

II. E. Elektronállapotok hidrogénatomban

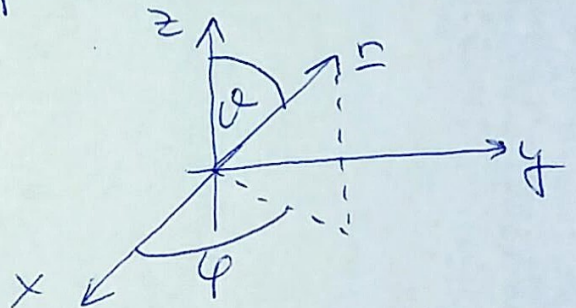
- H-atom: $1e^-$; időfüggetlen SE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(r) = E \psi(r)$$

- Keressük (E, ψ) párokat, melyek stacionárius állapotokat írnak le: $E \in]-\infty, 0]$ és ψ normált.

(szükséges hozzá, hogy $\psi(r \rightarrow \infty) = 0$)

- gömbszimmetria \rightarrow érdemes gömbi polárkoordinátákat használni: $(x, y, z) \rightarrow (r, \vartheta, \varphi)$



- ψ -ket szorzatalakban keressük:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$$

- all: megoldásokat (n, l, m_l) egész számok indexelik:

$n \in \{1, 2, 3, \dots\}$ főkvantumszám

$l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$ mellékvantumszám

$m_l \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ mágneses kvantumszám

$$E_{nlm_l} \equiv E_n = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2} = -1Ry \cdot \frac{1}{n^2} \quad (\text{úgy mint a Bohr-modell})$$

$$\psi_{nlm_l}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi) \quad \text{"gömbfüggvények"}$$

• pályák listája

"energiacsoport", "nívó"

"stacionárius állapot"
"atomi pályák"

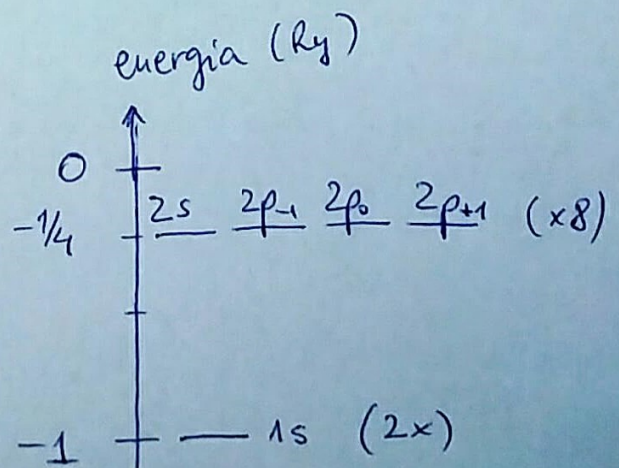
"név"	n, l, m_l	E_{nlm_l}	$\psi_{nlm_l}(r, \vartheta, \varphi)$
1s	1, 0, 0	$-1 R_y$	$R_{10}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2s	2, 0, 0	$-\frac{1}{4} R_y$	$R_{20}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2p	2p ₋₁	$-\frac{1}{4} R_y$	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\vartheta e^{-i\varphi}$
	2p ₀	$-\frac{1}{4} R_y$	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta$
	2p ₊₁	$-\frac{1}{4} R_y$	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\vartheta e^{i\varphi}$
...			

• "degenerált ~~pályák~~ nívó": az $n=2$ főkvantumszámú ~~pályák~~ nívó "négyesen degenerált", mert négy különböző pálya tartozik hozzá.

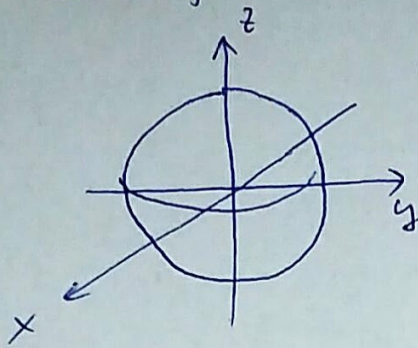
• hányosan degenerált az $n=3$ nívó?

• minden pályához két spinállapot (\uparrow, \downarrow) tartozik

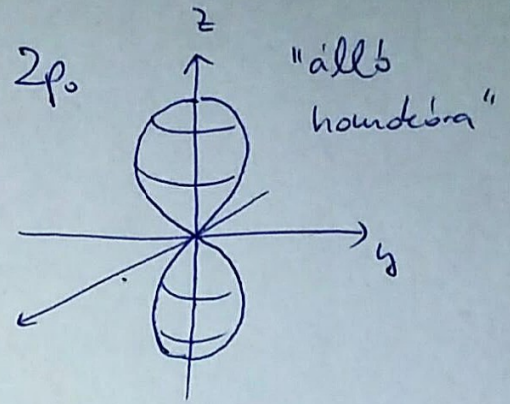
• spin: $n=1$ nívó 2x degenerált
 $n=2$ nívó 8x degenerált
 stb...



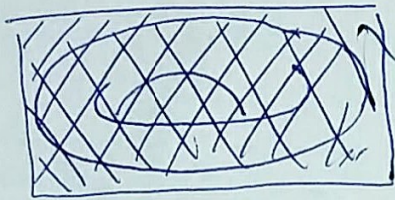
• elektronfelfű alakja:



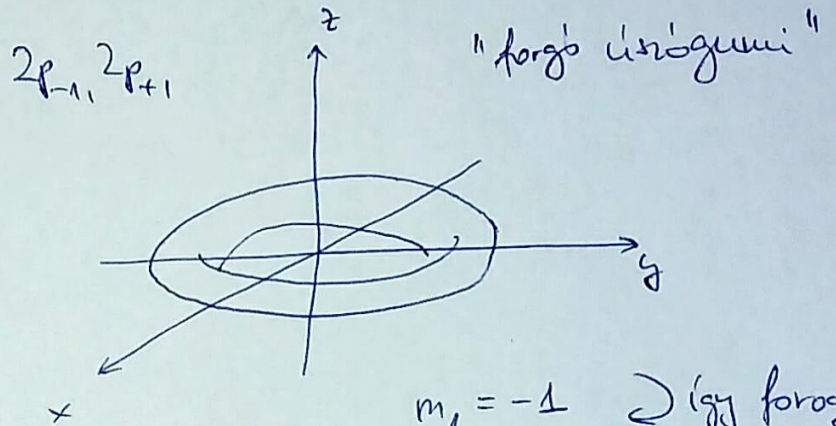
1s, 2s: gömbszerű



"állb hantforma"



mint a Rutherford- és Bohr-modellében



"forgó úrögumi"

$m_l = -1 \rightarrow$ így forgog

$m_l = +1 \rightarrow$ így forgog

• $2p_{-1}, 2p_{+1}$: stacionárius állapotok, mégis "forgogató"?

$$\frac{\hbar}{i} \dot{\Psi}(\underline{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\underline{r}, t) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(\underline{r}, t) = 0$$

$$\dot{\rho}(\underline{r}, t) + \text{div } \underline{j}(\underline{r}, t) = 0 \quad (\text{kontinuitási egyenlet})$$

$$\text{ahd } \rho(\underline{r}, t) = |\Psi(\underline{r}, t)|^2 \quad \text{és} \quad \underline{j}(\underline{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^*(\underline{r}, t) \underline{\nabla} \Psi(\underline{r}, t) - \Psi(\underline{r}, t) \underline{\nabla} \Psi^*(\underline{r}, t) \right] =$$

↑
részeskesűrűség

↑
részeskedram-
sűrűség

$$= \text{Re} \left\{ \Psi^*(\underline{r}, t) \frac{\hat{p}}{m} \Psi(\underline{r}, t) \right\}$$

stacionárius állapotra $\underline{j}(\underline{r}, t) = \underline{j}(\underline{r})$, de lehet hogy $\underline{j}(\underline{r}) \neq 0$,

pl. $2p_{-1}, 2p_{+1}$

II. F. Periódusos rendszer

- megfigyelés: vannak olyan egymástól különböző atomok, melyek kémiai reakcióiban hasonlóan viselkednek.

pl: nemesgázok: He, Ne, Ar... (nem vesznek részt kovalens kötésben)

pl: C, Si, Ge: gyémánt-szerkezetben kristályosodnak

- Csoportok: hasonló "elektron szerkezet"

- Pauli-elv: egy elektronállapotot legfeljebb egy elektron foglalhat be

- He: $\begin{cases} \text{mag: } 2p^+, 2n^+ & (\text{van más izotópjára is: } 2p^+, 1n^+) \\ 2e^- \end{cases}$

${}^3\text{He}$ 0,0002%
 ${}^4\text{He}$ 99,9998%

Mi az alapállapotú elektron szerkezet?

Mi az alapállapotú energia?

Mi az alapállapot degenerációs fok?

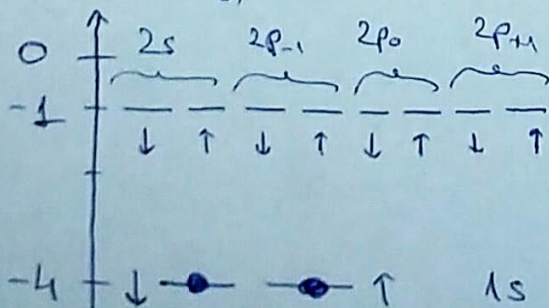
Mi az első gerjesztett állapot energiája és degenerációs fok?

Válaszolj a H-atom megadásából (e-e kössz nélkül):

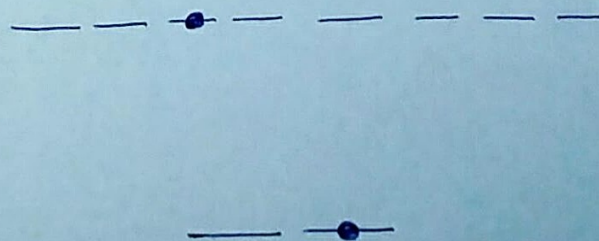
$$\text{He: } -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) - \frac{(2e)^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(r) = E \psi(r)$$

$$\rightarrow E_n^{(\text{He})} = -\frac{1}{2} \frac{m(2e)^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2} = -4R_y \cdot \frac{1}{n^2}$$

energia (R_y)



alapállapotú elektron szerkezet



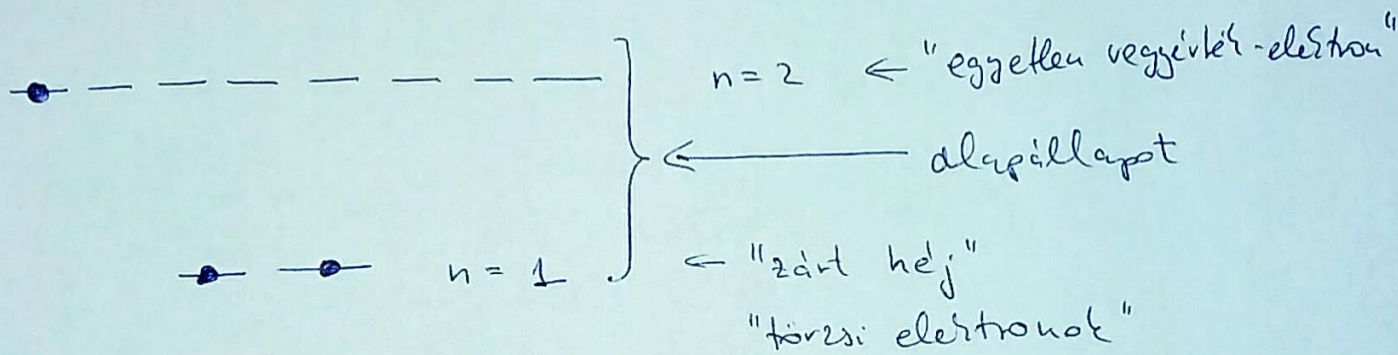
első gerjesztett állapot (pl.)

$$E_{\text{alag}} = -4Ry - 4Ry = -8Ry ; \text{deg: } \times 1$$

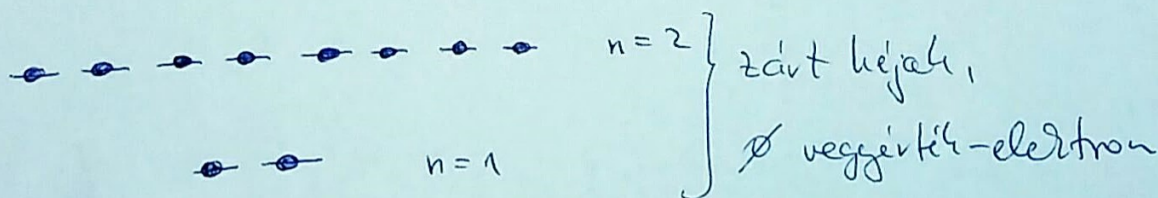
$$E_{\text{elsőj}} = -4Ry - 1Ry = -5Ry ; \text{deg: } \times (2 \times 8) = \times 16$$

• ezek csak becslések; pontosítás kell, pl. e-e-kész figyelembevétel.

• Li: $3p^+$, $3e^-$ (izotópok: ${}^6\text{Li}$ 5% $3n^\circ$
 ${}^7\text{Li}$ 95% $4n^\circ$)



• Ne: $10p^+$, $10e^-$ (izotópok: ${}^{20}\text{Ne}$ 90,48% $10n^\circ$
 ${}^{21}\text{Ne}$ 0,27% $11n^\circ$
 ${}^{22}\text{Ne}$ 9,25% $12n^\circ$)



• következtetések: H és Li hasonlók
 He és Ne hasonlók
 ...