

A 9. előadás összefoglalása a tankönyv fejezetei alapján

2.2. Elektrosztatikus kölcsönhatás részvételével kialakuló kötéstípusok

Ionos kötés, a heteropoláris kötések határeseteként, olyan atomok között jön létre, amelyeknek nagyon különböző az elektronegativitásuk. **Elektronegativitás** (Pauling): a semleges atomból előállított pozitív illetve negatív ion létrehozásához szükséges energiák (ionizációs energia illetve elektronegativitás) abszolút értékének összegével arányos. Általában a sokatomos, kristályos rendszerek összetartó kötéstípusa (ionkristály), benne a vonzó kölcsönhatás hosszú hatótávolságú. A kötés energiája néhány eV, erős kötés.

Dipólussal jellemezhető kölcsönhatások: atomcsoportok, molekulák permanens dipólus jellegű töltéeloszlása miatt jönnek létre. A kölcsönhatás erőssége (a dipólussal kölcsönható partnerek ion, dipólus, indukált dipólus természetétől függően) néhányszor $10^{-3} - 10^{-1}$ eV között változhat, tehát gyenge kölcsönhatás.

Az elektrosztatikus kölcsönhatások mind intra- mind intermolekuláris értelemben jelentőséggel bírnak az élő anyag szerkezetének kialakításában.

2.3. Van der Waals kölcsönhatások

Két semleges molekula (vagy egy molekula két része) közötti kölcsönhatás, ha egyikük sem poláris. Egy apoláris molekulában vagy atomcsoportban időlegesen kialakuló dipólus és az általa egy másik **apoláris molekulában** indukált dipólus közötti vonzó erőből (más néven diszperziós vagy London-féle erő) származik. A kölcsönhatás egy taszító erővel párosul. Az energiaminimumnak megfelelő távolság az ún. van der Waals sugarak összege. A kölcsönhatás gyenge, néhányszor 10^{-2} eV.

Az élővilág szerkezeti egységeinek felépítésében, a biokémiai reakciók szerkezeti feltételeinek biztosításában általános és nagyon fontos szerepet töltenek be.

3.2. Gázok

3.2.1. Ideális gáz

Az ideális gáz modelljét úgy képzelhetjük el, hogy egy edényben a nagyszámú (N) gömbalakú részecske rendszertelen mozgást végez, miközben egymással és az edény falával rugalmasan ütköznek. Minden egyéb **kölcsönhatás**, valamint a **részecskék össztérfogata** az edény térfogatához képest **elhanyagolhatóan kicsi**.

A modellben a gáz nyomása a részecskéknek az edény falával való ütközései során kifejtett erőlkédekből származik, a gáz hőmérséklete pedig a részecskék átlagos mozgási energiájával arányos.

A gáz állapotát jellemző paraméterek között az állapotegyenlet teremt összefüggést: $pV = NkT$, ahol N , V , p , T az állapotot leíró termodinamikai paraméterek: részecskeszám, térfogat, nyomás és hőmérséklet; k a Boltzmann-állandó.

3.2.3. Reális gáz

A gázok viselkedésének realisabb leírás érdekében két fontos tényezőt jó, ha figyelembe veszünk. Egyrészt a részecskéknek van saját térfogatuk, másrészt a reális gáz az ideális gáznál valamivel kisebb nyomást fejt ki a falakra, mert amikor egy molekula a falhoz, vagyis a molekulahalmaz széléhez közeledik, a többiek vonzása kissé lefékezi. Ezeket a korrekciókat veszi figyelembe a van der Waals-féle állapotegyenlet:

$(p + aN^2/V^2)(V - Nb) = NkT$, ahol a az anyagi minőségtől függő állandó, amely az intermolekuláris erők nagyságára jellemző, b pedig egyetlen molekula saját térfogata.

3.1. Boltzmann-eloszlás

3.1.1. A részecskék állapotainak eloszlása

Energetikai szempontból egy rendszer állapotát legrészletesebben azzal jellemezhetnénk, ha külön-külön megadjuk minden egyes részecske (N darab) pillanatnyi energiáját. Mivel ilyen sok adattal amúgy sem tudnánk mit kezdeni, célravezetőbb, ha azt adjuk meg, hogy hány darab részecske (n_0, n_1, n_2, \dots) rendelkezik $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2$, stb. energiával. Az n_i betöltési számok egy sorozata, definiálja a rendszer **állapotát**. **Termikus egyensúlyban** (azaz állandó hőmérsékleten, $T = \text{konst.}$) **van egy legvalószínűbb állapot**, ami azt jelenti, hogy a rendszer szinte mindig ugyanebben az állapotban található. Ha teljesül az, hogy a rendszer energiája a részecskék energiájának összege, akkor $n_i/n_j = e^{-\Delta\varepsilon/kT}$, ahol $\Delta\varepsilon = \varepsilon_i - \varepsilon_j$ és k a Boltzmann-állandó. Ez a Boltzmann-eloszlás egy lehetséges felírása, amiből azt olvashatjuk ki, hogy két állapot relatív betöltöttsége csak a kT egységekben mért energiakülönbségtől függ.

3.1.2. Mire használható a Boltzmann-eloszlás? (példák)

A barometrikus magasságformula (hogyan változik a légkörben a nyomás?)

A fémek termikus emissziója (hőhatás következtében létrejövő elektron kilépés)

Koncentrációs elemek (az elektromos feszültség meghatározása: Nerst-egyenlet)

Kémiai reakciók egyensúlya, sebessége (Arrhenius-féle ábrázolás)

3.2.2. A Boltzmann-eloszlás következményei ideális gázban: a Maxwell-féle sebességeloszlás

A Boltzmann-eloszlás ismeretében az is meghatározható, hogy a részecskék egyik, például a függőleges (v_z) sebességkomponense olyan Gauss-eloszlású változó, amelynek várható értéke 0, szórása pedig $\sqrt{kT/m}$ (k a Boltzmann-állandó, T a hőmérséklet, m egy részecske tömege). Ebből v abszolút értékének eloszlását is meghatározhatjuk, és így jutunk a gyakran emlegetett Maxwell-féle sebességeloszláshoz. Míg a Gauss-eloszlás szimmetrikus, a Maxwell-féle eloszlás ferde.

3.3. Szilárd anyagok

3.3.1. A kristályos állapot

Legfontosabb tulajdonsága a **periodikus hosszú távú rendezettség**. Az **ideális kristály** (egyikristály) azonos szerkezeti elemeknek a térben szabályosan ismétlődő végtelen sorozata. Geometriai tulajdonságait, illetve szimmetriáját a **téráccsal** jellemezzük, ami **elemi cellákból** építhető fel. Típusai: atom-, ion-, fém- és molekularács. A kristályos rend általában csak mikroszkopikus távolságokra terjed ki: mikrokristály. A kristályok **anizotropok**, vannak bennük kitüntetett irányok.

3.3.2. Energiasávok

Amint az atomok a kristály felépülése érdekében egyre közelebb kerülnek egymáshoz, a **Pauli-elv érvényre jut**. Az azonos kvantumállapotok elkerülését a rendszer úgy valósítja meg, hogy a kölcsönhatásba kerülő **elektronok atomonként azonos energiaszintje N db közeli szintre „hasad fel”**. Mivel N igen nagy szám, ezért mindegyik atomi energiaszintből felhasadt közeli szintek sokasága egy-egy folytonos energiasávot képez.