

Bevezetés az anyagtudományba

II. előadás

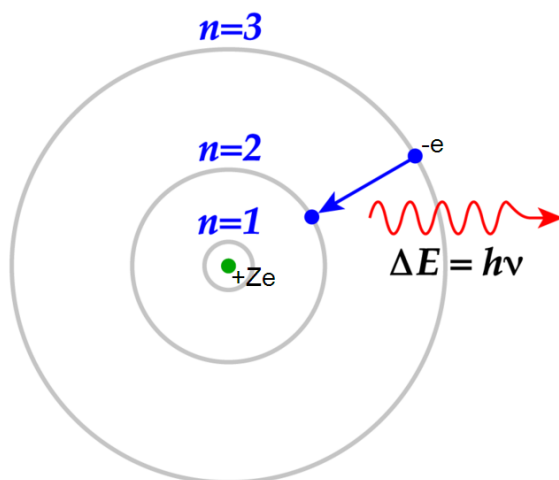
2010. február 11.

Bohr-féle atommodell

1914



Niels Henrik David **BOHR**
1885-1962



Posztulátumai:

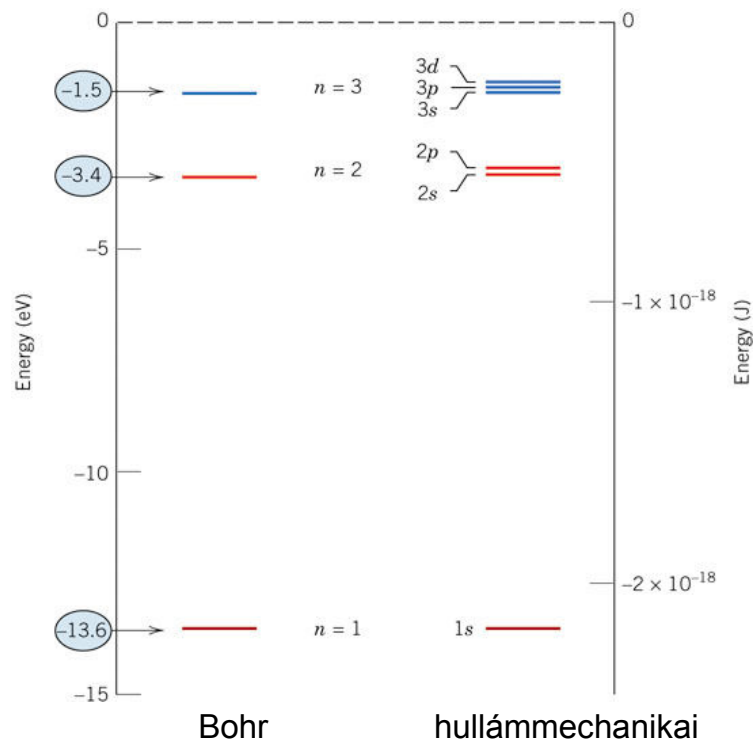
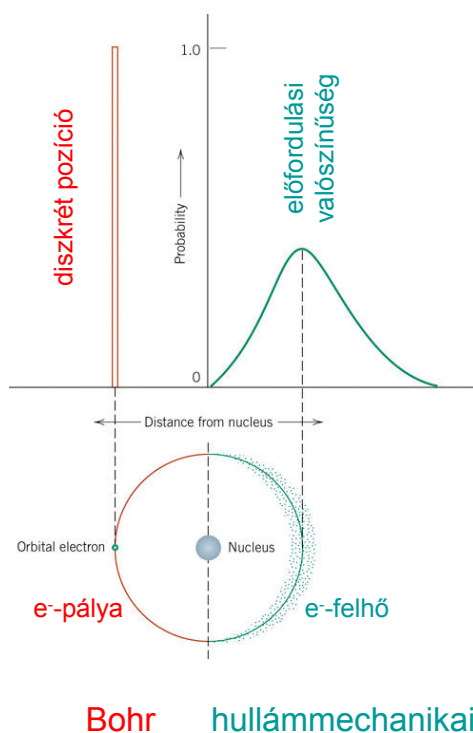
- 1) Az elektron a mag körül *körpályán* kering.
- 2) Az elektronok számára csak bizonyos körpályák (energiák) megengedettek. ($mvr = nh/2\pi$, ahol $n=1, 2, 3, \dots$)
- 3) A körpályán keringő elektron *nem sugároz* energiát.
- 4) $\Delta E = h\nu$

http://en.wikipedia.org/wiki/Bohr_model

<http://hu.wikipedia.org/wiki/Bohr-atommodell>

Hullámmechanikai atommodell

az elektronok részecske- és hullámtermészetét egyaránt figyelembe veszi

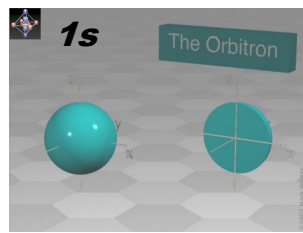


Kvantumszámok

- **Főkvantumszám** ($n=1,2,3,\dots$; K,L,M,...): az elektron magtól mért átlagos távolságát jellemzi (*héj*)
- **Mellékvantumszám** ($l=0,1,\dots,n-1$; s, p, d,...): az elektronpálya alakját (impulzusmomentumát) jellemzi (*alhéj*)
- **Mágneses kvantumszám** ($m=-l,\dots,0,\dots,+l$): a pályák térbeli orientációját határozza meg (a pályák mágneses térben elfajulnak) (*pálya*)
- **Spin kvantumszám** ($s=-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}$): az elektron saját perdületét veszi figyelembe

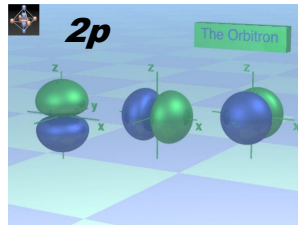
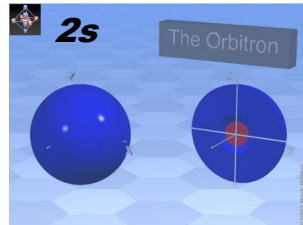
Elektron pályák

K héj

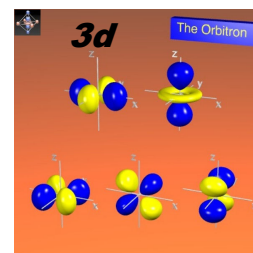
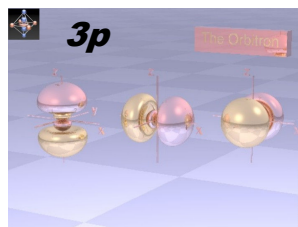
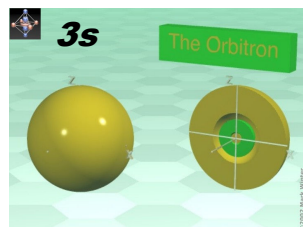


<http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/index.html>

L héj



M héj



Az atomok elektronszerkezete

Pauli-féle kizárási elv: egy elektronpályán max. 2 db ellentétes spinű elektron tartózkodhat.

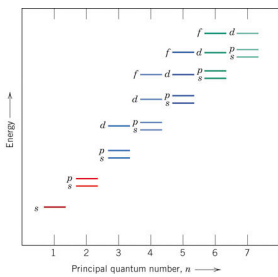
Hund szabály: az elektronok egy alhéj elfajult pályáit egyenként töltik be párhuzamos spinel mindaddig, amíg az alhéj félig be nem telik (a félig vagy teljesen betöltött alhéjak kiemelkedő stabilitásúak).

alapállapot: az atom azon állapota, melyben elektronjai a legalacsonyabb energiájú pályákat foglalják el. (\leftrightarrow **gerjesztett állapot**)

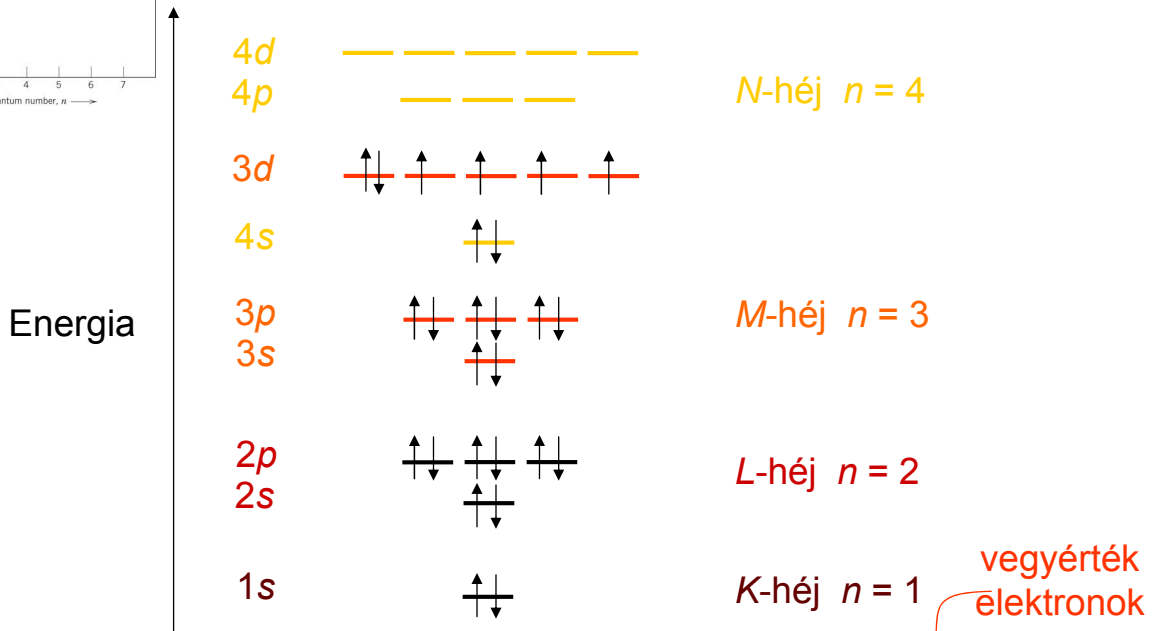
vegyérték elektronok: az atom legkülső héjának elektronjai (a kötésekbe lépő elektronok, melyek a szilárd anyag kémiai, elektromos, optikai és hőtani tulajdonságait meghatározza) (vegyértékhéj)

stabil elektronkonfiguráció: amikor a vegyértékhéj s és p-alhéjai telítettek (ú.n. nemesgáz konfiguráció)

hibridizáció: egyes esetekben a különböző alhéjakhoz tartozó pályák kombinációjával a vegyértékelektronok alacsonyabb energiájú állapotba kerülhetnek (a IIIA-VA csoportok elemeire jellemző)



Pályaenergiák



pl. Fe - rendszám=26



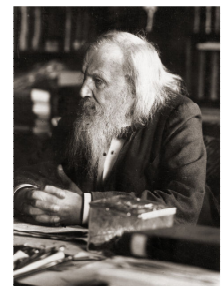
vegyérték elektronok

<http://acswebcontent.acs.org/games/pt.html>

Periódusos rendszer

Csoportok (oszlopok):

Hasonló vegyértékszerkezet → hasonló tulajdonságok



Dmitri Ivanovich MENDELEEV
1834 – 1907

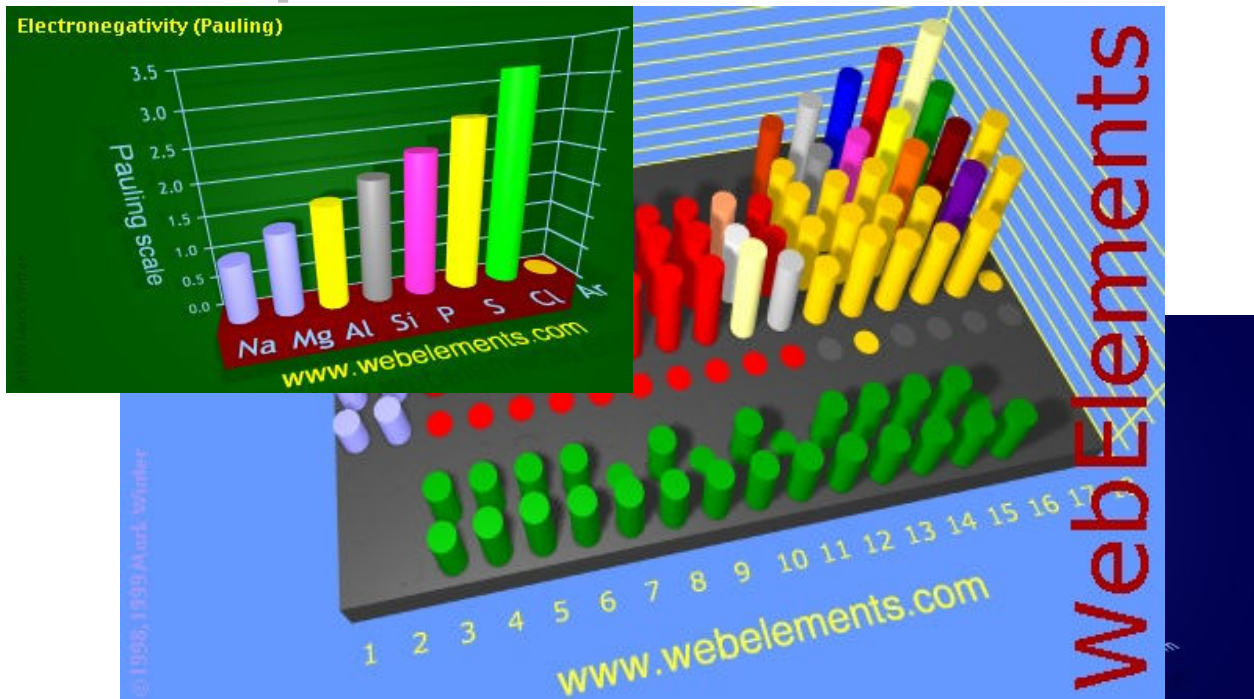
	IA																			0	
	1																				2
	H	IIA																			He
	3	4																			Ne
	11	12																			Ar
	Na	Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB									
	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36			
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54			
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
	55	56	Rare earth series	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86			
	Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn			
	87	88	Actinide series	104	105	106	107	108	109	110											
	Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds											

Elektropozitív elemek:
elektron leadással kationok

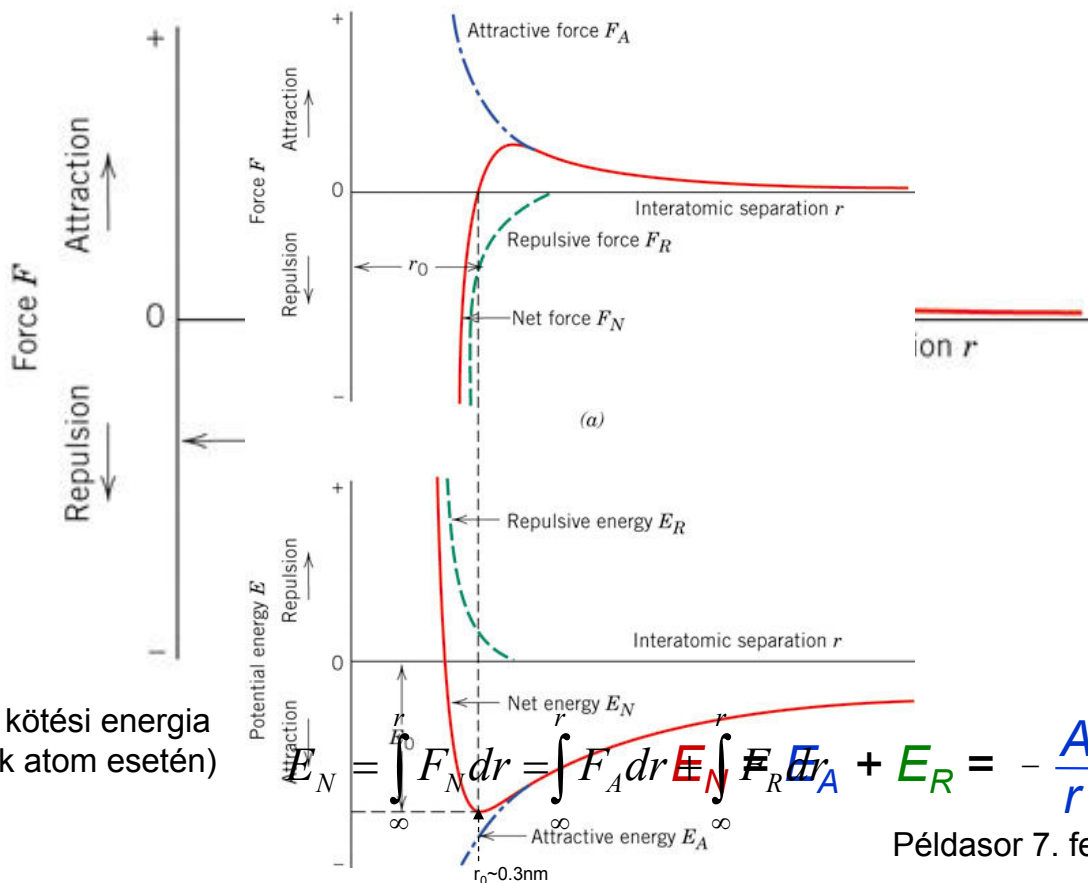
Elektronegatív elemek:
elektron felvétellel anionok

elektronegativitás

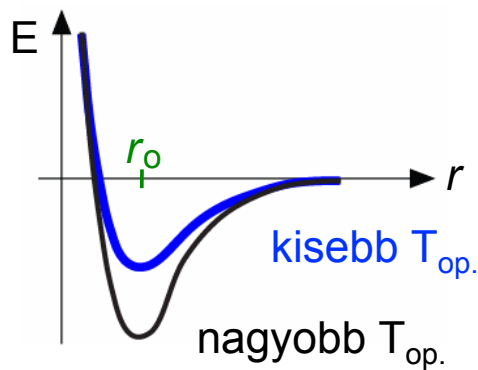
Az elemek tulajdonságának periódikus változása



1 atom – 2 atom – rács

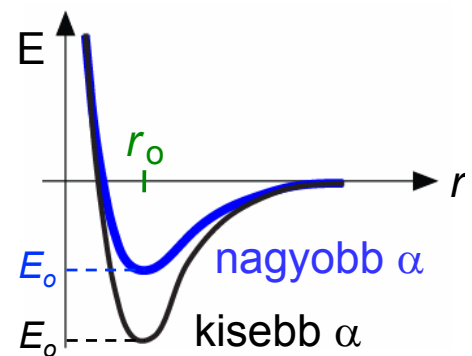
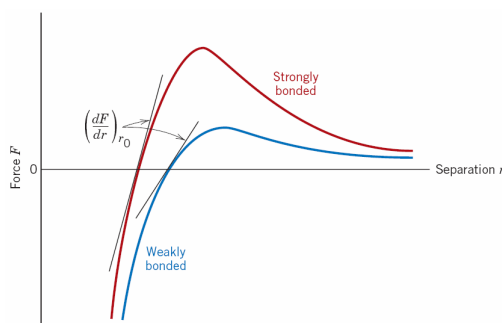


A **kötéstípus** meghatározza a **kötési energia** nagyságát és **potenciálgörbe alakját**. → Az anyag számos makroszkópikus tulajdonsága ezekről függ.



$T_{op.}$ olvadáspont
+ halmazállapot

α : lineáris hőtágulási együttható



Kötések

- **Elsőrendű**, vagy kémiai kötések
 - Ionos (600-1500 kJ/mol)
 - Kovalens (300-730 kJ/mol)
 - Fémes (68-850 kJ/mol)
- **Másodrendű**, vagy van der Waals kötések
 - Hidrogénhídkötés (30-51 kJ/mol)
 - Dipól kölcsönhatás (5-30 kJ/mol)

Ionos kötés

Elektron mozgás a kötésben résztvevő atomok között.

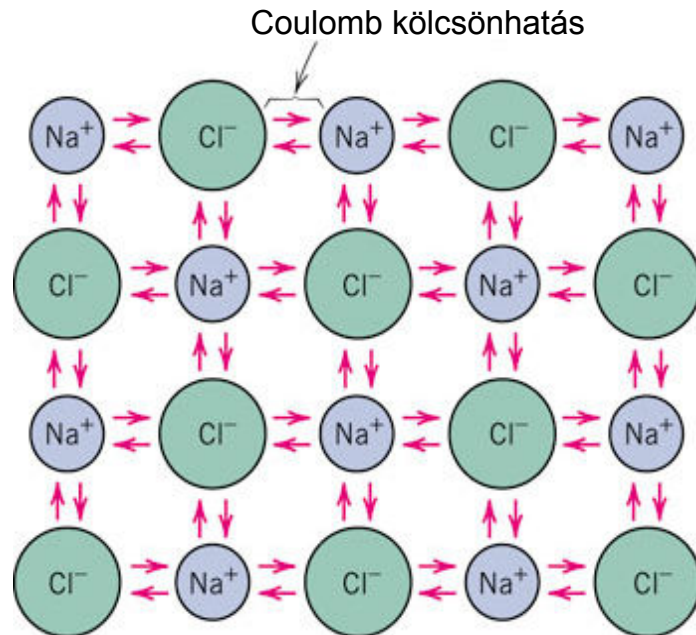
Nemesgáz szerkezetre törekvés

Nem irányított

Periódusos rendszer jobb és bal szélén levő elemek között. (kerámiák)

Tulajdonságok:

- Magas op.
- Kemény, törékeny
- Jó elektromos és hőszigetelők



Kovalens kötés

A kötésben résztvevő atomok megosztják elektronjaikat.

Nemesgáz szerkezetre törekvés

Irányított

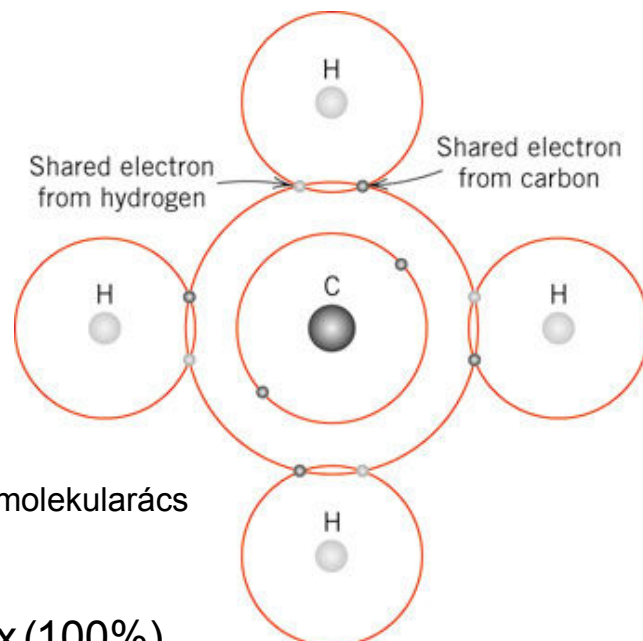
Periódusos rendszer jobb oldalán levő elemek (kerámiák, műanyagok, félvezetők)

Tulajdonságok:

attól függ, hogy atomrács vagy molekularács

$$\text{Ionos karakter} = \left(1 - e^{-\frac{(X_A - X_B)^2}{4}} \right) \times (100\%)$$

ahol X_A, X_B a Pauling-féle elektronegativitás



Fémes kötés

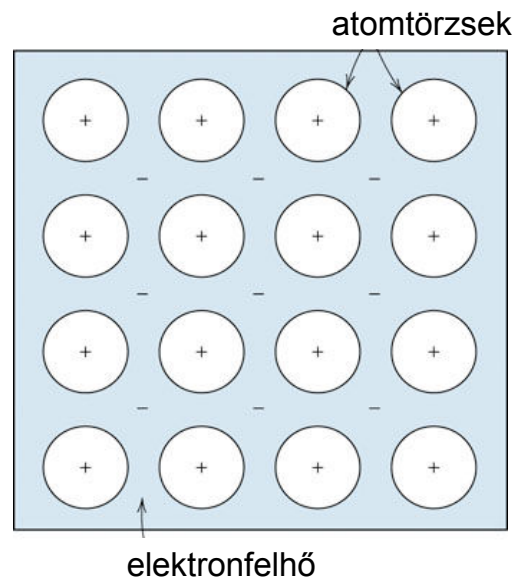
Elektron megosztás (elektron felhő, max. $3e^-$ /atom)

Periódusos rendszer leggyakoribb kötése (fémek és ötvözeteik)

Nem irányított

Tulajdonságok:

- Kemény, de jól alakítható
- Jó elektromos és hővezetők



Számítsa ki a következő vegyületekben a kötés ionos karakterét: MgO, GaP, CsF, CdS és FeO! Milyen kötéstípusokba sorolná ezek alapján az egyes vegyületeket?

Két X_A és X_B elektronegativitású elem közti kötés ionos karaktere

$$IC = \left(1 - e^{-\left(\frac{X_A - X_B}{2}\right)^2} \right) \cdot 100\%$$

Ezt alkalmazva MgO-ra, $X_{Mg}=1.2$, $X_O=3.5$

$$IC = \left(1 - e^{-\left(\frac{1.2-3.5}{2}\right)^2} \right) \cdot 100\% = 73.4\%$$

Ezt alkalmazva GaP-ra, $X_{Ga}=1.6$, $X_P=2.1$

$$IC = \left(1 - e^{-\left(\frac{1.6-2.1}{2}\right)^2} \right) \cdot 100\% = 6.1\%$$

Ezt alkalmazva CsF-ra, $X_{Cs}=0.7$, $X_F=4.0$

$$IC = \left(1 - e^{-\left(\frac{0.7-4.0}{2}\right)^2} \right) \cdot 100\% = 93.4\%$$

Ezt alkalmazva CdS-ra, $X_{Cd}=1.7$, $X_S=2.5$

$$IC = \left(1 - e^{-\left(\frac{1.7-2.5}{2}\right)^2} \right) \cdot 100\% = 14.8\%$$

Ezt alkalmazva FeO-ra, $X_{Fe}=1.8$, $X_O=3.5$

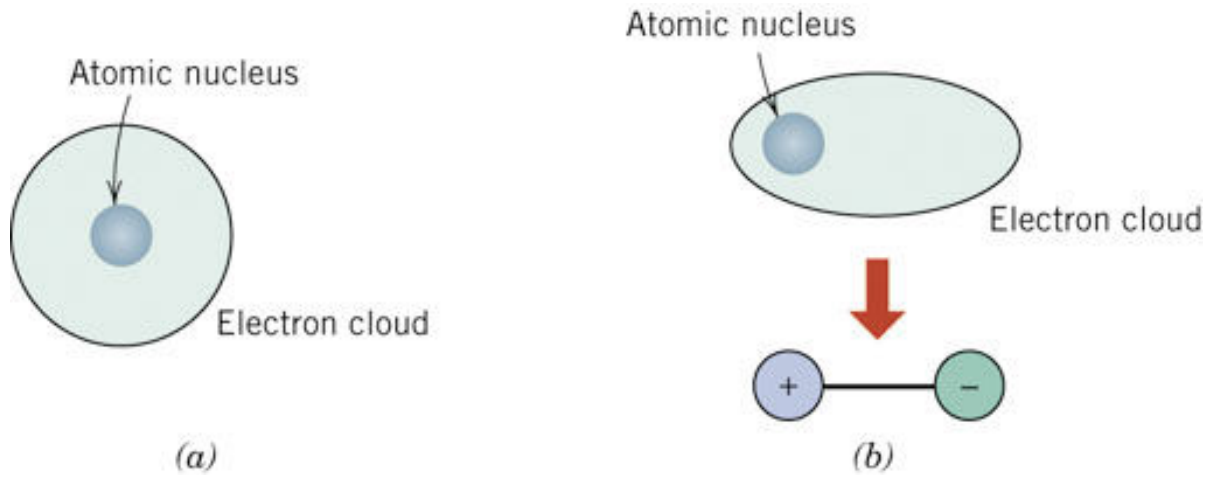
$$IC = \left(1 - e^{-\left(\frac{1.8-3.5}{2}\right)^2} \right) \cdot 100\% = 51.4\%$$

S ezért a MgO és a CsF ionos, míg a GaP, CdS jellemzően kovalens karakterű vegyület. A FeO ionos és kovalens jelleget egyaránt mutat.

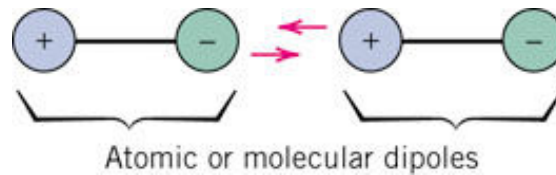
Példasor 8. feladat!

Dipól kölcsönhatás

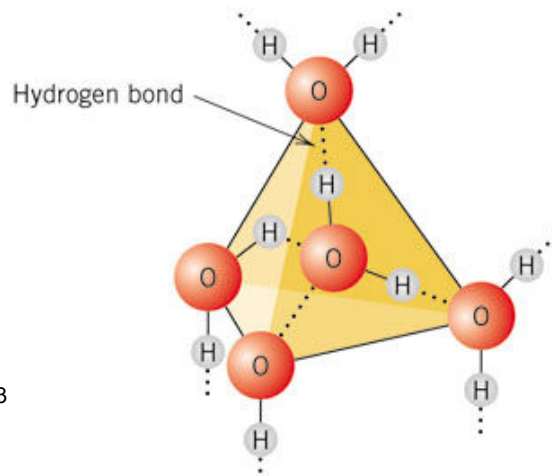
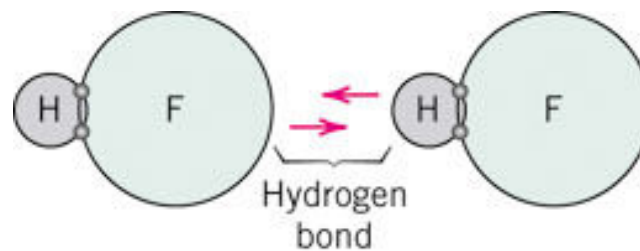
Indukált dipól



Permanens dipól

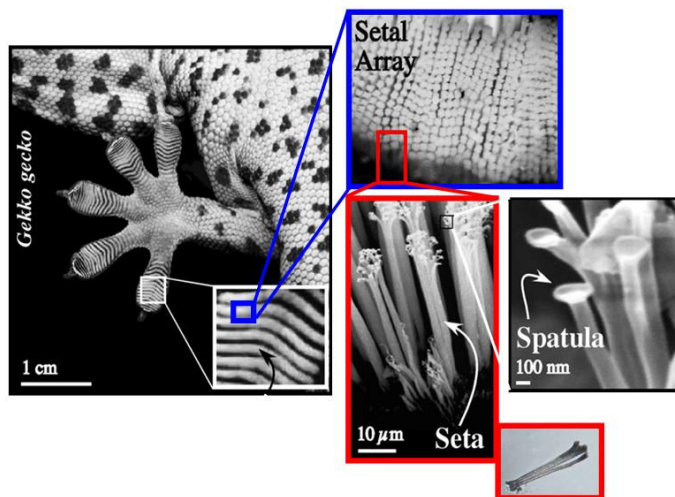


Hidrogénhídkötés



pl. H_2O , HF , NH_3

Sok kicsi, sokra megy ...



www.cchem.berkeley.edu/rmgrp/about_gecko.jpg

nano szőr

http://physics.suite101.com/article.cfm/nanotechnology_mimicks_natures_adhesive

Összefoglalásként

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640	3.3	801
	MgO	1000	5.2	2800
Covalent	Si	450	4.7	1410
	C (diamond)	713	7.4	>3550
Metallic	Hg	68	0.7	-39
	Al	324	3.4	660
	Fe	406	4.2	1538
van der Waals	W	849	8.8	3410
	Ar	7.7	0.08	-189
	Cl ₂	31	0.32	-101
Hydrogen	NH ₃	35	0.36	-78
	H ₂ O	51	0.52	0

További, ismertnek feltételezett fogalmak

proton, elektron, neutron, rendszám, izotóp, atomtömeg, energiaszintek (állapotok), kötött és szabad elektron/állapot, kötésenergia, atomtörzs, delokalizált elektronfelhő, (elektromos) dipól, poláris/apoláris molekula