

Dr. Szalai István
egyetemi tanár
ELTE TTK Kémia Intézet

Atomszerkezet

Atom, elem, elektronszerkezet



Kulcsfogalmak

Atomok

- **Atommag, elektronfelhő**
- **Nukleonok (proton, neutron), elektron**
- **Relatív töltés, relatív tömeg**
- **Rendszám, tömegszám**

Kulcsfogalmak

Elemek

- **Elemek, izotópok, radioaktív izotópok**
- **Relatív atomtömeg**
- **Tudománytörténeti jelentőség: Jakob Berzelius, Hevesy György, Curie házaspár**

Kulcsfogalmak

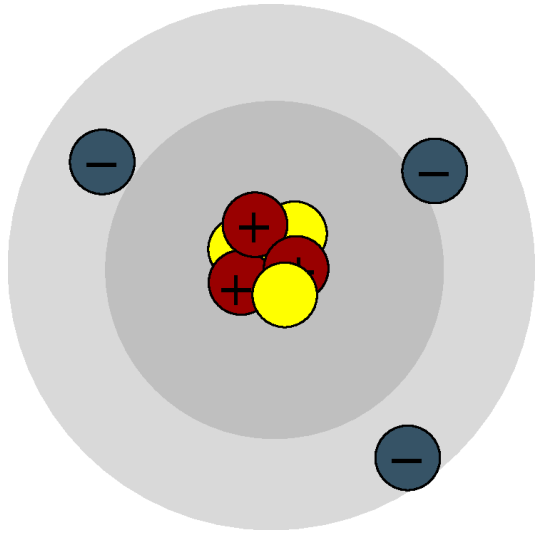
Elektronszerkezet

- **Elektronhéj (telített és telítetlen)**
- **Energiaminimum elve**
- **Vegyértékelektron**
- **Atomtörzs**
- **Nemesgázszerkezet**
- **Atompálya, Pauli-elv, Hund-szabály, alapállapot, gerjesztett állapot, párosítatlan elektron, elektronpár**

Atomok



Atomok

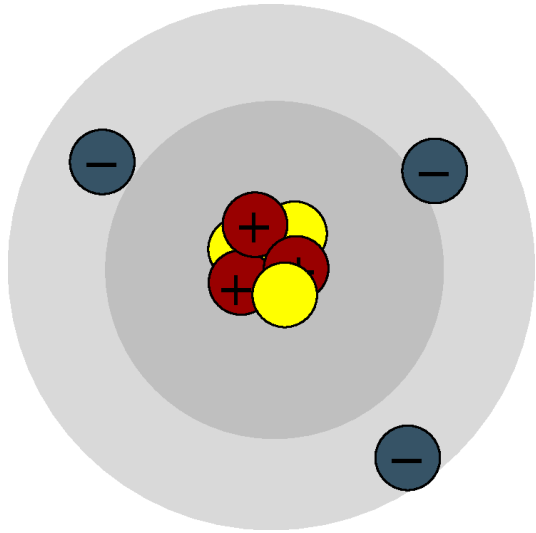


- **Atommag ($\sim 10^{-15}$ m)**
- **Atom ($\sim 10^{-10}$ m)**

részecske	tömeg (kg)	Relatív tömeg	töltés (C)	Relatív töltés
proton p^+	$1,672 \cdot 10^{-27}$	1	$1,602 \cdot 10^{-19}$	1
neutron n^0	$1,674 \cdot 10^{-27}$	1	0	0
elektron e^-	$9,109 \cdot 10^{-31}$	1/1840	$-1,602 \cdot 10^{-19}$	-1

Relatív mennyiség = mennyiség / viszonyítási alap

Atomok



Atommag

- nukleonok: p^+ , n^0
- magerők és elektrosztatikus taszítás a protonok között
- pozitív töltés, $N(p^+)$
- stabil magok $N(p^+) \leq N(n^0)$

Atom

- rendszám $Z=N(p^+)$, $N=N(n^0)$
- tömegszám $A=Z+N$
- semleges $N(p^+)=N(e^-)$
- elektronok és protonok közötti elektrosztatikus vonzás

Coulomb erő:

$$F_c = k \frac{Q_1 Q_2}{r^2}$$

Elemek

2

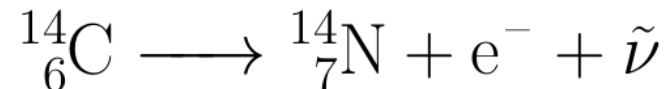
Elemek

- **Elem:** Azonos protonszámú, rendszámú (Z) atomok halmaza. Jellemzően eltérő eltérő neutronszámú, tömegszámú (A) atomokból (nuklidokból) áll. Kémiai reakciókkal nem alakíthatók át más elemmé.
- **Izotóp:** Azonos protonszámú de eltérő neutronszámú atomok.

- **Vegyjel:**



- **Radioaktív izotópok:**



felezési idő: 5730 év

Radioaktív izotópok felhasználása:

- **kormeghatározás** ${}^{14}_6\text{C} \longrightarrow {}^{14}_7\text{N} + e^{-} + \tilde{\nu}$
 - **felezési idő: 5730 év**

- **nyomjelzés** ${}^{131}_{53}\text{I} \longrightarrow {}^{131}_{54}\text{Xe} + e^{-} + \tilde{\nu}$
 - **felezési idő: 8 nap**

- **terápia** ${}^{60}_{27}\text{Co} \longrightarrow {}^{60}_{28}\text{Ni} + e^{-} + \tilde{\nu} + \gamma$

Relatív atomtömeg

- Az adott elem atomjai átlagosan hányszor nagyobb tömegűek a ^{12}C izotóp tömegének 1/12 részénél.
- Ha a relatív atomtömeggel megegyező tömegű anyagot mérünk le, akkor abban $6 \cdot 10^{23}$ db atom (N_A) található meg, bármely elem esetén.

Relatív atomtömeg

- Az egyes nuklidok tömegszámából az izotóparány figyelembevételével számolva a szokásos számításaink szempontjából elhanyagolható, de elvben fontos hibát vétünk. Az atom tömege kisebb, mint amit az azt felépítő részecskék (p^+ , n^0 , e^-) tömege alapján számolunk.

$$A_r(^{35}\text{Cl})=34,969 \text{ (17p}^+, \text{ 18n}^0, \text{ 17e}^-) \text{ gyakoriság 75,76\%}$$

$$A_r(^{37}\text{Cl})=36,966 \text{ (17p}^+, \text{ 20n}^0, \text{ 17e}^-) \text{ gyakoriság 24,24\%}$$

$$A_r(\text{Cl})=0,7576 \cdot 34,969 + 0,2424 \cdot 36,966 = 35,45$$

Moláris atomtömeg

- Anyagmennyiség:

$$n = \frac{N}{N_A}$$

ahol $N_A = 6 \cdot 10^{23}$ 1/mol

mértékegység: mól, jele: mol.

- A moláris tömeg a tömeg és az anyagmennyiség hányadosa:

$$M = \frac{m}{n}$$

mértékegysége: g/mol.

Számértéke a relatív atomtömeg értékével egyezik meg.

Jakob Berzelius (1779-1848)

- Megfigyelte, hogy az elektromos áram hatására egyes vegyületek elbomlanak (elektrolízis).
- Bevezette az elemek jelölésére a vegyjeleket. Felismerte Dalton atomelméletének jelentőségét.
- Atomtömeg-táblázatot publikált.
- Bevezette az allotrópia fogalmát.
- Felfedezett három elemet: a szelént, szilíciumot és tóriumot. Számos vegyület összetételét meghatározta.
- Ő használta először a laboratóriumban szűrőpapírt, gumi-csővet, kémcsőállványt, osztott pipettát. Tőle származik az izoméria, az allotrópia, a katalízis és a protein elnevezés.

Maria Skłodowska-Curie (1867-1934) és Pierre Curie (1859-1906)

- **A radioaktivitás felfedezés (fizikai Nobel-díj: 1903)**
- **A polónium és a rádium előállítás (kémiai Nobel-díj: 1911)**
- **A radioaktív sugárzások tulajdonságai**
- **Mérési lehetőségek**
- **A radioaktív sugárzás hatásai**
- **A biológiai felhasználás lehetőségei**

Hevesy György (1885-1966)

- A radioaktív izotópok indikátorként való alkalmazása a kémiai kutatásban (kémiai Nobel-díj: 1943)
- Feltalálta a röntgen-fluoreszcenciás (1932), az izotóphígításos (1931) és a neutronaktivációs (1934) analitikai módszereket.
- Felfedezte a hafniumot.
- Azonosította a ^{40}K természetes radioaktív izotópot.

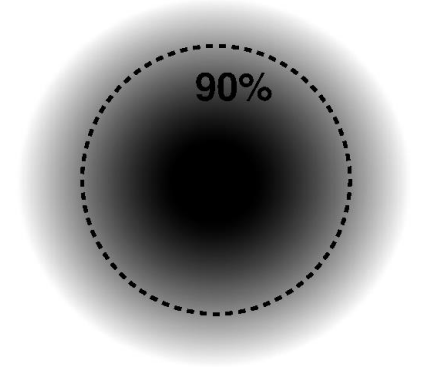
Elektronszerkezet

3

Elektron

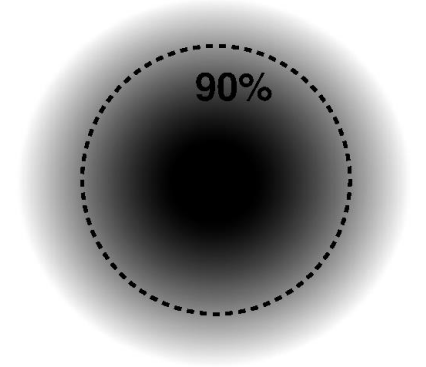
- **Kettős természet: részecske (tömeg) és hullám (elhajlás, interferencia).**
- **A kvantummechanika törvényei alapján az elektronnak a megtalálási valószínűségét adhatjuk meg.**
- **A töltés és a tömeg mellett fontos tulajdonság a spin is. A spin megszabja az elektron mágneses tulajdonságait. Az elektron spinkvantumszáma: $\pm 1/2$ értéket vehet fel. \pm**

Atompályák



- Az az atommag körüli térrész, ahol az elektron 90%-os valószínűséggel megtalálható.
- Az azonos energiájú atompályák alhéjakat, azok pedig héjakat alkotnak.
- Az atompályákat, alhéjakat és héjakat kvantumszámokkal jellemezzük.
- Kvantumszámok: főkvantumszám ($n=1,2,3\dots$), mellékvantumszám ($l=0,1\dots n-1$), mágneses kvantumszám ($m=-l\dots 0\dots +l$)

Atompályák

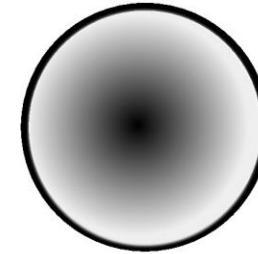


Főkvantumszám ($n=1, 2, 3\dots$): Az azonos főkvantumszámú pályák alkotják a héjakat. A pálya nagyságára és energiájára vonatkozó szám.

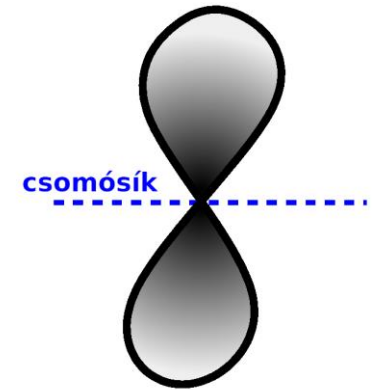
Főkvantumszám (n)	1	2	3	4
Héj	K	L	M	N

Atompályák

Mellékkvantumszám ($l=0, 1.. n-1$): Egy adott héjon belül az azonos mellékkvantumszámú alkotják az alhéjakat. A pálya alakjára és energiájára vonatkozó szám.



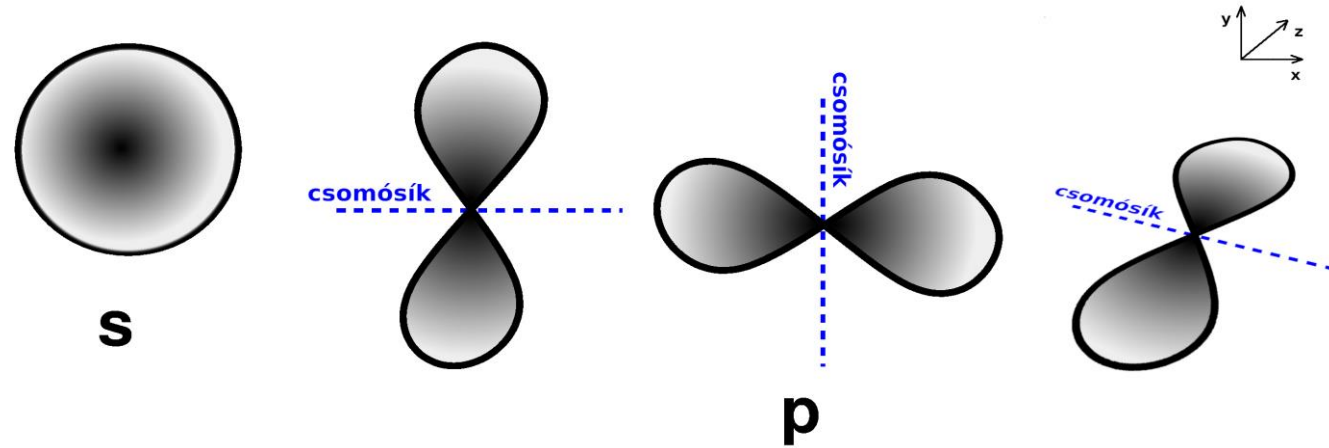
s



p

Mellékkvantumszám (l)	0	1	2	3
Alhéj	s	p	d	f
Csomósíkok száma	0	1	2	3

Atompályák



Mágneses kvantumszám ($m=-l..0..+l$): a mágneses térben való viselkedésre utaló szám.

Mellékkvantumszám (l)	0	1	2	3
Alhéj	s	p	d	f
Mágneses kvantumszám	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3
Atompályák száma	1	3	5	7

Atompályák

Főkvantumszám	1 (K)
Mellékvantumszám (l)	0
Alhég	s
Mágneses kvantumszám	0
Atompályák száma	1

Főkvantumszám	2 (L)	
Mellékvantumszám (l)	0	1
Alhég	s	p
Mágneses kvantumszám	0	-1, 0, 1
Atompályák száma	1	3

Atompályák

Főkvantumszám	3 (M)		
Mellékkvantumszám (l)	0	1	2
Alhég	s	p	d
Mágneses kvantumszám	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2
Atompályák száma	1	3	5

Főkvantumszám	4 (N)			
Mellékkvantumszám (l)	0	1	2	3
Alhég	s	p	d	f
Mágneses kvantumszám	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3
Atompályák száma	1	3	5	7

Elektronszerkezet

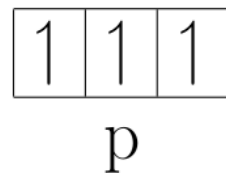
- **Alapállapotú atom:** a lehető legkisebb energiájú atom. Az elektronok a kvantummechanika törvényei által megengedett módon, a lehető legközelebb helyezkednek el az atommaghoz.
- **Gerjesztett atom:** energiafelvétellel elvben végtelen sok olyan állapot, amikor az elektronok (legalább egy része) távolabb (magasabb energiájú állapotba) kerül az atommagtól, mint alapállapotban volt.

Elektronszerkezet

- **Energiaminimumra törekvés:** az alapállapotú atomban az elektronok a lehető legalacsonyabb energiájú pályákon helyezkednek el.
- **Pauli-elv:** az atomban még két olyan elektron sem lehet, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezne. Ennek következtében minden atompályán legfeljebb 2 elektron tartózkodhat ellentétes spinnel.



- **Hund-szabály:** egy alhéjon belül az elektronok úgy helyezkednek el, hogy a párosítatlan elektronok száma a lehető legnagyobb legyen.



Atompályák

Főkvantumszám	1 (K)
Mellékkvantumszám (l)	0
Alhég	s
Mágneses kvantumszám	0
Atompályák száma	1
Elektronok maximális száma	2

Főkvantumszám	2 (L)	
Mellékkvantumszám (l)	0	1
Alhég	s	p
Mágneses kvantumszám	0	-1, 0, 1
Atompályák száma	1	3
Elektronok maximális száma	2	6
	8	

Atompályák

Főkvantumszám	3 (M)		
Mellékkvantumszám (l)	0	1	2
Alhég	s	p	d
Mágneses kvantumszám	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2
Atompályák száma	1	3	5
Elektronok maximális száma	2	6	10
	18		

Atompályák

Főkvantumszám	4 (N)			
Mellékkvantumszám (<i>l</i>)	0	1	2	3
Alhéj	s	p	d	f
Mágneses kvantumszám	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3
Atompályák száma	1	3	5	7
Elektronok maximális száma	2	6	10	14
	32			

Elektronszerkezet

- **Pályaenergia:** az az energia, ami akkor szabadul fel, ha „végtelen” távolságból egy elektron az adott atompályára kerül (1 mol atom mindegyike esetén). Mértékegység: kJ/mol. Értéke negatív.
- A pályaenergia értéke függ a fő- és mellékkvantumszámtól:
 $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \dots$
- Az adott alhéjhoz tartozó pályák energiája azonos

↑↓	↑↓	↑↓
----	----	----

p
- Az adott atompálya energiája minden elem atomjában más, értéke függ a protonok számától $E_{1s}(\text{H}) > E_{1s}(\text{Cl})$

Elektronszerkezet

- Vegyértékelektronok: részt vesznek a kémiai reakciókban, lényegesen befolyásolják az atomokból képződő részecskék tulajdonságait.

Az s- és a p-mező elemeinél ezek a legkülső héj elektronjai:



- d-mező elemeinél: Fe $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^6$ $4s^2$ $3d^6$
- A „vegyértékhéj” kifejezés használata hibás vagy pontatlan lehet (pl. d-mező elemei).
- Helytelen vegyértékhéjnak nevezni a „le nem zárt” héjat:
- pl. Ca esetén az M héj nincs lezárva (nincs elektron a 3d pályán), a vegyértékelektronok pedig a $4s^2$ elektronok.

Elektronszerkezet

- **Atomtörzs: atommag és a nem vegyértékelektronok.**
- **Nemesgázszerkezet: $1s^2, ns^2np^6$**



- **A d-mezőben megfigyelhető eltérések az eddig tanultakhoz képest:**



Atomszerkezet

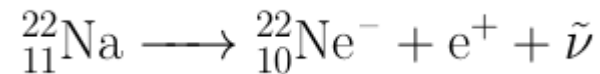
Kiegészítések

Radioaktív bomlások

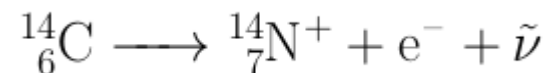
A radioaktív bomlások néhány típusa

- α -bomlás (távozó részecske egy He mag) ${}_{92}^{238}\text{U} \longrightarrow {}_{90}^{234}\text{Th}^{2-} + {}_2^4\text{He}^{2+}$

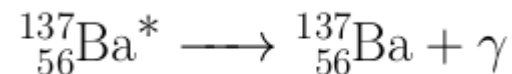
- β^+ -bomlás (távozó részecske egy pozitron (antielektron) és egy neutrínó)



- β^- -bomlás (távozó részecske egy elektron és egy antineutrínó)



- γ -bomlás (távozó részecske egy foton)



Az atommag kötési energiája

Megbeszéltük:

Az egyes nuklidok tömegszámából az izotóparány figyelembevételével számolva a szokásos számításaink szempontjából elhanyagolható, de elvben fontos hibát vétünk. Az atom tömege kisebb, mint amit az azt felépítő részecskék (p^+ , n^0 , e^-) tömege alapján számolunk.

Hova lett a hiányzó tömeg?

A hiányzó tömeg (Δm , „tömegdefektus”) az atommag kötési energiáját adja az Einstein-formula alapján: $E=mc^2$ (ahol c a fénysebesség).

$$E_{\text{kötési}} = \Delta E = \Delta mc^2$$

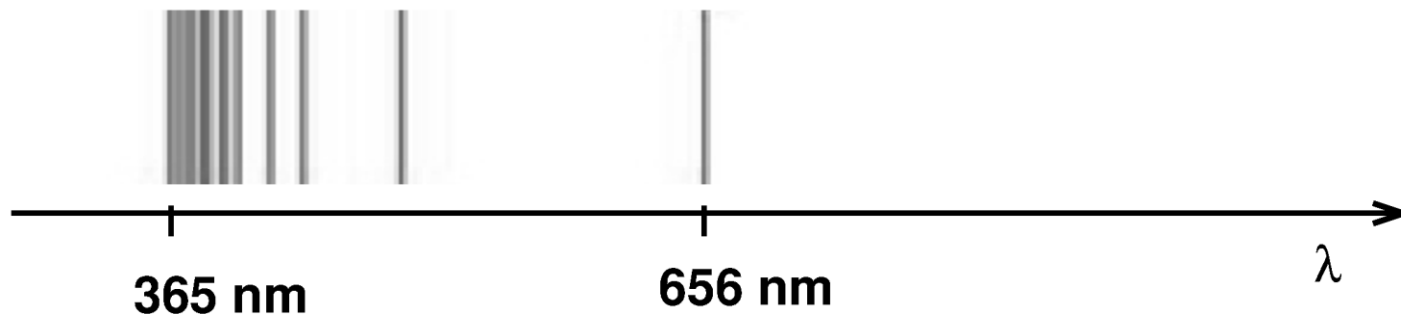
$$\Delta m = m_{\text{atom}} - (Zm_{\text{proton}} + (A-Z)m_{\text{neutron}} + Zm_{\text{elektron}})$$

Az atomok vonalas színeke

Az atomok színekeének vonalas jellege egyértelműen mutatja, hogy csak diszkrét méretű csomagokban képesek energiát felvenni és leadni. A hidrogénatom színeke egyszerűen leírható két egész szám (n_1 és n_2) segítségével:

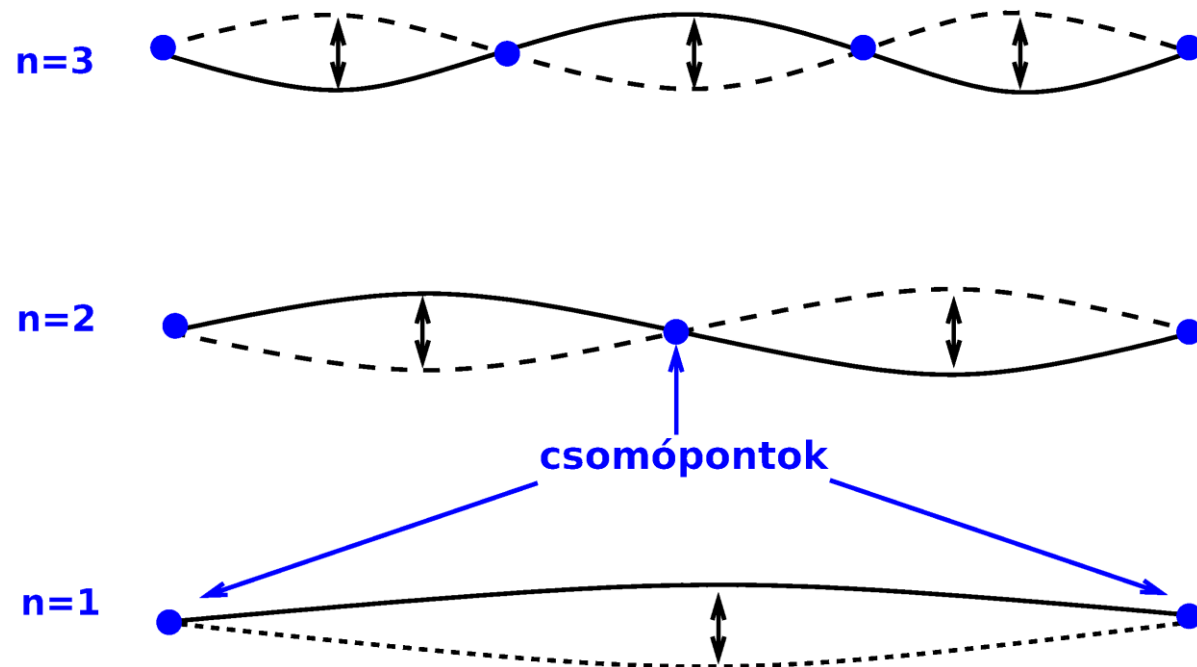
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

A hidrogénatom színekeének részlete, a leíráshoz itt $n_1=2$ és $n_2=3, 4, 5...$



Állóhullámok

- Az atompályák kvantummechanikai képének megértésében segít az állóhullámokról tanultak felidézése:

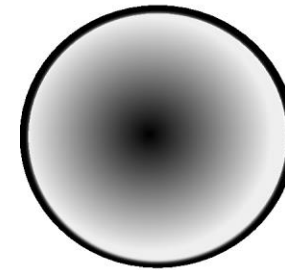
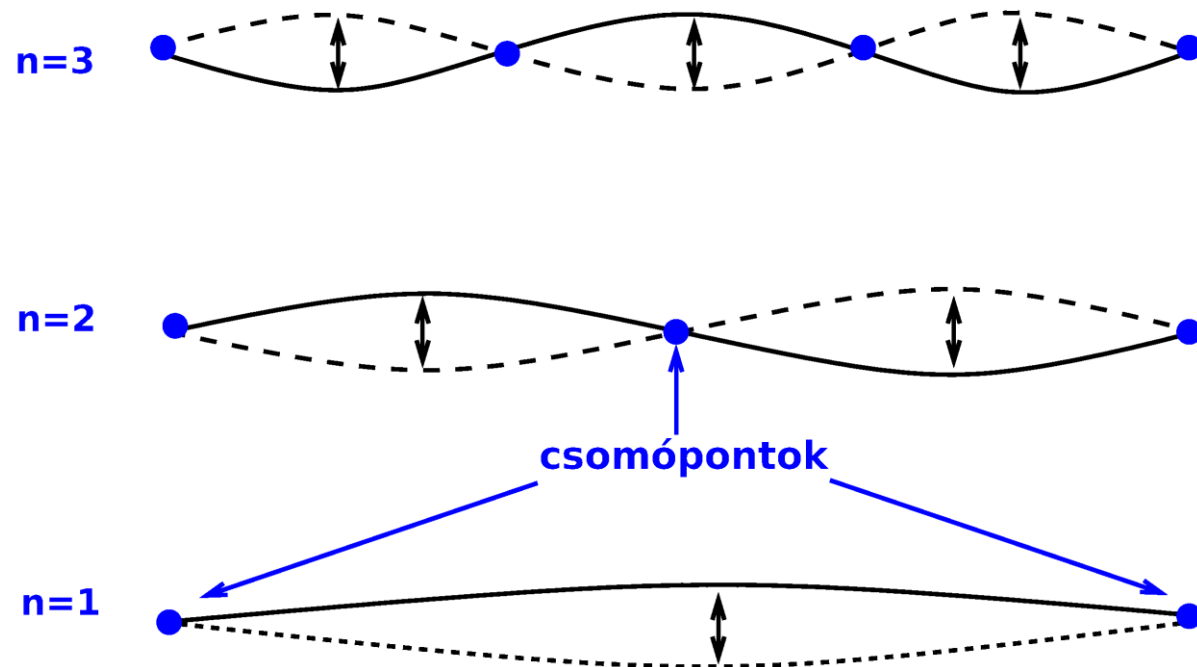


$$\lambda = \frac{2L}{n}$$

csomópontok száma: $n + 1$

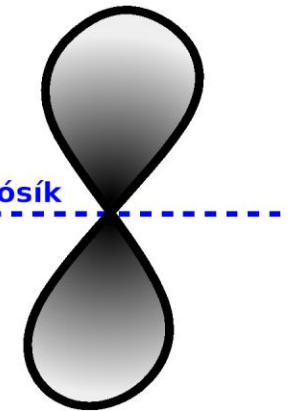
Állóhullámok

- Az atompályák kvantummechanikai képének megértésében segít az állóhullámokról tanultak felidézése:



s

$n=0$



p

$n=1$