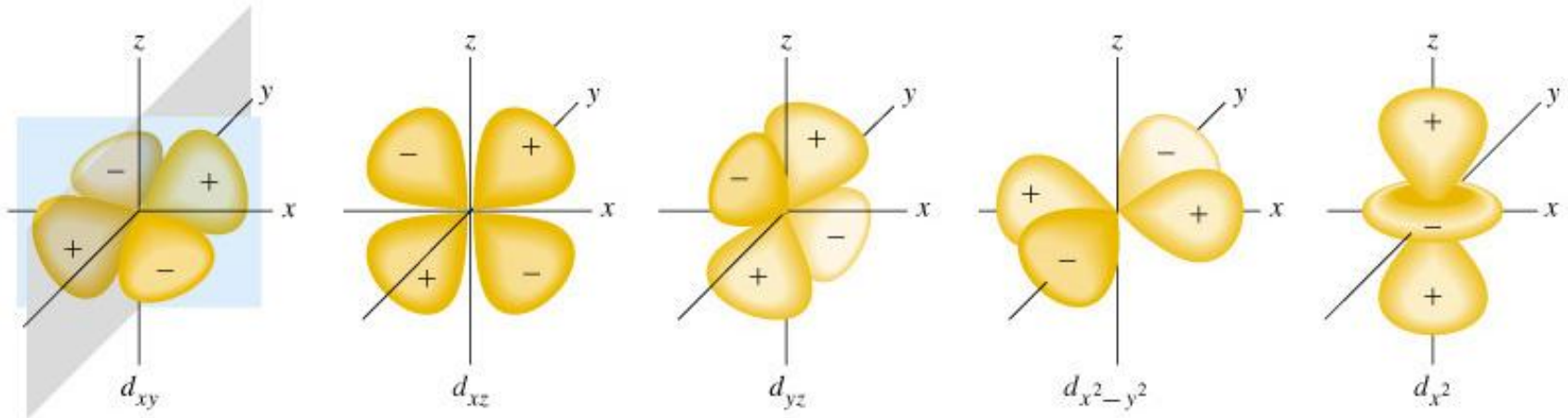


(b)

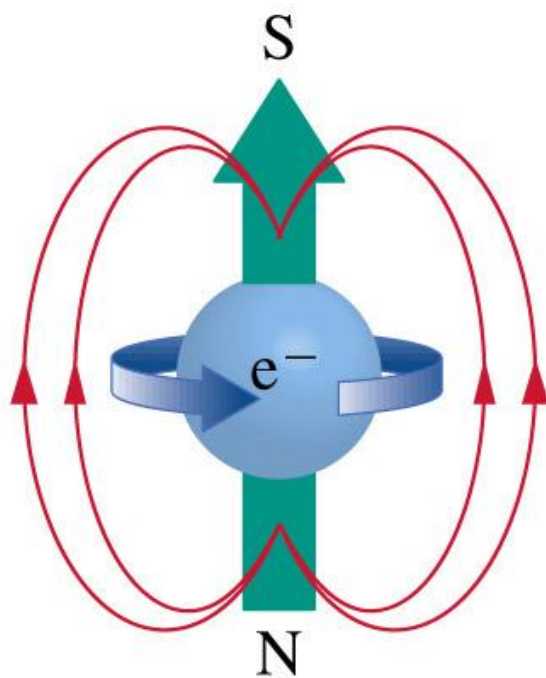


(c)

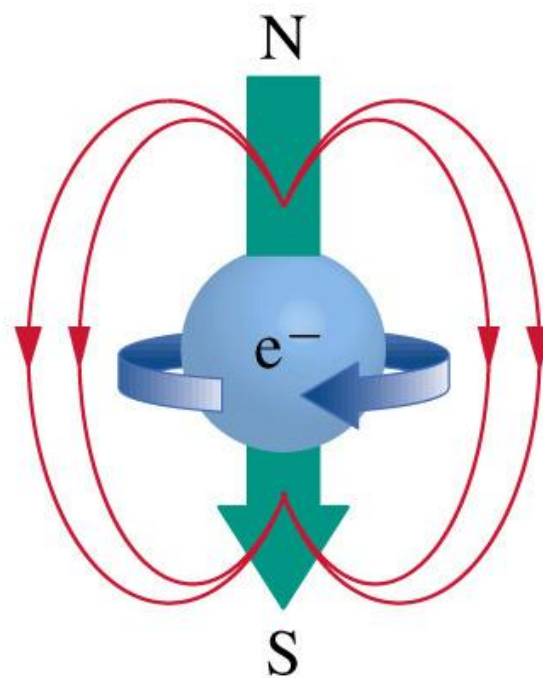
d pályák



2-9 Elektron Spin: a negyedik kvantumszám



$$m_s = +\frac{1}{2}$$



$$m_s = -\frac{1}{2}$$

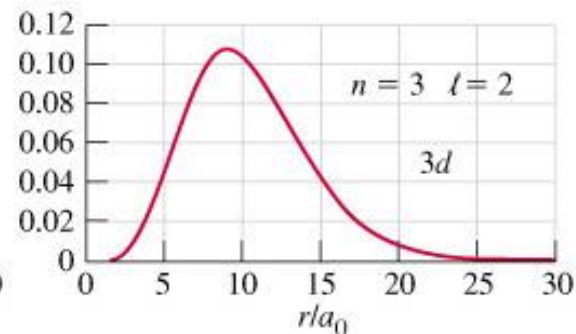
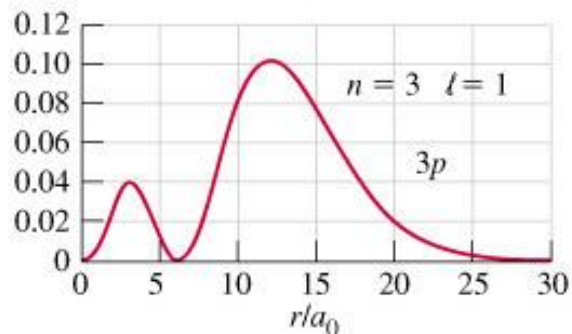
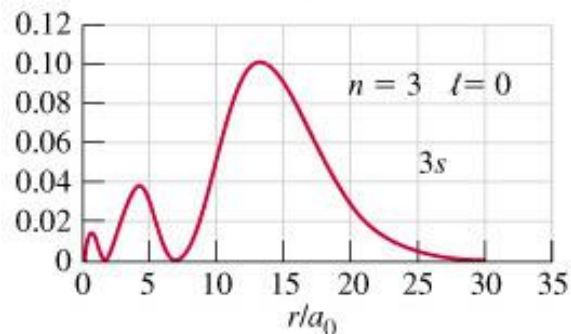
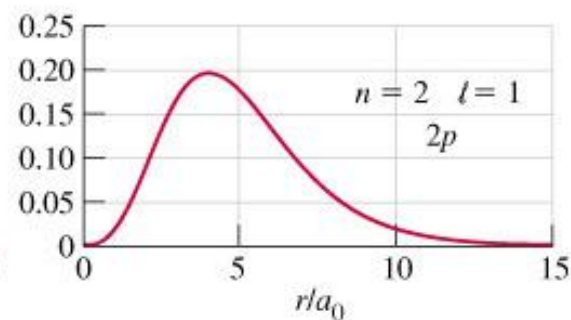
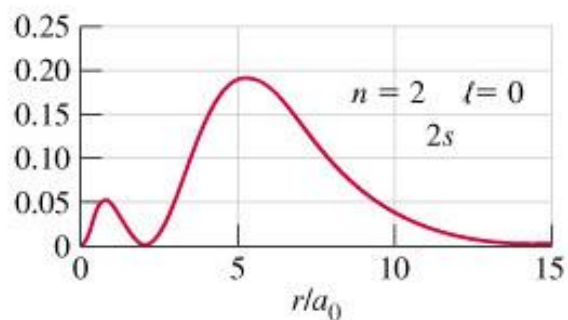
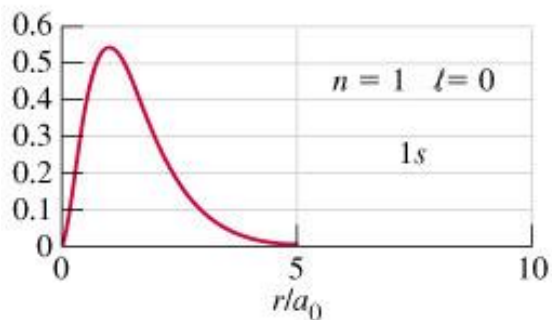
2-10 Több elektronos atomok

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

Radiális elektronsűrűség

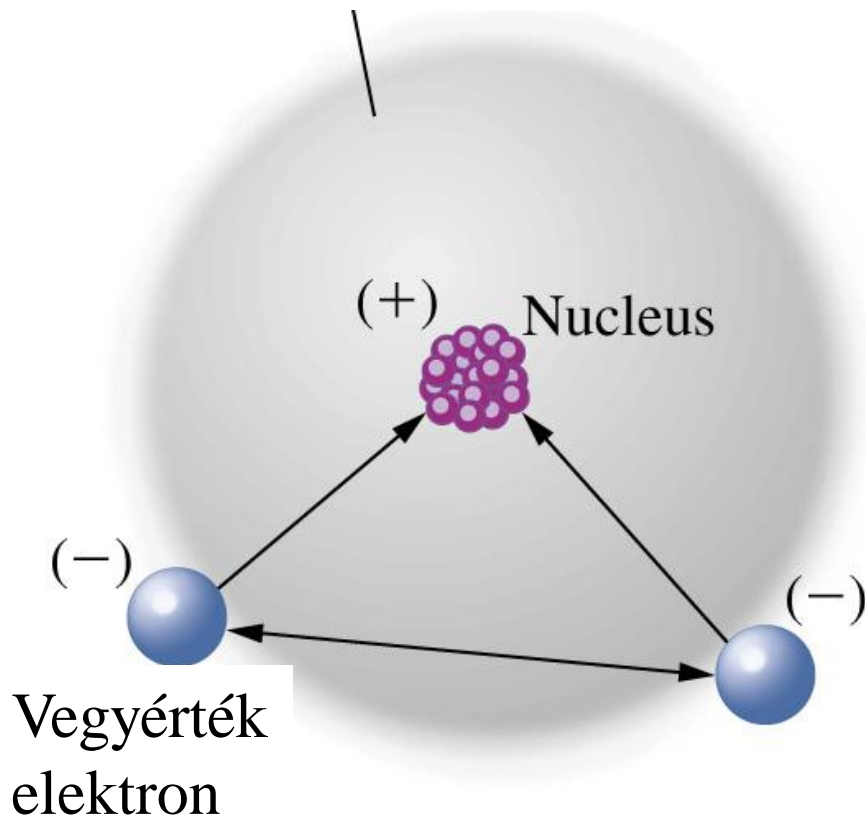
Az r sugarú gömb felületén mérhető elektronsűrűség

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



Árnyékolás

Törzs elektronok árnyékoló hatása



Z a mag töltése
 S az árnyékolás:

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

Ionizációs energia:

$$I \approx -R_H \frac{Z_{eff}^2}{n^2}$$

Árnyékolás (S)

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

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

$$S = 1.00 \cdot N2 + 0.85 \cdot N1 + 0.35 \cdot N0$$

$N0$ a többi elektron száma azonos héjon, $N1$ az elektronok száma egy héjjal lejjebb ($n-1$), és $N2$ az elektronok száma kettő vagy több héjjal lejjebb ($n-2$ és kisebb).

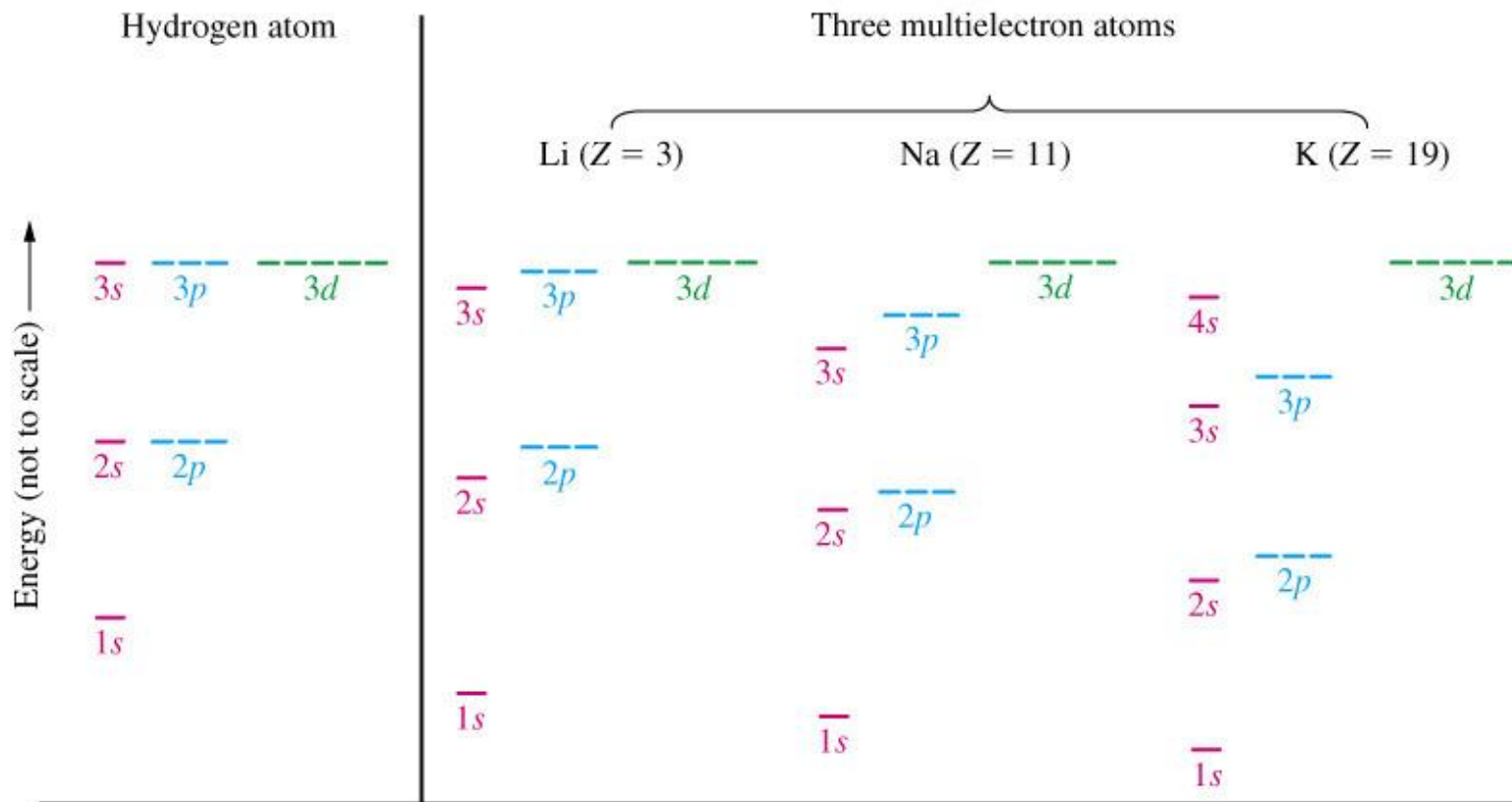
Az effektív magtöltés

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

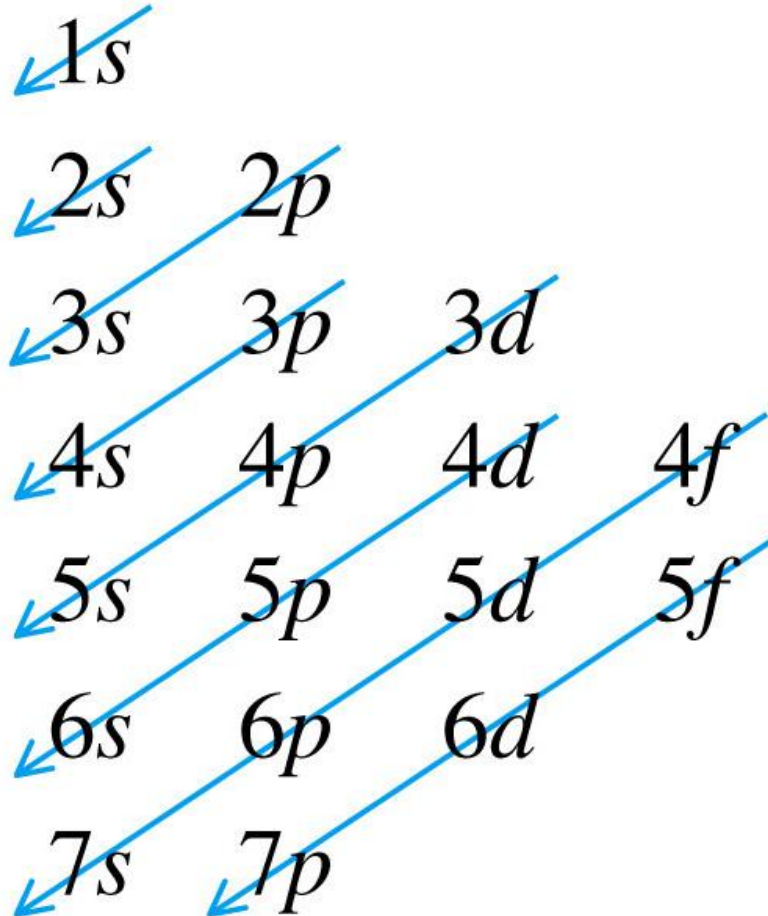
2-11 Elektron Konfigurációk

- 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.

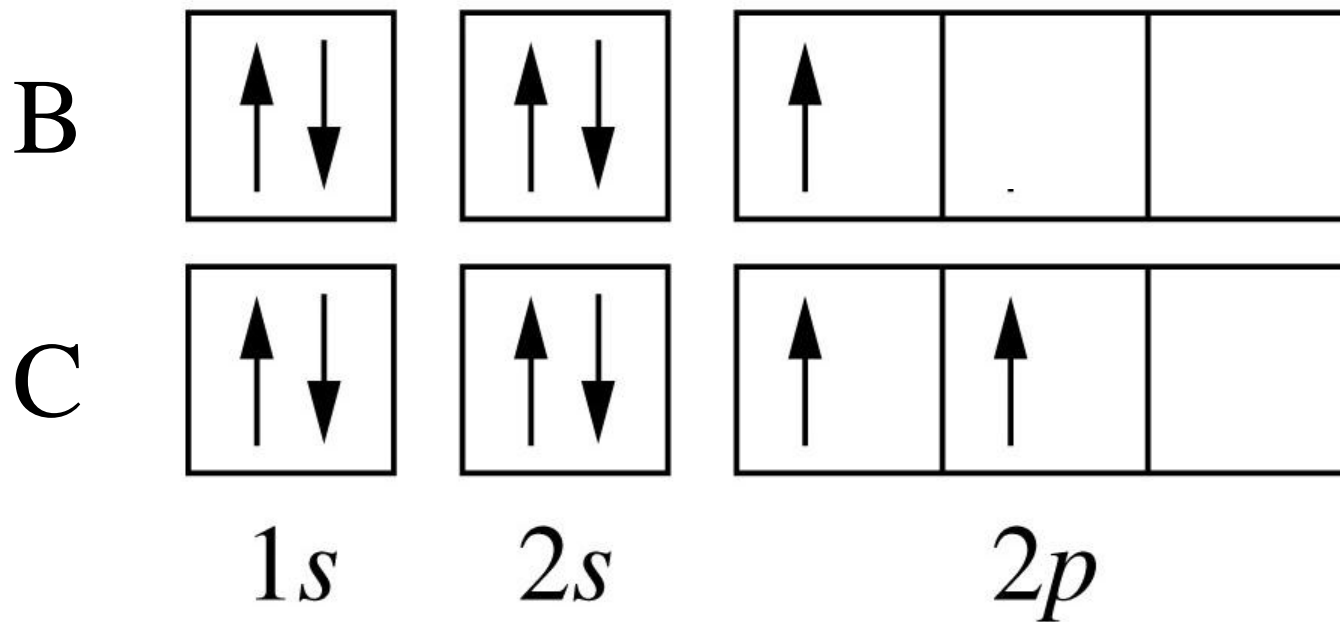
pálya energiák



pálya betöltés

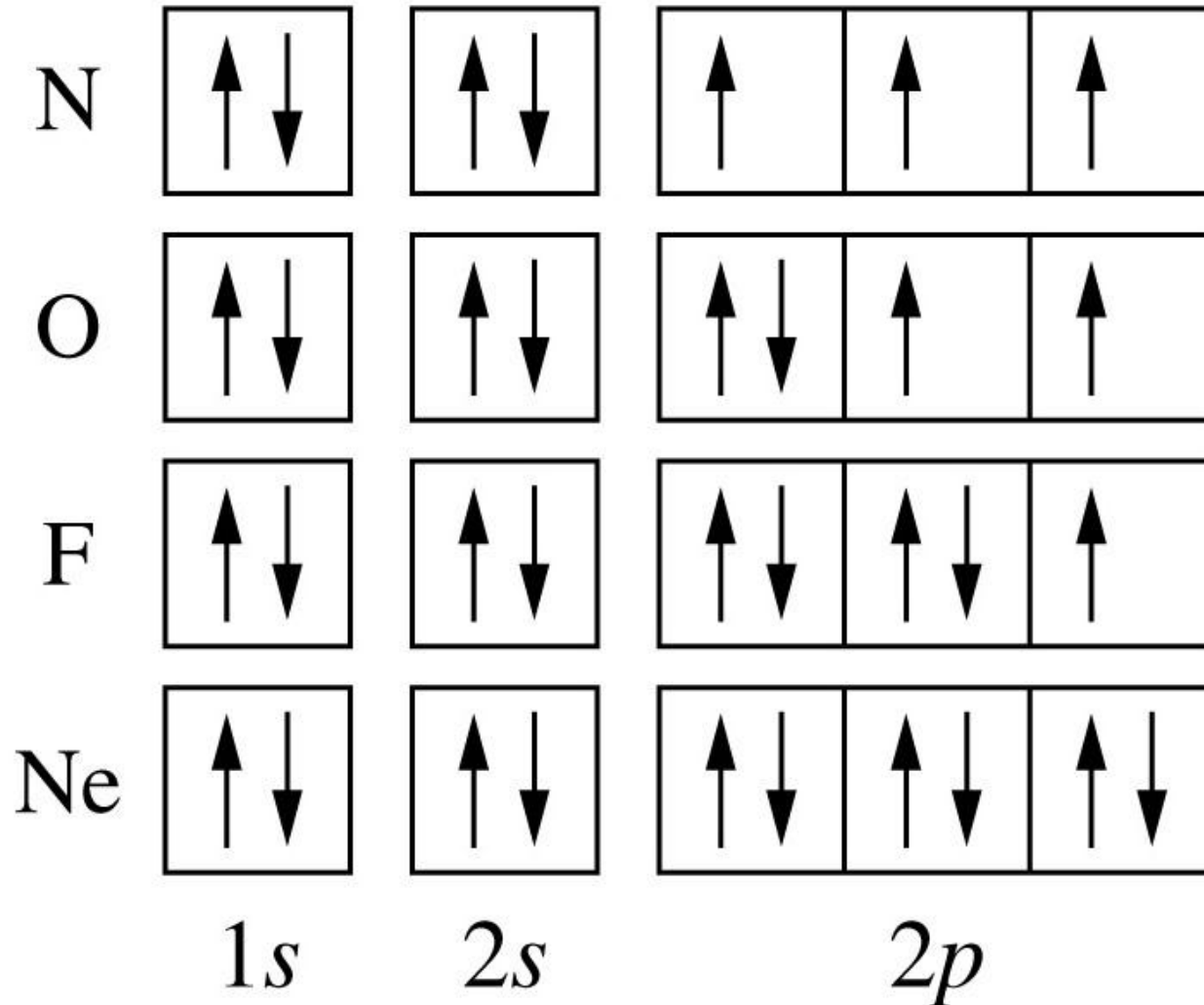


Aufbau elv és Hund szabály



$$E(1s) < E(2s) < E(2p)$$

p pályák betöltése



Elektronkonfiguráció

- Egy olyan rövid jelölés, amely leírja hány elektron tölti be a rendelkezésre álló pályákat, pl.
- B: $1s^2 2s^2 2p^1$
- C: $1s^2 2s^2 2p^2$
- N: $1s^2 2s^2 2p^3$
- O: $1s^2 2s^2 2p^4$
- F: $1s^2 2s^2 2p^5$
- Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$ jelölése: [Ne] (10 elektron)

d pályák betöltése

Sc:	[Ar]	\uparrow					$\uparrow\downarrow$	$[\text{Ar}]3d^14s^2$	
Ti:	[Ar]	\uparrow	\uparrow				$\uparrow\downarrow$	$[\text{Ar}]3d^24s^2$	
V:	[Ar]	\uparrow	\uparrow	\uparrow			$\uparrow\downarrow$	$[\text{Ar}]3d^34s^2$	
Cr:	[Ar]	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	$[\text{Ar}]3d^54s^1$	
Mn:	[Ar]	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	$\uparrow\downarrow$	$[\text{Ar}]3d^54s^2$	
Fe:	[Ar]	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	$\uparrow\downarrow$	$[\text{Ar}]3d^64s^2$	
Co:	[Ar]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	$\uparrow\downarrow$	$[\text{Ar}]3d^74s^2$	
Ni:	[Ar]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	$\uparrow\downarrow$	$[\text{Ar}]3d^84s^2$	
Cu:	[Ar]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$	
Zn:	[Ar]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^2$	
		$3d$					$4s$		

TABLE 9.2 Electron Configurations of Some Groups of Elements

Group	Element	Configuration
1	H	$1s^1$
	Li	$[\text{He}]2s^1$
	Na	$[\text{Ne}]3s^1$
	K	$[\text{Ar}]4s^1$
	Rb	$[\text{Kr}]5s^1$
	Cs	$[\text{Xe}]6s^1$
	Fr	$[\text{Rn}]7s^1$
17	F	$[\text{He}]2s^22p^5$
	Cl	$[\text{Ne}]3s^23p^5$
	Br	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^5$
	I	$[\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^5$
	At	$[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^5$
18	He	$1s^2$
	Ne	$[\text{He}]2s^22p^6$
	Ar	$[\text{Ne}]3s^23p^6$
	Kr	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^6$
	Xe	$[\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^6$
	Rn	$[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^6$

2-12 Elektron konfigurációk és a periódusos táblázat

Main-group elements

s block		Transition elements										p block							
1												18							
1s	2											5	6	7	8	9	10		
H	He											B	C	N	O	F	Ne		
3		4												13	14	15	16	17	18
2s		2p												3p					
Li	Be											Al	Si	P	S	Cl	Ar		
11		12												31	32	33	34	35	36
3s		3d												4p					
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
19		20												5p					
4s		4d												6p					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
37		38												7p					
5s		5d												8p					
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	81	82	83	84	85	86		
55		56												9p					
6s		6d												10p					
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
87		88												11p					
7s		7d												12p					
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

Alkáli fémek

Periódusos táblázat

Nemes Gázok

Alkáli földfémek

Halogének

Főcsoport

D-elemek

1 1A	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A														
1 H 1.00794	4 Be 9.01218											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.0067	8 O 15.9994	9 F 18.9984	10 Ne 20.1797														
11 Na 22.9898	12 Mg 24.3050	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	13 Al 26.9815	14 Si 28.0855	15 P 30.9738	16 S 32.06	17 Cl 35.4527	18 Ar 39.948														
19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.88	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.9381	26 Fe 55.847	27 Co 58.9332	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80														
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.224	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.906	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.60	53 I 126.904	54 Xe 131.29														
55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	57 *La 138.906	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.980	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)														
87 Fr (223)	88 Ra 226.025	89 †Ac 227.028	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 (269)	111 (272)	112 (272)			114 (287)	116 (289)																
*Lanthanide series		<table border="1"> <tr> <td>58 Ce 140.115</td> <td>59 Pr 140.908</td> <td>60 Nd 144.24</td> <td>61 Pm (145)</td> <td>62 Sm 150.36</td> <td>63 Eu 151.965</td> <td>64 Gd 157.25</td> <td>65 Tb 158.925</td> <td>66 Dy 162.50</td> <td>67 Ho 164.930</td> <td>68 Er 167.26</td> <td>69 Tm 168.934</td> <td>70 Yb 173.04</td> <td>71 Lu 174.967</td> </tr> </table>																58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.26	69 Tm 168.934	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967
58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.26	69 Tm 168.934	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967																		
†Actinide series		<table border="1"> <tr> <td>90 Th 232.038</td> <td>91 Pa 231.036</td> <td>92 U 238.029</td> <td>93 Np 237.048</td> <td>94 Pu (244)</td> <td>95 Am (243)</td> <td>96 Cm (247)</td> <td>97 Bk (247)</td> <td>98 Cf (251)</td> <td>99 Es (252)</td> <td>100 Fm (257)</td> <td>101 Md (258)</td> <td>102 No (259)</td> <td>103 Lr (260)</td> </tr> </table>																90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)
90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)																		

Főcsoport

Lantanidák és Aktinidák