

A 8. előadása összefoglalása a tankönyv fejezetei alapján

1.2.2. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció

Bár $\psi(x,t)$ önmagában teljesen határozott, a hely és az impulzus külön-külön határozatlan, mégpedig úgy, hogy $\Delta x \Delta p \geq h$, azaz minél pontosabban meghatározott az elektron helye (x), annál kevésbé meghatározott az impulzusa (p) és fordítva. Más megfogalmazásban (az energia-idő változó párra): $\Delta E \Delta t \geq h$.

1.2.3. A kötött állapotú elektron, atomi állapotok

Az elektron állapotfüggvényét az erőter a saját irányába tereli, de a szabad elektron terjedési törvényéből a szétterülésre vonatkozó rész is érvényben marad. A két hatás eredményeként jönnek létre a stacionárius kötött (atomi) elektronállapotok. Az ilyen állapotokban az elektronnak nincs elég energiája ahhoz, hogy a mag környezetét elhagyhassa.

1.4.2. Az elektron spinje és a hozzá tartozó mágneses momentum

Stern-Gerlach-kísérlet (1922): inhomogén mágneses téren áthaladó atomok mágneses momentumuktól függően különböző mértékben eltérülnek. Alapállapotban a hidrogén atom elektronjának nulla az impulzus momentuma ($l = 0$), ezért azt várjuk, hogy nem térül el. Ezzel szemben a nyaláb két részre hasad. A kísérleti eredmény csak úgy magyarázható, ha feltesszük, hogy az elektronnak van egy másik ún. saját mágneses momentuma, ami irányítottága szerint kétféle lehet. Az Einstein-de Haas-kísérlet bizonyította be azt, hogy a saját mágneses momentumhoz, saját impulzusmomentum is társul, ezt nevezzük spinnek.

1.5. Az atommag szerkezete

1.5.1. Az atommagot jellemző adatok áttekintése

Minden atommag nukleonokból, azaz pozitív töltésű protonokból és semleges töltésű neutronokból áll. Tömegük majdnem egyforma, közelítőleg 1 ATE (atomi tömeg egység, a ^{12}C izotóp tömegének 1/12-ed része). A proton töltése ugyanakkora, mint az elektroné, de ellentétes előjelű. Az atom tömegszámát (A) a neutronok (N) és a protonok (Z) együttes száma adja meg: $A = Z + N$. A magtömeg (M_M) és az atomi tömeg (M_A) között az alábbi összefüggés áll fenn: $M_M = M_A - Zm_e$, ahol m_e az elektron tömege.

Az azonos rendszámú, de különböző tömegszámú atomokat az adott elem **izotópjainak** nevezzük.

1.5.2. Az atommagot összetartó kölcsönhatás, tömeghiány, kötési energia

A nukleonok között ható vonzóerőt **magerőnek**, a kölcsönhatást **erős kölcsönhatásnak** nevezzük.

Tömeghiány: $\Delta M = [Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n] - M(A, Z)$. Az atommag energiája jóval kisebb, mint az azt alkotó szabad nukleonok energiáinak összege. Ennek a két energiának a ΔE különbségét a mag kötési energiájának nevezzük. A tömeghiány éppen ezzel az energiakülönbséggel egyenértékű: $\Delta E = \Delta M c^2$, (az Einstein-féle tömeg-energia reláció ($E = mc^2$) alapján). Ez az energia a mag keletkezésekor nagyenergiájú foton vagy más részecske formájában távozik.

Az atommagokban a kötés erősségét jobban jellemezhetjük az **egy nukleonra jutó kötési energiával** ($\Delta E/A$, fajlagos kötési energiával).

Atomi kölcsönhatások, kötéstípusok

Lehetséges osztályozásuk: **intramolekuláris, intermolekuláris; erős, gyenge; elsődleges, másodlagos**

2.1. A kovalens kötés

Intramolekuláris, erős kötés (néhány eV kötési energia; $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$).

A molekulában összekapcsolódó atomokat **közös elektronpályák** elektronjai „tartják össze”.

Ha a pozitív és negatív töltések súlypontja nem esik egybe, akkor **elektrosztatikus kölcsönhatás is** szerepet játszik a kötés létrejöttében. A kovalens kötésű vegyületek többségét elektromos dipólusmomentummal rendelkező **poláris molekulák** alkotják.

(A **fémek kötés** nagyon hasonló, de nincs értelmezve kétatomos relációban (sokatomos rendszerek). Az egész kristályos rendszerre kiterjedő delokalizált vegyértékelektronok tartják össze.)

1.3.3. Kémiai kötés értelmezése a legegyszerűbb molekulában (H_2^+)

Amikor egy alapállapotú hidrogén atom közelében feltűnik egy proton, a lehetséges atomi állapotok (ψ_{a1}, ψ_{a2}) helyett olyan új (ψ_m) (molekuláris) egyensúlyi állapot alakul ki, amelyben az energia határozottan kisebb, mint az eredetiben. A kötést tehát a magokhoz egyformán tartozó, lecsökkent mozgási energiájú elektronállapot valósítja meg. (v. ö. Heisenberg -féle határozatlansági reláció)