

Általános és szervetlen kémia - 2. hét

Az előző órán elsajátítottuk, hogy ...

- az anyagokat hogyan csoportosítjuk
- a fizikai és kémiai folyamatok miben térnek el egymástól
- milyen kémiai jelölésrendszert használunk

Mai témakörök

- atomszerkezet
- periódusos rendszer
- periodikus tulajdonságok

Az anyagi világ felépítése

■ ókori görögök

- Arisztotelész (i.e. 384-322):
a világ 4 elemből épül fel, amelyek kombinációja hozza létre az anyagok sokaságát
- Demokritosz (~i.e. 460-370): végtelen számú, minőségileg egyforma, mennyiségben, alakban és elrendeződésben különböző atom örök mozgásban van. Egyesülésük és szétválásuk hozza létre a különböző anyagokat és azok tulajdonságait.
- Anaxagorasz (~ i.e. 500-428): minden anyagfajta igen apró magokból épül fel, és a különböző anyagfajták magjai egymástól eltérőek. Változtathatatlan, de NEM oszthatatlan!!!



~ 400 i.e.

Az anyagi világ felépítése

Dalton (1804):

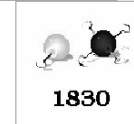
- az anyag legkisebb része az atom.
- Az atomokat - amelyek apró, változtathatatlan súlyú gömböcskék - az atomszáma jellemzi.
- Az elemek azonos atomokból, a vegyületek pedig különböző elemek atomjaiból épülnek fel.

■ elemek - azonos atomokból ??

azonos rendszám, tömegszám eltérhet

■ vegyületek - különböző atomokból ??

különböző rendszám, állandó összetétel



1830



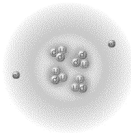
John Dalton

Az atomok szerkezete

- az atom: a kémiai elem legkisebb, a kémiai változás során át nem alakuló része
atommag?! ??
- kémiai történések: változás az atomok vegyértékelektron-szerkezetében
- az atom: a kémiai elem legkisebb része, amely kémiai eszközökkel tovább nem osztható, fizikai módszerekkel elemi részecskékre hasítható
- atommag (protonok + neutronok) és elektronburok

Az atommag

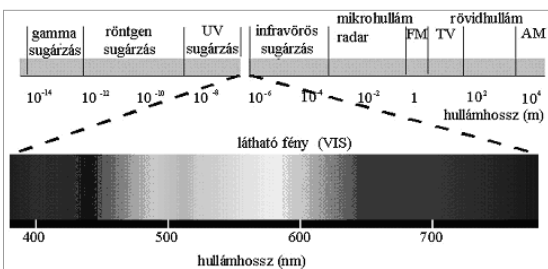
- Kémiai szempontból az atommag összetétele csak a protonok és neutronok szintjéig fontos
- A protonok száma (→ rendszám)
 - meghatározza az atom kémiai jellegét
 - megszabja az elektronok számát és elrendeződését
- A protonok és neutronok együttes száma (→ tömegszám)



Elektromágneses sugárzások

- Frekvencia (1/s), hullámhossz (nm) és sebesség valamint energia kapcsolata

$$c = \lambda \nu \quad E = h \nu$$



A fény és az anyag kapcsolata



az elemek hő hatására kibocsátott fénye a prizmán átbocsátva nem folytonos spektrumú, hanem diszkrét vonalokból áll ezek hullámhossza pontosan azonosítja

1859 Bunsen és Kirchhoff
színeképelemzés - számos elem felfedezése

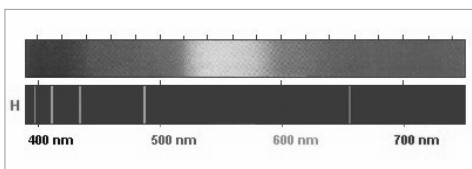


Robert Wilhelm
Bunsen



Gustav Robert
Kirchhoff

A hidrogén színeképe



■ 1890 Rydberg - egyszerű matematikai összefüggést a H színeképvonalainak hullámhosszára

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

ahol n_1 és $n_2 = 1, 2, 3, \dots$ $R = 109373 \text{ cm}^{-1}$



Johannes Robert
Rydberg

Az atomok szerkezete

■ 1900 Planck: szilárd test atomjai rezgő mozgást végeznek - frekvencia - energia összefüggés:

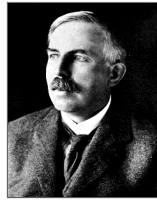
$$E = n h \nu = (n h) c / \lambda$$

ahol $n = 1, 2, 3, \dots$!!!

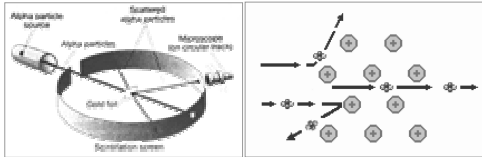
- a testek által felvett vagy leadott energia kvantált
- Einstein: ha a rezgő atom energiája csökken, foton formájában távozik az energia
- anyag és hullám - mint megjelenési forma
- a kvantáltság forrását az atomszerkezetben kell keresni

Az atomok szerkezete

- Rutherford
- 1908: pozitív töltésű alfa sugarak áthatoló képessége - az atom nagyobb része üres
- 1911: az atommagban összpontosul az atom pozitív töltése és tömegének legnagyobb része



Ernest Rutherford



Az atomok szerkezete

- 1911 Soddy : izotópok: azonos rendszámú, de eltérő tömegszámú atomok (kémiai azonos atomok)
- 1920 Rutherford: feltételezi a semleges neutronok jelenlétét a magban
- 1919-1920 Aston: elkészítette a tömegspektrométert
- 1932 Chadwick: „előállítja” a neutront
- Mi van az elektronokkal?



Frederic Soddy

Az atomok elektronszerkezete

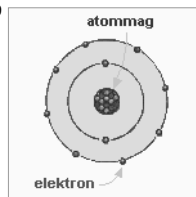
Bohr

- 1913: bolygómodell: az elektronok a pozitív atommag körül viszonylag nagy távolságban körpályán vannak, nem lehetnek tetszőleges helyen
- a kör alakú pályák sugara $r_n = n^2 a_0$
- egy elektronthéjon maximálisan $2n^2$ elektron lehet - nem tesz különbséget a héjon lévő elektronok jellegében

ahol $n = 1, 2, 3, \dots$!!!

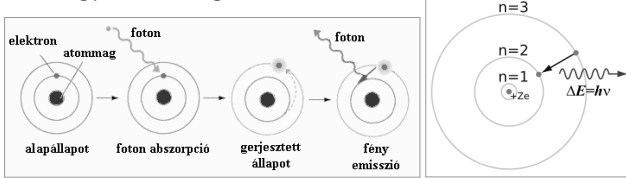
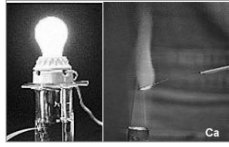


Niels Bohr



A Bohr-féle atommodell

- az adott pályán lévő elektron energiája meghatározott, azon sugárzás nélkül kering
- fénysugárzás akkor lép fel, ha az elektron nagyobb sugarú héjra gerjesztődik (elektromos energia, fény, hő hatására) és onnan visszaesik egy kisebb sugarúra



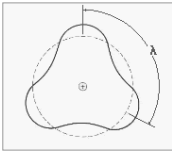
A kvantummechanikai atommodell

- 1923 DeBroglie: az elektron olyan pályán mozog az atomban, hogy állóhullámot alkothasson - a hullámhossz az elektron sebességétől függ

$$\lambda = h / (m v)$$



Louis-Victor Pierre Raymond De Broglie

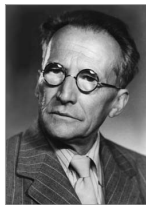


az állóhullám gondolata kiváló

nem síkbeli elrendeződés és nem mozgó elektron

A kvantummechanikai atommodell

- 1926 Schrödinger: egyenlet, megoldásai olyan függvények, amelyek leírják az atomi elektronok háromdimenziós állóhullámainak alakjait - az elektron milyen valószínűséggel tartózkodhat az atom egy megadott helyén
- atompálya vagy atomorbitál
- a hullámfüggvény értelmezése a több-elektronos atomokra, a függvény konstansai kvantumszámok
- az alapállapotú atom elektronjait 4 kvantumszám jellemzi



Erwin Schrödinger

Kvantumszámok

1924

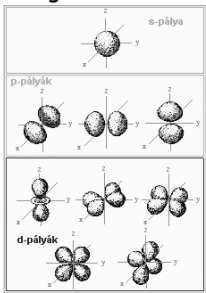
- főkvantumszám: $n = 1, 2, 3, \dots, 7$
 - az elektron energiája a főhéjban (Bohr-modell)
- mellékkvantumszám: $\ell = 0, \dots, (n-1)$
 - jellemzi az elektron impulzusmomentumát
 - a főhéjban belül az alhéjak számát
 - kvantált értékeit a főkvantumszámból
- mágneses kvantumszám: $m_\ell = -\ell \dots 0 \dots +\ell$
 - az impulzusmomentum térbeli irányultságát
- spínkvantumszám: $m_s = +\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}$
 - az elektron jellemzője, annak térbeli impulzusmomentumát növeli vagy csökkenti

Az elektronburok szerkezete

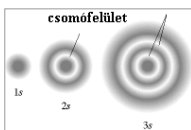
- elektronburok (az atom elektronjainak összessége)
- elektronhéjak - főkvantumszám - $1 \dots 7$ (K, L, M...)
 - alhéjak - azonos fő- és mellékkvantumszámú atompályák alkotják - azonos energiájú pályák
 - atompályák alakja - mellékkvantumszám - s, p, d, f
 $\ell = 0$ s, $\ell = 1$ p, $\ell = 2$ d, $\ell = 3$ f,
 száma - mágneses kvantumszámok száma - (s-hez 1, p-hez 3, d-hez 5, f-hez 7)
 minden atompályán max. 2 elektron lehet - eltérő spínkvantumszámmal - $+1/2, -1/2$

Az atompálya

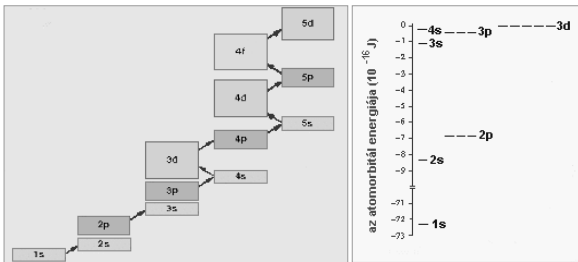
- Az atomnak az a legkisebb térrésze, amelyen belül az adott atommag erőterében lévő elektron legalább 90%-os valószínűséggel tartózkodik



ábrázolása: olyan burkolófelülettel, amelyen belül 90%-os valószínűséggel fordul elő az elektron



Az atompályák energiasorrendje



az elektronhéjak feltöltődési sorrendje
 1s 2s2p 3s3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d

Az elektronszerkezet

- Energiaminimum elve: az elektronok beépülése mindig a lehető legkisebb energiájú szabad helyre történik - megszabja a feltöltődési sorrendet
- Pauli-elv: egy atomban nem lehet két olyan elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik - a spinkvantumszám eltérő egy atompályán két elektron tartózkodhat
- Hund szabály: az azonos energiájú pályákon (alhéjakon) az elektronok úgy helyezkednek el, hogy minél több legyen párosítatlan - megegyező spinkvantumszámú

Az elektronszerkezet jelölése

- betűs módszer - az atompályákat növekvő energia-sorrendben
 - n számmal, ℓ betűvel, elektronok száma felső indexbe
 Fe: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 4s^2 3d^6$
- cellás módszer - atompályákat főhéjak szerinti sorrendbe
 - alhéjakat önálló vagy osztott négyzetek, bennük az elektronokat nyilak



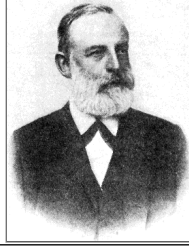
A periódusos rendszer

Az ismert elemek rendszerezése

- jellemző sajátságai és atomtömege (moláris tömeg) alapján

Dimitrij Mengyelejev

Lothar Meyer



Mengyelejev periódusos rendszere

- magyarázat a táblázathoz: hibás atomtömegeket korrigálta ($B \neq 9$), üres helyeket hagyott ki, nem ismert elemek sajátságait megjósolta

Reihen	Gruppe I. R ² O	Gruppe II. RO	Gruppe III. R ² O ³	Gruppe IV. RH ⁴ RO ²	Gruppe V. RH ³ R ² O ⁵	Gruppe VI. RH ² RO ³	Gruppe VII. RH R ² O ⁷	Gruppe VIII. RO ³
1	H = 1							
2	Li = 7	Be = 9,4	B = 11	C = 12	N = 14	O = 16	F = 19	
3	Na = 23	Mg = 24	Al = 27,3	Si = 28	P = 31	S = 32	Cl = 35,5	
4	K = 39	Ca = 40	44	Ti = 48	V = 51	Cr = 52	Mn = 55	Fe = 56, Co = 59, Ni = 59, Cu = 63.
5	(Cu = 63)	Zn = 65	68	72	As = 75	Se = 78	Br = 80	
6	Rb = 85	Sr = 87	?Yt = 88	Zr = 90	Nb = 94	Mo = 96	100	Ru = 104, Rh = 104, Pd = 106, Ag = 108
7	(Ag = 108)	Cd = 112	In = 113	Sn = 118	Sb = 122	Te = 125	J = 127	
8	Cs = 133	Ba = 137	?Di = 138	?Ce = 140				
9	(-)							
10			?Er = 178	?La = 180	Ta = 182	W = 184		Os = 195, Ir = 197, Pt = 198, Au = 199
11	(Au = 199)	Hg = 200	Tl = 204	Pb = 207	Bi = 208			
12				Th = 231		U = 240		

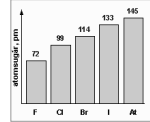
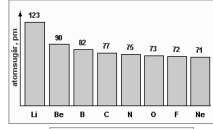
A periódusos rendszer felépítése

- Az elemeket protonszámuk alapján sorba rendezve tartalmazza
- Az utoljára feltöltődő atompálya típusa szerinti területek alakulnak ki - mezők

The diagram illustrates the periodic table with four blocks labeled s, p, d, and f. Arrows indicate the order of orbital filling: s (left to right), p (right to left), d (upward), and f (downward). The periodic table is shown in a standard layout with elements grouped into these blocks.

Az atomok mérete

- meghatározó: a magtöltés és az elektronkonfiguráció - periodikus változás
- növekvő rendszám esetén a periódusban (a sorban) csökken az atom mérete
- növekvő rendszám esetén a csoportban (oszlopban) nő az atom mérete

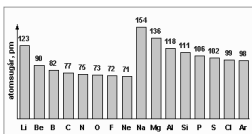


Az atomok mérete

- Két hatás érvényesül
1. A elektronhéjak növekvő száma (főkvantumszám) növeli az atomok méretét - a külső héjak távolabb vannak a magtól
 2. A periódusban a növekvő effektív magtöltés csökkenti az atomok méretét
- Az effektív magtöltés = a magtöltés-számból kivonjuk a belső elektronok befolyásoló hatását kifejező árnyékolási számot $Z_{\text{eff}} = Z - S$

Az atomok mérete

- A magtöltés a rendszámmal monoton változik
- Adott periódusban a belső elektronok száma az s- és p-mező elemeinél azonos - vagyis a legkülső atompályán lévő elektronokra ható effektív magtöltés a rendszámmal folytonosan nő és csökkenti a méretet



az s- és a p-mező elemeinek kovalens atomsugara a 2. és a 3. periódusban

Ionok képződése és mérete

- Ionok képződése - törekvés a nemesgáz szerkezetre, lezárt elektronhéj kialakulásra
- Elektron leadással - pozitív töltésű kation
- Elektron felvétellel - negatív töltésű anion

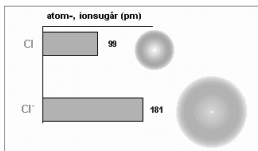
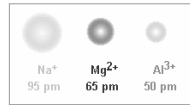
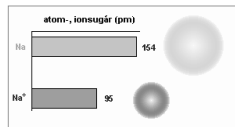
Li ⁺	Be ²⁺				H ⁺	He
Na ⁺	Mg ²⁺	Al ³⁺			S ²⁻	Cl ⁻
K ⁺	Ca ²⁺	Sc ³⁺			Se ²⁻	Br ⁻
Rb ⁺	Sr ²⁺	Y ³⁺			Te ²⁻	I ⁻
Cs ⁺	Ba ²⁺	La ³⁺				Xe

- Ionsugár: Az ionrácsos kristályokban betöltött iontérfogatból meghatározott gömb sugara

nemesgáz szerkezetű ionok

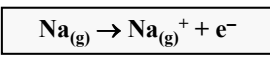
Ionok mérete

- Kation mérete kisebb, mint a semleges atomjéé
- Az izoelektronos kationok mérete a töltés növekedésével egyre kisebb
- Az anion mérete mindig nagyobb, mint a megfelelő semleges atomé - érvényesül az effektív magtöltés és az elektronok taszító hatása



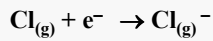
Ionizációs energia

- energia-befektetés, amely pozitív töltésű ionok létrehozásához szükséges
- az első ionizációs energia ahhoz szükséges, hogy 1 mol alapállapotú, gáz halmazállapotú atomból a legkönnyebben leszakítható elektronokat eltávolítsuk, miközben egyszeresen pozitív töltésű kationokat kapunk. Mértékegysége: kJ/mol.

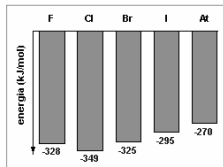


Elektronaffinitás

- Az az energiaváltozás, ami akkor következik be, ha 1 mól gáz halmazállapotú atomból 1 mól egyszeresen negatív töltésű anion keletkezik. Mértékegysége: kJ/mol



Az elektronaffinitás egyes elemek esetén energia felszabadulással jár - ezek stabil aniont tudnak képezni



Elektronegativitás

- A kötésben lévő atom milyen mértékű vonzást fejt ki a kötő elektronokra

- 1934 Mulliken:

$$X = (E_i - E_0) / 2$$

az elektronaffinitás nehezen meghatározható

- Pauling: viszonyszám

$$EN_H = 2,1$$

Linus Clark Pauling



Robert Sanderson Mulliken

Elektronegativitás

- Segítségével jól jellemezhetők az elemek fizikai és kémiai sajátosságai
- Periodikus változás ($EN_{Fr} = 0,7 \rightarrow EN_F = 4,0$) - az atomok méretével ellentétesen
- A kémiai kötések jellegét megszabó tulajdonság

