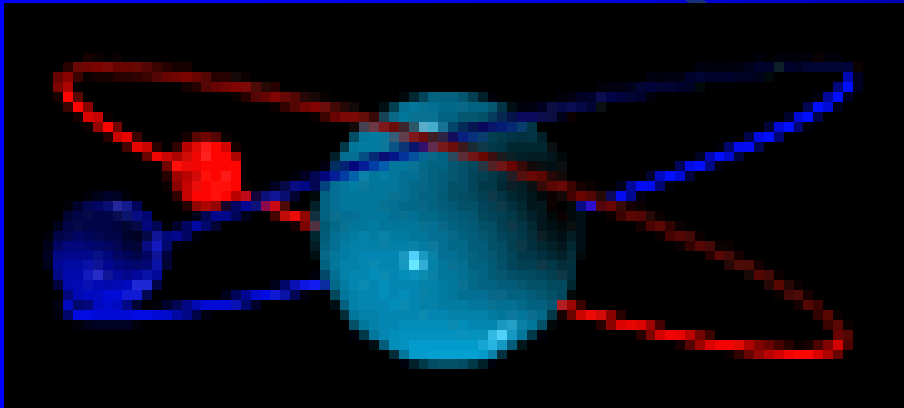
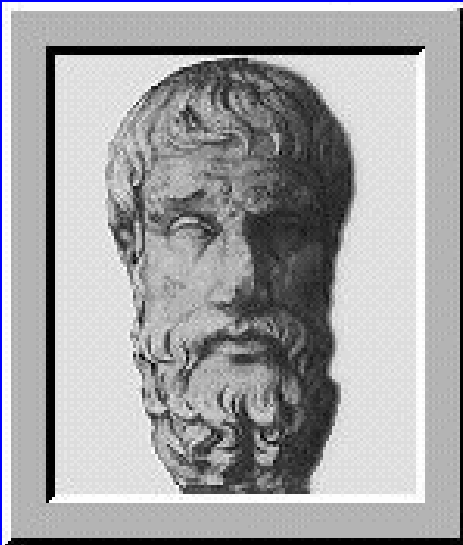


Atomok felépítése

Az egészen kis részek...





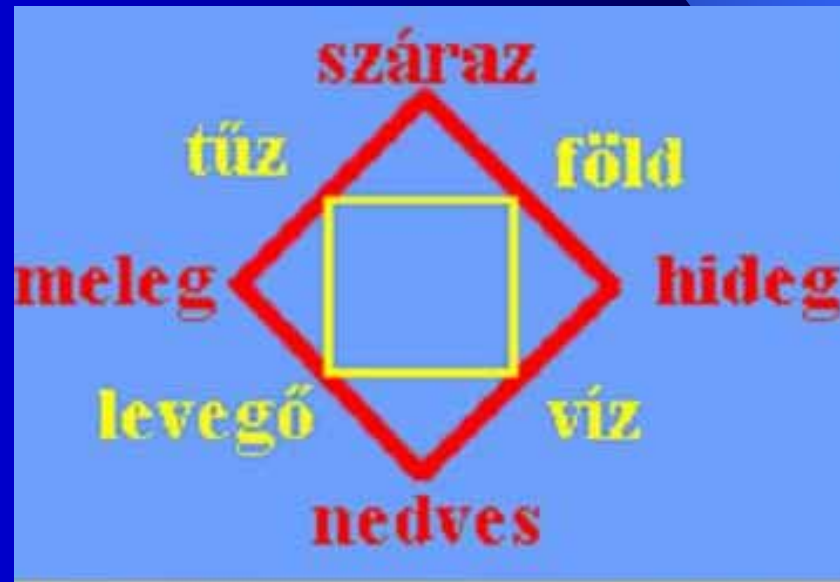
Epikürosz (i.e. 342-270) az atomokat különböző horgokkal és kapsokkal képzei el.

(kapsok eltörnek: víz elpárolog - lecsapódik ???)

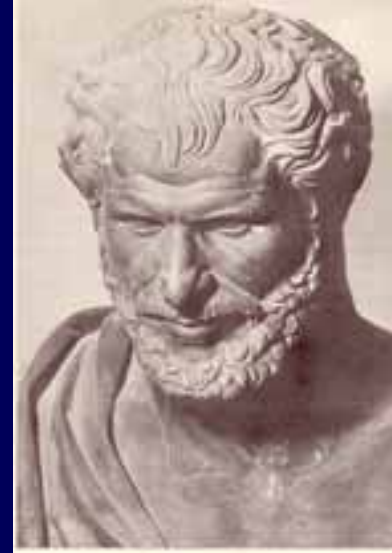
Arisztotelész (i.e. 384-322) nem léteznek atomok

- az anyag folyamatosan osztható

- „horror vacui” elmélet (az üres terektől való félelem), a jelenségek oka az őselemek, illetve az őstulajdonságok arányának tetszőleges megváltozása



Elképzélések az anyag felépítéséről



- Demokritosz = atom, az oszthatatlan
- Dalton felfedezi az atommodellt
- Rutherford megalkotja a mag-elektronfelhő modellt
- Bohr beszél az elektronhéjakról
- Kimball posztulátum: elektronfelhők
- Schrödinger & Heisenberg felfedezik az atomorbitált

Mindegyik modell elmagyarázza az atomok felépítését, de még senki sem látott egy atomot a két szép szemével

Céljaink az előadáson:

- Mindenekelőtt a Bohr és Kimball modellel ismerkedünk meg
- Ezen modellek segítségével az egyszerűbb atomokat, molekulákat leírhatjuk
- Ennek alapján megérthetjük a kémia alapjait, az **atomok felépítését** és majd... a kötések, a kötések tulajdonságait, s az atomokból kialakuló molekulák kötésviszonyait

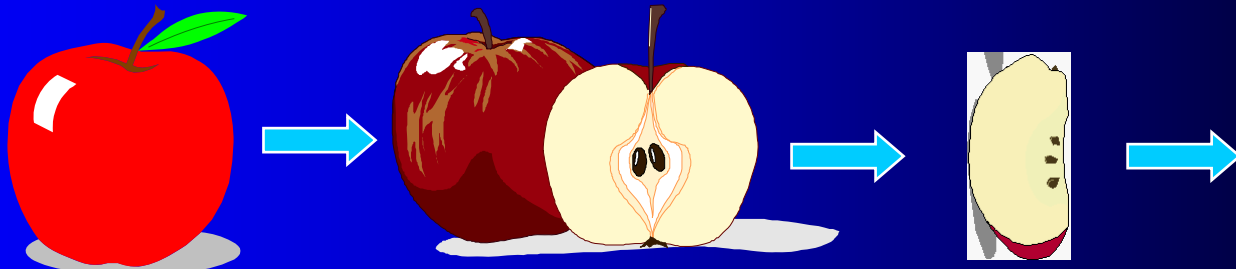
Gondolatkísérlet...

A görög filozófus Demokritosz lefektette.:

Ha egy anyagot elfelezek, és mégegyszer felezek, és ezeket a részeket még többször félbe vágom, akkor egyszer csak eljutok egy olyan legkisebb részhez, amit már nem tudok tovább osztani.

Minden anyagnak van egy olyan oszthatósági állapota, amit tovább már nem oszthatok, azaz **az anyagok atomokból** állnak...

... És mindez 2400 éve...!!!! S filozófikus alapon, nem kísérletekkel ☺!

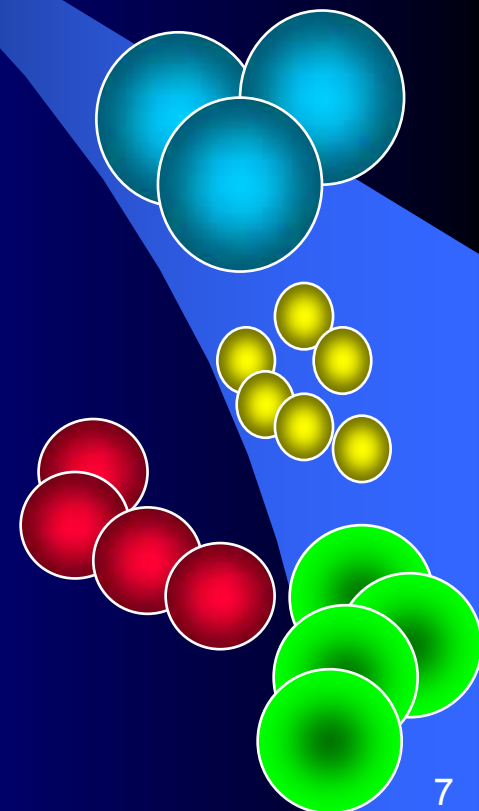


Atom szó...

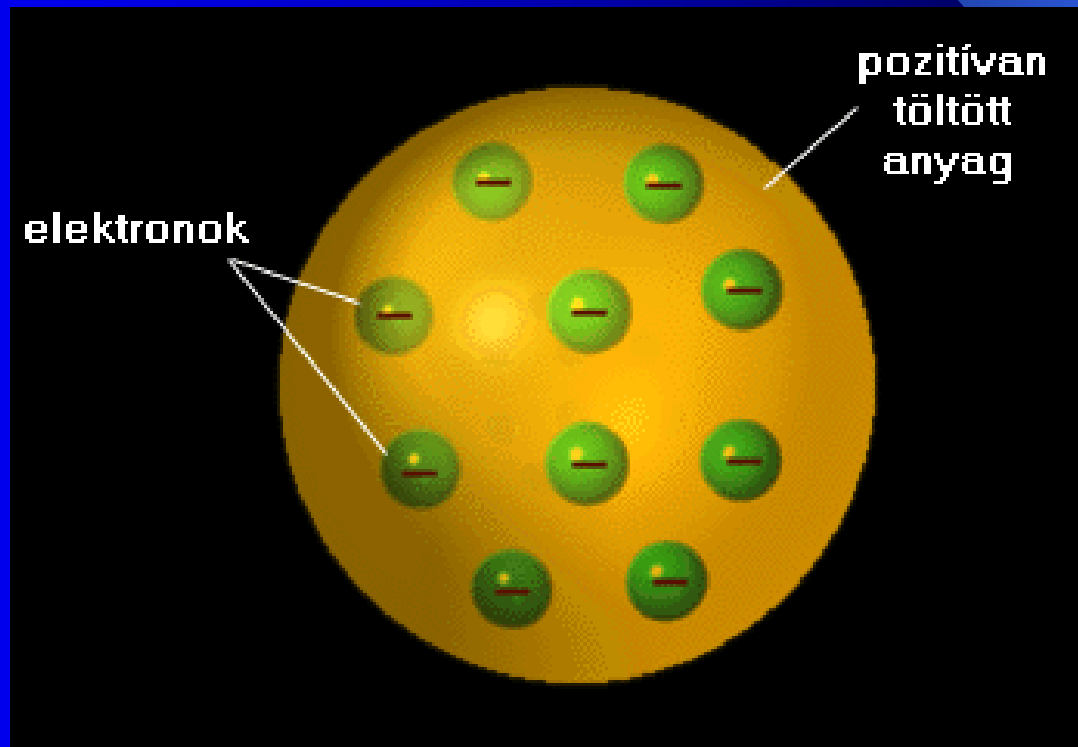
- Az elnevezés az „oszthatatlan” szóból származik és Demokritosz révén vált ismertté.
- A technika fejlődésével sikerült bizonyítani, hogy az atom valóban a legkisebb anyagi részecske, amely még hordozza az elem tulajdonságait,
- de az oszthatatlanság elmélete megdőlt, amikor a 19.század végén a kísérleti tapasztalatok az atomok belső összetettségére utaltak.

John Dalton felfedezése...

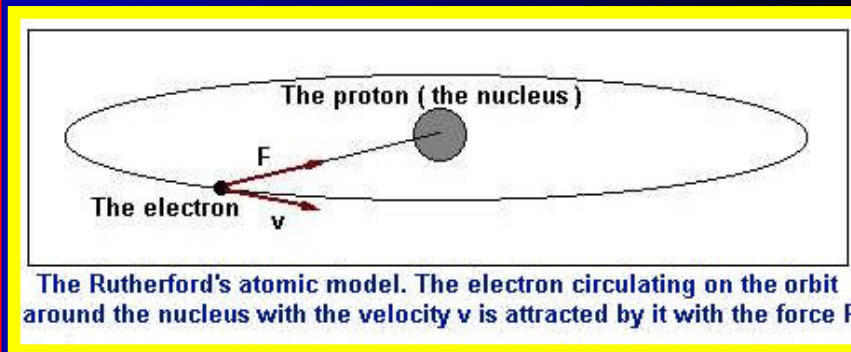
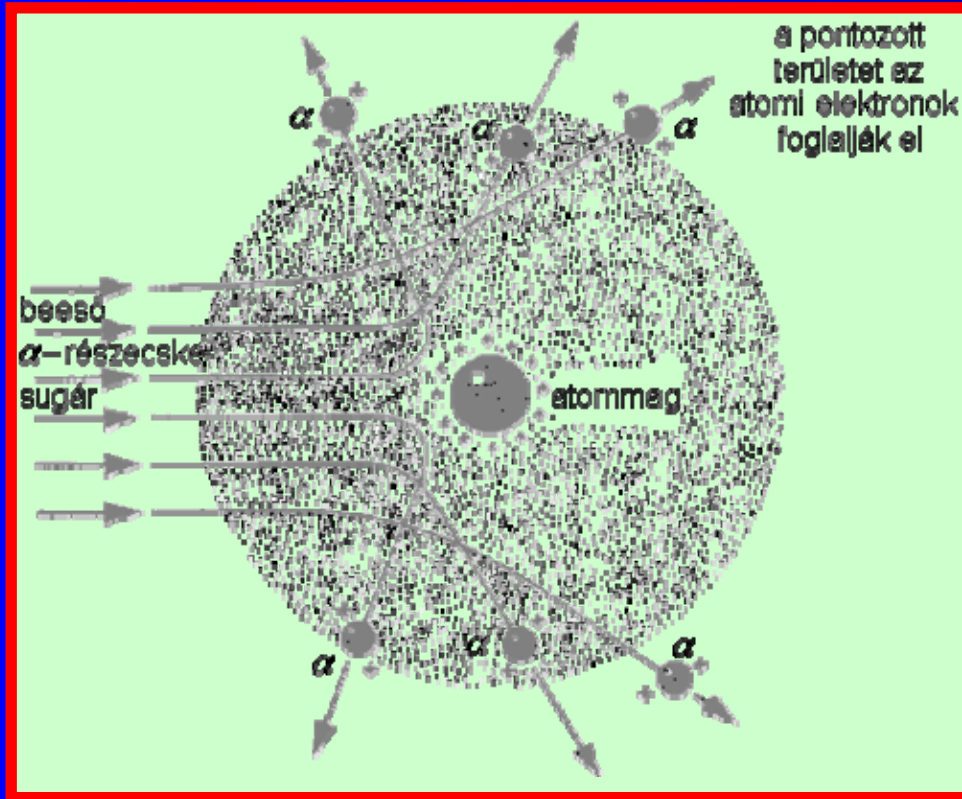
- Dalton, John (1766-1844), brit kémikus és fizikus, aki kitalálta az **ATOMELMÉLETET**, amin a modern természettudományos világképünk nyugszik.
- Kvázi autodidakta volt, apja tanítgatta az akkori misztikummal átszótt alchímiára...
- Dalton az atomokat, mint igen kicsi golyókat képzelte el.. Azt gondolta, hogy a **golyócskák mérete** határozza meg, hogy melyik elemről beszélünk. Az **elemek** azok az alap építőkövek, amikből az egyes anyagok állnak (pl réz, vas...)



- Az atomok szerkezetéről sok elképzelés született, ezeket **atommodelleknek** nevezzük.
- **Thomson** : (1904) : mazsolás puding elmélet : az atom pozitív massa, melyben pontszerűen vannak az elektronok – nem magyarázza az atomok spektrumvonalának létét



- **Rutherford**: naprendszer : középen a mag körülötte keringenek az elektronok, a pozitív töltések száma = a rendszám

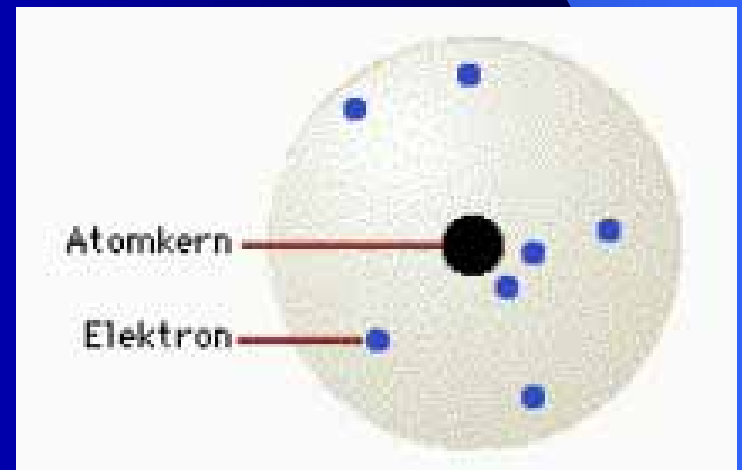


1909. (Sir) E. Rutherford (angol): aranyfűst fóliát bombázott α részecskékkel, s nagyfokú eltérülést tapasztalt

Rutherford „belép” az atom belsejébe...

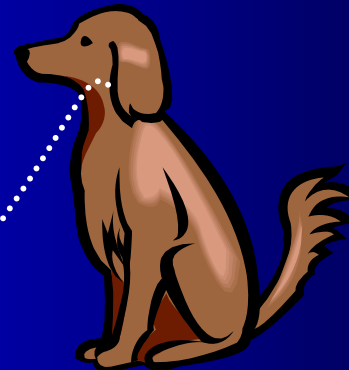


- Rutherford, Ernest, Lord of Nelson and Cambridge (1871-1937), brit fizikus, aki az korszakalkotóan zseniális gondolataiért -a magfizikában és az atomelmélet megalapításáért ért Nobel díjat kapott.
- A sugarak vizsgálatával és a mért eredmények értelmezése közben jutott el az **atomszerkezeti lényegének** felismeréséig. Eszerint az atom nagyobb sűrűségű, nagyobb **atommaggal** és az ezt körülölelő **elektronokkal** jellemezhető,



- porszem (10^{-2} cm)
- porszem: Föld = mag : porszem
- 3 m sugarú vasgömb súlya = porszem
- nagyon nagy tömeg, igen kis méret
($g = 200$ billió g/cm^3)
($1 * 10^{-13}$ cm)
- \oplus töltés
- tömegtelen \ominus töltés, mozog
- 1/2000 tömeg

- a protonhoz képest
- 500 billiószer nagyobb térfogatban, mint a proton
- 7 m sugarú körben mozogna
- nyugvó elektron nincs
- „S” (entrópia 😊) növekedés – a szétterjedés ellen hat a proton



- Az atomok pozitív töltésű atommagból és negatív töltésű **elektronokból** ($e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{C}$, $m_e = 9.109 \cdot 10^{-28} \text{g}$) állnak.
- Az atom tömege a kis méretű atommagban össz pontosul, kémiai szempontból két egységből áll : **proton (+) és neutron(0)**.
- Az elem jellemző kémiai sajátságait az atommag ezen belül is a proton hordozza, így az atomban található protonok száma adja az elem rendszámát.
- Az atom kifelé semleges, így a mag protonjainak száma = a mag körüli elektronok száma.
- A tömegszám = protonok + neutronok száma, kisebb rendszámok esetében protonok száma megegyezik a neutronok számával (kiv H),
- a rendszám növekedésével a neutronok többen lesznek a protonoknál (atommag stabilizálás).

- **Izotópok** :kémiaailag azonos atomok, de tömegük eltérő, vagyis azonos protonszám mellett különböző számú neutron tartalmaznak.
- Miután egy elem több izotópja is előfordul a természetben, ezért az elemek relatív **atomtömege nem egészszám**, hiszen ezt úgy kapjuk meg, hogy a tömegszámot az izotópok tömegének előfordulási valószínűségével súlyozzuk és átlagoljuk.

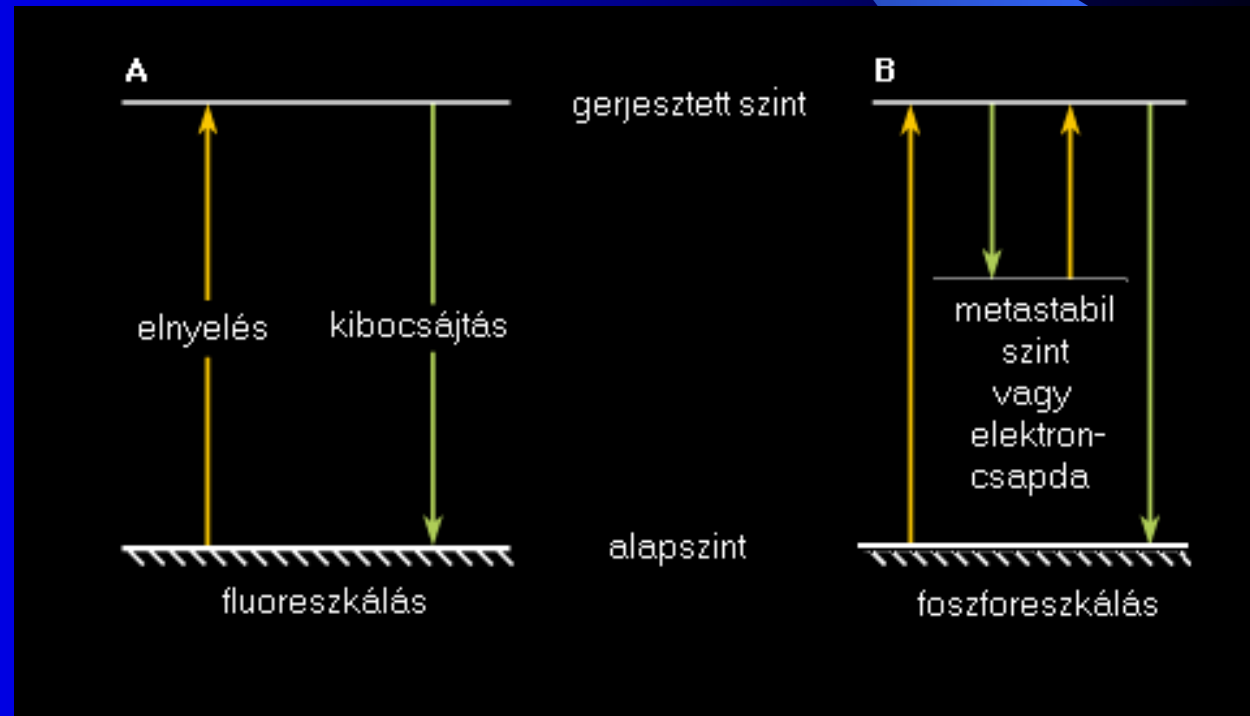
- A protonokat és a neutronokat a magban erős kölcsönhatás tartja össze (magerők).
- Azt az energiát, ami a magok képződése során szabadul fel, képződési energiának nevezzük.
- A mag tömege mindig kisebb valamennyivel mint a magot felépítő **nukleonok** (proton + neutron) tömege, vagyis a nukleonok maggá való egyesülése során a rendszer veszít a tömegéből. Magyarázat : **Einstein** : $E = mc^2$, ahol c a fénysebesség, és az összefüggés szerint a szabaddá váló energia tömeg ekvivalenciájával azonos a tömeghiány (tömegdefektus).
- Kémiai reakciókban (ahol csak az elektronhéj vesz részt, ezt kísérő E-k sokkal kisebbek mint a magfolyamatok energiája, ezért a tömegdefektus sem észlelhető gyakorlatilag kémiai folyamatok során.

A magfizika rövid története

- lumineszcenciakutatások közben Antoine Henri Becquerel (1852-1908) felfedezi a rádiumsók természetes radioaktivitását (1896)

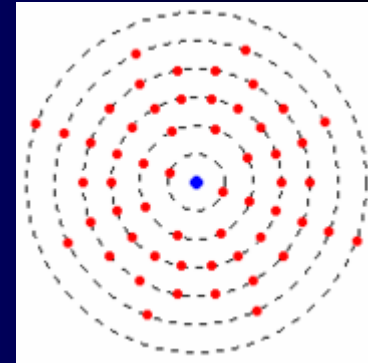
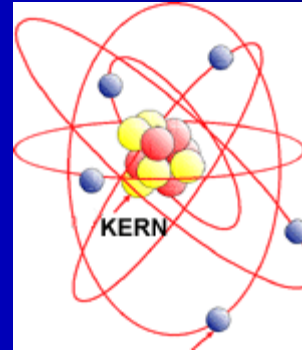


e. meli 03

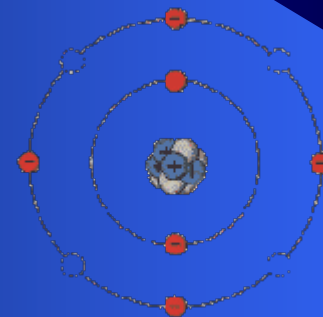


- véletlen felfedezések és szisztematikus kutatások a fizikában
 - Wilhelm Konrad Röntgen (1845-1923)
 - az UV-nél rövidebb hullámhosszú sugárzás és tulajdonságai (1895)
 - az első Nobel-díj (1901)

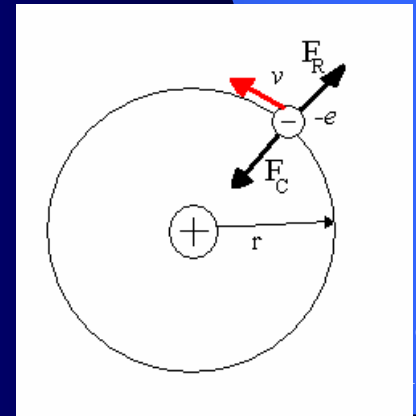




Bohr Atommodell



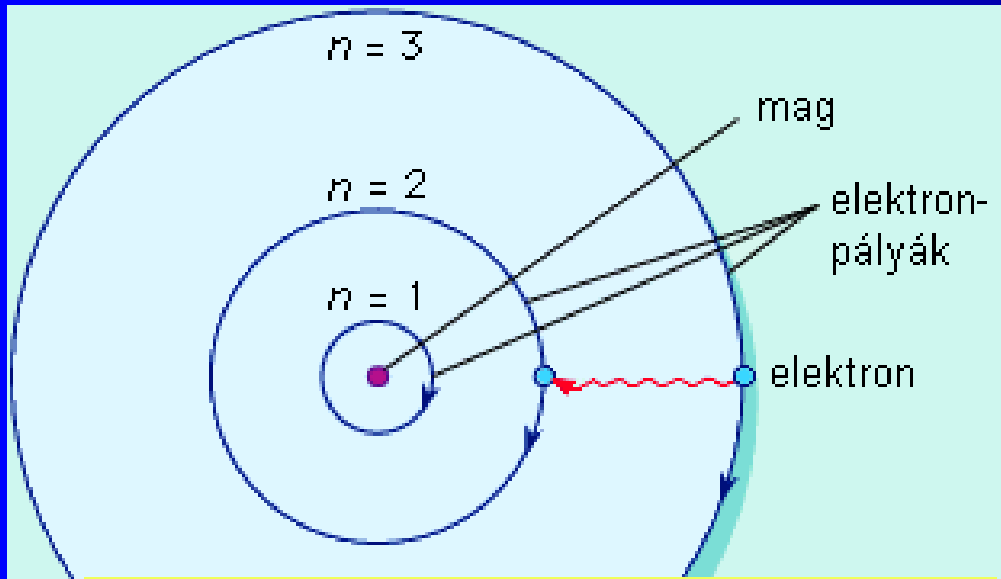
- Niels Bohr (1913):
megállapítja, hogy az elektronok mozgása és a kibocsátott fény is kvantált, így az elektron átmenete az atomban egy magasabban kvantált E szintről egy alacsonyabbra,
- EZ egy olyan fénykvantum kibocsátását eredményezi, amelynek $h \cdot \nu$ energiája a két szint közötti E különbséggel egyenlő.
- A diszkrét E értékek kitüntetettsége közvetlenül megnyilvánul az atomok vonalas spektrumában.
- Niels Bohr (1885-1962), dán fizikus és Nobel díjas, fontos és megalapozó ismereteket fedezett fel a magfizikában és ezt hasznosította és követői hasznosították az atomelméletkben.



- Niels Hendrik David Bohr (1885-1962) atommodellje (1913)

$$mv^2/r = e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$$

$$m_e v r = n \hbar$$

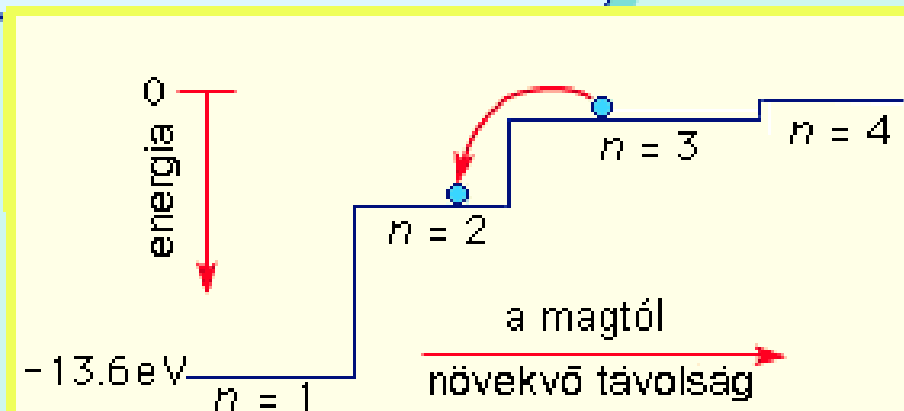


$$\alpha_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

$$E_n = \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

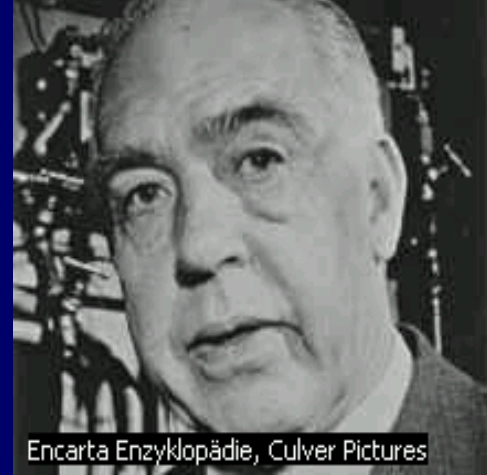
$$E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

$$\hbar\nu = E_n - E_m$$



Bohr felfedezi az elektronpályákat...

- Bohr szerint az **elektronok a mag körül keringenek,**
- Különböző helyeken, amit **elektronpályáknak,** vagy **elektronhéjaknak** nevezett el,
- Eszerint a maghoz a legközelebb a **K héj**
- Aztán az L héj, majd az M és az N héj stb. található.



Bohr féle Atommodell...

Neutron

Elektromosan nem töltött

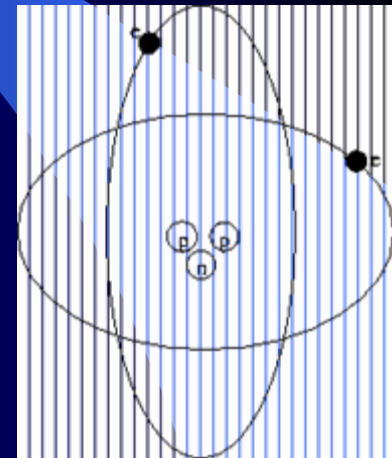
Proton

Pozitív töltés

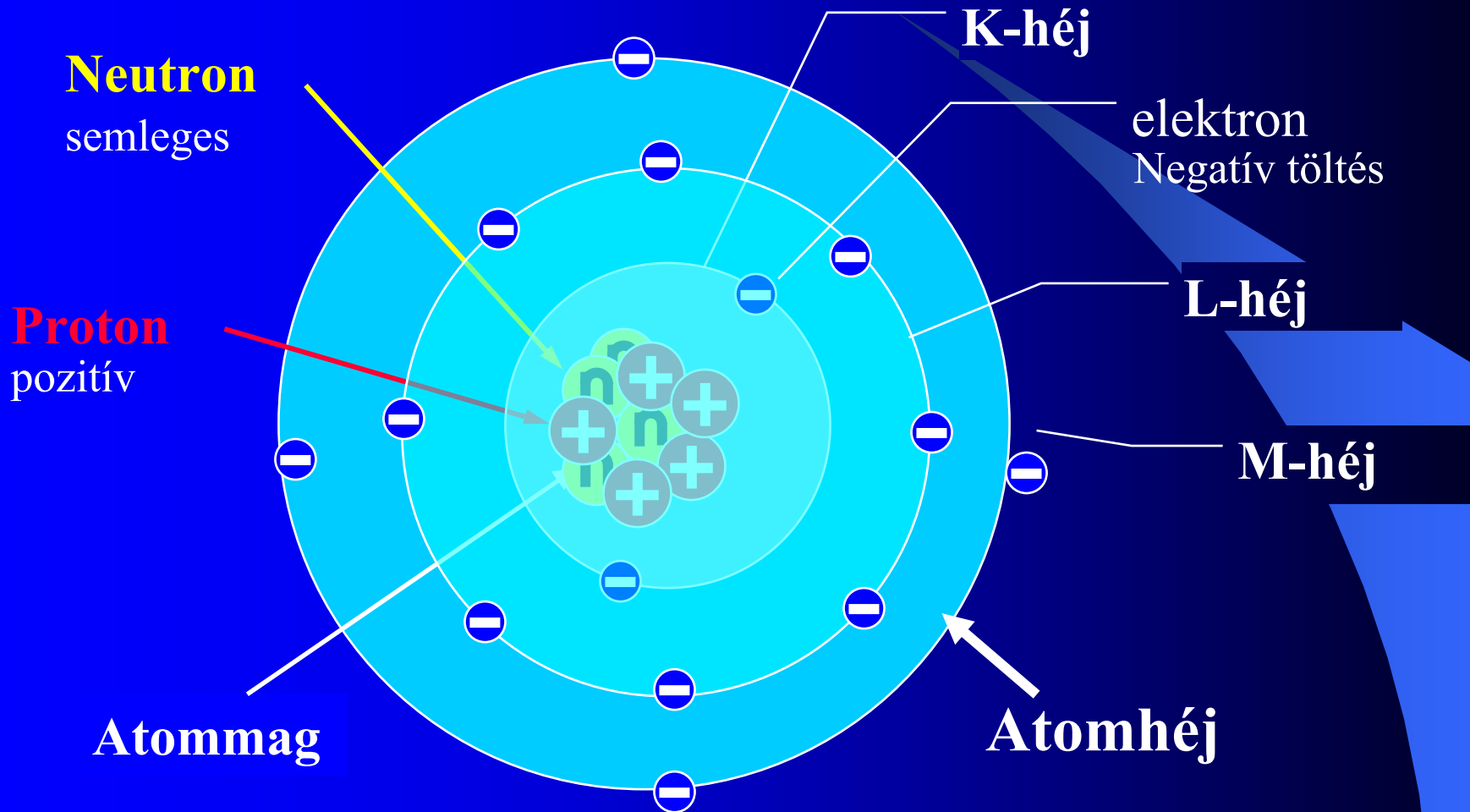
atommag

elektronhéj

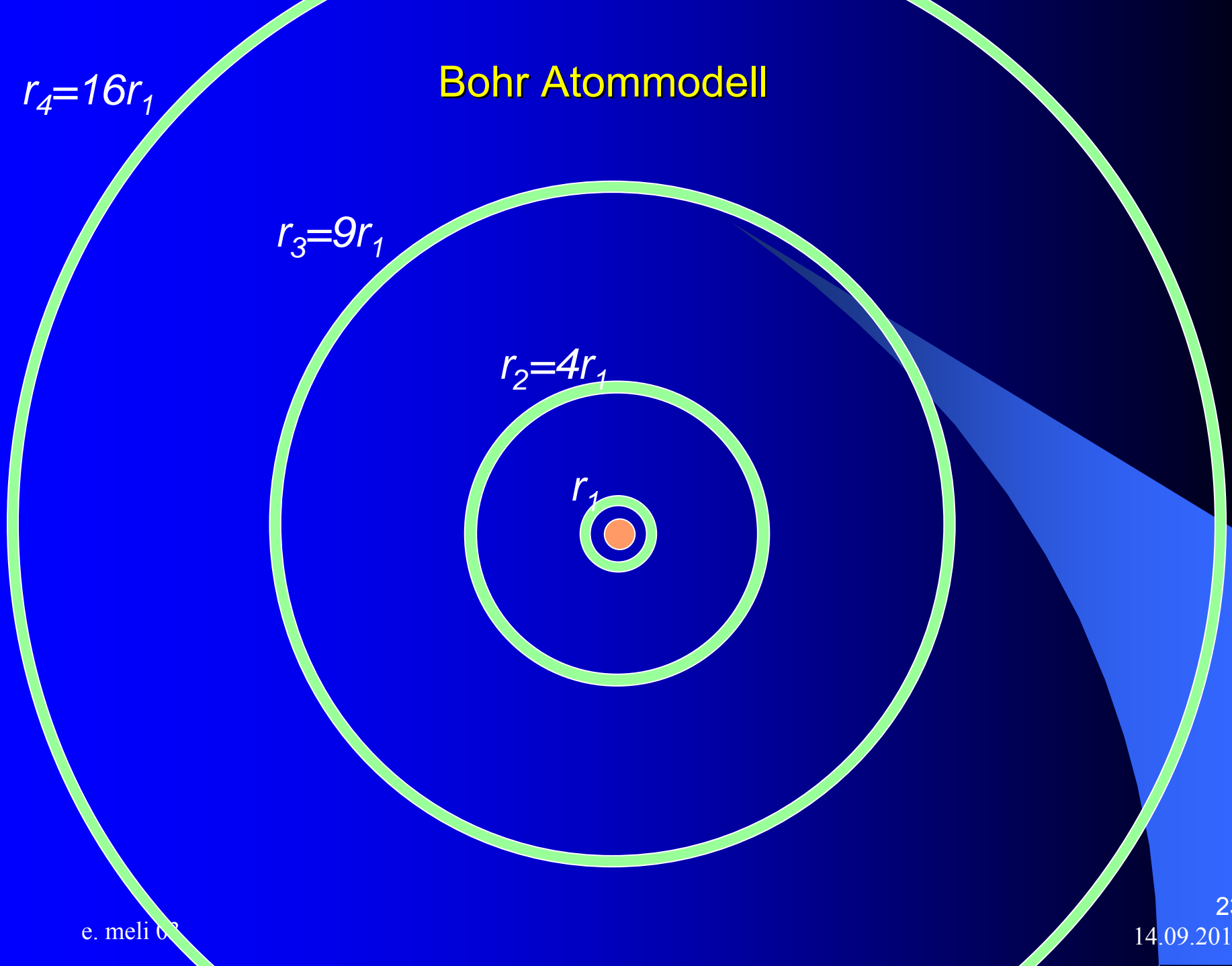
He atom



Bohr Atommodell...



Bohr Atommodell



Bohr' Atommmodell...



A leglényegesebbek:

	név	szimbólum	töltés	héj neve	max. elektron	
atommag	Proton	Nukleon		pozitív	majd' a teljes atom tömegét jelenti...	
	Neutron			seml.		
elektronhéj	Elektron			negatív	K-héj	max. 2
	Elektron			negatív	L-héj	max. 8
	Elektron			negatív	M-héj	max. 18

1913. Niels Bohr (dán): a ma is érvényes atommodell posztulátumai:

- Az elektronok a mag körül meghatározott pályán mozognak s eközben nem sugároznak, s így energiájuk a mozgás során változatlan.
- Minden diszkrét sorozatot képező E_1, E_2, \dots energia állapothoz más-más sugarú pálya tartozik.
- Gerjesztéskor az elektronok nagyobb sugarú pályára ugranak, amihez a szükséges energiát a két energiaállapot közötti energiakülönbség szabja meg, a Bohr-féle frekvenciafeltétel segítségével:

$$h \cdot \nu = E_n - E_k$$

- Ha nagyobb energiájú állapotból visszalép az elektron kevésbé gerjesztett állapotba, akkor az atom a Bohr-féle frekvenciafeltétellel megadott energiájú fotont sugároz ki.

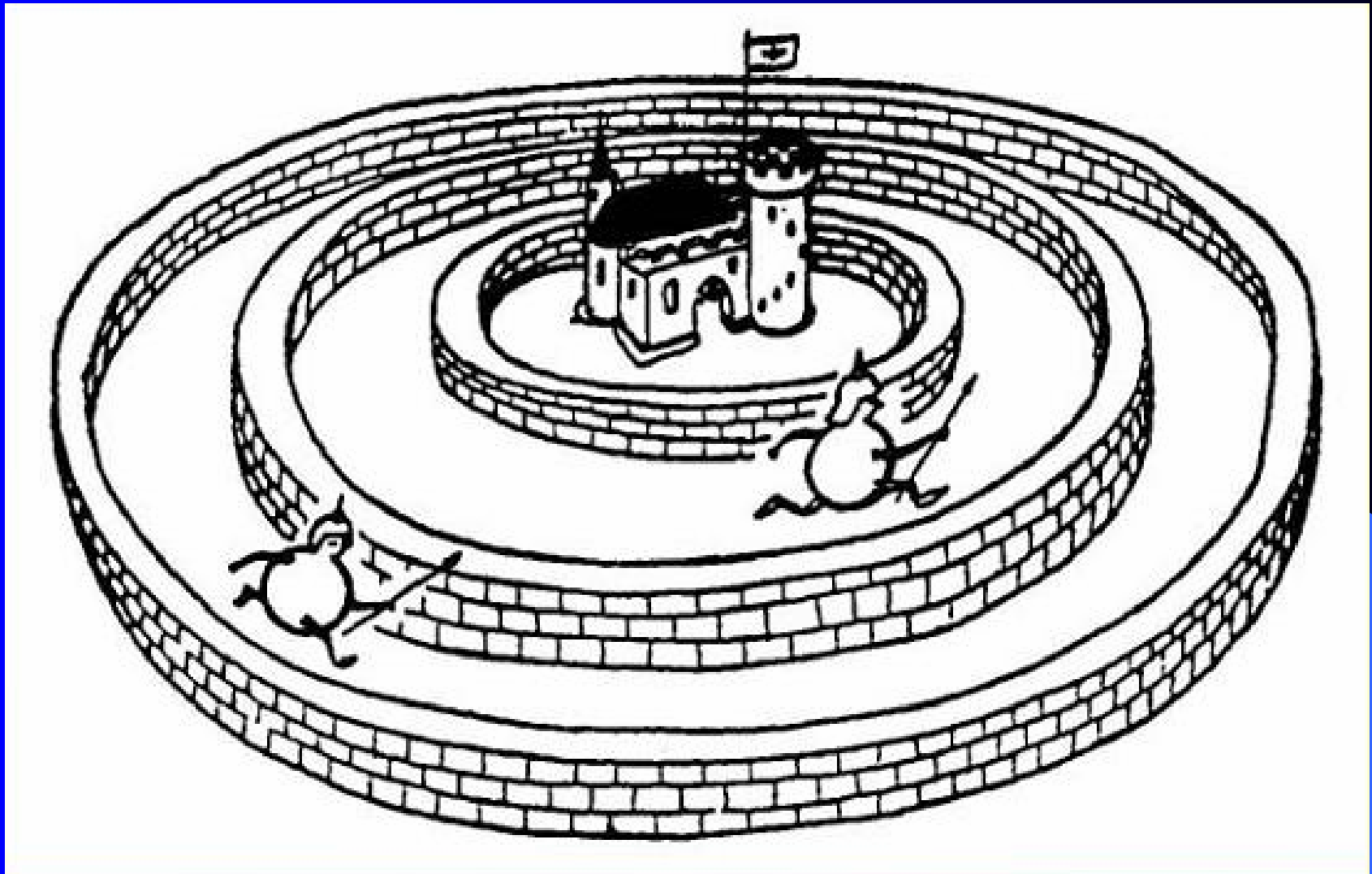
1920. E. Rutherford: a proton felfedezése (protosz = ősz, ősi)

Bohr Atommodell...

- Minden héj csak meghatározott számú elektront tartalmazhat, vehet fel...
- Az elektronok száma egyszerűen megadható:

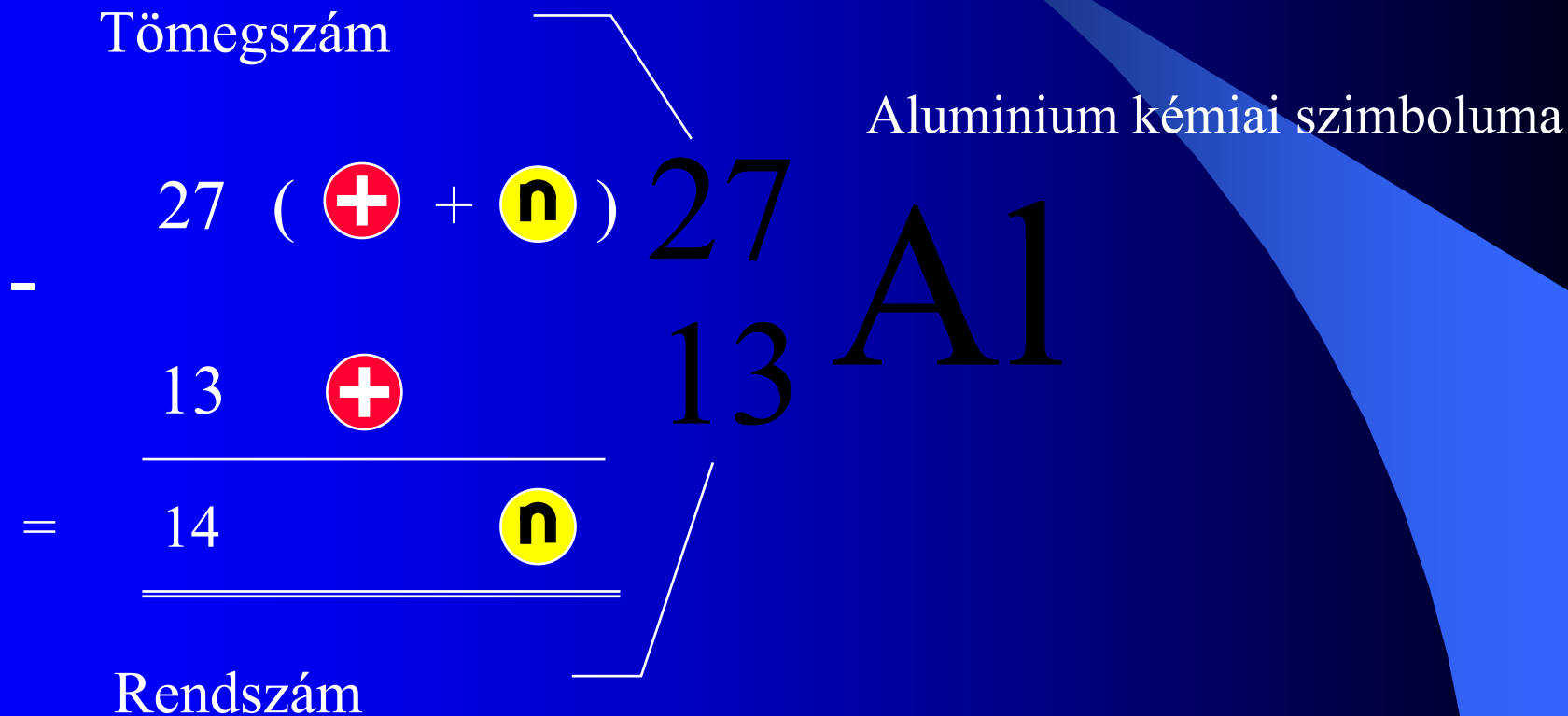
$$\text{Maximum E- szám} = 2 * (\text{a héj száma})^2$$

Héj	A héj száma	Formel	max. Elektronenszám
K	1.	$= 2 * 1^2$	= 2 Elektron
L	2.	$= 2 * 2^2$	= 8 Elektron
M	3.	$= 2 * 3^2$	= 18 Elektron
N	4.	$= 2 * 4^2$	= 32 Elektron
O	5.	$= 2 * 5^2$	= 50 Elektron
P	6.	$= 2 * 6^2$	= 72 Elektron
Q	7.	$= 2 * 7^2$	= 98 Elektron

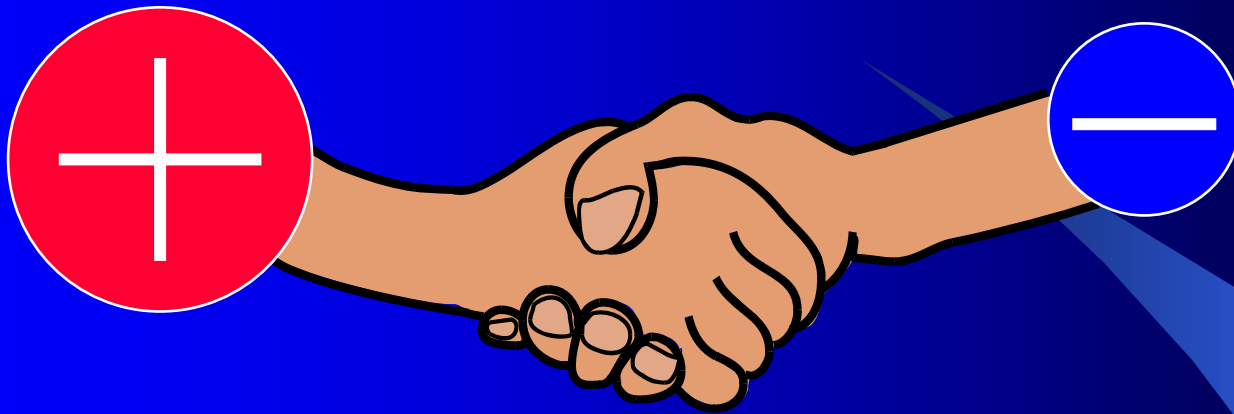


- A **tömegszám** (A) az atommagban található protonok és neutronok száma együttesen, azaz a nukleonok száma.
-
- A tömegszám egy kémiai elem minden izotópja esetén más és más, szokás szerint az elem neve után, vagy az elem vegyjelének bal felső sarkába tüntetjük fel.
- Például a szén-12 (^{12}C) 6 protont (ettől szén) és 6 neutronot tartalmaz.
- Az izotóp teljes jele tartalmazza a rendszámot (Z) is a bal alsó sarokban: , megjegyezzük azonban, hogy ennek megadása felesleges, mivel az elem vegyjele egyértelműen meghatározza a rendszámot, ezért ritkán használják.
- A tömegszám és a rendszám különbsége adja az adott mag neutronjainak számát (N): $N=A-Z$.

Az elemek egymástól különböznek, pl a tömegszámában, vagy az elektronok számában....



És minden proton....

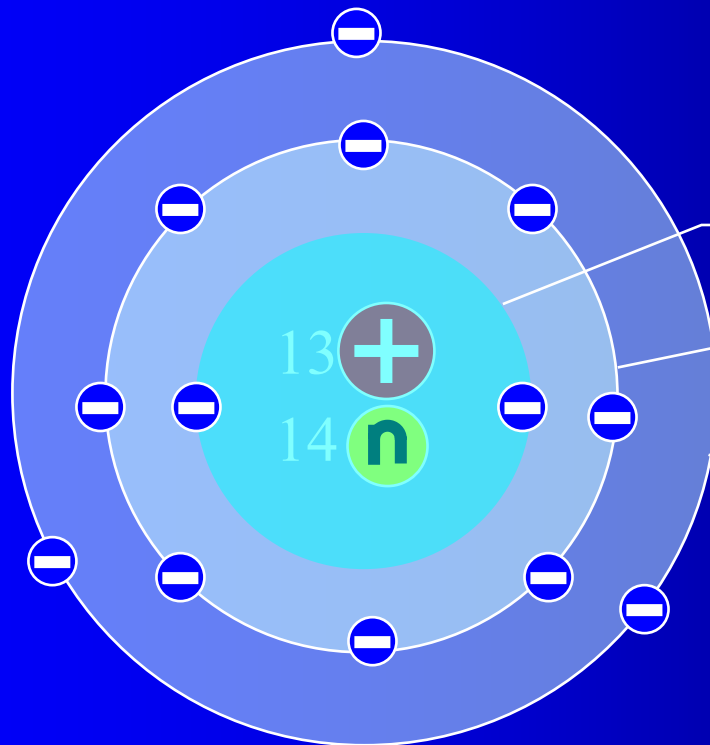


... Pontosan egy elektronnal...!

- Elektronok állandó (energiájú) körpályán mozognak
- A mozgásuk során nem adnak le energiát
- Az energiafelvétel és leadás kvantumokban történik (elektromágneses hullám...)

Építsük fel az Al modellt:

- $^{27}_{13}\text{Al}$..tartalmaz 27 Nukleont
- $^{27}_{13}\text{Al}$ 13 Proton, mindegyike egy - egy elektronnal van egyensúlyban
- 14 Nukleon egyben neutron is...



K-héj max. 2 e⁻

L- héj max. 8 e⁻

M-héj még 3 e⁻

Ez a vegyérték elektronhéj...

Nemesgáz konfiguráció? Igen...

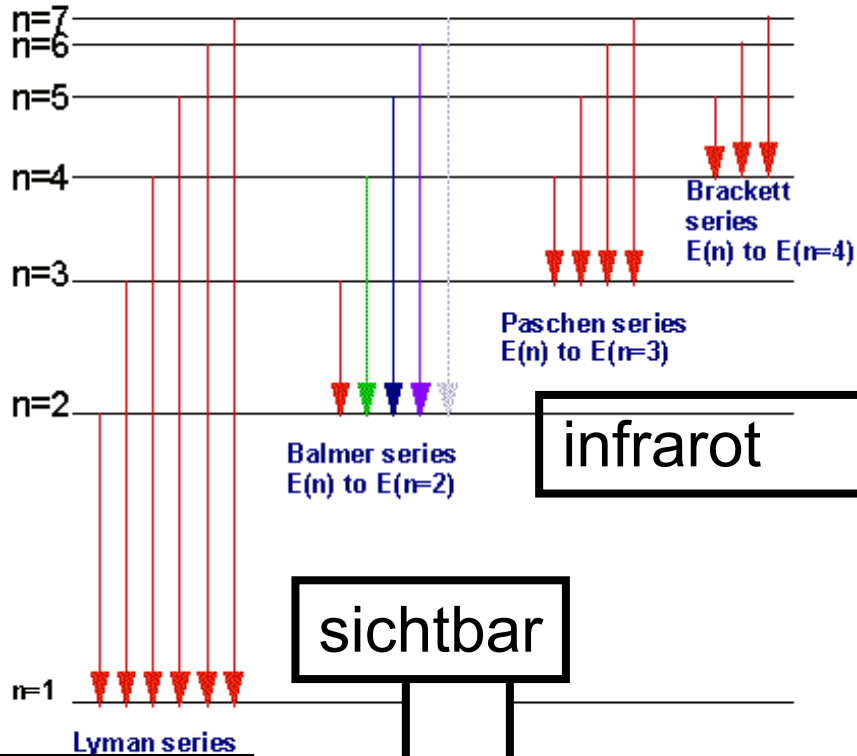
- Atomok akkor „boldogak”, ha a vegyértékelektronhéjukon nemesgáz konfiguráció van
- jelen esetben ez 8 elektron az M héjon
- Ezt elérendő, a felesleges elektronokat leadják, vagy felveszik
- ionokat képeznek ekkor, vagy
- közössé teszik molekulák ez a kovalens kötés



Gerjesztés

- Ha az anyagokat gerjesztünk világítani fognak, a kibocsátott fény meghatározott frekvenciájú és jellemző a kibocsátó elemre. A kibocsátott frekvenciák összessége a **színekép**, mely atomok esetében diszkrét hullámhosszú sugarakból épül fel, ezért **vonalas szerkezetű**. Az adott ν frekvenciájú fénysugarat alkotó részecskék (fotonok) mindegyike **$h \cdot \nu$** energiájú. (h Planck állandó)

Electron transitions for the Hydrogen atom



ultraviolett

sichtbar

infrarot

Lyman $n_1=1$
 Balmer $n_1=2$
 Paschen $n_1=3$



H δ
410 nm

H γ
434 nm

H β
486 nm

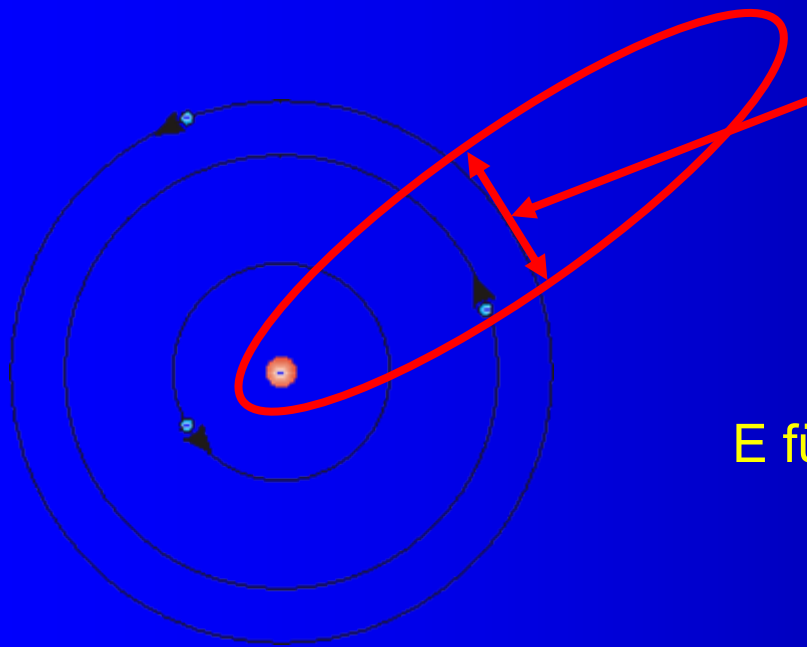
H α
656 nm

A hidrogén atom Bohr-féle modellje

1. Az elektron az atommag körül csak meghatározott sugarú körpályán keringhet.
2. Az adott pályán lévő elektronok energiája meghatározott, s ezeken a pályákon az elektron, sugárzás nélkül kering.
3. Az egyik atom pályáról a másikra történő átmenetnél, az elektron által kisugárzott, vagy elnyelt energia a két pálya közötti energia különbséggel egyenlő.

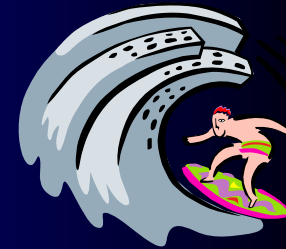
Sommerfelds korigálta a Bohr modellt

$$E_n = -\frac{Z^2 R_y h c}{n^2}$$



Eliptikus – gömb helyett
Mellékkvantumszám leírja a pályatorzulás

Relatív kevés mozgás a mag
közelében
E függ az ellipszis méretétől, formájától



Hullámmechanikai atommodell

- 1926 Erwin Schrödinger
 - egyenlete leírja az egyes elektronok mozgását az atomon belül
 - H atom OK
 - többi ~

Kvantumszámok

Atom minden elektronjához

4

Kvantumszám tartozik, melyek meghatározzák az elektron energiáját, térbeli orientációját és a többi elektronnal lehetséges kölcsönhatásait

Kvantummechanika

- elektron hullámtermészetű
- Schrödinger

$$\Delta_i \varphi_i + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{n^2} (\varepsilon_i - E_{pot}^i) \varphi_i = 0$$
$$\dots \Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

- lehetséges elektroneloszlások hullámfüggvényei
- lehetséges elektroneloszlások energiaértékei

A hullámfüggvénynek a tér minden pontjában meghatározott értéke van.

DE

atom vagy molekulapályák csak azok, ahol (felület) az elektronok max. valószínűséggel (90 %) tartózkodnak.

Schrödinger atommodell (1920): hullám - vagy kvantummechanikai modell

A mozgó elemi részecskékhez hullám rendelhető, hullámtermészetüket a **hullámfüggvény** írja le, melynek alakja egy **hullámot jellemző mennyiség (a)**

periodikus változására szinuszos:

$$a = \varphi(x, y, z) \sin 2\pi \nu t$$

ahol: $\varphi(x, y, z)$ az amplitudófüggvény
 ν a rezgés frekvenciája
 t az idő

Φ függvény fizikai jelentése: $|\varphi|^2$ arányos az elektron tartózkodási valószínűségével (vagy sűrűségével) egy x, y, z koordinátákkal megadott helyen

Az **elektronok állapotát tehát egy valószínűségeloszlással** adhatjuk meg,

Az energiaállapotuk azonban csak meghatározott lehet, melyet a tér 3 szabadsági foka szerint 3 egész számmal, az ún. **kvantumszámokkal** adhatunk meg.

Így olyan **valószínűségi eloszlásokat** kapunk a térben, melyeket méreteik és csomósíkjaik (ezeken a tartózkodási valószínűség nulla) jellemeznek.

A kvantummechanikai atommodell

1. Az atomban található elektron energiája meghatározott, **kvantált**.
2. A kvantált energia állapot az **elektron hullámtermészetének** következménye.
3. Az elektron térbeli helyzete és impulzusa tetszészerinti pontossággal nem adható meg. (**Heisenberg-féle határozatlansági elv**)
4. Az elektron legvalószínűbb térbeli tartózkodási helye adható meg az atommag környezetében. A különböző energiájú elektronok eltérő tartózkodási valószínűséggel jellemezhetők. Ezeket tekintjük az elektronok pályáinak, **atomorbitáloknak**.

Kvantumszámok

Egy atomban lévő összes elektron **négy kvantumszámmal** írható le, amelyek meghatározzák:

- az elektron energiáját,
- térbeli elhelyezkedését
- a többi elektronnal való kölcsönhatását.

1. Főkvantumszám (jele:n)

- Egy atomban lévő elektron energiáját elsősorban a főkvantumszám határozza meg.
- Melyik héjon tartózkodik az elektron. az azonos főkvantumszámú pályák héjakat alkotnak
- Minél kisebb az n értéke, annál közelebb helyezkedik el az elektron az atommaghoz és annál kisebb az energiája.
- Az n értéke pozitív egész szám.

jele	K	L	M	N
n	1	2	3	4

2. Mellékkvantumszám (jele: $l = n-1$):

- Az elektron impulzusmomentumát jellemzi.
- Kvantált értékeit a főkvantumszám határozza meg.
- Értékei $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
- Az alhéjakat betűkkel is szokás jelölni (s,p,d,f)
- A mellékkvantumszám megadja melyik alhéjon tartózkodik az elektron.

jele	s	p	d	f	...
l	0	1	2	3	...

Az atomban lévő elektronok energiaállapotát a fő- és mellékkvantumszám határozza meg. Pl. 2p atompálya esetén: $n = 2$ $l = 1$

3. Mágneses kvantumszám (jele: m_l):

- Az elektron impulzusmomentumának lehetséges térbeli irányítottságát határozza meg, egy önkényes térbeli koordináta rendszerhez viszonyítva.
- Nemcsak a külső mágneses erőter, de az elektronok mozgása által keltett erőter is orientálja az atomorbitálok töltéseloszlását.

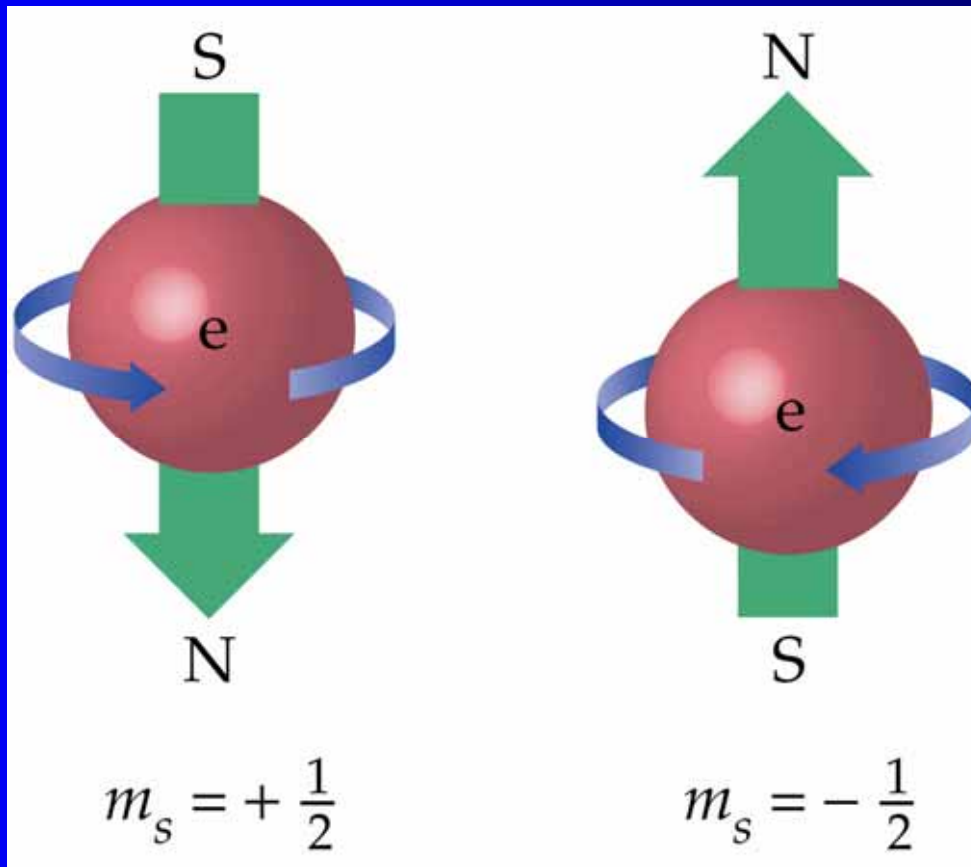
Értékei: $-l, \dots, 0, \dots, +l$ □

Pl. a p alhéjon:

jele	p_x	p_y	p_z
m_l	-1	0	+1

4. **Spinkvantumszám (jele: m_s):**

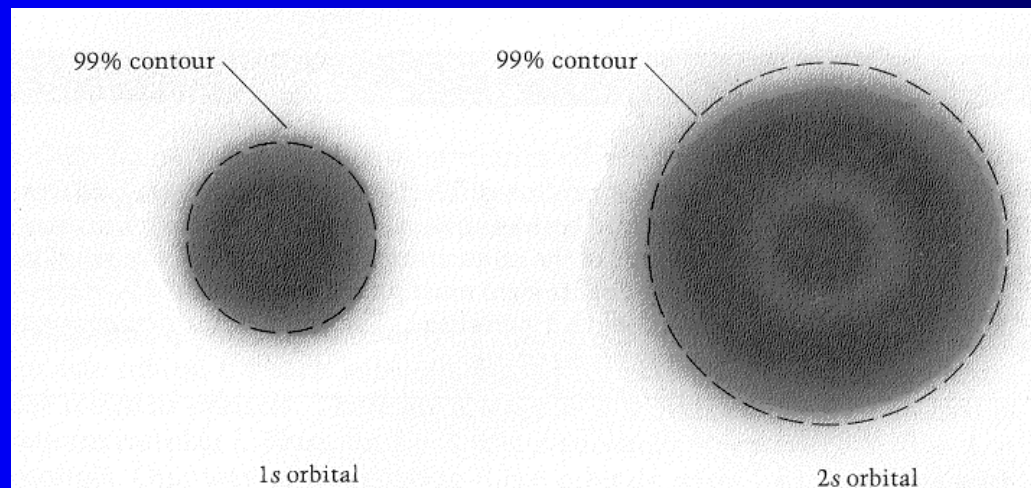
- Nem értelmezhető a hullámfüggvény alapján.
- Az elektron saját momentumát jelöli.
- Az elektron úgy forog a tengelye körül, akárcsak a Föld.
- A forgása közben mágneses erőteret indukál maga körül.
- Úgy viselkedik, mint egy kis mágnes, amely északi és déli pólussal rendelkezik.
- Lehetséges értékei $+1/2$ és $-1/2$.



- **Heisenberg- féle bizonytalansági elv**, a kvantummechanika egyik alaptörvénye : az
 - elektron impulzusa és tartózkodási helye egyidőben nem határozható meg abszolút pontossággal
- Az egyes E szintek a mellékkvantumszám szerint is felhasadnak, ami azt jelenti, hogy a második héj **s és p alhéjakra**, a harmadik már **s, p, és d alhéjakra** hasad, és ezek különböző E-jú szintek.

Atomorbitálok

1. Az **s atomorbitál**: az **s** elektron az **atomorbitált** burkolófelületen belül 99%-os valószínűséggel tartózkodik, amelynek alakja **gömb**.



2. A p-atomorbitál:

- A p-orbitálok csak a második héjtól kezdődnek
- Minden orbitál két "labdából" áll, amelyek az egyes tengelyekre szimmetrikusak. Pl. a p_x orbitál az x tengelyre szimmetrikus atompálya.
- mágneses kvantumszám három értéket vehet fel: -1, 0, +1.
- Ezért három különböző térbeli eloszlás figyelhető meg.

3. A d-orbitálok:

- Ötféle térbeli eloszlása egy gyűrűzött súlyzóra és négy keresztezett súlyzóra emlékeztetnek.
- A d-orbitálok a harmadik héjtól kezdődően töltődnek fel.
- Az átmeneti fémek tartoznak ide.

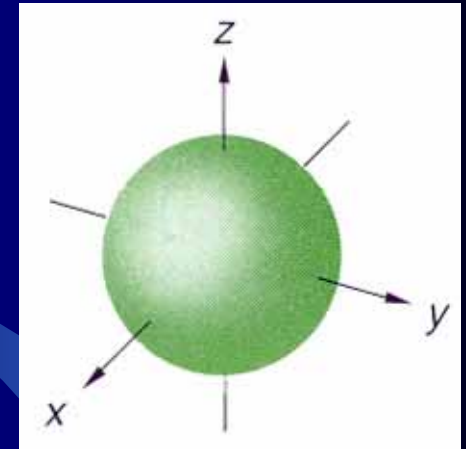
s és p pálya

s pálya

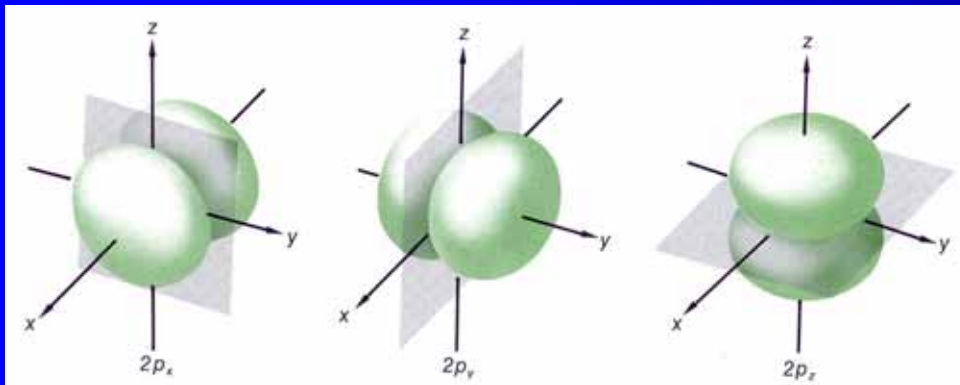
- gömbszimmetrikus
- elektron ebben a gömbben tart.
 $1s = 1,2 \text{ \AA}$ v.d.w. rádiusz
- értéke csak az atommagtól való távolságtól függ
- nem függ az iránytól

p pálya

- hengersizimmetrikus
- a hullámfüggvény értéke az iránytól is függ



- *Pauli elv*
- *Hund szabály*

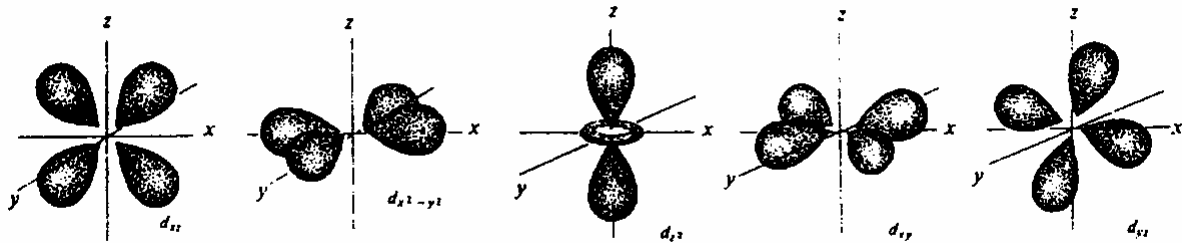
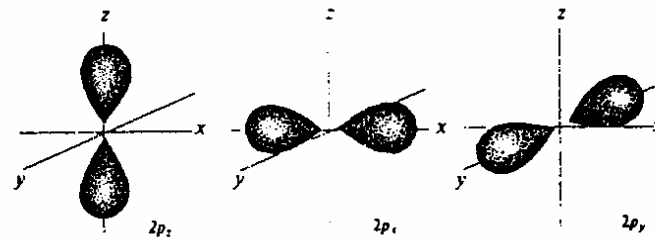
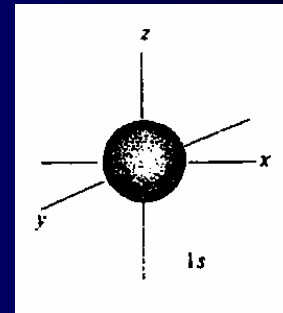


- $l = 0$ s - pálya
- $l = 1$ p - pálya
- $l = 2$ d - pálya 5 féle
- $l = 3$ f - pálya

Az atomok elektronhéjának felépítése

Atompályák alakja:

- s pályák gömbszimmetrikusak (maximum 2 elektron)
- p pályák egy csomósíkkal rendelkeznek (maximum 6 elektron)
- d pályák két csomósíkkal rendelkeznek (maximum 10 elektron)



Az elektronhéj elektronjainak megadása: $n s^x p^y \dots$
ahol x és y az azonos energiájú elektronok száma

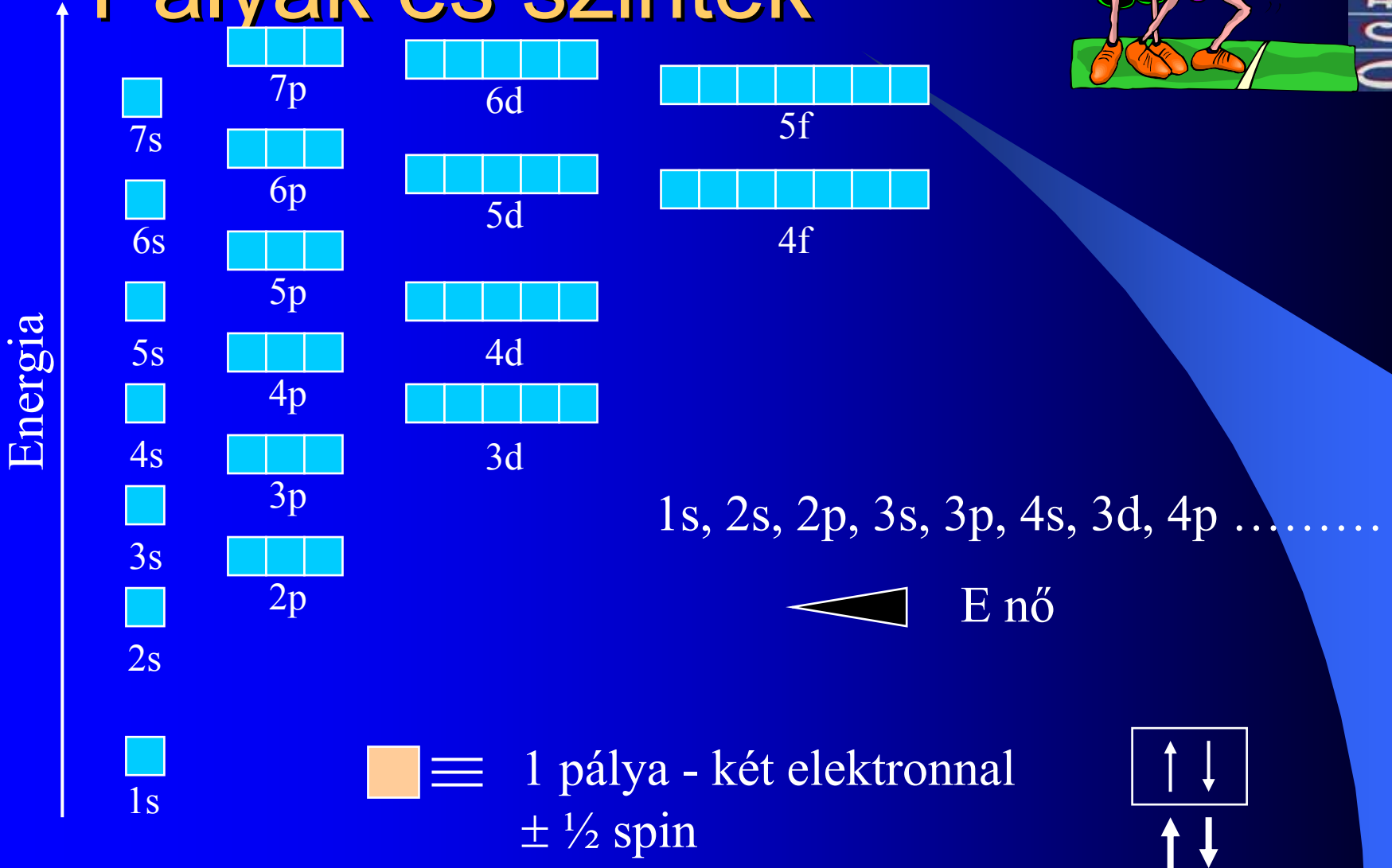
Az elektronhéjak felépülésének törvényei

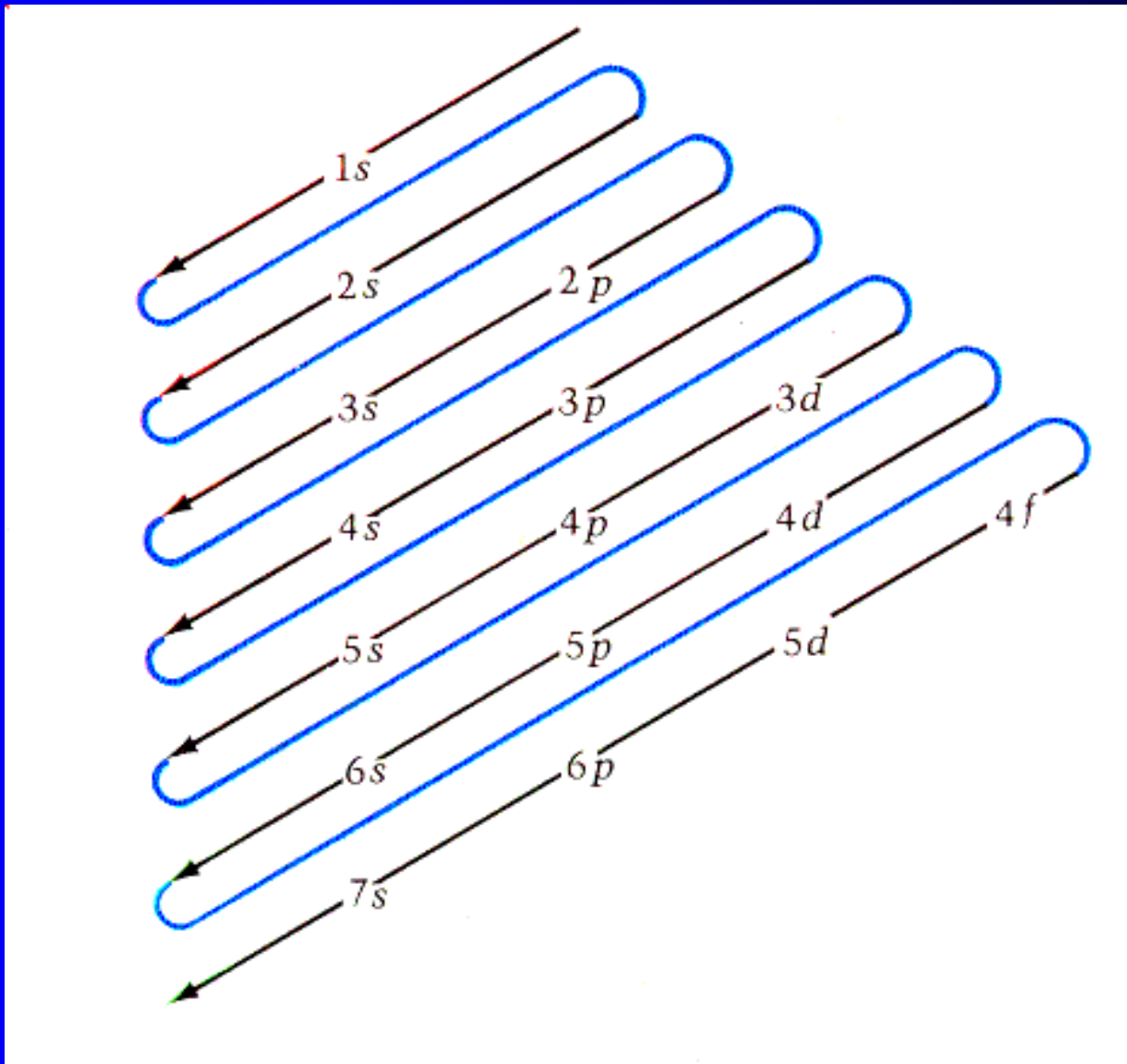
1. **Az energia minimumra törekvés elve:** Ha az elektronok a lehető legkisebb energiájú atompályán tartózkodnak, akkor az atom **alapállapotú**.
2. **Pauli elv:** Egy atomon belül nem lehet két olyan elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik.
3. **Hund-féle szabály (maximális multiplicitás elve)** : az elektronok az alhéjak orbitáljait egyenként azonos spinnel töltik be, s ha félig megtelt, akkor kezdenek kompenzált spinű elektronpárokat képezni.

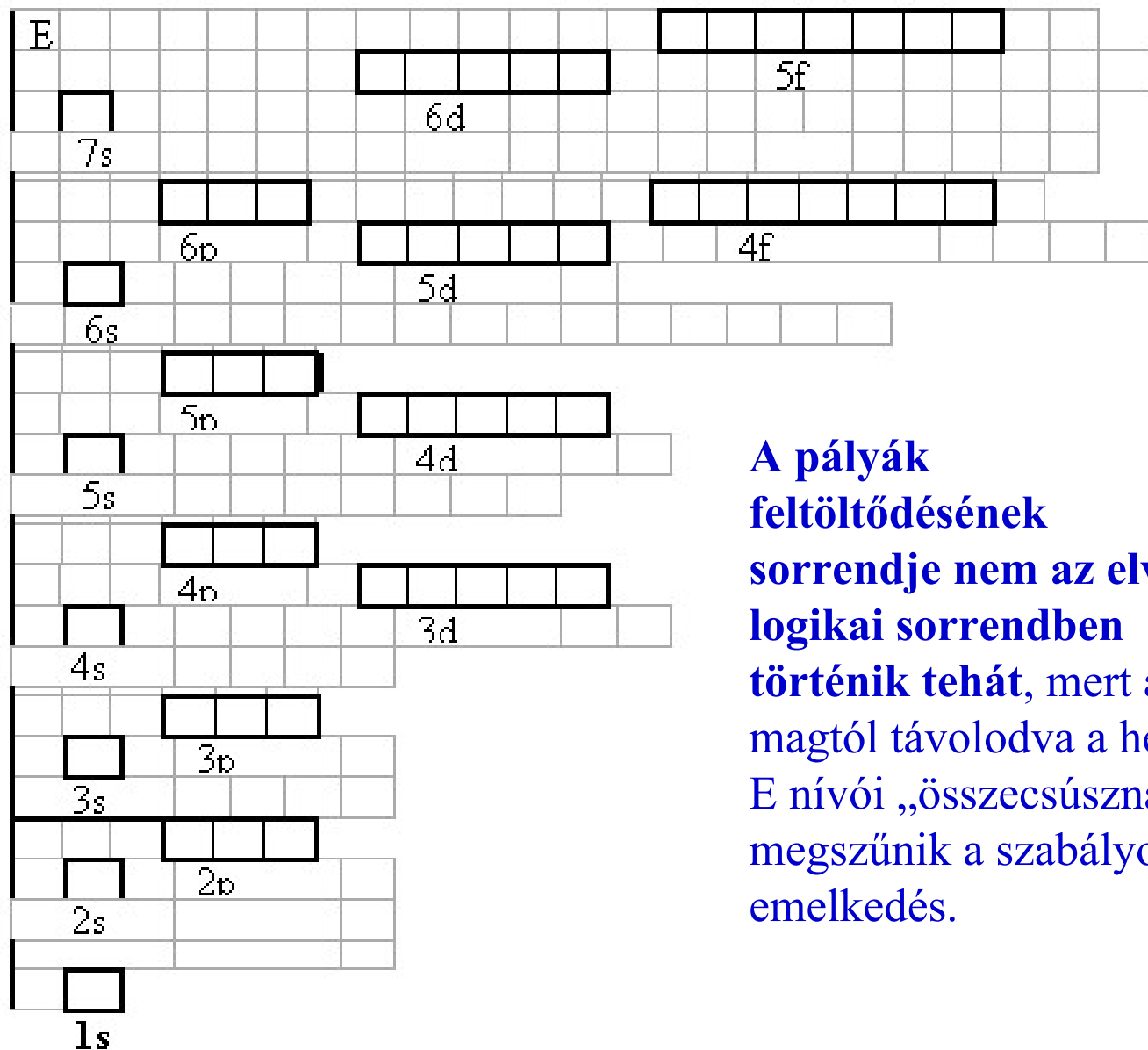
Atompályák feltöltődési sorrendje

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s,
4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d,
7p

Pályák és szintek







A pályák feltöltődésének sorrendje nem az elvárt logikai sorrendben történik tehát, mert a magtól távolodva a héjak E nívói „összecsúsznak”, megszűnik a szabályos emelkedés.

A különböző főkvantumszámú pályák energiasorrendje

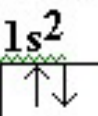
Elektronkonfiguráció : az elektronok cellás ábrázolása egy-egy elem esetén

Az atompályák elektronokkal való feltöltődésének szabályszerűségeinek segítségével írjuk fel néhány egyszerű elem **elektronkonfigurációját**:

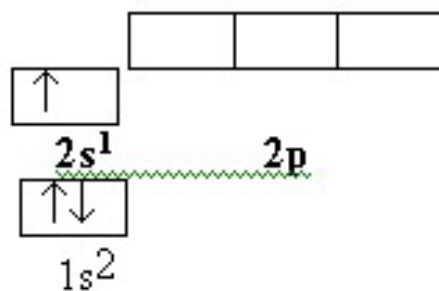
A hidrogén egyetlen pályáján 1 s elektron tartózkodik, tehát az elektronkonfigurációja **1s¹**



A hélium egyetlen pályáján **spin-kompenzációval** 2 s elektron van, az elektronkonfiguráció



A lítium első pályáján 2 s állapotú elektron található, a harmadik s elektron a második pályára lép be



K héj :

$n=1, l=0$, (s pálya, gömbszimmetrikus), $m=0$
(vagyis térben egyféle elhelyezkedése van)

L héj :

$n=2, l=1$ és 2 (a héj alhéjakra hasad, az s pálya mellett van tengélszimmetrikus p pálya is), $m=0$ az s pálya esetében, $m=-1, 0, +1$ a p pálya esetében (vagyis ez a térben háromféleképpen (p_x, p_y, p_z) helyezkedhet el, ezen **3 pálya energiaszintje azonos**, vagyis a p pálya **háromszorosán degenerált**).

M héj :

$n=3, l=0, 1, 2$, vagyis s, p, d alhéjakra hasad, d pálya esetén a $m = -2, -1, 0, +1, +2$, vagyis a d pályák már **ötszörösen degeneráltak**

Egy atomon belül lehetséges azonos főkvantumszámú elektronok maximális száma:

n	ℓ	mágneses kv. (m)	szint	spin kv.	elektronok száma
1 K	\emptyset	\emptyset	1 s	$+\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}$	2
2 L	\emptyset	\emptyset	2s	$+\frac{1}{2} -\frac{1}{2}$	2
	1	-1; \emptyset ; +1	2p	$\pm\frac{1}{2}$	6 8
3 M	\emptyset	\emptyset	3s	$\pm\frac{1}{2}$	2
	1	-1; \emptyset ; +1	3p	$\pm\frac{1}{2}$	6 18
	2	-2; -1; \emptyset ; +1; +2	3d	$\pm\frac{1}{2}$	10
4 N	\emptyset	\emptyset	4s	$\pm\frac{1}{2}$	2
	1	-1; \emptyset ; +1	4p		6
	2	-2; -1; \emptyset ; +1; +2	4d		10 32
	3	-3; -2; -1; \emptyset ; +1; +2; +3	4f		14
n	\emptyset $n-1$	$-l \mapsto +l$		$\pm\frac{1}{2}$	

Pauli elv –

Hund szabály –

Periodusos rendszer –

→ Elektronok száma

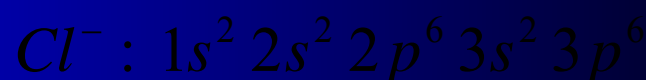
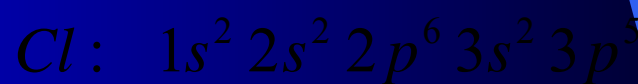
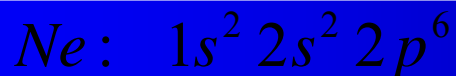
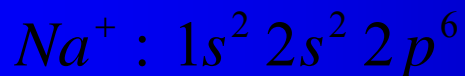
	I 1	II 2	III	IV	V	VI	VII	VII I
1	H							He
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar

n

Vegyérték
elektronhøj

s

p



- **Pauli elv** : 1 atompályán max két ellentétes spinű elektron lehet, mivel az atomban nem lehet két olyan elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik.
- **Hund szabály** (maximális multiplicitás elve): degenerált E állapotok esetén (egy alhéj kiépülése során) az elektronok először azonos spinnel épülnek be egyesével az atompályákra, majd az adott alhéjon lévő összes atompálya betöltése után indul meg a párképzés.

Pauli elv –

Hund szabály –

Periodusos rendszer –

→ Elektronok száma

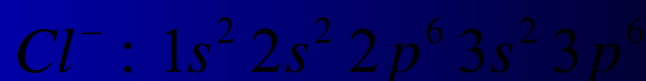
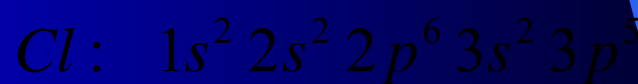
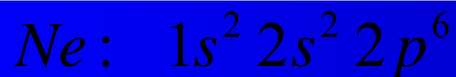
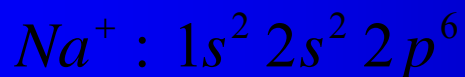
	I 1	II 2	III	IV	V	VI	VII	VII I
1	H							He
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar

n

Vegyérték
elektronhøj

s

p



Atomorbitál

s, p, d, f

Molekulaorbitál

- elektronok valószínűség eloszlása két v. több atommag terében
- ábrázolásuk: **burkoló felülettel**
(elektronok 90 %-a valószínűséggel itt)

Két atom molekulává egyesül

- az atomok energiaszintjei felhasadnak

Kötőpálya: kisebb

Lazítópálya: nagyobb

Az a pálya, melynek kisebb az E-ja mint a megfelelő
atompályáé – **kötőpálya**

Hückel szabály: 8 szép lenne...

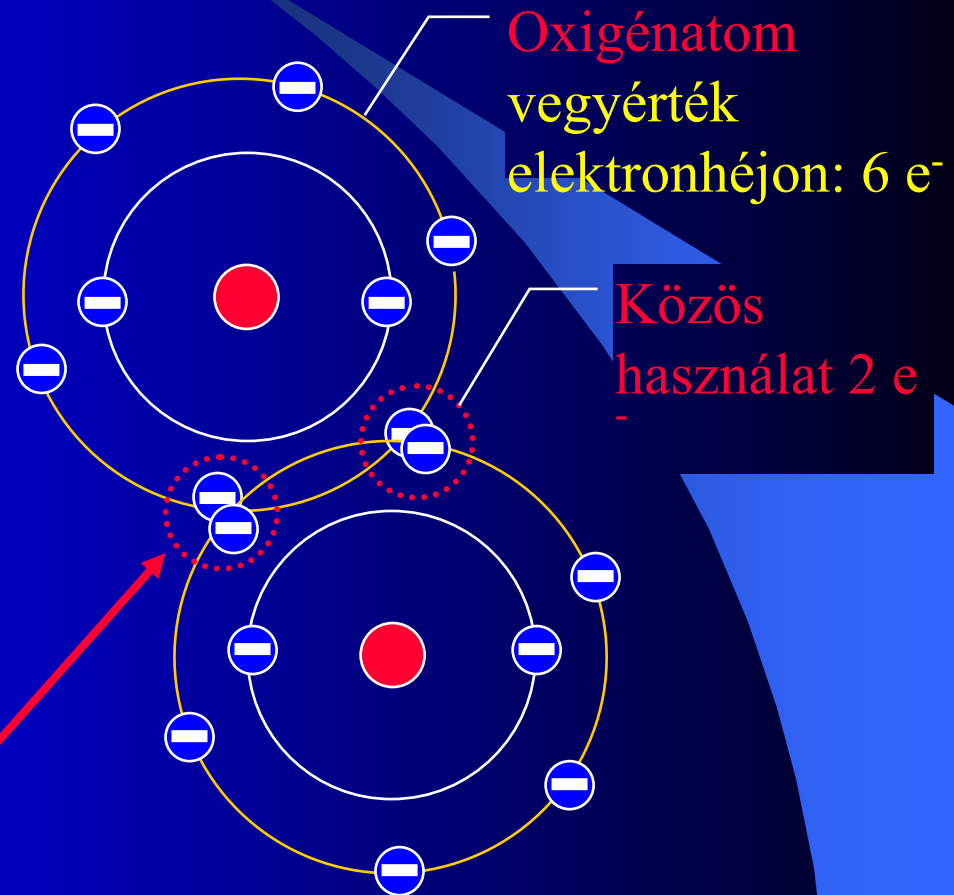
- **Az atomok az alábbi esetben érik el a nemesgáz konfigurációt:**

K-héj: 2 e⁻

L-héj: 8 e⁻

M-héj: 8 e⁻

- **Kovalens kötésnél ezt közös elektronokkal – kötésekkel érik el!**

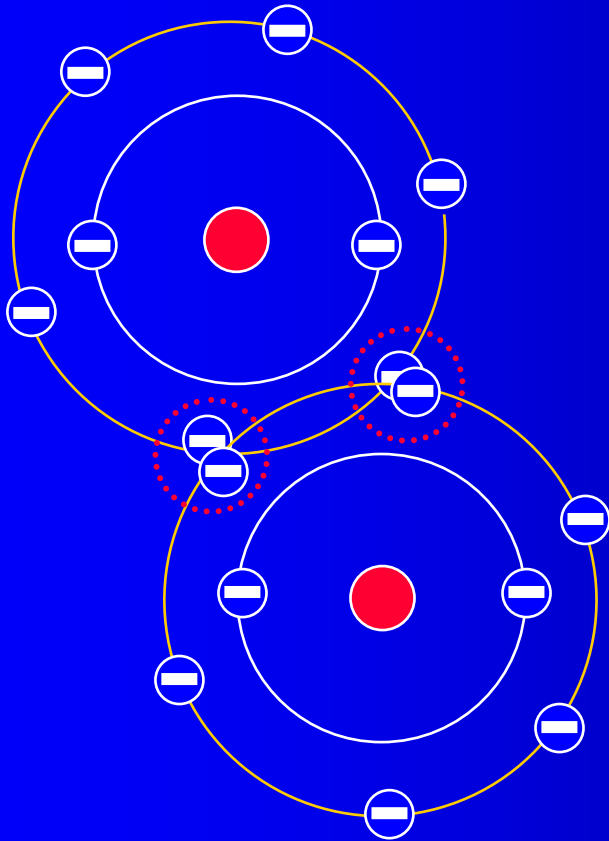


De ez már a következő előadások anyaga
tökre rosszul van...



**Köszönöm a
figyelmet 😊!**

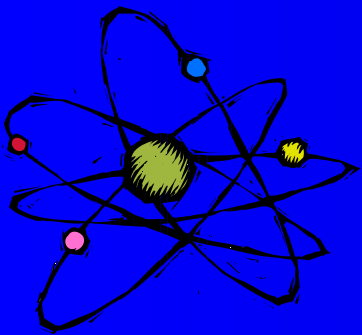
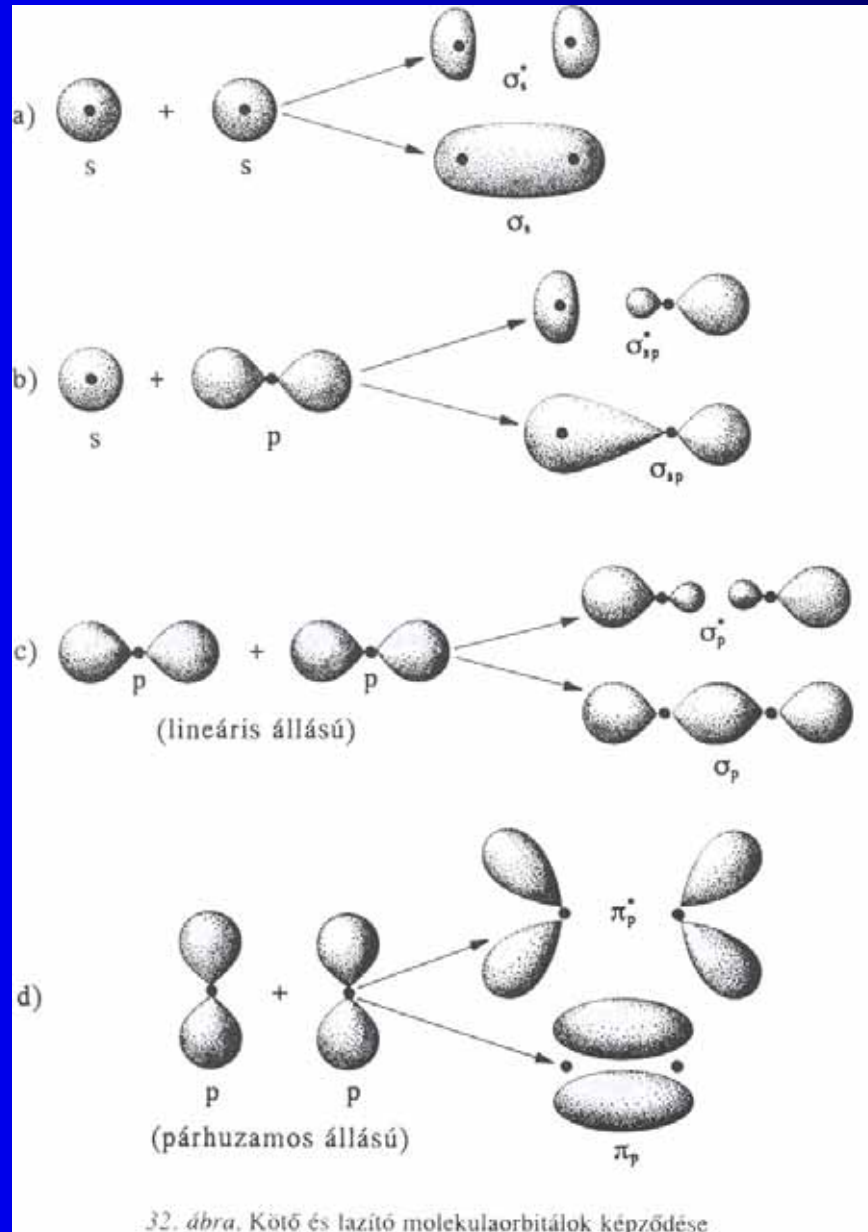
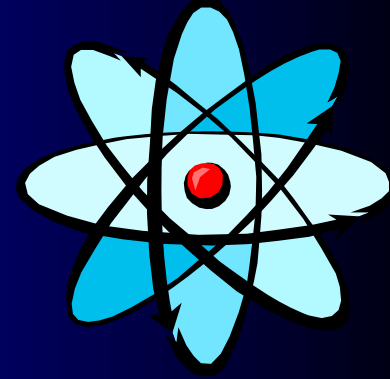
Atomtól a molekuláig...



- Két oxigén atom egy **oxigén** molekulát képez
- Mindkét atomnak így 8 elektrona van (2 e kölcsönben, de közösen...)
- A molekula a legkisebb egység, ahol kötésről beszélhetünk.

- A kémiai kötés kialakításában nem vesz részt az atomok összes elektronja, csak a külső vegyértékhéjon lévő elektronok. Ezeket hívjuk **vegyértékelektronoknak**.
-
- **Ionizációs energia** : azzal a munkával egyenlő, amely ahhoz szükséges, hogy az elektront az atomból kiszakítsuk és a végtelenbe távolítsuk. Ennek során pozitív töltésű kationt kapunk.
- Az atomban az elektronok az atommag erőterében tartózkodnak. Ez az erőter vonzza a szabad elektronokat, ugyanakkor a jelenlevő többi elektron taszítja őket. Sok atom esetén egy újabb elektronnak a maghoz való vonzási E -ja meghaladja a semleges atom elektronhéjának taszítási E -át.
- Ezek az atomok elektront tudnak megkötni, miközben stabilis negatív ion, anion képződik. Azt az energiát ami akkor szabadul fel, vagy tűnik el, amikor egy egyszeres negatív töltésű ionból semleges atom keletkezik, **elektronaffinitásnak** nevezzük.

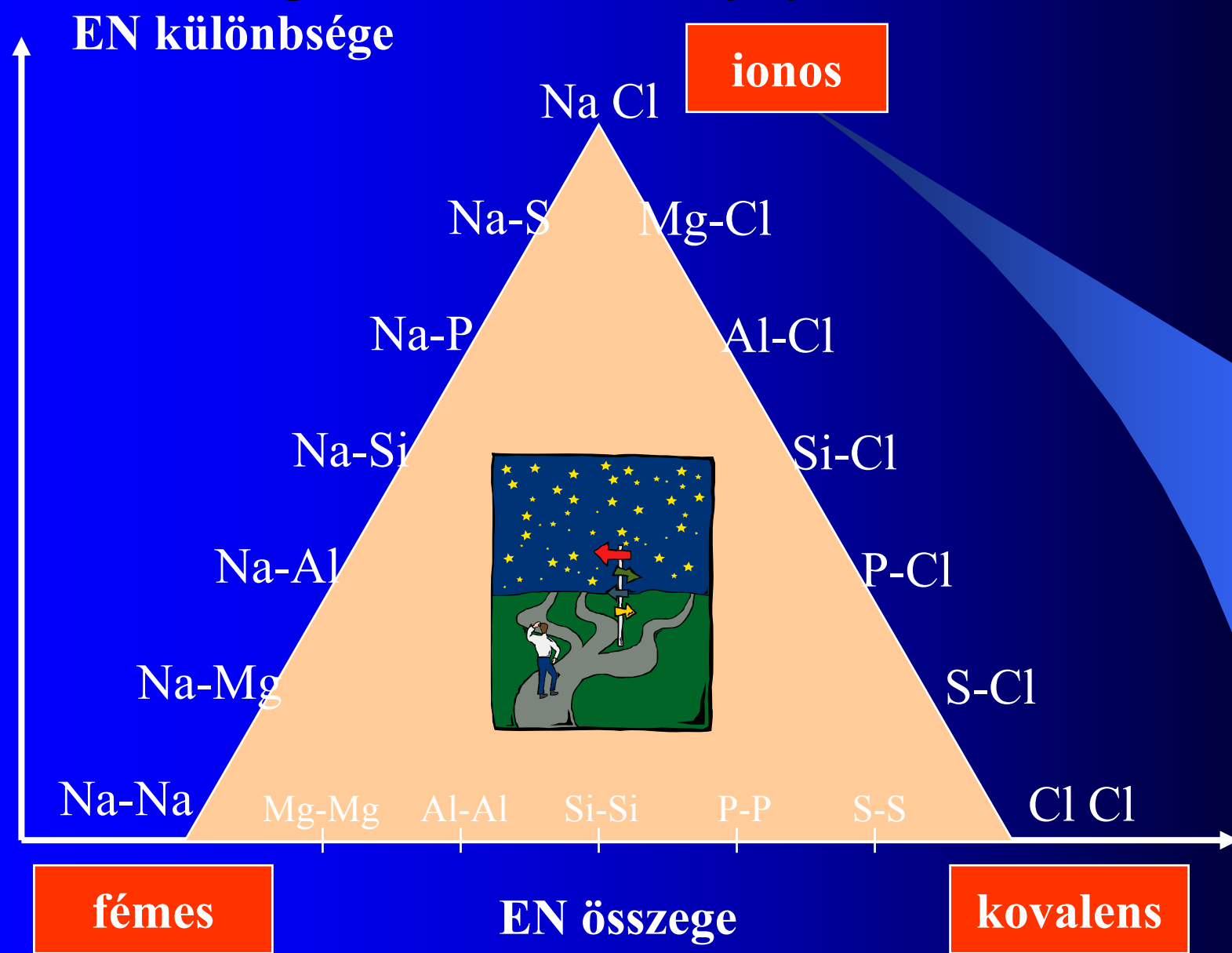
Atompályák kapcsolódása molekulapályákká



● Elektronegativitás (EN)

- Az a kémiai szerkezetben kötött atomnak egy olyan tulajdonsága, amely megmutatja, hogy az illető atom mennyire vonzza a másik atom kötésben levő elektronját.
- A legnagyobb elektronegativitási értékkel a fluor rendelkezik (EN=4.0).
- A legkisebb értékkel a francium (EN=0.7).
- Oszlopon belül az elektronegativitási értékek csökkennek.
- Periódusokban balról jobbra nőnek.
- A periódusok végét lezáró nemesgázok elektronegativitása nem értelmezhető.

Kötéstípus összefüggése az elektronegativitással (2)



Molekulák szerkezete



- szabad atomok: csak a nemesgázok
- Atomok akkor jutnak kisebb energiájú (stabilisabb) állapotba, ha **egymással kémiai kötésbe lépnek.**
- külső elektronhéj
↳ **nemesgáz-konfiguráció**
- **elektronegativitás**: az az erő, amellyel egy atom a kémiai kötésben a megfelelő pályához tartozó elektronokat vonzza



Kötőpálya

