

# Atomok, elektronok

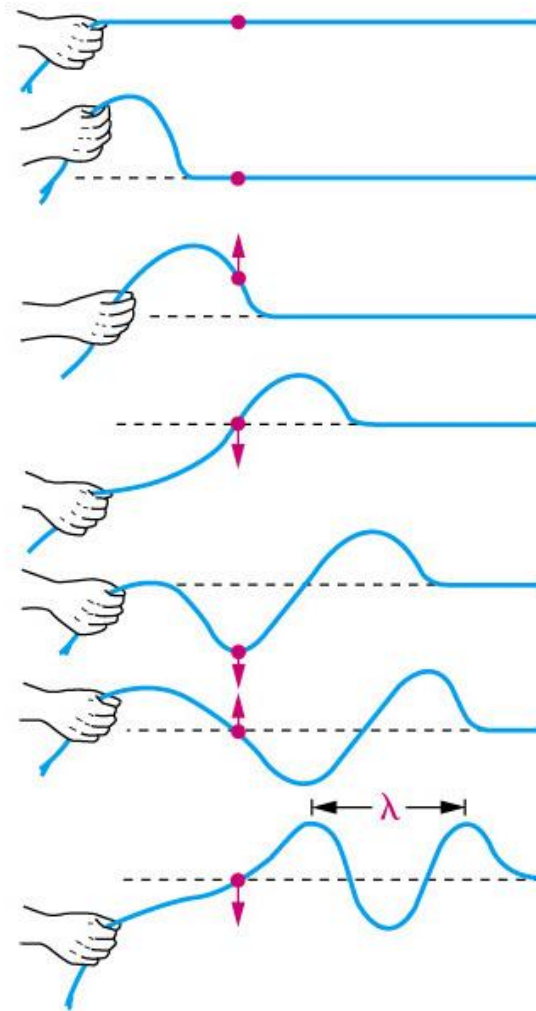
- 2-1 Elektromágneses sugárzás
- 2-2 Atomi spektrum
- 2-3 Kvantumelmélet
- 2-4 Bohr-atom
- 2-5 Az új kvantummechanika
- 2-6 Hullámmechanika
- 2-7 A hidrogénatom hullámfüggvényei

# Atomok, elektronok

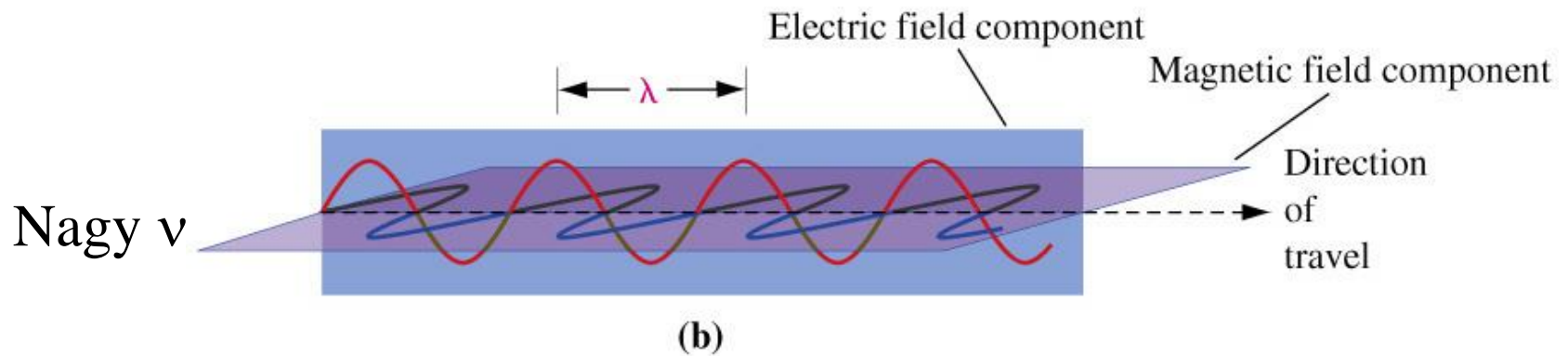
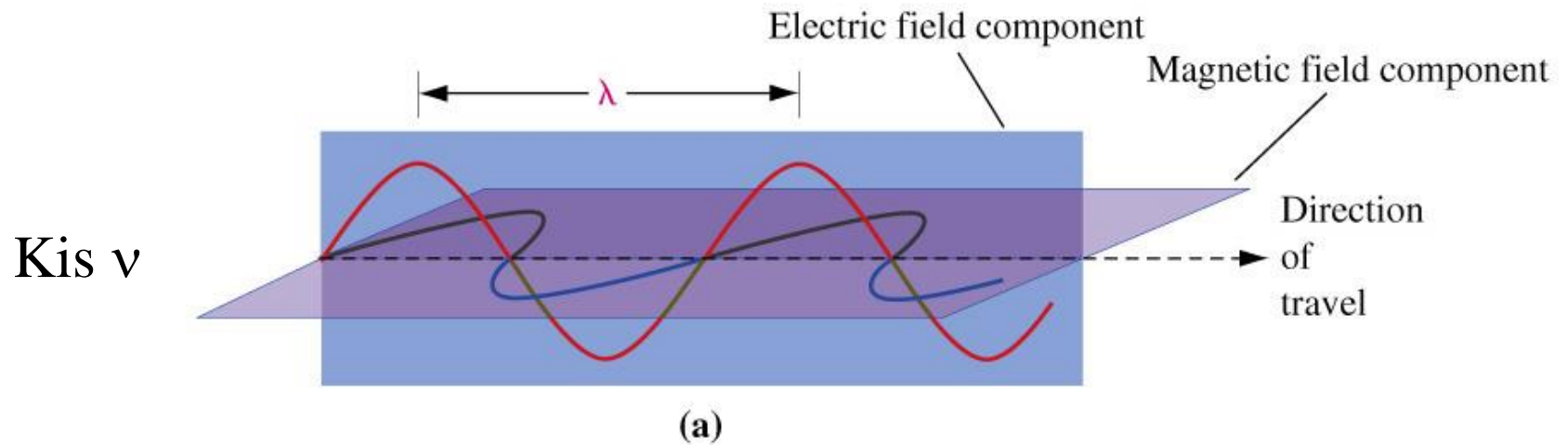
- 2-8 Elektronsűrűség
- 2-9 Elektron spin
- 2-10 Több elektronos atomok
- 2-11 Elektron konfigurációk
- 2-12 Elektron konfigurációk és a periódusos rendszer

# 2-1 Elektromágneses 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

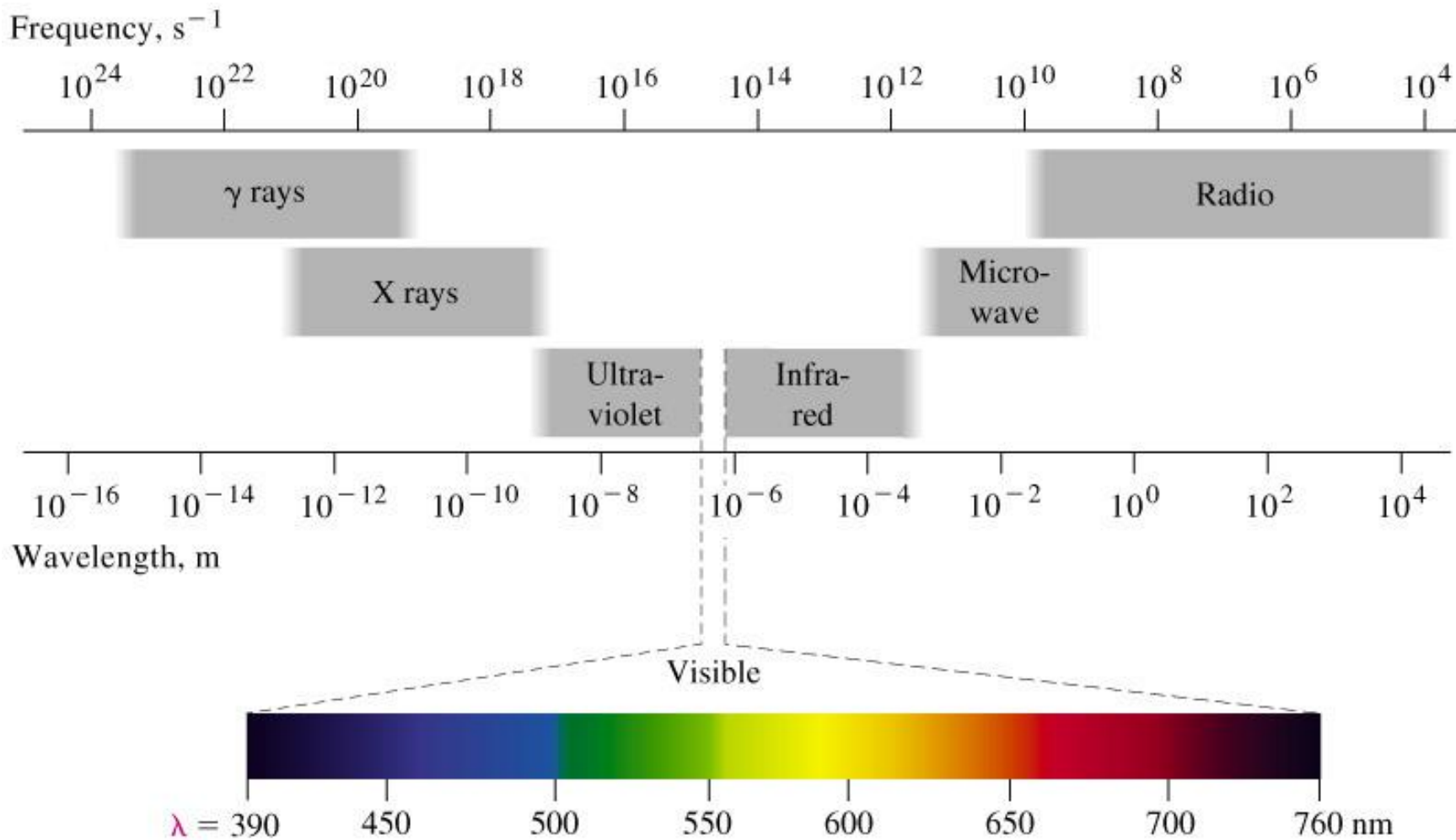
- Frekvencia ( $\nu$ ) Hertz—Hz vagy  $s^{-1}$ .
- Hullámhossz ( $\lambda$ ) méter—m.

cm	mm	$\mu\text{m}$	nm	Å	pm
$10^{-2}\text{m}$	$10^{-3}\text{m}$	$10^{-6}\text{m}$	$10^{-9}\text{m}$	$10^{-10}\text{m}$	$10^{-12}\text{m}$

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

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

# Elektromágneses színeképtartomány



# ROYGBIV



Red

Orange

Yellow

700 nm

Green

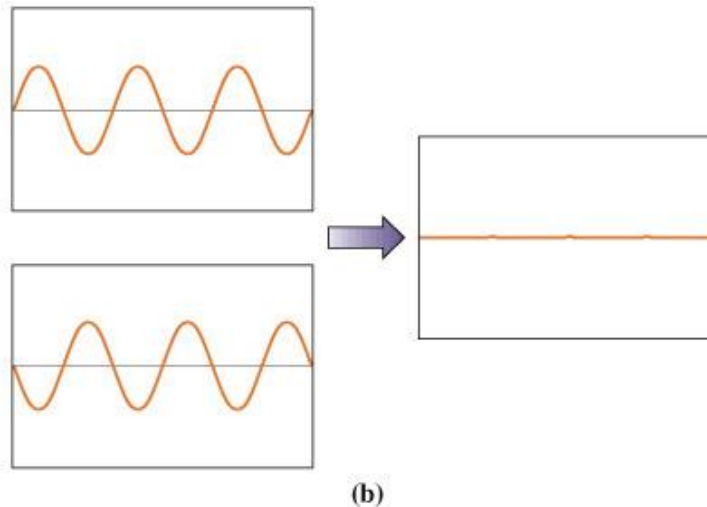
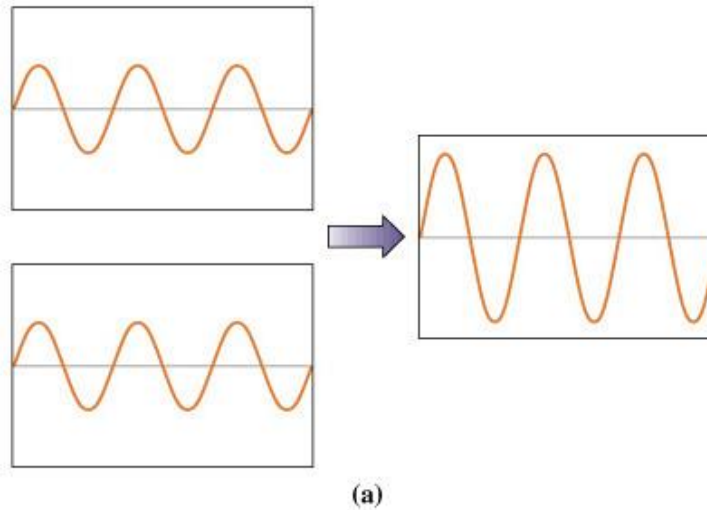
450 nm

Blue

Indigo

Violet

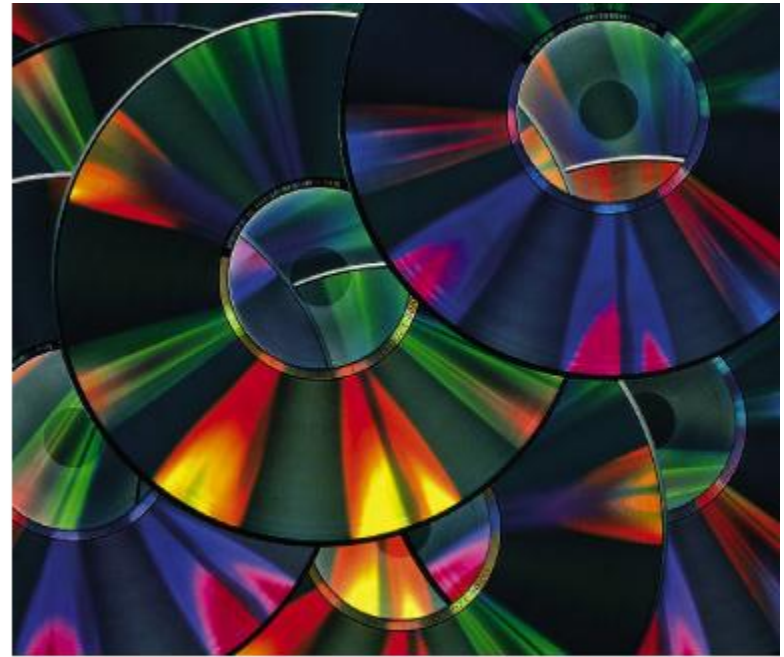
# Konstruktív és destruktív interferencia



# Interferencia

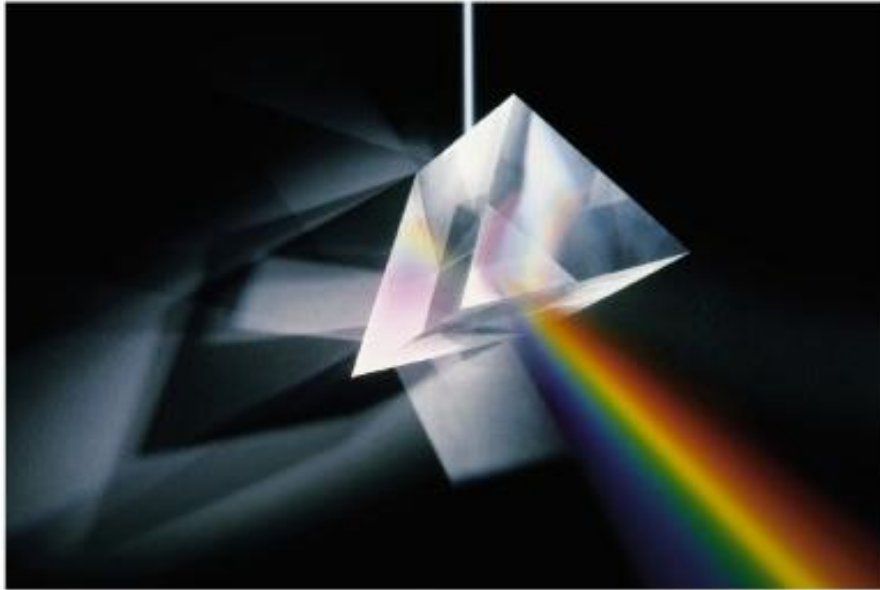


(a)



(b)

# Fénytörés



(a)



(b)

# 2-2 Atomszínképek



(a)

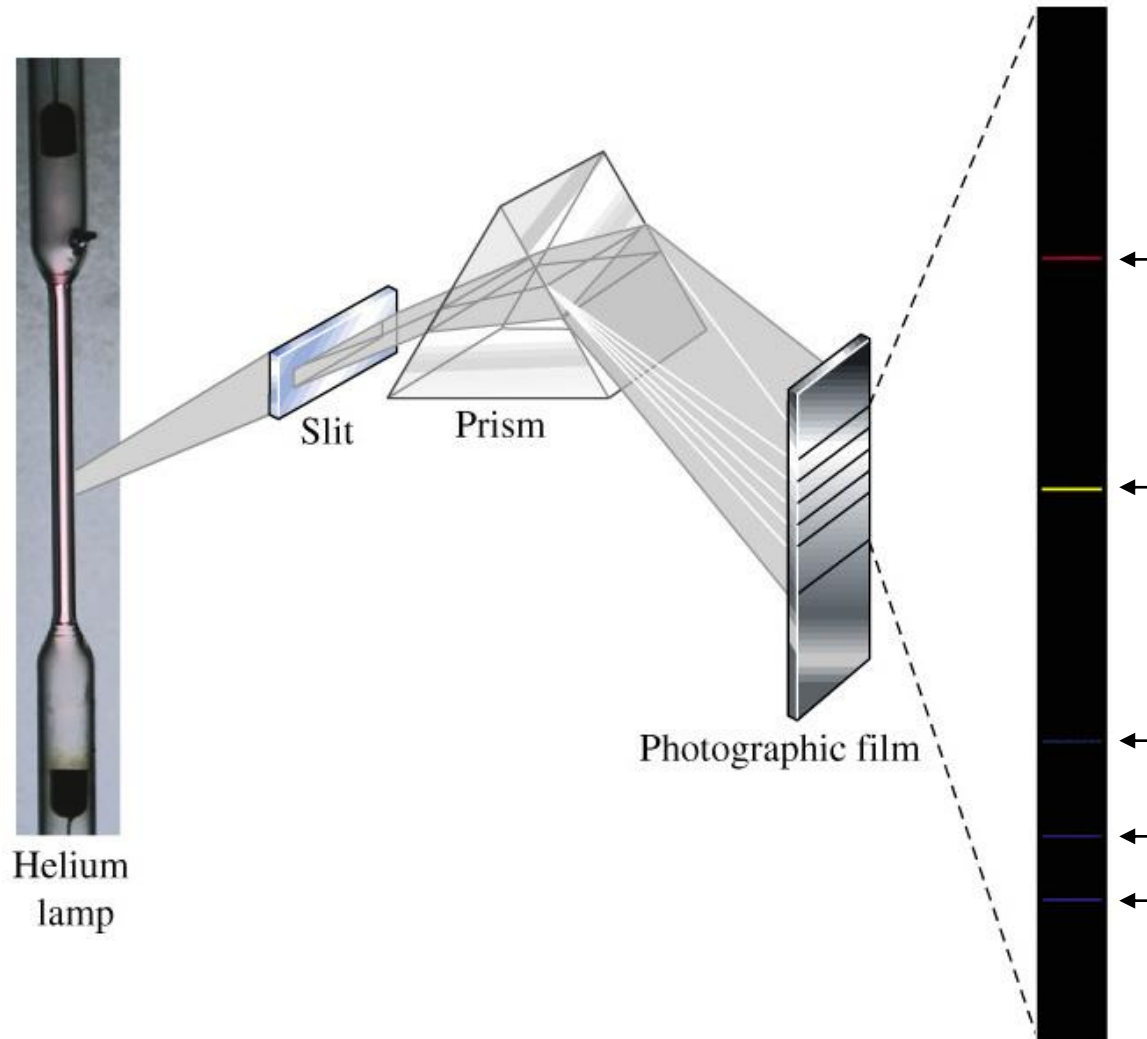
(b)

(c)

(d)

(e)

# Atomszínképek



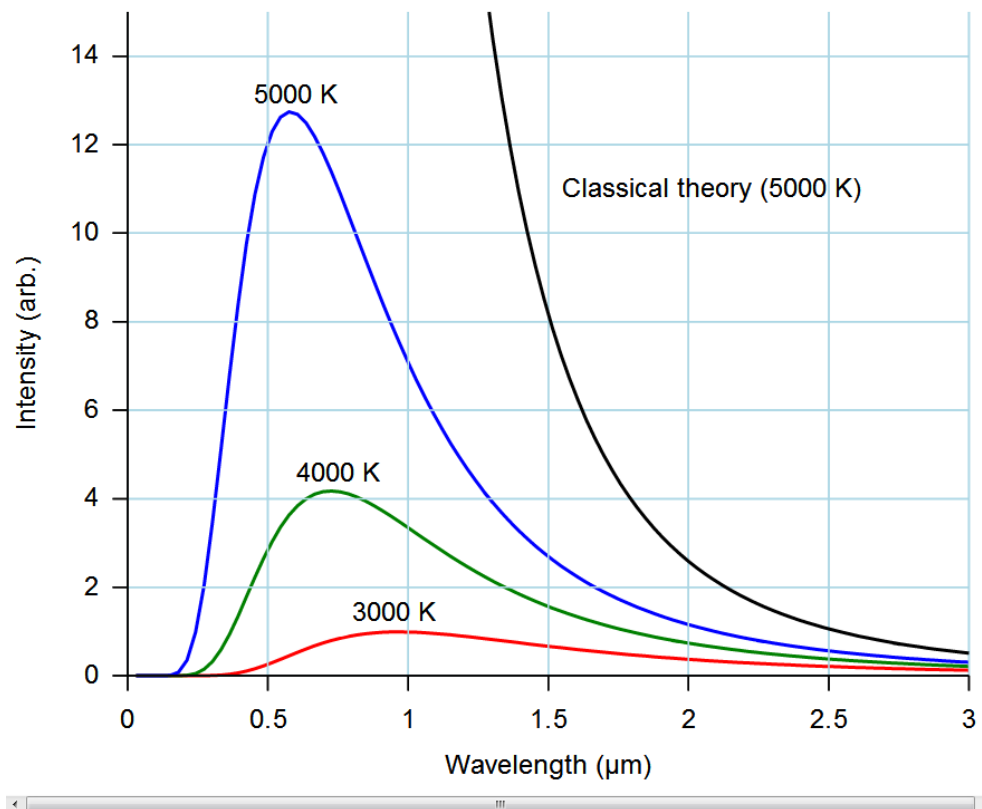
# 2-3 Kvantumelmélet

*Fekete test sugárzása:*



Max Planck, 1900:

$$I(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{c^2(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)}$$

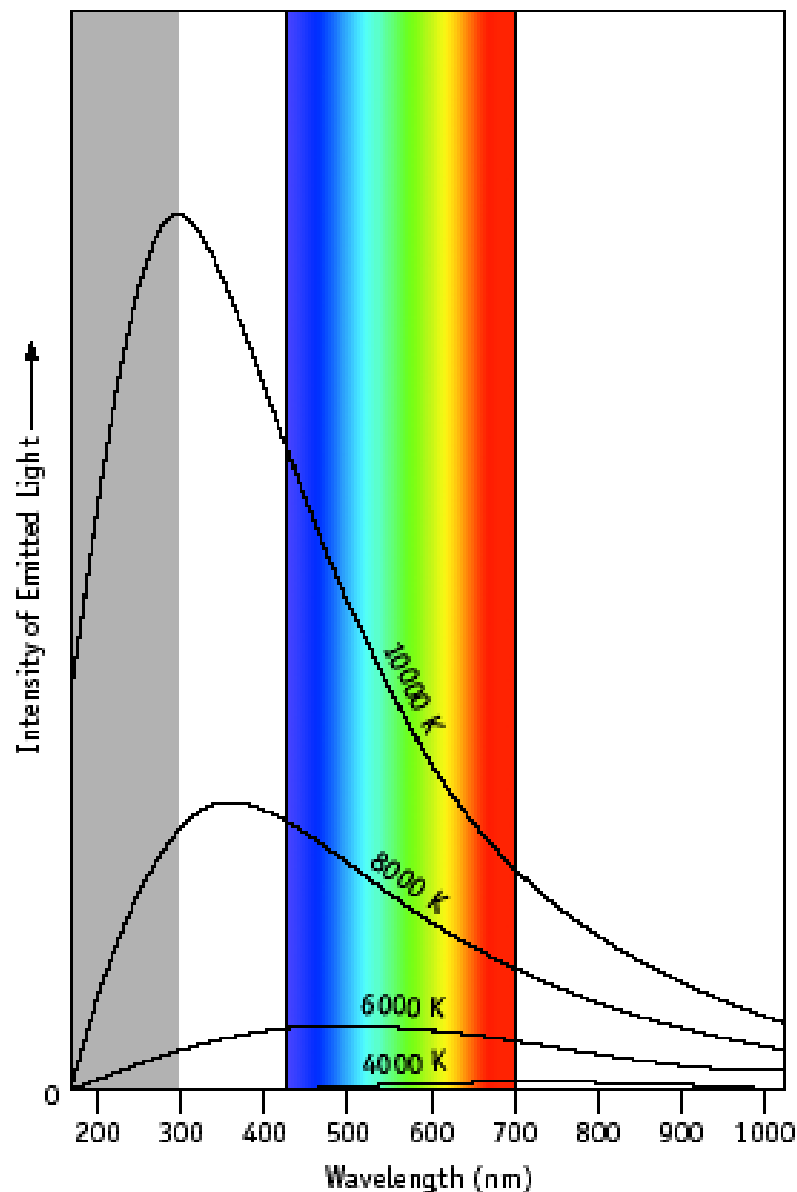


Energia, az anyaghoz hasonlóan nem folytonos.

$$E(\text{kvantum}) = h\nu$$

# Feketetest spektruma

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



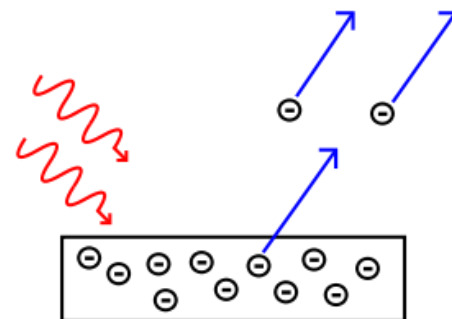
# A fotoelektromos hatás (Einstein – Nobel díj 1921)

- Bizonyos fémek esetében a beeső elektromágneses sugárzás elektronok kibocsátását eredményezi.
- Ha a fény frekvenciája nagyobb, mint a küszöbfrekvencia:
  - $\nu > \nu_0$  (küszöbfrekvencia)
  - $e^- \sim I$  (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:

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

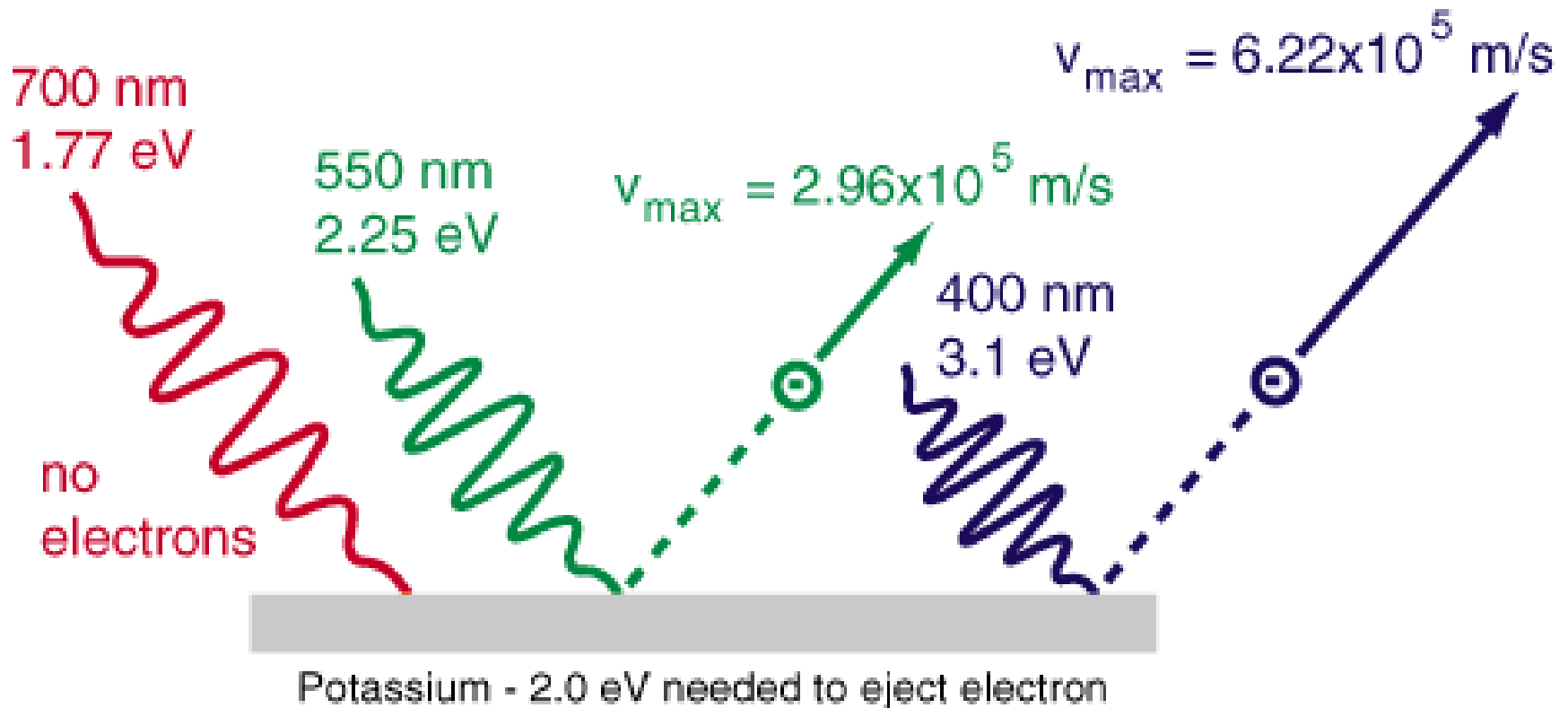


- Ahol  $V_s$  az elektron megállítási feszültség
- A foton frekvencia nagyobb kell legyen mint  $\nu_0$ :

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

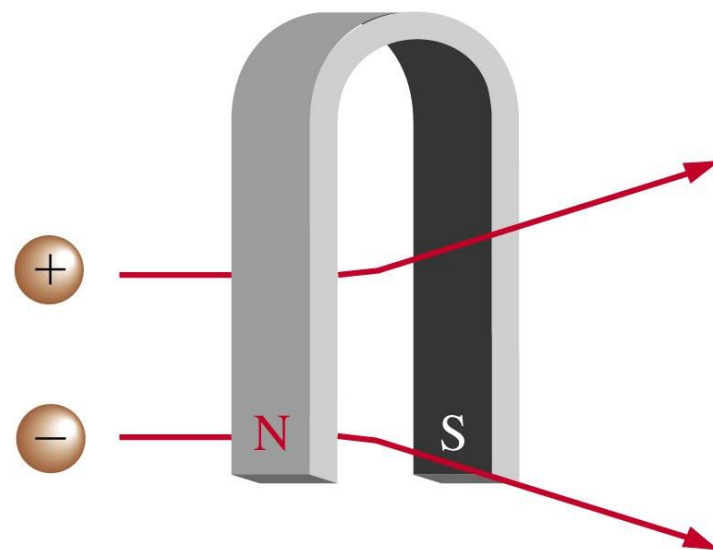
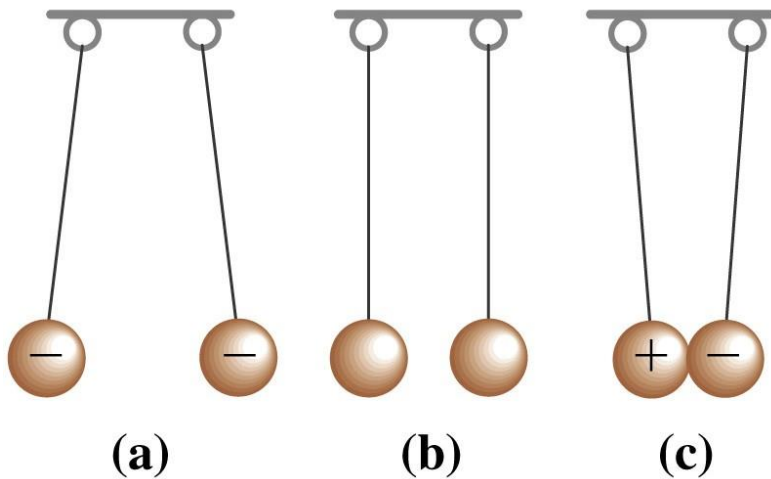
# A fotoelektromos hatás

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

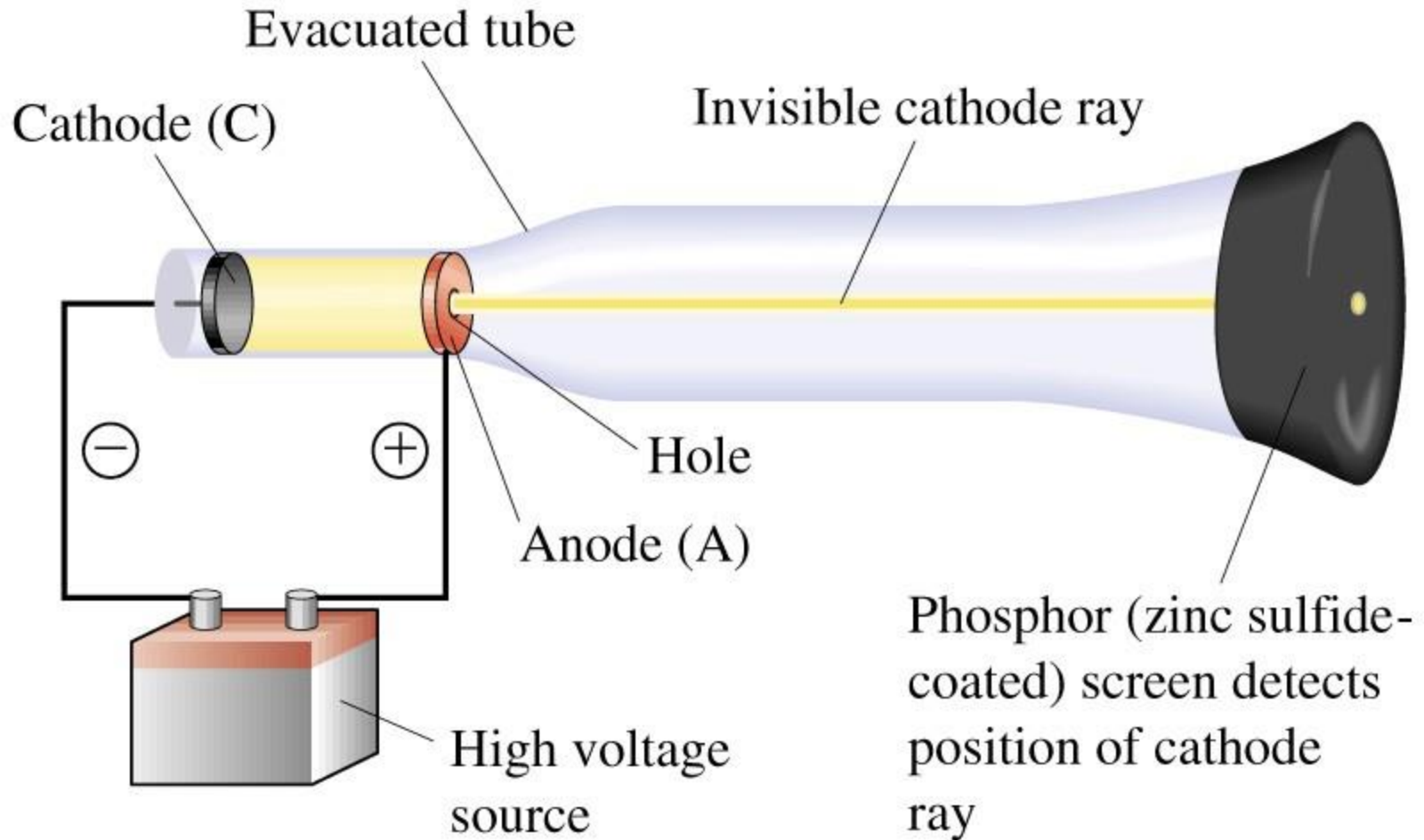


## Photoelectric effect

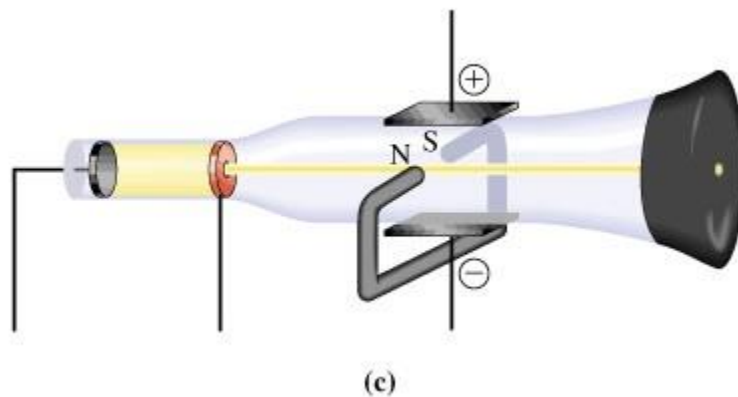
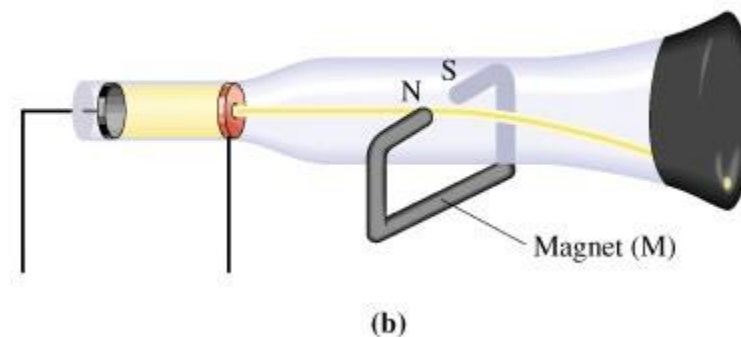
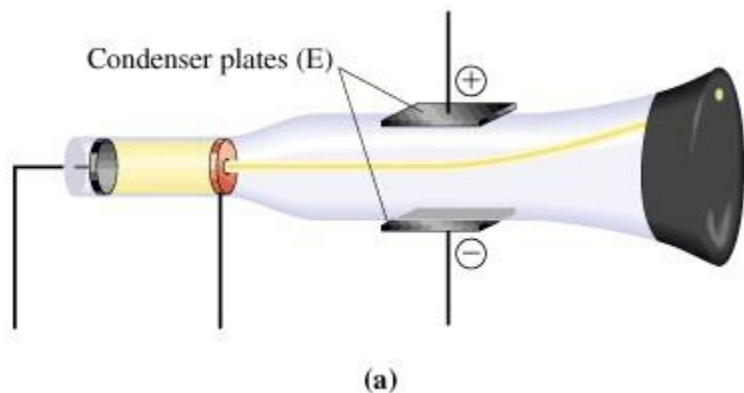
# A töltések viselkedése



# Katódsugárcső

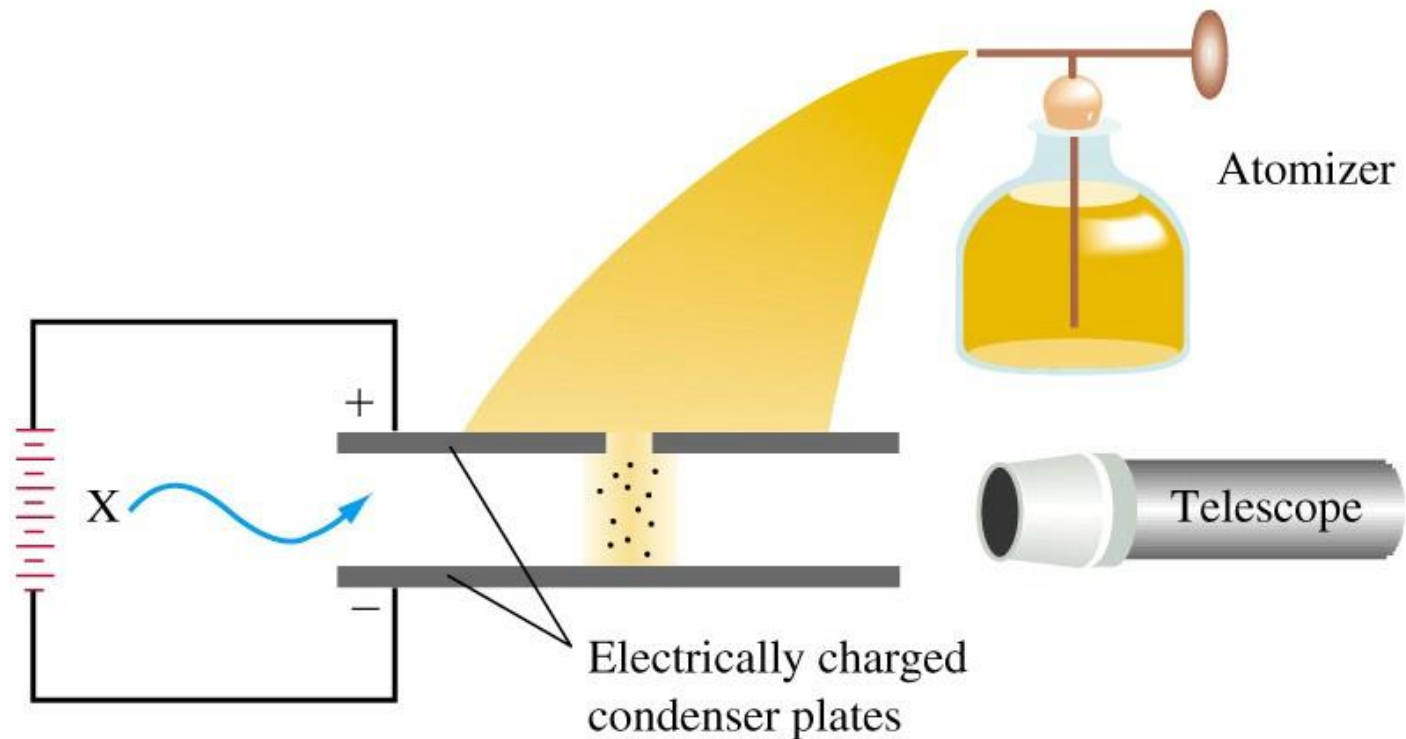


# A katódsugárcső tulajdonságai



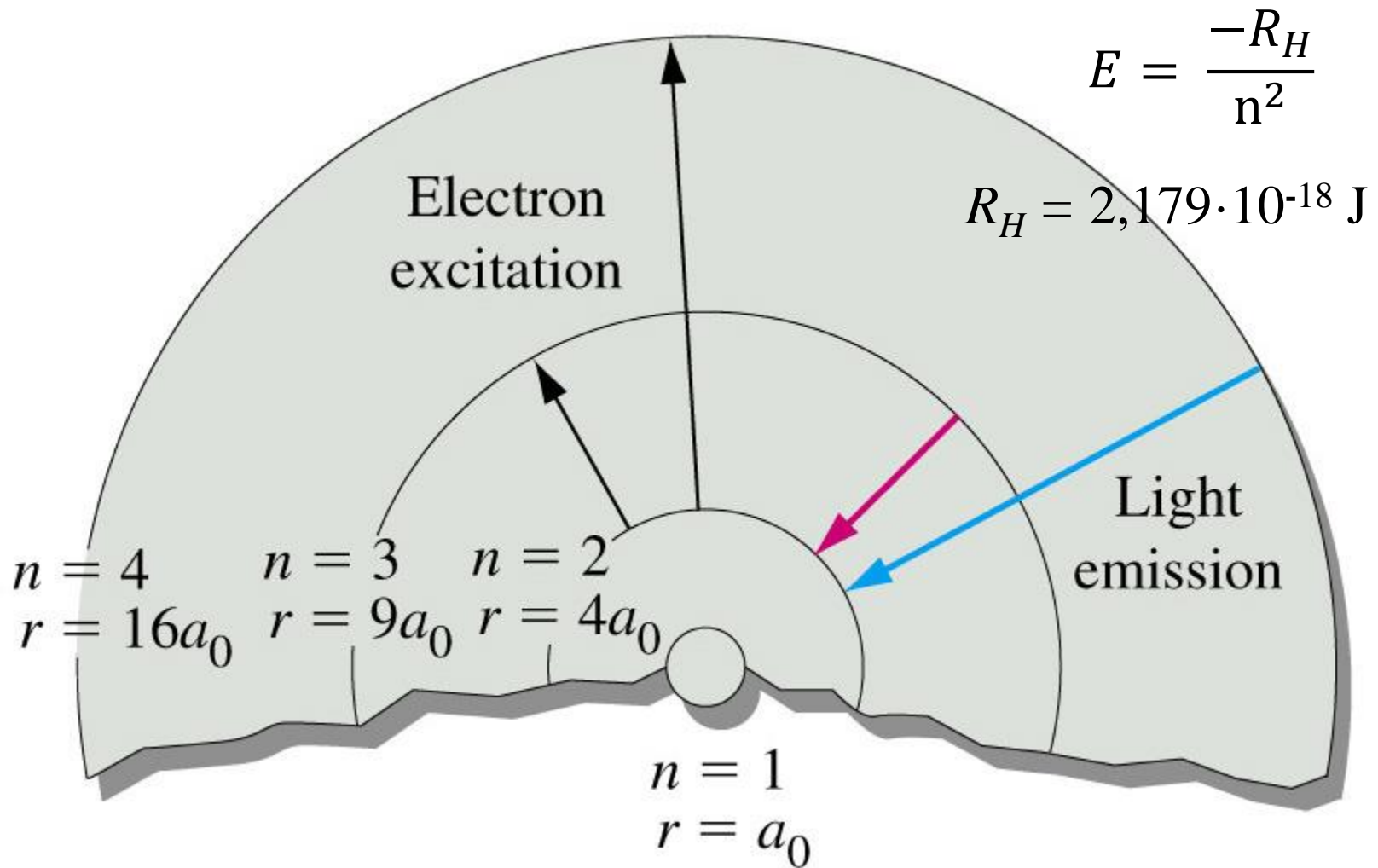
Elektron  $m/e = -5.6857 \times 10^{-9} \text{ g coulomb}^{-1}$

# Az elektron töltése

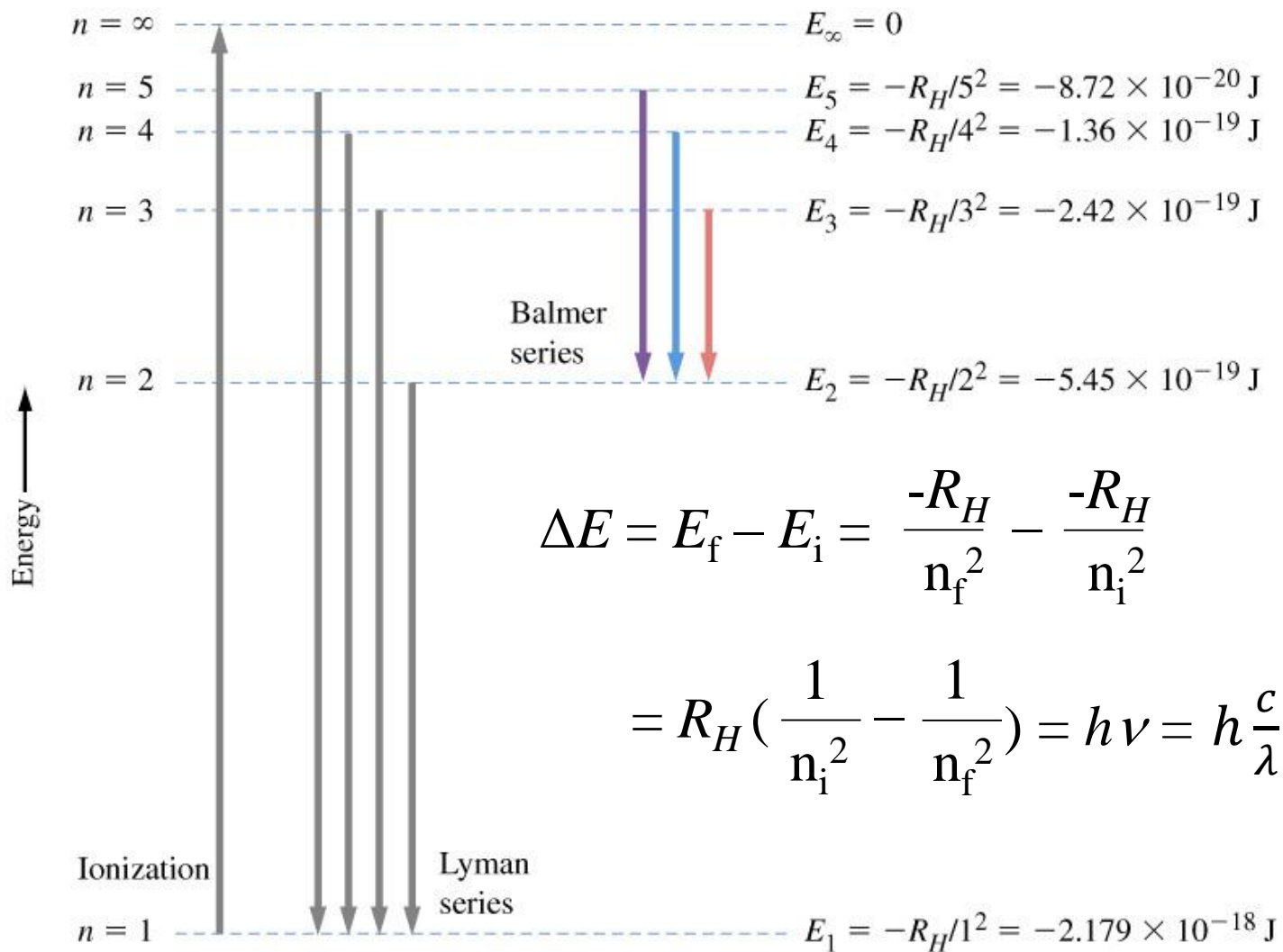


- ☆ **1906-1914 Robert Millikan: ionizált olajcseppek esetében elektromos mezővel kiegyensúlyozta a gravitációt.**
- ☆ **A töltés az elektron töltésének ( $e$ ) egész számú többszöröse.**

# 2-4 Bohr-atom



# Energia szintek



# A hidrogén atom ionizációs energiája

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

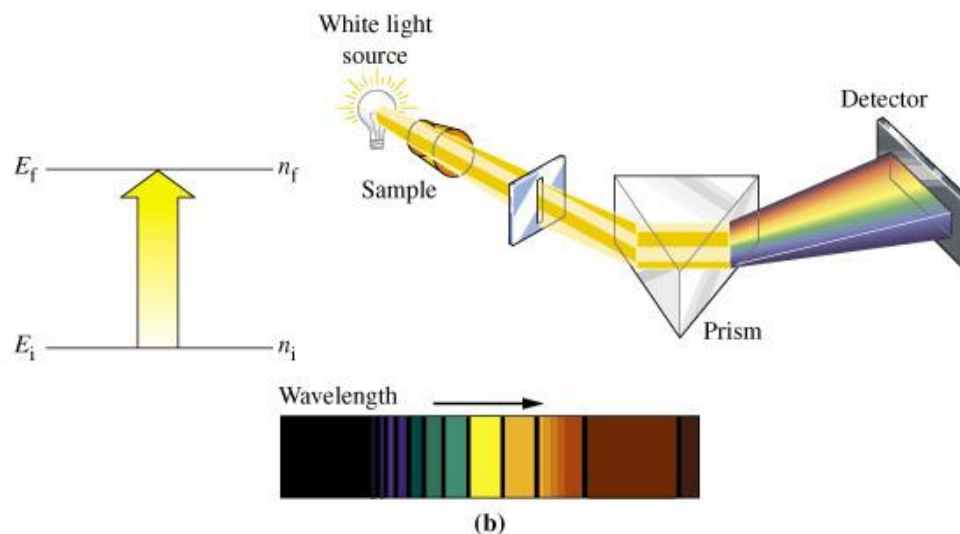
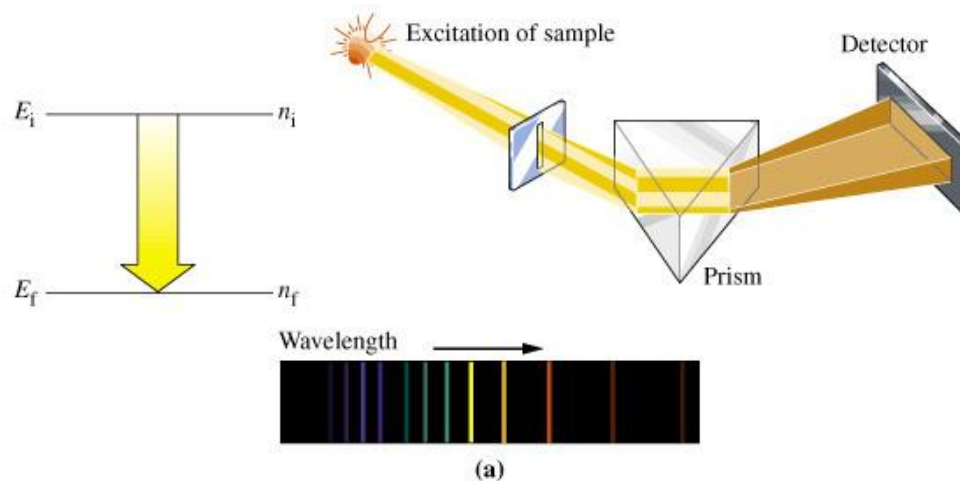
Ha  $n_f$  végtelenhez tart :

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

A hidrogénszerű ionokra, pl.:  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ..., is érvényes,

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

# Emissziós és abszorpciós spektroszkópia



## 2-5 Az új kvantummechanika

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

# deBroglie anyaghullámok

$$E = mc^2$$

$$h\nu = mc^2$$

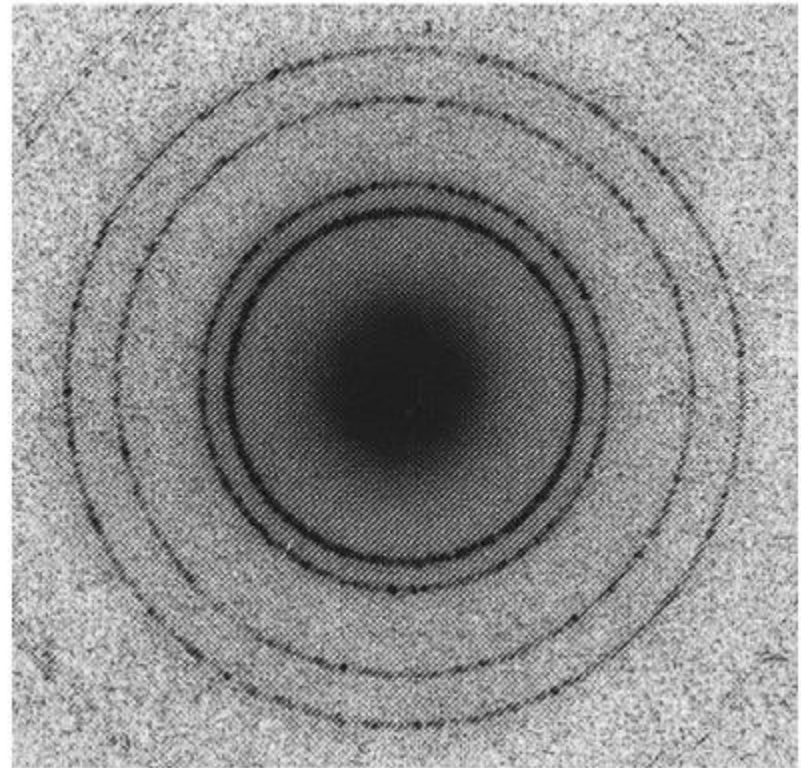
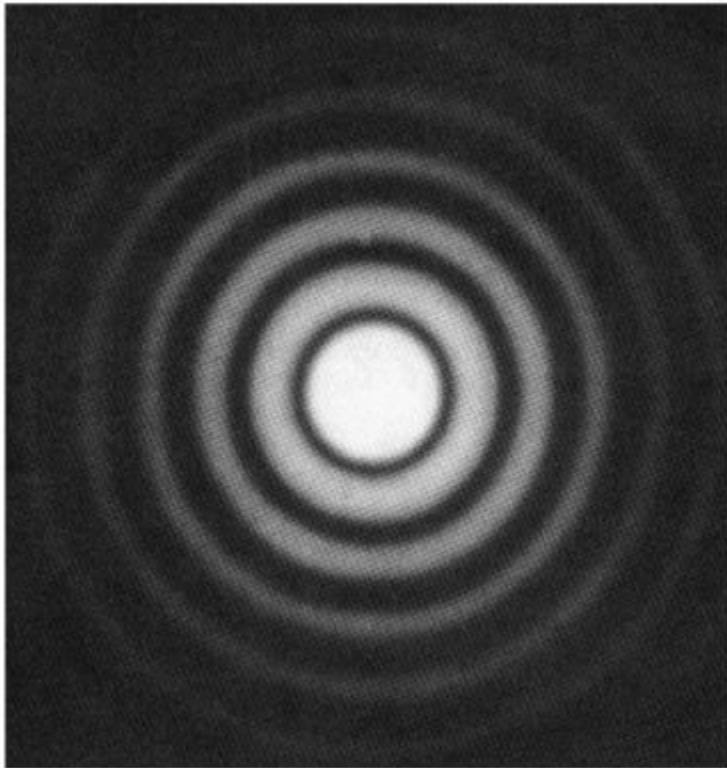
$$h\nu/c = mc = p$$

$$p = h/\lambda$$

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

# Elektron diffrakció

Davisson és Thomson Nobel díj: 1937



# A bizonytalansági elv

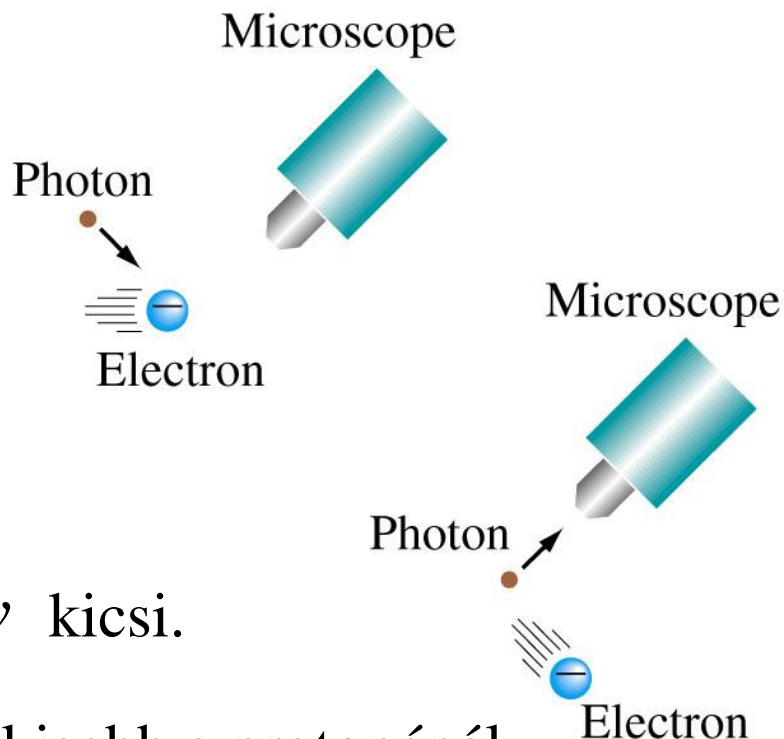
- Werner Heisenberg (1927)

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

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

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

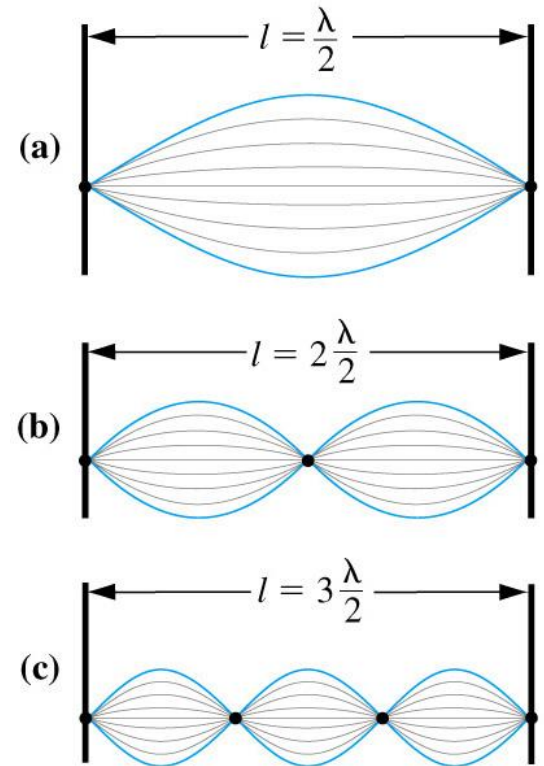
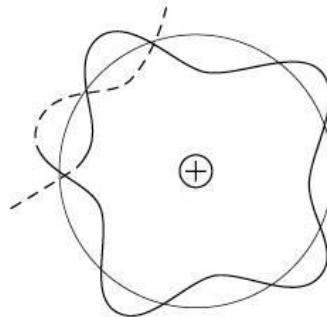
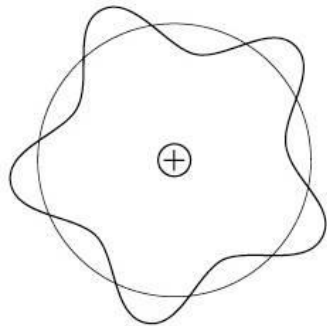
Az elektron tömege 2000-szer kisebb a protonénál, ezért az elektron esetében ez a bizonytalanság jobban érzékelhető.



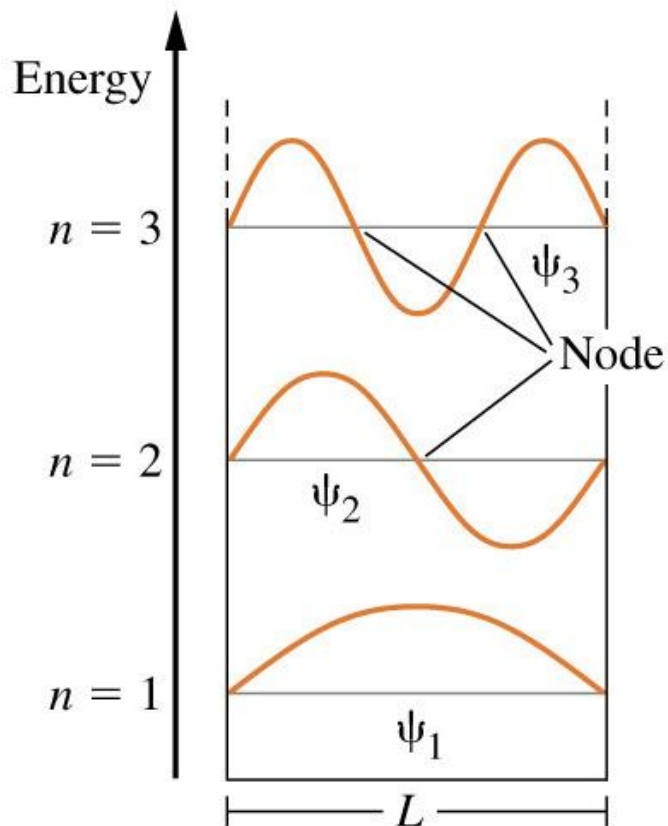
# 2-6 Hullámmechanika

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

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



# Hullámfüggvények



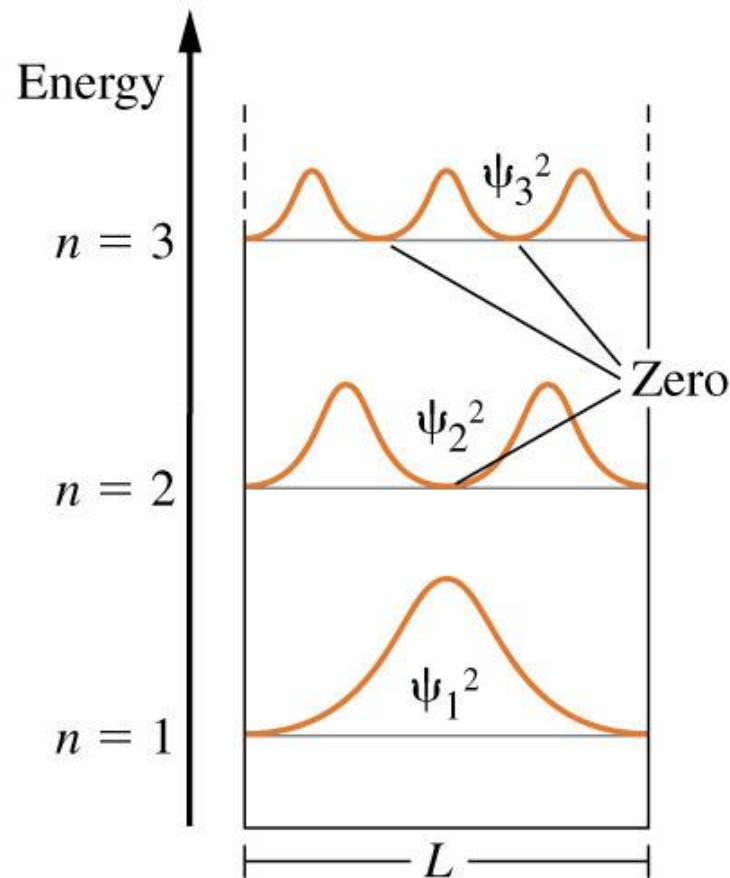
- $\psi$ , pszi, hullámfüggvény.
  - Egy állóhullám a rendszer határain belül.
- Részecske 1 dimenziós potenciálgödörben:

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

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

Ahol  $n$  a kvatumszám,  $L$  a hossz.

# 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

# 2-7 A hidrogénatom hullámfüggvényei

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

Gömbszimmetrikus potenciáltér

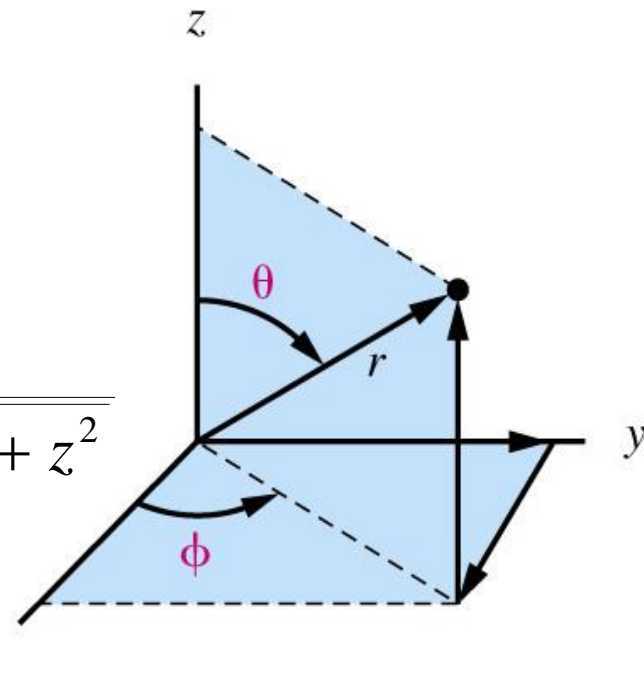
$$V(x,y,z) = -1/r \quad -\frac{1}{r} = \frac{-1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

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

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

$R(r)$  radiális hullámfüggvény.

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



Spherical polar coordinates

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

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

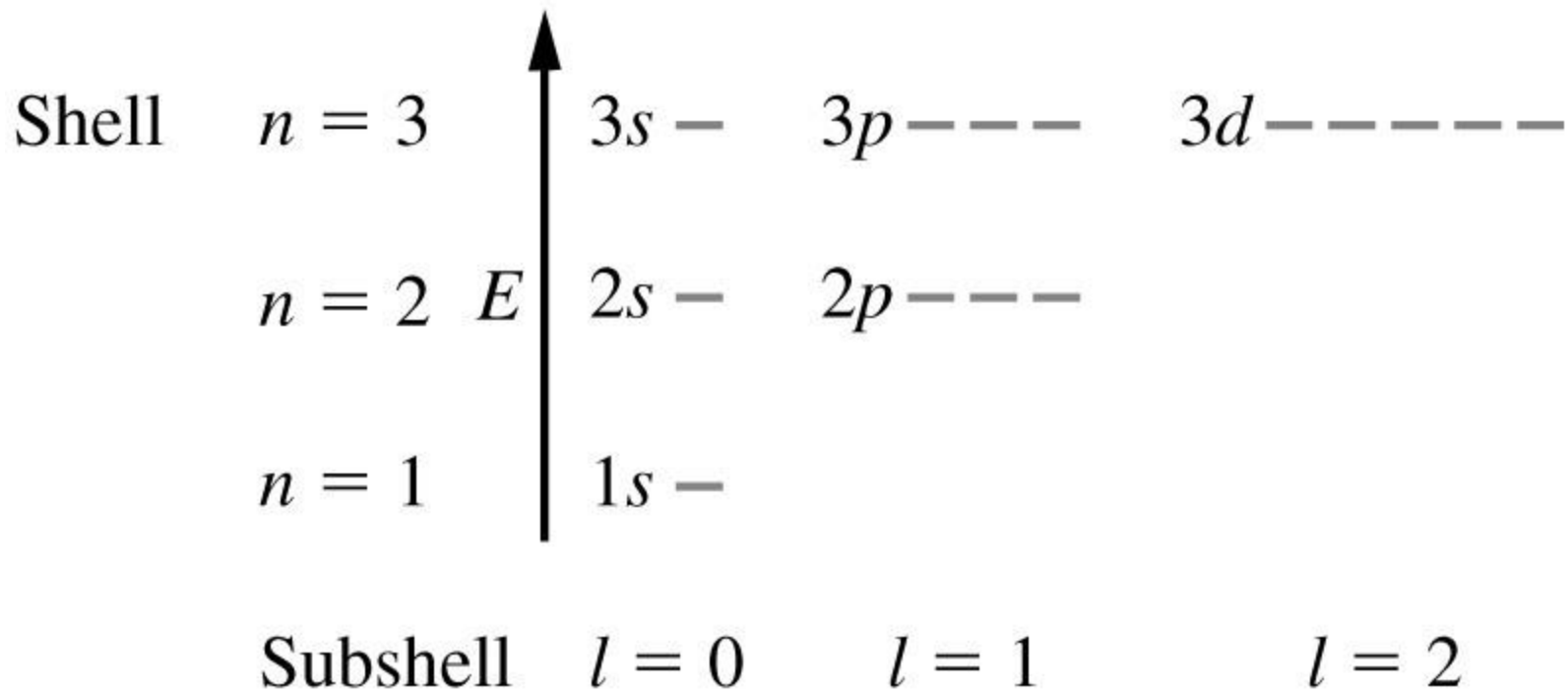
$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

# Kvantumszámok

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

# Pályae energiák (H-atomra)

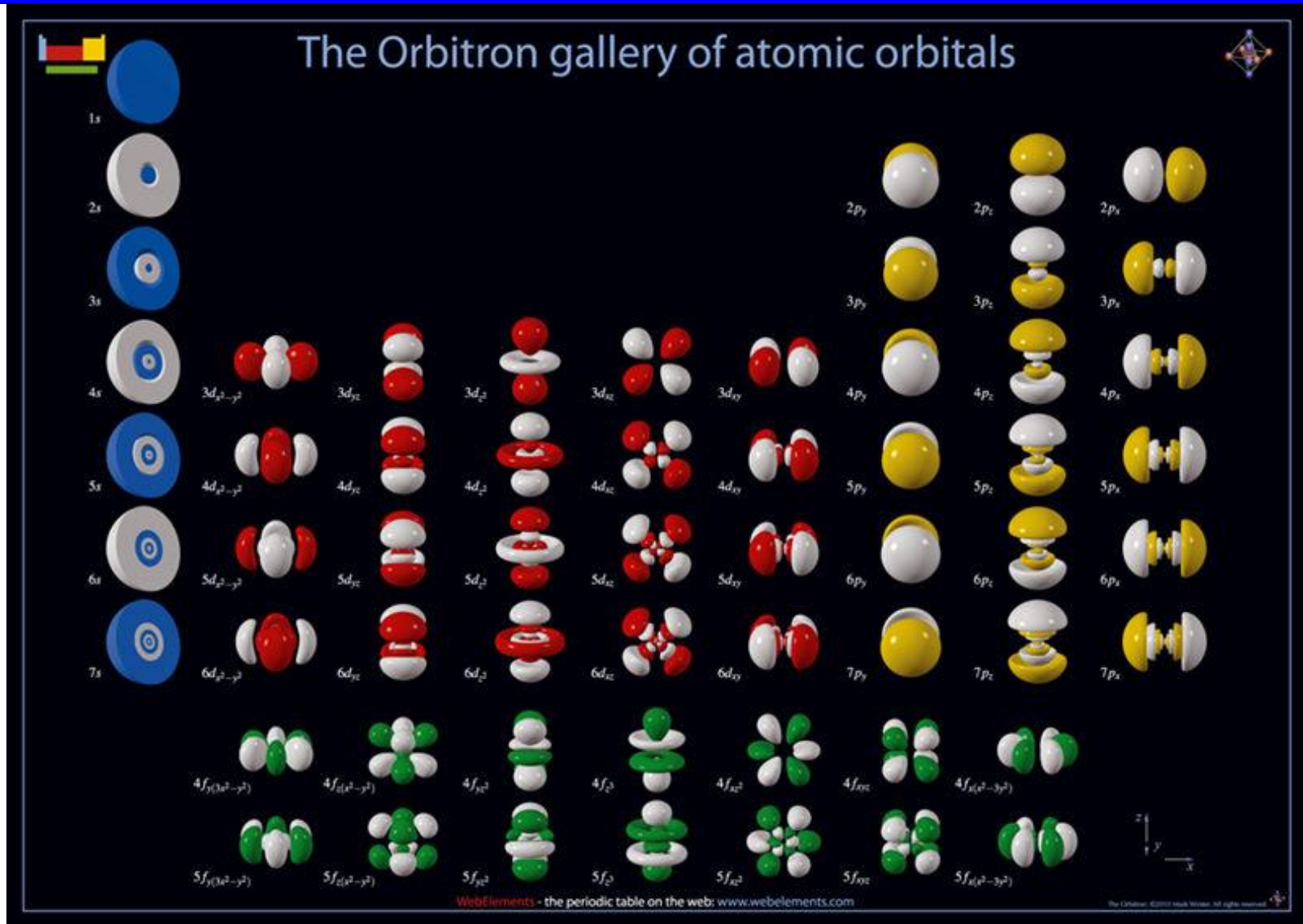


Each subshell is made up of  $(2l + 1)$  orbitals.

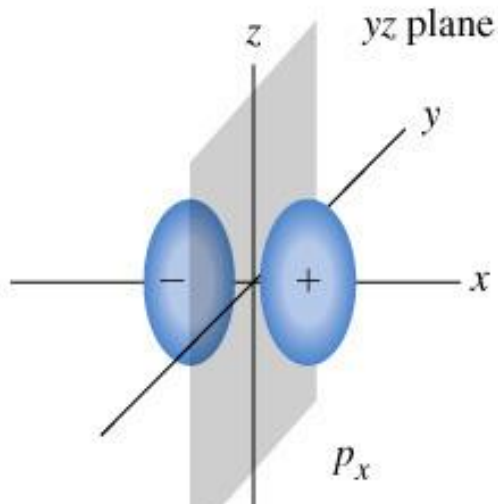
# Egyszerűsített egyenletek ( $Z=1, a_0=1$ )

<b>n</b>	<b>l</b>	<b>m</b>	<b>Jelölés</b>	$R_{nl}(r)$	$Y(\phi, \theta)$ valós	<b>Komplex</b>
1	0	0	1s	$2e^{-r}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	-
2	0	0	2s	$\frac{1}{2\sqrt{2}}(2-r)e^{-\frac{r}{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	-
2	1	0	2p <sub>z</sub>	$\frac{r}{2\sqrt{6}}e^{-\frac{r}{2}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \frac{z}{r}$	-
2	1	(±1)	2p <sub>x,y</sub>	$\frac{r}{2\sqrt{6}}e^{-\frac{r}{2}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \frac{x}{r},$ $\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \frac{y}{r}$	Igen $e^{\pm i\phi}$

# Az atompályák alakja

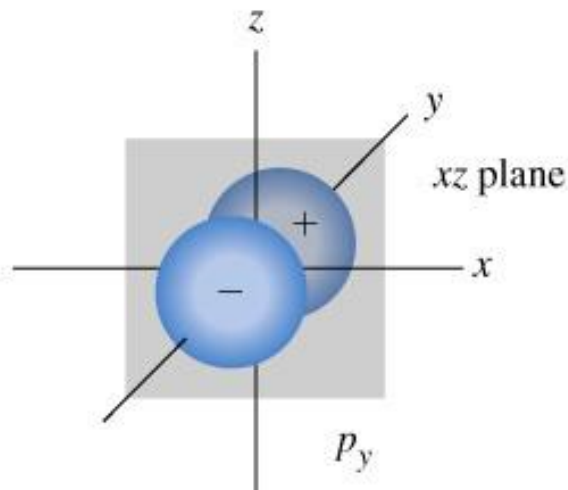


# p pályák



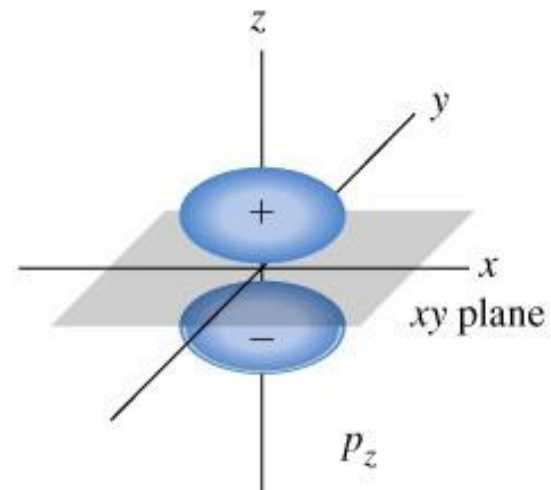
$$\frac{\sqrt{3}}{2 \cdot \sqrt{\pi}} \frac{x}{r} \cdot R_{2p}(r)$$

yz síkban nulla  
mert itt  $x=0$



$$\frac{\sqrt{3}}{2 \cdot \sqrt{\pi}} \frac{y}{r} \cdot R_{2p}(r)$$

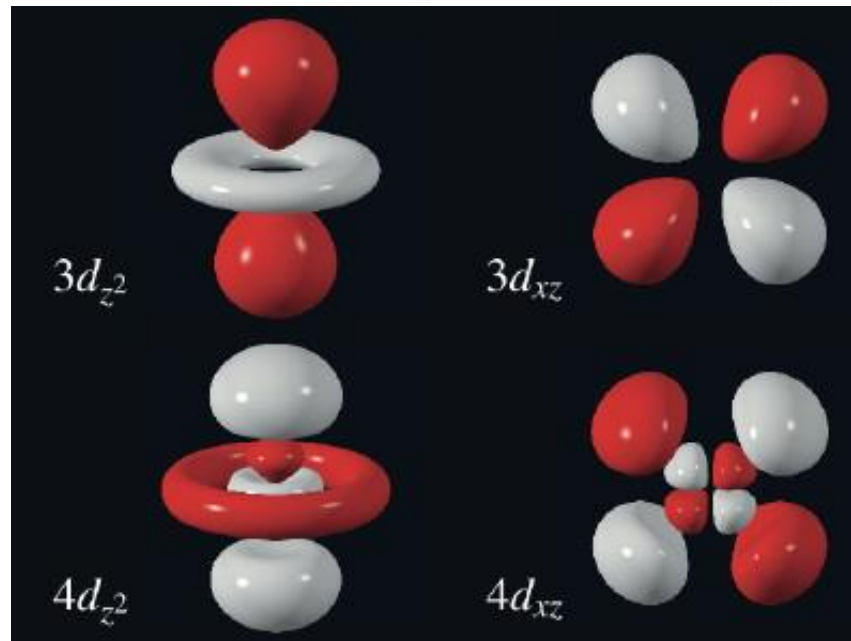
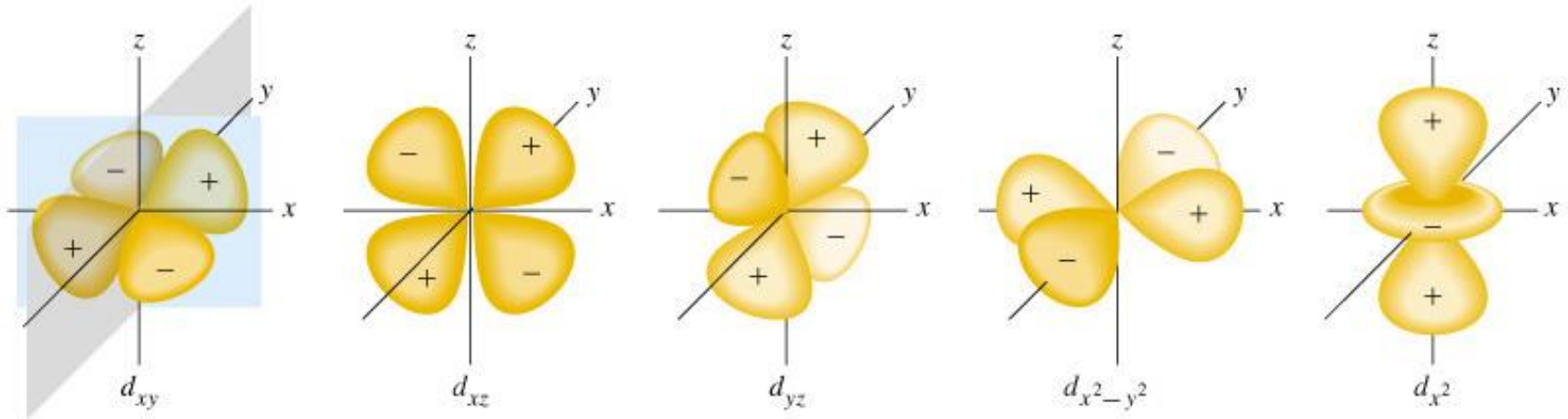
xz síkban nulla  
 $y=0$



$$\frac{\sqrt{3}}{2 \cdot \sqrt{\pi}} \frac{z}{r} \cdot R_{2p}(r)$$

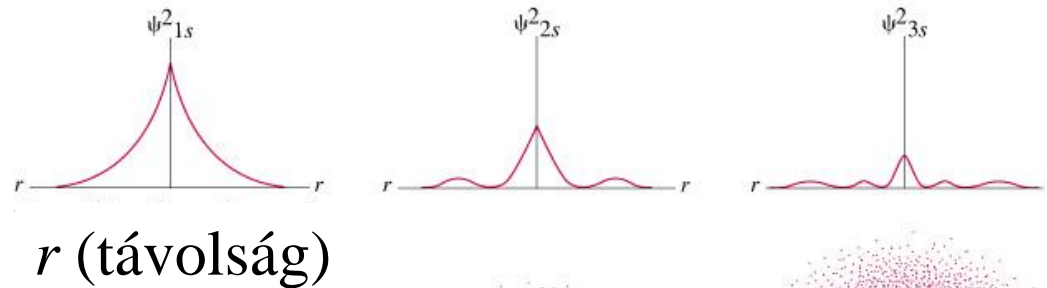
xy síkban nulla  
 $z=0, \cos(\theta) = z/r$

# d pályák

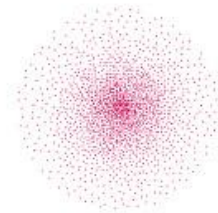


# 2-8 Elektronsűrűség

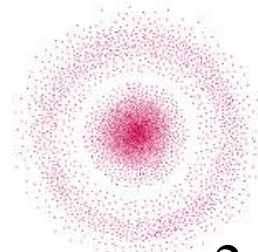
s pályák



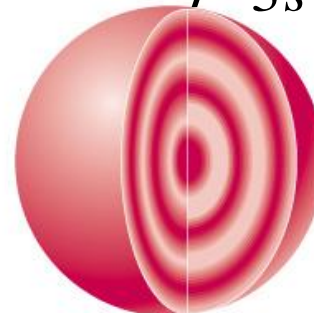
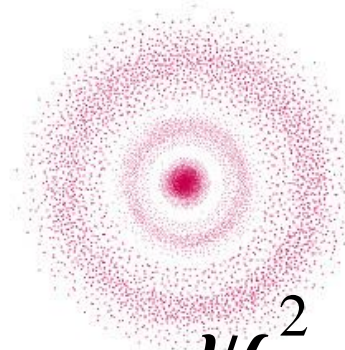
$$\psi_{1s}^2 = \frac{e^{-2r}}{\pi}$$



(a) 1s



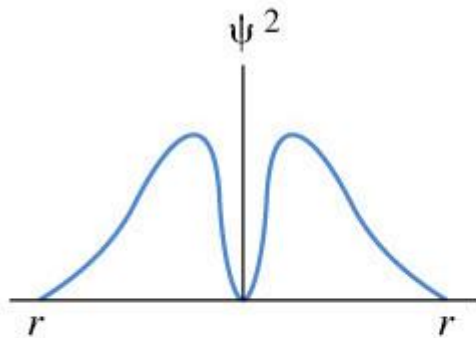
(b) 2s



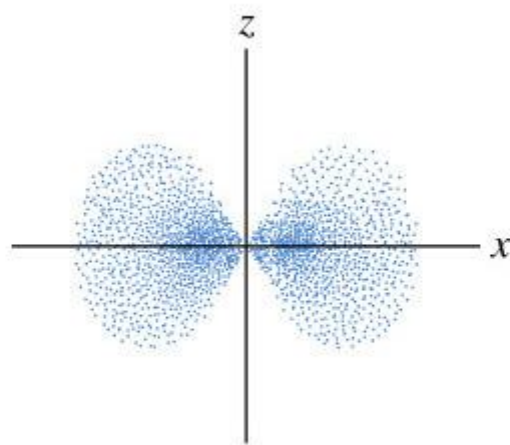
(c) 3s

# p pályák elektronsűrűsége

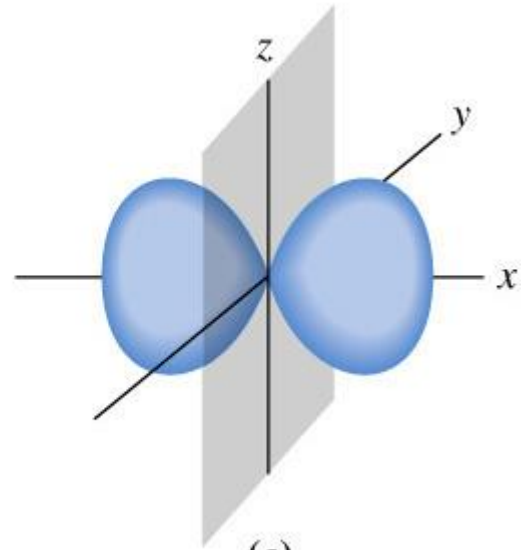
$$\psi_{2p_x}^2$$



(a)



(b)



(c)

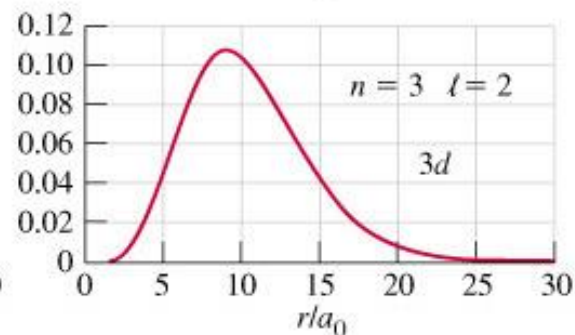
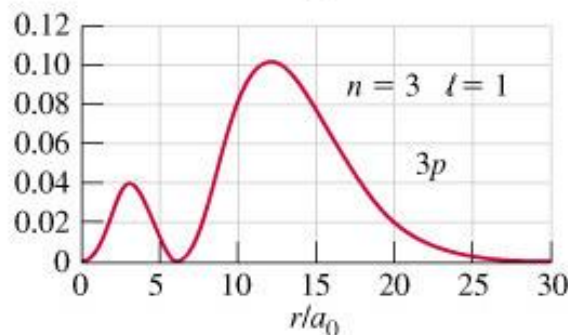
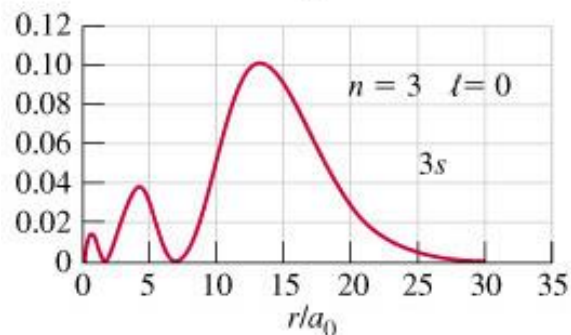
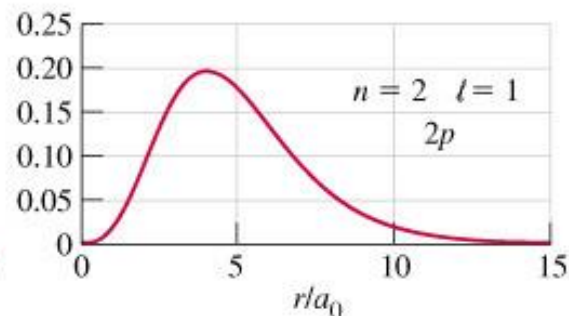
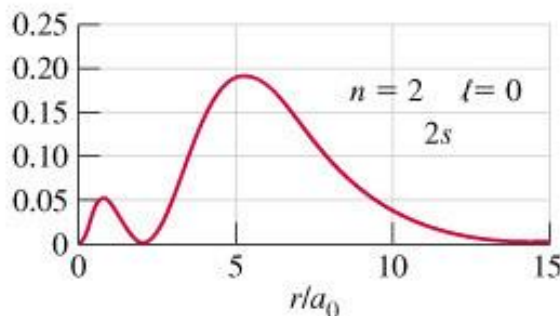
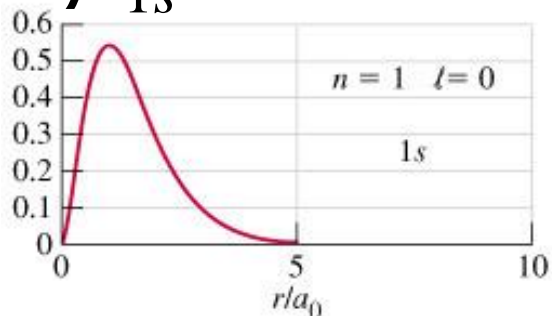
# Radiális elektronsűrűség

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

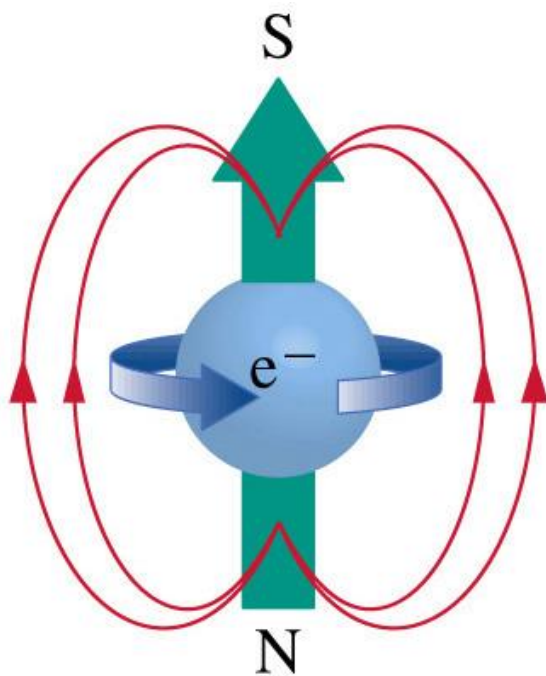
Az elektronok megtalálási valószínűsége az  $r$  sugarú gömb felületén. (A gömb felületének nagysága  $= 4\pi r^2$ ).

$$\rho_{1s} = 4r^2 e^{-2r}$$

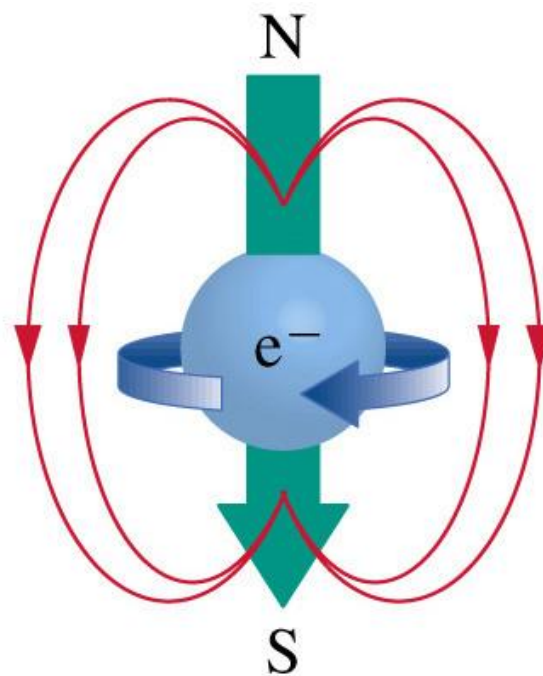
Hol lesz maximális?  $r = 1$ ! Bizonyítsák.



## 2-9 Elektronspin: a negyedik kvantumszám



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



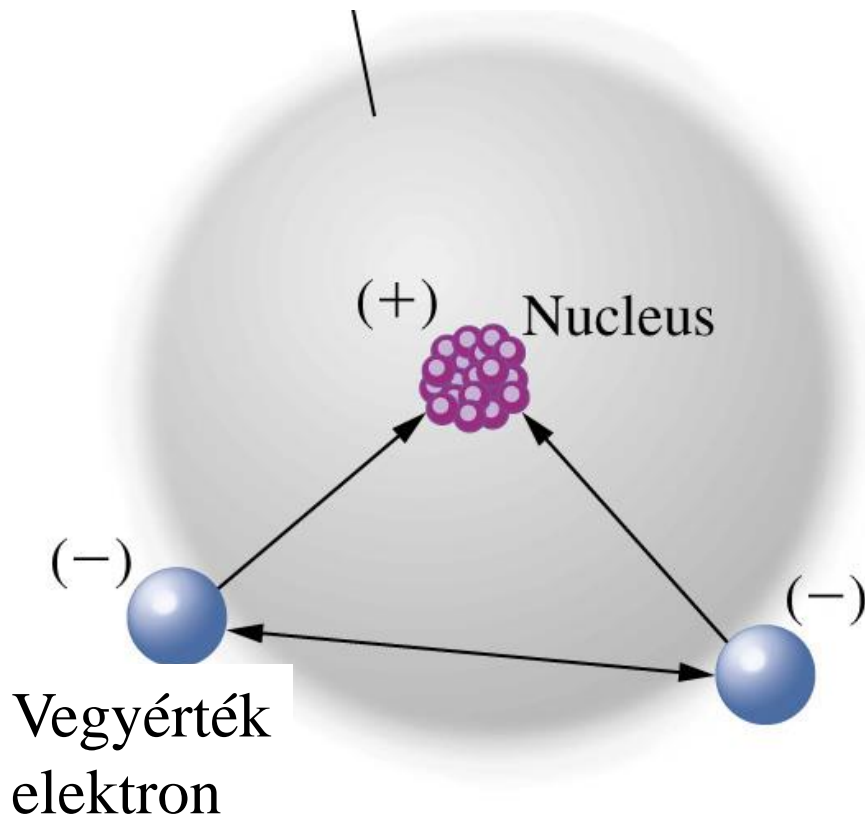
$$m_s = -\frac{1}{2}$$

## 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).

# Árnyékolás

Törzs elektronok árnyékoló hatása



$Z$  a mag töltése  
 $S$  az árnyékolás:

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

Ionizációs energia:

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

# Árnyékolás (S)

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

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

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

$N_0$  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).

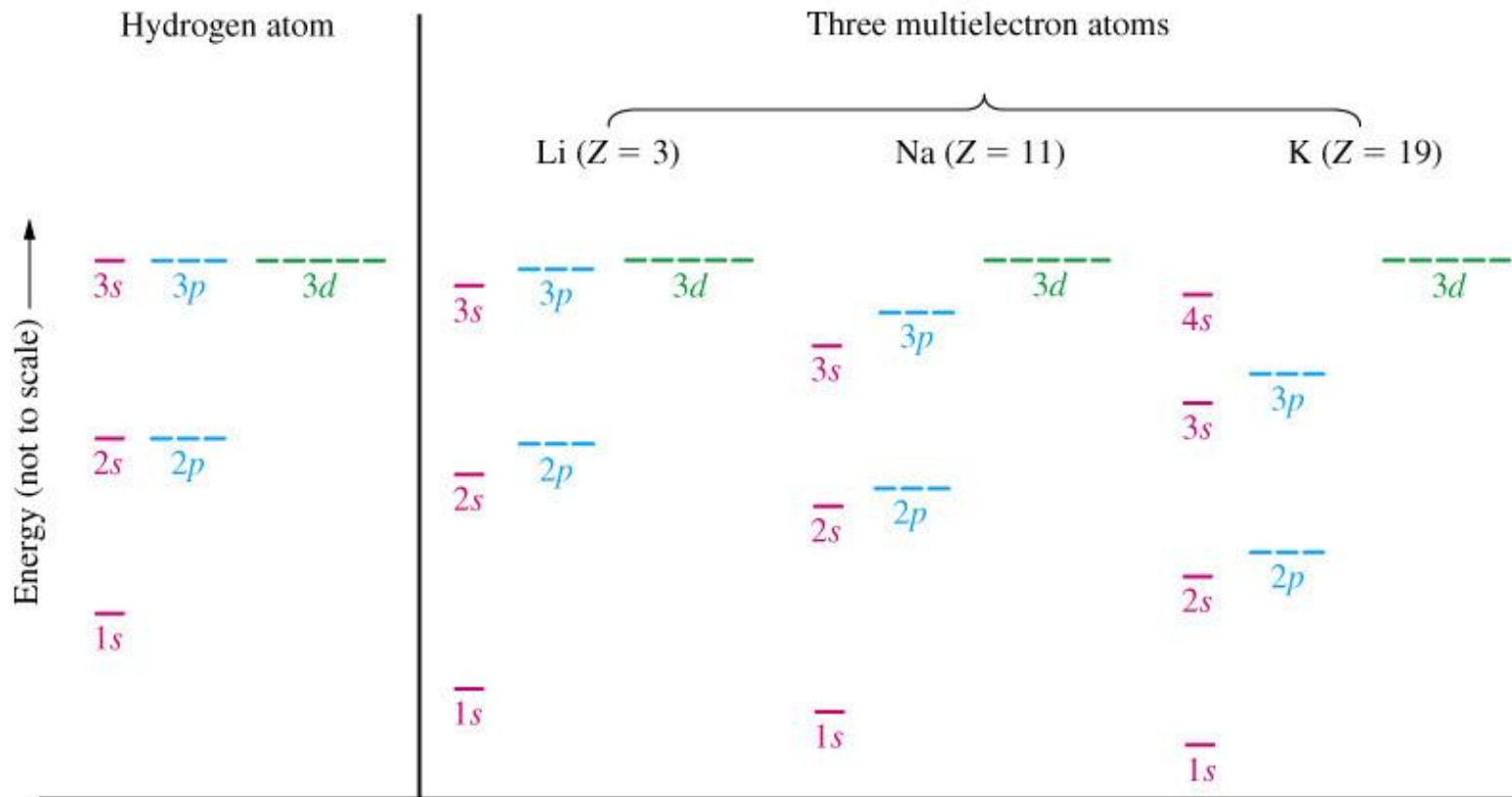
Az effektív magtöltés

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

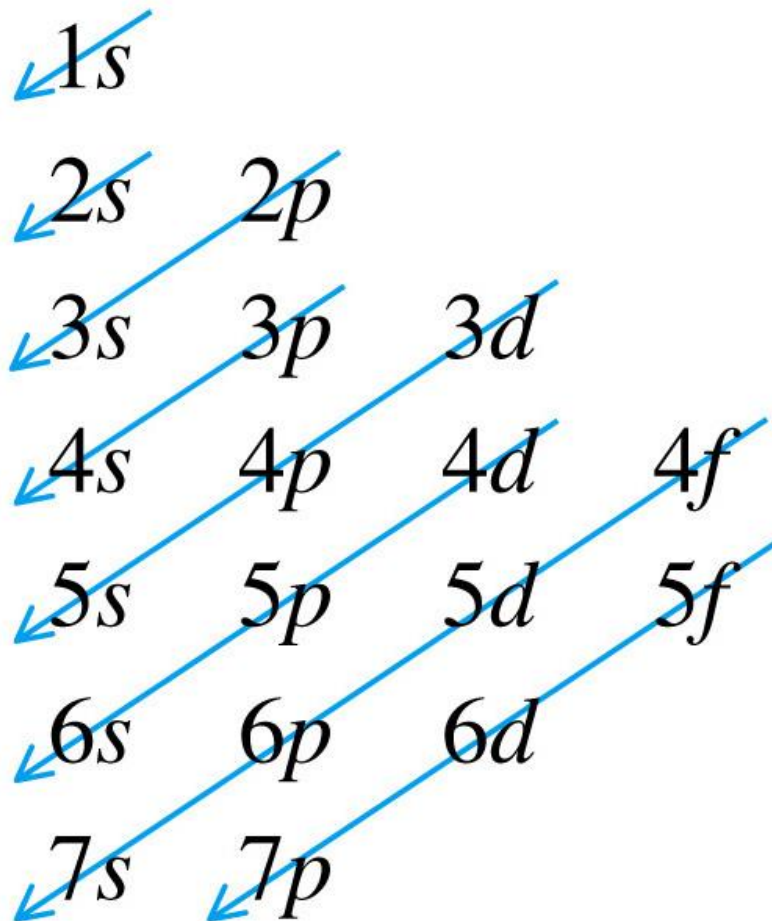
## 2-11 Elektronkonfigurációk

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

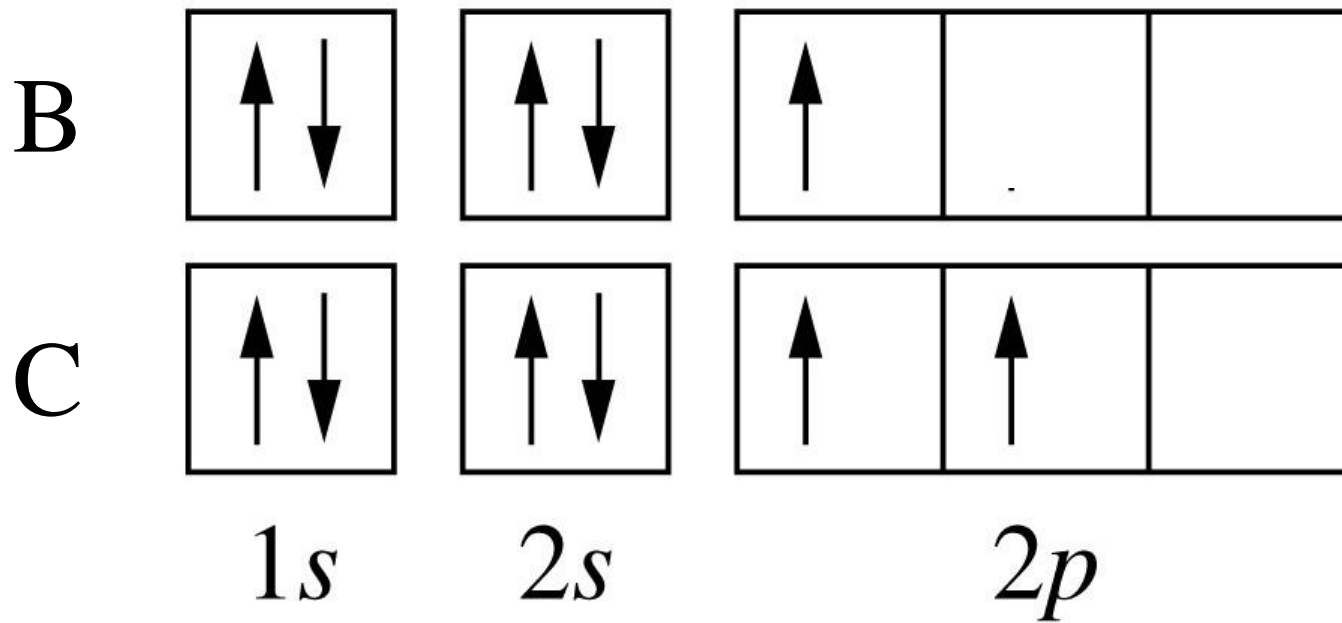
# Pályaeenergiák



# pálya betöltés

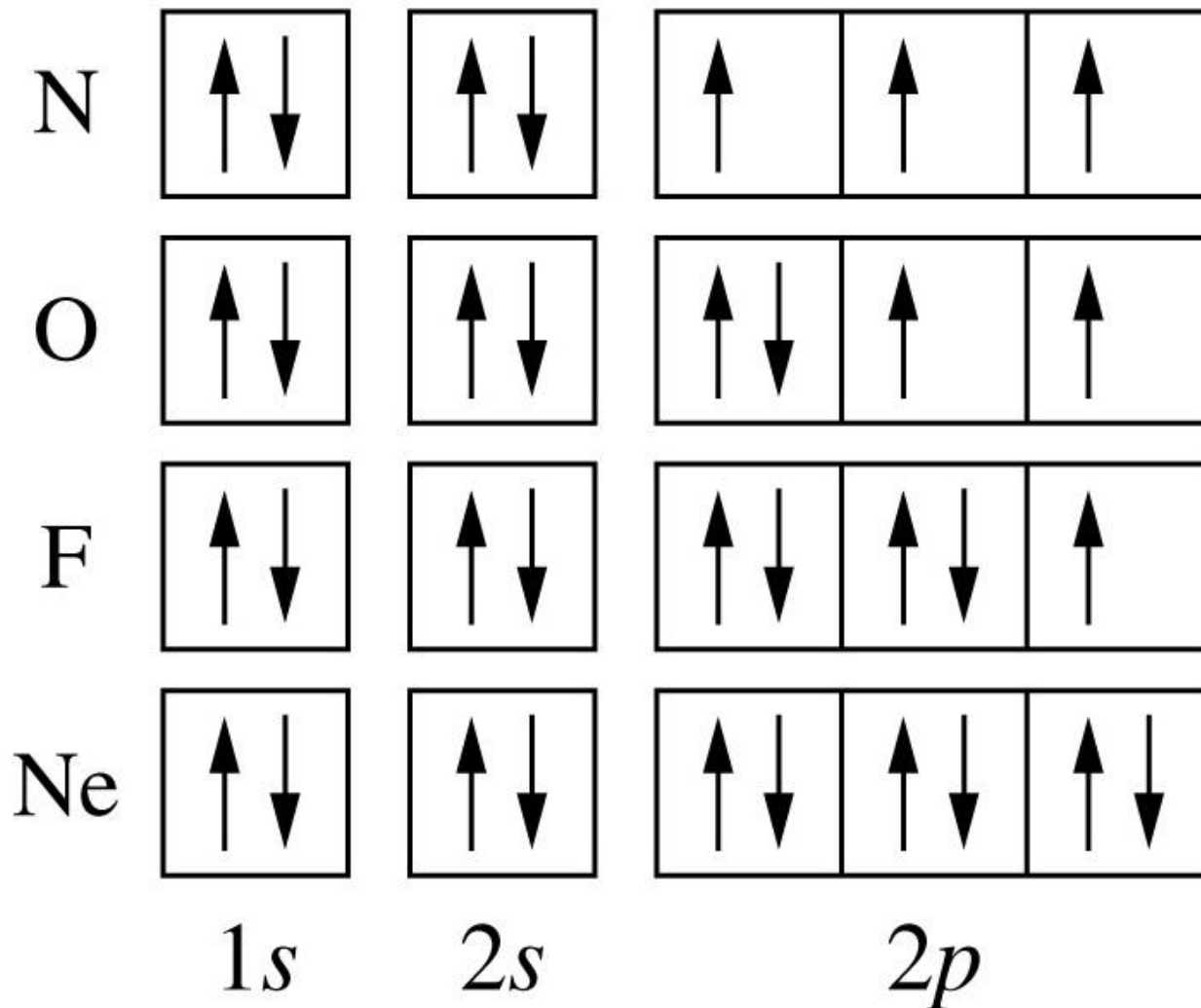


# Aufbau elv és Hund-szabály



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

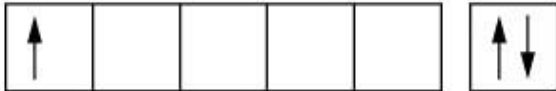
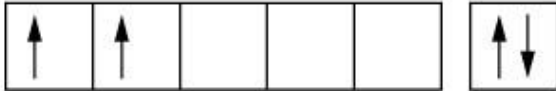

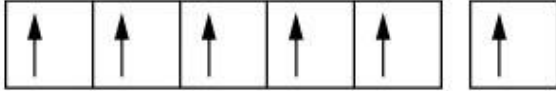
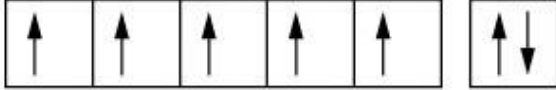
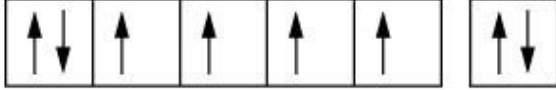




# p pályák betöltése



# 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]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>1</sup> 4 <i>s</i> <sup>2</sup>
Ti:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>2</sup> 4 <i>s</i> <sup>2</sup>
V:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>3</sup> 4 <i>s</i> <sup>2</sup>
Cr:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>5</sup> 4 <i>s</i> <sup>1</sup>
Mn:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>5</sup> 4 <i>s</i> <sup>2</sup>
Fe:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>6</sup> 4 <i>s</i> <sup>2</sup>
Co:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>7</sup> 4 <i>s</i> <sup>2</sup>
Ni:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>8</sup> 4 <i>s</i> <sup>2</sup>
Cu:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>10</sup> 4 <i>s</i> <sup>1</sup>
Zn:	[Ar]		[Ar]3 <i>d</i> <sup>10</sup> 4 <i>s</i> <sup>2</sup>

**TABLE 9.2 Electron Configurations of Some Groups of Elements**

<b>Group</b>	<b>Element</b>	<b>Configuration</b>
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 Elektronkonfigurációk és a periódusos rendszer

Main-group elements

s block		Transition elements										p block						
1												18						
1s	H																	
2																		
2s	Li	Be											2p					
3																		
3s	Na	Mg											3p					
4																		
4s	K	Ca											4p					
5																		
5s	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	5p					
6																		
6s	Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	6p					
7																		
7s	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 rendszer

Nemes Gázok

Alkáli földfémek

Halogének

Főcsoport

D-elemek

1 1A	2 2A	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9	10	11 1B	12 2B	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
1 H 1.00794	2 He 4.00260	3 Li 6.941	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	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)	(287)	114 (287)	(289)	116 (289)	(293)	118 (293)
*Lanthanide series			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			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