

## 2. Az atomelmélet alapjai, a periódusos rendszer

A világ nagyon összetett, sok szinten lehet tanulmányozni (az emberi méretektől elindulva, kisebb részek felé haladva), rengeteg anyag van! Az anyagot felépítő elemi részecskék száma csak 3! Hogyan lesz ilyen változatos az anyag?

Az anyagok rendkívüli változatossága mindössze mintegy 100 különböző atomra vezethető vissza, azok néhány elemi részecskére.... Ennek megismerése igen hosszú folyamat volt.

RÉGEN nem tudtak ennyit az anyagról. Hogyan alakult ki a modern kémia?

Lavoisier (1743-1794): **tömegmegmaradás törvénye**

égéseket vizsgált, az égés után megmaradt anyag tömege megegyezett az azt megelőzővel

Proust (1754-1826): **állandó súlyviszonyok törvénye** (1799)

a réz-karbonát ugyanakkora tömegszázalék rezet tartalmazott függetlenül attól, hogy milyen természetes forrásból származott vagy állította elő

**Adott vegyületben, az bárhonnan származik is, bármilyen módon állították elő, az alkotóelemek súlyaránya szigorúan állandó, és jellemző az adott vegyületre.**

**Dalton atomelmélete** (1803-1808)

1. Minden kémiai elem kis, oszthatatlan részekből, ún. atomokból áll. Kémiai változások során atomok nem hozhatók létre és nem pusztíthatók el.
2. Egy elem atomjainak tömege (súlya) és más tulajdonságai megegyeznek, de a különböző elemek atomjainak tulajdonságai eltérnek.
3. A vegyületeket különböző elemek atomjai kis egész számok arányában alkotják.

1.-> tömegmegmaradás

2., 3. -> állandó súlyviszonyok törvénye

Dalton: **többszörös súlyviszonyok törvénye** (1805)

2., 3. -> ha két elem egynél több vegyületet képes, akkor vegyülő elemek tömegének arány kis egész szám (fólia)

Gay-Lussac: **vegyülő gázok térfogati törvényei** (1808)

gázreakciókban az egymással vegyülő és keletkező gázok térfogatai azonos nyomáson és hőmérsékleten úgy aránylanak egymáshoz, mint kis egész számok

### az Avogadro-tétel

azonos hőmérsékletű és nyomású gázok egyenlő térfogataiban azonos a molekulák száma

következmények:

- molekulák egymáshoz viszonyított tömegei (mai szóval a relatív molekulatömegek) meghatározhatók. Oxigén legyen 32,00 egység, a többi ebből származik.
- gázok moláris térfogata azonos hőmérsékleten és nyomáson egyenlő
- relatív atomtömegek meghatározása (fólia)

### A periódusos rendszer létrejötte, Mengyelejev jelentősége

A XIX. század elején még nem ismerték az elemi részecskéket, de az egyes elemek hasonlóságát már látták:

Johann Wolfgang Döbereiner (1828) triádok: hasonló elemekből álló hármasok, amelyben az egyik elem atomtömege a másik kettőének kb. a számtani közepe

elem	atomtömeg / (g/mol)	elem	atomtömeg / (g/mol)
klór	35,45	kalcium	40,08
bróm	79,90	stroncium	87,62
jód	126,90	bárium	137,33

1829–1858 számos tudós dolgozott a területen (Jean Baptiste Dumas, Leopold Gmelin, Ernst Lenssen, Max von Pettenkofer, J.P. Cooke) és azt találták, hogy a fentiekben túlmutató összefüggések vannak az egyes elemek tulajdonságai között. A fluort hozzáítették a halogének csoportjához, az oxigént, ként, szelént és tellúrt, illetve a nitrogént, foszfort, arzént, antimont és bizmutot egy-egy csoportba sorolták.

John Newlands angol kémikus 1865-ben észrevette, hogy ha az elemeket növekvő atomtömeg szerint sorrendbe állítja, minden nyolcadik hasonló fizikai és kémiai sajátosságokat mutat, amit a zenei oktávokhoz hasonlított. Bár sok elem esetén jól működött, több probléma is volt vele:

-A kalciumnál nagyobb atomtömegű elemekre nem volt igaz

- Miután több elemet (például a héliumot, neont, argont) felfedeztek, az új elemek nem fértek bele a táblázatba

Lothar Meyer (német), Dmitrij Mengyelejev (orosz) kémikusok kb. ugyanabban az időben (1868-69 körül) egymástól függetlenül hasonló eredményre jutottak. Az elemeket táblázatba helyezték növekvő atomtömegük szerint.

Mengyelejev néhány elemet (17-et az akkor ismert 63-ból!) a sorrendtől eltérően helyezett el, hogy a tulajdonságaik jobban igazodjanak a szomszédjaikéhoz (az atomtömegek pontossága még nem érte el a mai szintet, ezért ezek egy részét mérési hibának gondolta, s ezzel párhuzamosan kijavította néhány elem atomtömegét), de ezek után sem volt a tulajdonságok szerint tökéletes a táblázat. Ekkor **üres helyeket hagyott benne** és megjósolta az ezekre a helyekre kerülő elemek tulajdonságait, atomtömegét. (fólia M. eredeti közleményében szereplő táblázatról)

	Cu	Zn	eka-Al	eka-Si	As	Se	Br
<i>M</i> (g/mol)	63	65	68	72	79	78	80

Mengyelejev eka-Al elemét 1875-ben felfedezték és a gallium nevet kapta. A Ga a Mengyelejev által megjósolt tulajdonságokat mutatta, ami a rendszer helyességét megerősítette:

	eka-Al	Ga
relatív atomtömeg	68	69,9
oxid összetétele	Ea <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
olvadáspont	alacsony	30,1 °C
forráspont	magas	1983 °C
sűrűség	5,9 g/cm <sup>3</sup>	5,91 g/cm <sup>3</sup>

Végül Henry G. Moseley rendezte az elemeket rendszám szerint sorba 1914-ben.

### A periódusos rendszer ismertetése

A mai legelterjedtebb periódusos rendszer az ún. hosszú periódusos rendszer (fóliák)

sok változata van, különböző dolgokat tüntetnek fel bennük  
mindig tartalmaz: sorszámokat (a rendszám) és vegyjel

a sorok: periódusok

7 van belőlük

az oszlopok

18 van belőlük

nem minden oszlopban van elem az első 3 periódusban

hasonló tulajdonságú elemek egy oszlopban

hagyományos számozás: római számokkal I, II, III, illetve A és B jelöléssel

modern számozás: arab számokkal 1-18

lantanoidák, aktinoidák külön, nagyon hasonló kémiai és fizikai tulajdonságok

Miért ilyen a periódusos rendszer? válasz: a többelektronos atomok elektronszerkezete, lást később.

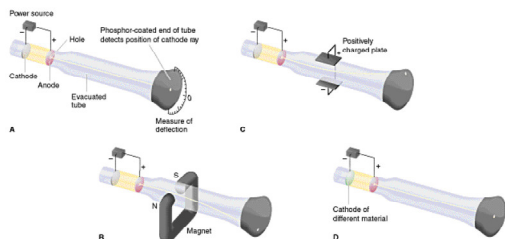
### Az elektron

1897. Joseph J. Thompson (fizikai Nobel díj.)

Az üveggel érintkező katódsugár zöldes lumineszcenciát eredményez

Az útvonal elektród anyagtól és töltő gáztól független,  $m_e/e = 5,686 \cdot 10^{-12}$  kg/C

1909. Millikan:  $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$  C  $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}$  kg



## Az atommag

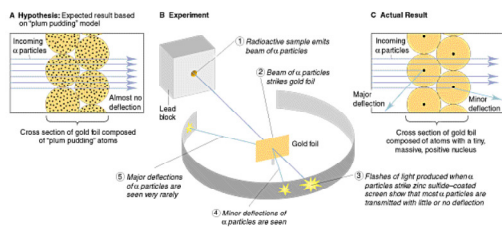
1911. Ernst Rutherford

1 $\mu$ m vastagságú aranyfólia

előzetes elképzelés: a pudding-modell

a legtöbb részecske akadálytalanul áthaladt, de néhány visszapattant!

(~1/8000 visszaverődik, szóródik).



<http://www.chem.ufl.edu/~chm2040/index.html>

A számítások szerint az atom belsejében, egy  $10^{-14}$  m sugarú gömbben van az atom tömegének jelentős része, ezt atommagnak nevezte el.

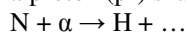
Így született meg a **Rutherford-féle atommodell**: atommag, körülötte az elektronok tetszőleges pályán keringenek, Coulomb-kh. („bolygómodell”)

Ha az atommag 1cm, akkor az atom 100m!

Rutherford megállapította, hogy az atommagnak annyiszor  $1,6 \cdot 10^{-19}$  C töltése van, amennyi az atom sorszámának (Z) a periódusos rendszerben! Az elektroneutralitás miatt ennyi elektron is van az atomban.

Problémák a Rutherford modellel: a mag körül keringő elektronok folyamatosan gyorsulnak, így energiát kellene sugározniuk, így az atom nem létezne tartósan. Az atomok színepei nem magyarázhatók vele meg.

1919. Rutherford igazolta, hogy a hidrogén atommagja megtalálható más elemek magjában, univerzális építőelem. Ezt nevezhetjük a proton ( $p^+$ ) születésnapjának.



1931-ben Walther Bothe és Herbert Becker Németországban azt találta, hogy ha nagyenergiájú polóniumból kisugárzott alfa-részecskéket könnyű elemere (berlítiumra, bórra, lítiumra) vezetnek, akkor szokatlanul nagy áthatóképességű sugárzás keletkezik. Eleinte gamma sugárzásnak vélték, de a további kísérletek ezt nem támasztották alá. Végül 1932-ben James Chadwick bizonyította be, hogy ez egy semleges részecskéből álló sugár, amelyet neutronnak neveztek el.

## Az atomokat felépítő elemi részecskék

Az atomokat protonok, neutronok és elektronok építik fel, ezeket nevezzük elemi részecskéknek.

Elemi részecskék	tömeg	relatív tömeg	töltés	relatív töltés
$e^-$	$9,10953 \cdot 10^{-31}$ kg	1/1836	$-1,60219 \cdot 10^{-19}$ C	-1
$p^+$	$1,67265 \cdot 10^{-27}$ kg	1,000	$+1,60219 \cdot 10^{-19}$ C	+1
n	$1,67495 \cdot 10^{-27}$ kg	1,001	0	0

Összefoglalva: az atomok proton(ok)ból, elektron(ok)ból és általában neutronokból felépülő semleges részecskék, amelyek kémiai úton tovább nem bonthatók.

**rendsám:** az atommagban lévő protonok száma (jele Z)

**tömegszám:** az atommagban lévő protonok és neutronok számának összege (jele A) (az elektronok tömege elhanyagolhatóan kicsi)

a rendszámon múlik, hogy melyik elemről van szó

**elem:** azonos rendszámú atomokból épül fel

jelölése

**vegyjel:** olyan egy vagy kétbetűs jel, amely egy adott atomot illetve az elemet jelöli (latin nevek kezdőbetűi, Jöns Jakob Berzelius)

pl: O, C, Ca

nem mindegy a neutronok száma, ezek stabilizálják az atommagot

ugyanahhoz a rendszámhoz (protonszámhoz) különböző neutronszám tartozhat, ezek az **izotópok** (Z azonos, A különböző)

**nuklid:** egy elem adott neutronszámú atomja

nuklid jelölése:  ${}^A_Z\text{vegyjel}$  vagy  ${}^A\text{vegyjel}$  (a Z-t gyakran elhagyják, mert a vegyjel a nélkül is egyértelmű) vagy név-A

pl.  ${}^{12}_6\text{C}$ ,  ${}^{12}\text{C}$ , szén-12

egyetlen atom tömege igen kicsi (pl. egy szénatom  $1,99 \cdot 10^{-23}$ g), ezért inkább a relatív atomtömeget érdemes használni

mi legyen az egység? legyen a hidrogén atom!

Nem rossz, de rájöttek, hogy más atomokban a magot összetartó erők olyan nagyok, hogy jelentős tömegcsökkenést okoznak, ezért érdemes inkább olyan atomot választani, amiben már hatnak magerők:

**Relatív atomtömeg:** Külön megjelölés nélkül, a természetes izotóp-összetételű elem egy atomja átlagos tömegének viszonya a  ${}^{12}\text{C}$ -nuklid tömegének 1/12 részéhez.

Jól használható, mert az izotópok előfordulási aránya általában csak kicsit változik.

példa: a klór

${}^{35}\text{Cl}$  75,77%

${}^{37}\text{Cl}$  24,23%

$$0.7577 * 35 \text{ amu} + 0.2423 * 37 \text{ amu} = 35.49 \text{ amu}$$

A természetes előfordulási arány miatt nem pontosan 12 a szén relatív atomtömege

Szén-12: 98.89 % gyakoriság, 12 amu

Szén-13: 1.11 % gyakoriság, 13.0034 amu

tömeg = (12 amu)(0.9889) + (13.0034 amu)(0.0111)

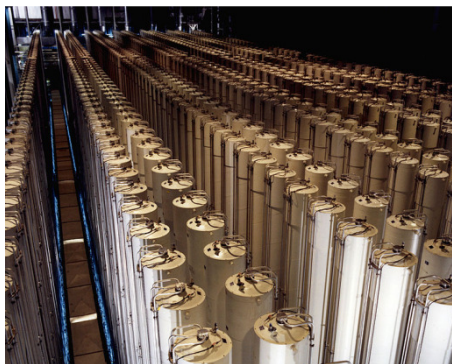
= 11.87 amu + 0.144 amu = 12.01 amu

vannak olyan elemek, amelyeknek csak egy stabil izotópja van (pl. fluór), de pl. az ónnak 10!

az izotópok kémiaiailag hasonlóan viselkednek, de bizonyos tulajdonságaik eltérnek (például az  ${}^{235}\text{U}$  és  ${}^{238}\text{U}$ )

Az urán természetes izotópjai:  ${}^{238}\text{U}$  (99.28%),  ${}^{235}\text{U}$  (0.71%),  ${}^{234}\text{U}$  (0.0054%).

Az uránizotópok ipari méretű elválasztása gázcentrifugával történik. Urán-hexafluoridot ( $\text{UF}_6$ ) választanak szét centrifugálással a moláris tömeg különbséget (mindössze 0,9%-os különbség!) felhasználva (a nehezebb  ${}^{238}\text{U}$  izotópot tartalmazó molekulák kicsit lassabbak, mint a könnyebb izotópot tartalmazók). A hatékony elválasztáshoz nagysebességű centrifugákból álló centrifuga-sorozatot alkalmaznak.



Gázcentrifuga-sorozat urán dúsításhoz

## a radioaktivitás

Becquerel fedezte fel (1896): az uránszurokérc nevű ásvány közelébe helyezett, de fényvédő papírba csomagolt fotolemezek megfeketedtek, mintha fény érte volna őket

az uránszurokérc magától röntgensugárzó! Marie Sklodovska, Pierre Curie különböző uránásványokat vizsgáltak, és némelyik urántartalmánál sokkal jobban sugárzott. 10 tonna uránszurokérc feldolgozása után néhány mg olyan anyagot állítottak elő, ami az uránnál egymilliószor erősebben sugároz. Ez lett a rádium. Később még erősebben sugárzó anyagot állítottak elő, ez lett a polónium. Később korábban ismert elemekről is kiderült, hogy radioaktívak (pl. tórium, aktínium)

az egyes izotópok nem egyforma stabilak, idővel elbomlanak

a bomlás sebességének jellemzése: a **felezési idő**: az az idő ami alatt az atomok fele elbomlik

statisztikus folyamat, valószínűségek, nem tudjuk egy adott atomról előre megmondani, hogy mikor bomlik el

stabil izotópok: a föld korával összemérhető felezési idő

természetben nagyobb mennyiségben megtalálható radioaktív izotópok: nagyon hosszú felezési idők

a sugárzást vizsgálva

- nem tudták annak intenzitását befolyásolni (hőmérséklet emelése, kémiai reakciók)
- elektromágneses térben három részre bomlott (ábra)

A negatív lemez felé eltérülő részt  $\alpha$ , pozitív lemez felé eltérülőt  $\beta$ , az el nem térülőt  $\gamma$  sugárzásnak nevezték.

A radioaktív bomlás során egy kémiai elemből (anyaelemből) egy új elem (leányelem) jön létre. Előfordulhat, hogy ez utóbbi is radioaktív, így újabb bomlás történik. Ez a folyamat addig tart, amíg egy stabil elemhez nem érünk. Ezt nevezik **bomlási sornak**.

A radioaktív bomlás során a tömegszám vagy négyvel csökken (az alfa-bomlás esetében), vagy nem változik (a béta-bomlás és gamma-bomlás esetében). Ezért négy bomlási sor létezik attól függően, hogy a tömegszám négyes osztású maradéka 0, 1, 2 vagy 3. Ebből a négy bomlási sorból csak az a 3 maradt meg, amelyeknél a leghosszabb felezési idejű izotóp felezési ideje nagyságrendileg összemérhető a Föld életkorával ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$  és a  $^{232}\text{Th}$ ). A negyedik (neptúnium) anyaelemének bomlási ideje kétmillió év, így ez ma már csak mesterséges eredetből található meg a Földön.

$^{238}\text{U}$ -család, (zárójelben a felezési idők):

$^{238}\text{U}$  ( $4,468 \cdot 10^9$  év),  $^{234}\text{Th}$  (24,1 nap),  $^{234}\text{Pa}$  (6,70 óra),  $^{234}\text{U}$  (245 500 év),  $^{230}\text{Th}$  (75 380 év),  $^{226}\text{Ra}$  (1602 év),  $^{222}\text{Rn}$  (3,8235 nap),  $^{218}\text{Po}$  (3,10 perc),  $^{214}\text{Pb}$  (26,8 perc) és  $^{218}\text{At}$  (1,5 s),  $^{214}\text{Bi}$  (19,9 perc) illetve  $^{218}\text{Rn}$  (35 ms),  $^{214}\text{Po}$  (164,3  $\mu\text{s}$ ) és  $^{210}\text{Tl}$  (1,30 perc),  $^{210}\text{Pb}$  (22,3 év),  $^{210}\text{Bi}$  (5,013 nap),  $^{210}\text{Po}$  (138,376 nap) és  $^{206}\text{Tl}$  (4,199 perc),  $^{206}\text{Pb}$  (stabil).

$^{235}\text{U}$ -család, (zárójelben a felezési idők):

$^{235}\text{U}$  ( $7,04 \cdot 10^8$  év),  $^{231}\text{Th}$  (25,52 óra),  $^{231}\text{Pa}$  (32 760 év),  $^{227}\text{Ac}$  (21,772 év),  $^{227}\text{Th}$  (18,68 nap),  $^{223}\text{Fr}$  (22,00 perc),  $^{223}\text{Ra}$  (11,43 nap),  $^{219}\text{Rn}$  (3,96 s),  $^{215}\text{Po}$  (1,781 ms),  $^{211}\text{Pb}$  (36,1 perc) és  $^{215}\text{At}$  (0,1 ms),  $^{211}\text{Bi}$  (2,14 perc),  $^{207}\text{Tl}$  (4,77 perc) és  $^{211}\text{Po}$  (516 ms),  $^{207}\text{Pb}$  (stabil)

<sup>232</sup>Th-család, (zárójelben a felezési idők):

<sup>232</sup>Th (1,405·10<sup>10</sup> év), <sup>228</sup>Ra (5,75 év), <sup>228</sup>Ac (6,25 óra), <sup>228</sup>Th (1,9116 év), <sup>224</sup>Ra (3,6319 nap), <sup>220</sup>Rn (55,6 s), <sup>216</sup>Po (0,145 s), <sup>212</sup>Pb (10,64 óra), <sup>212</sup>Bi (60,55 perc), <sup>212</sup>Po (299 ns) és <sup>208</sup>Tl (3,053 perc), <sup>208</sup>Pb (stabil)

<sup>237</sup>Np-család, (zárójelben a felezési idők):

<sup>237</sup>Np (2,14·10<sup>6</sup> év), <sup>233</sup>U (1,592·10<sup>5</sup> év), <sup>229</sup>Th (7,34·10<sup>4</sup> év), <sup>225</sup>Ra (14,9 nap), <sup>225</sup>Ac (10,0 nap), <sup>221</sup>Fr (4,8 perc), <sup>217</sup>At (32 ms), <sup>213</sup>Bi (46,5 perc), <sup>209</sup>Tl (2,2 perc), <sup>209</sup>Pb (3,25 óra), <sup>209</sup>Bi (1,9·10<sup>19</sup> év), <sup>205</sup>Tl (stabil)

### az izotópok felhasználása

maghasadás: atomreaktor, atombomba (kitérő a magot alkotó nukleonok közötti kötés erősségére, fúzió-hasadás, valamint Csernobil)

radioaktív nyomjelzés: tápanyag útja a szervezetben

- anyagcsere-folyamatok
- gyógyszerek hatása
- műtrágyák felhasználása
- kémiai reakciók mechanizmusa
- egyensúlyi folyamatok
- felszín alatti vizek követése

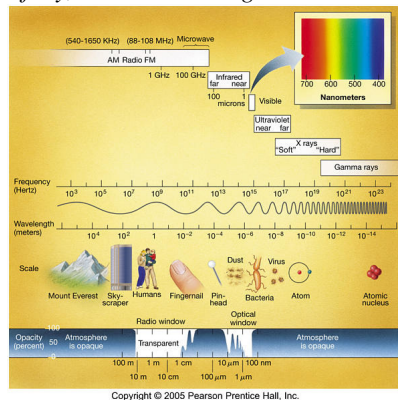
sugárforrás: kóros sejtek elpusztítása  
fertőtlenítés  
anyagszerkezeti, rejtett hibák felderítése

Térjünk vissza egy kicsit és nézzük meg kicsit az atomi színeképeket!  
Ehhez át kell ismételnünk néhány fogalmat:

### a fény tulajdonságai

- kettős természete: részecske – hullám
- nem ez vagy az, mindkettő, csak a vizsgálattól függően másként mutatkozik
- a fény, mint hullám: elhajlás, polarizáció, interferencia
- a fény, mint részecske: fotoelektromos effektus, fotonok szóródása

### a fény, mint elektromágneses hullám



$c = \lambda * \nu$  sebesség, frekvencia, hullámhossz, hullámszám  
 $c$  a fény sebessége, vákuumban,  $c_0 = 2,99792458 \cdot 10^8$  m/s  
 $\lambda$  a fény hullámhossza  
 $\nu$  a fény frekvenciája

### az anyagok színe

- különböző hullámhosszúságú fényt különböző mértékben nyelnek el az anyagok.
- egyszerű színek – összetett színek
- anyagszerkezeti okok

a fény kölcsönhatása az anyaggal

**abszorpció:** az a folyamat, amely során a fény **elnyelődik** az anyagban

**emisszió:** az a folyamat, amely során az anyag fényt **sugároz ki**

a fény energiája és a lehetséges kölcsönhatás helye/típusa (táblázat)

a látható spektrum

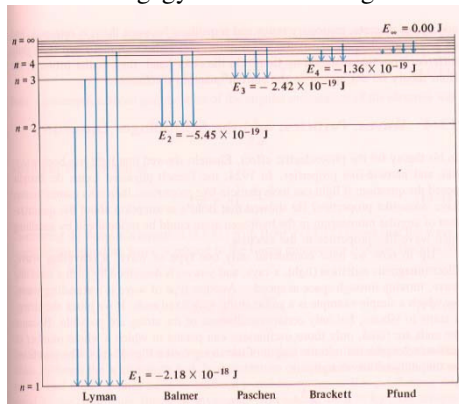
nap fényének bontása prizmával: színek

mint a szivárvány, minden szín meg van benne

kísérlet: fénybontás cd-vel

mesterségesen előállított fény bontása: nincs meg minden szín, vonalak jelennek meg!  
(fóliák)

a legegyszerűbb: a hidrogénatom színe (fólia)



A hidrogén gázt melegítve vonalas spektrumot kapunk. A látható tartományban a Balmer-féle sorozat esik.

empirikus összefüggés a színekvonalak hullámhosszára: Balmer (1885): képlet

Általános, minden ismert sorozatra érvényes összefüggés:

**Rydberg:**  $1/\lambda = R \cdot (1/k^2 - 1/n^2)$

Bohr tudta elméletileg megmagyarázni ezt:

### A Bohr-féle atommodell

a Rutherford-féle atommodellből indul ki, posztulátumok:

1. Az elektronok az atomban nem keringhetnek tetszőleges sugarú pályákon, csak adott sugarú, adott energiájúakon ( $E = -R_h/n^2$ ). Ezekon a pályákon viszont energiavesztés nélkül keringenek.
2. Az egyik kötött pályáról egy másik pályára történő átmenetnél az elektron által felvett, vagy kisugárzott energia megegyezik a két különböző pályán lévő elektron energiájának különbségével.

$$E_i \rightarrow E_j \quad \Delta E = +R_h/n_j^2 - R_h/n_i^2 = R_h(1/n_j^2 - 1/n_i^2) = h\nu$$

az elektron keringési pályái  $n$  kis egész számokkal jellemezhetők, a pályák sugara  $n^2$ -tel arányosak

néhány fogalom:

- **alapállapot:** az elektron a legkisebb energiájú pályán van
- **gerjesztett állapot:** az elektron nem a legkisebb energiájú pályán van
- **ionizáció:** az elektront kiszakítjuk az atomból

a hidrogénatom színe jét jól lehetett értelmezni ez alapján:

az alapállapotú atom gerjesztésekor az elektron nagyobb energiájú pályára kerül, majd egy vagy több lépésben vissza alapállapotba, miközben foton/fotonokat bocsát ki. Így jönnek létre a spektrális sorozatok.

fólia

A hidrogén-atomra remekül működött a Bohr-féle atommodell, de a több elektront tartalmazó atomoknál csak pontatlanul tudja a színeket magyarázni és a színekvonalak egyéb tulajdonságairól sem tud számot adni (felhasadás elektromos és mágneses térben).

## a kvantummechanikai atommodell

„Ami pontos az nem szemléletes, ami szemléletes az nem pontos.”

az anyagi részecskék állapota kapcsolatba hozható egy ún. hullámfüggvénnyel. A hullámfüggvények a kvantummechanikai állapotegyenlet megoldásai, kémiai szempontból az ún. Schrödinger-egyenletet kell tekinteni. Az egyenletben szerepelnek energiaértékek. Megoldást csak bizonyos energiaértékeknél lehet kapni. A megoldás során olyan paramétereket használnak, amelyek csak kis – általában egész – értékeket vehetnek fel, ezek a kvantumszámok. Az atomban lévő elektronok energiáját ezek a kvantumszámok határozzák meg.

kvantumszám neve	jele	lehetséges értékei
főkvantumszám	$n$	1, 2, 3, ...
mellékkvantumszám	$l$	0, 1, ..., $(n-1)$
mágneses kvantumszám	$m$	$-l, \dots, 0, \dots, +l$
spinquantumszám	$s$	$-1/2, +1/2$

hidrogén esetén a fő- (többelektros atomok esetén a fő- és mellékkvantumszám együtt) határozza meg az elektron energiáját

főkvantumszám: távolság az atommagtól  
elektronhéjak

betűjelek:  $n=1$ : K,  $n=2$ : L,  $n=3$ : M,  $n=4$ : N

mellékkvantumszám: az atompálya alakjával kapcsolatos  
alhéj

l lehetséges értékei:  $0-(n-1)$

betűjelek:  $l=0$ : s,  $l=1$ : p,  $l=2$ : d,  $l=3$ : f

a héj elnevezés félrevezető!

az elektron nem úgy viselkedik, mint várnánk (részecske / hullám)

Heisenberg-féle határozatlansági reláció: helyet és impulzust ( $p=m*v$ ) nem lehet egyszerre tetszőleges pontossággal meghatározni.

következmény: az atomon belül nem lehet pontosan megmondani, hogy hol van az elektron és hogyan mozog, csak az adható meg, hogy az adott térrészben mekkora valószínűséggel tartózkodik

**atompálya:** az atommag körüli térnek az a része, ahol az elektron tartózkodási valószínűsége 90%-nál nagyobb

s- és p-pályák alakja  
atompályák fólia

interaktív periódos rendszer <http://www.ptable.com>

A hidrogén esetén csak egy elektron van az atomban.

A többelektros atomok esetén a fő- és mellékkvantumszám együtt határozza meg az elektron energiáját.

## A periódos rendszer és a többelektros atomok elektronszerkezete közötti kapcsolat

Ha egy atomba több elektron kerül mekkora energiája lesz? Ezt a kvantumelmélet alapján tudjuk megmondani: többelektros atomok esetén a fő- és mellékkvantumszám együtt határozza meg az elektron energiáját:

**Az atom úgy épül fel, hogy az összenergiája minimális legyen!**

naív gondolat: akkor az összes elektron menjen az  $n=1, l=0$  pályára!

Ez nem így történik! Pauli felismerte, hogy egy elektronnak nem lehet mind a négy kvantumszáma azonos (ez a **Pauli-féle tilalmi elv**)

Induljunk ki ebből és számláljuk meg, hogy az egyes alhéjakon, héjakon mennyi elektron lehet!

$l=0$  (azaz s alhéj):  $m=0, s=-1/2, +1/2$ , tehát  $1*2=2$ db

$l=1$  (azaz p alhéj):  $m=-1, 0, +1, s=-1/2, +1/2$ , tehát  $3*2=6$ db

$l=2$  (azaz d alhéj):  $m=-2, -1, 0, +1, +2, s=-1/2, +1/2$ , tehát  $5*2=10$ db

$l=3$  (azaz f alhéj):  $m=-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, s=-1/2, +1/2$ , tehát  $7*2=14$ db



azaz	
n=1 (K héj) > l=0 >	2db
n=2 (L héj) > l=0,1 >	8db
n=3 (M héj) > l=0,1,2 >	18db
n=4 (N héj) > l=0,1,2,3 >	32db
elektron lehet egy héjon	

Az elektronok száma az atomban (semleges!) egyenlő a protonok számával (Z, rendszám).

A periódusos rendszerben rendszám szerint vannak sorban az elemek.

Az elektronkonfiguráció leírja, hogy az elektronok miképpen oszlanak el a héjakon, alhéjakon, pályákon és mekkora a spinquantumszámuk.

Az elektronkonfiguráció jelölése:

spdf-jelöléssel, azaz a főkvantumszám számmal, mellékvantumszám betűvel, betöltöttség felső indexben számmal

pl. H:  $1s^1$   
 N:  $1s^2 2s^2 2p^3$   
 O:  $1s^2 2s^2 2p^4$   
 Ne:  $1s^2 2s^2 2p^6$   
 Na:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

**Felépülési elv:** az „energiaminimumra törekvés elve”

ÁTLÓS ÁBRA

Na:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$      $1s^2 2s^2 2p^6 3p^1$   
           alapállapot      1. gerjesztett állapot  
 ez a nátrium D vonala

Minden egyes rendszámnál van egy olyan elektronkonfiguráció, amelynek az energiája minimális. Ez az **alapállapot**. Ezt fel lehet tüntetni a periódusos rendszerben:

periódusos rendszer elektronszerkezettel

Az alapján, hogy éppen melyik héj töltődik fel elektronokkal, beszélünk s-, p-, d- és f- mezőkről.

A félig vagy teljesen betöltött alhéj különösen stabil, ami eltérésekhez vezet az elvárásainktól!

Cr:  $3d^5 4s^1$     Pd:  $4d^{10}$   
 (de Ni:  $3d^8 4s^2$ )  
 (Pt:  $5d^9 6s^1$ )  
 Mo:  $4d^5 5s^1$     Cu:  $3d^{10} 5s^1$   
 Gd:  $f^7 d^1 s^2$     Au:  $5d^{10} 6s^1$

Atomok, ionok elektronszerkezetének cellás ábrázolása:

H, N, O elektronkonfigurációja cellás ábrázolással

Miért így töltődnek fel az azonos energiájú (degenerált) pályák? (Azaz miért lesznek az elektronok párosíthatatlanok a 2p pályán?)

Az atom úgy épül fel, hogy az összenergiája minimális legyen! Ez akkor teljesül, ha az azonos energiájú pályákon az elektronok párosíthatatlan spinnel vannak jelen. Ezt mondja ki a **Hund-szabály**.

A kémiai reakciókban leginkább az atomok legkülső elektronhéján lévő elektronok vesznek részt. Ezért szokták a legkülső elektronhéjat **vegyértékhéj**nek is nevezni.

Nagyobb rendszámú elemek elektronkonfigurációjának feltüntetésénél nagyon sokat kellene írni, ezért gyakran csak a vegyértékhéj elektronkonfigurációját tüntetik fel részletesen:

- az előző nemesgáz vegyjelét írjuk bele: Na: Ne 3s<sup>1</sup>
- a lezárt héjakat betűkkel jelöljük: Na: KL 3s<sup>1</sup>