

TOP 50 CHEMICALS: (USA)

Rank			Billions of lb	
	1995	1994	1995	1994
1	1	Sulfuric acid	95.36	89.63
2	2	Nitrogen	68.04	63.91
3	3	Oxygen	53.48	50.08
4	4	Ethylene	46.97	44.60
5	5	Lime (b)	41.23	38.37
6	6	Ammonia	35.60	34.51
7	7	Phosphoric acid	26.19	25.58
8	8	Sodium hydroxide	26.19	25.11
9	10	Propylene	25.69	23.94
10	9	Chlorine	25.09	24.37
11	11	Sodium carbonate (c)	22.28	20.56
12	18	Methyl tert-butyl ether	17.62	13.61
13	14	Ethylene dichloride	17.26	16.76
14	12	Nitric acid	17.24	17.22
15	13	Ammonium nitrate (d)	15.99	17.03
16	16	Benzene	15.97	15.27
22	20	Carbon dioxide (f)	10.89	11.80
27	26	Hydrochloric acid	7.33	7.47
33	33	Acetic acid	4.68	3.98
42	42	Titanium dioxide	2.77	2.76
43	43	Acetone	2.76	2.66
50	49	Bisphenol A	1.62	1.70

*Aggodalmak a társadalomban:
sok túlzás és kémiailag hibás képzet (is)!*

<http://consumerlawpage.com/article/household-chemicals.shtml>

TOP "10" HAZARDOUS HOUSEHOLD CHEMICALS By Richard Alexander

AIR FRESHENERS: Most air fresheners interfere with your ability to smell by coating your nasal passages with an oil film, or by releasing a nerve deadening agent. Known toxic chemicals found in an air freshener: *Formaldehyde:* Highly toxic, known carcinogen. *Phenol:* When phenol touches your skin it can cause it to swell, burn, peel, and break out in hives. Can cause cold sweats, convulsions, circulatory collapse, coma and even death.

AMMONIA: It is a very volatile chemical, it is very damaging to your eyes, respiratory tract and skin.

BLEACH: It is a strong corrosive. It will irritate or burn the skin, eyes and respiratory tract. It may cause pulmonary edema or vomiting and coma if ingested. **WARNING: never mix bleach with ammonia it may cause fumes which can be DEADLY.**

FIGYELEM: a fenti warning marhasága; az internet veszélyei ...

CARPET AND UPHOLSTERY SHAMPOO: Most formulas are designed to over power the stain itself, they accomplish the task but not without using highly toxic substances. Some include: *Perchlorethylene:* Known carcinogen damages liver, kidney and nervous system damage. *Ammonium Hydroxide:* Corrosive, extremely irritable to eyes, skin and respiratory passages.

DISHWASHER DETERGENTS: Most products contain *chlorine* in a dry form that is highly concentrated. # 1 cause of child poisonings, according to poison control centers.

DRAIN CLEANER: Most drain cleaners contain lye, hydrochloric acid or trichloroethane. *Lye:* Caustic, burns skin and eyes, if ingested will damage esophagus and stomach. *Hydrochloric acid:* Corrosive, eye and skin irritant, damages kidneys, liver and digestive tract. *Trichloroethane:* Eye and skin irritant, nervous system depressant; damages liver and kidneys.

FURNITURE POLISH: *Petroleum Distillates:* Highly flammable, can cause skin and lung cancer. *Phenol:* (see Air fresheners, Phenol.) *Nitrobenzene:* Easily absorbed through the skin, extremely toxic.

MOLD AND MILDEW CLEANERS: Chemicals contained are: *Sodium hypochlorite:* Corrosive, irritates or burns skin and eyes, causes fluid in the lungs which can lead to coma or death. *Formaldehyde:* Highly toxic, known carcinogen. Irritant to eyes, nose, throat, and skin. May cause nausea, headaches, nosebleeds, dizziness, memory loss and shortness of breath.

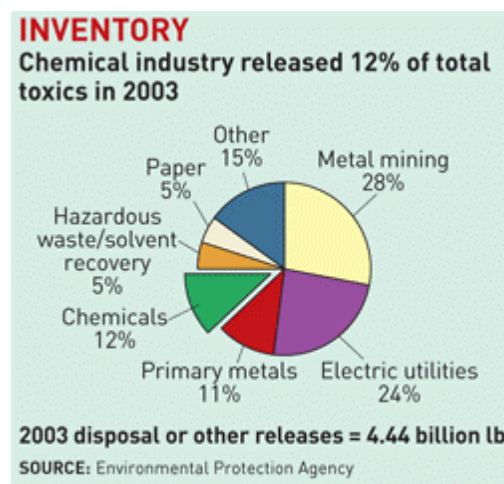
OVEN CLEANER: *Sodium Hydroxide (Lye):* Caustic, strong irritant, burns to both skin and eyes. Inhibits reflexes, will cause severe tissue damage if swallowed.

ANTIBACTERIAL CLEANERS: may contain: *Triclosan:* Absorption through the skin can be tied to liver damage.

LAUNDRY ROOM PRODUCTS: *Sodium or calcium hypochlorite:* Highly corrosive, irritates or burns skin, eyes or respiratory tract. *Linear alkylate sulfonate:* Absorbed through the skin. Known liver damaging agent. *Sodium Tripolyphosphate:* Irritates skin and mucous membranes, causes vomiting. Easily absorbed through the skin from clothes.

TOILET BOWL CLEANERS: *Hydrochloric acid:* Highly corrosive, irritant to both skin and eyes. Damages kidneys and liver. *Hypochlorite Bleach:* Corrosive, irritates or burns eyes, skin and respiratory tract. May cause pulmonary edema, vomiting or coma if ingested. Contact with other chemicals may cause chlorine fumes which may be fatal.

Másokhoz képest:



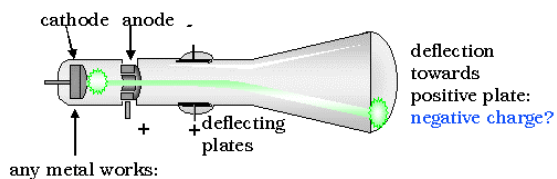
Dalton posztulátumai (1803)

1. Az anyag tovább nem osztható építőkövekből, atomokból áll.
2. Adott elem azonos atomokat tartalmaz.
3. Vegyület: az alkotó elemek atomjaiból épül fel, határozott számarányban.
4. A kémiai reakció: az atomok átrendeződése, új kombinációja.

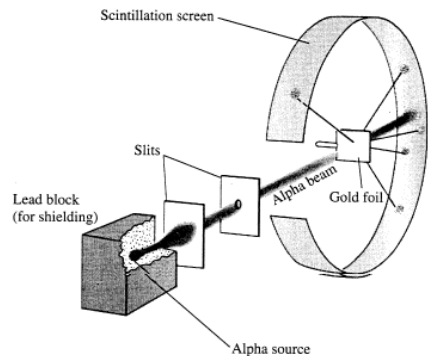
Avogadro tétele (1811) : azonos állapotú (p, T) gázok egyenlő térfogatában egyenlő számú molekula van, függetlenül az anyagi minőségtől.
 Figyelem! következtetés ==> kétagatomos molekulák!!
 (Berzelius vs. Avogadro)

A modern kép

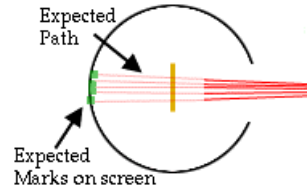
Thompson, 1897: az elektron mint töltött részecske konkrét kimutatása (pudding modell)



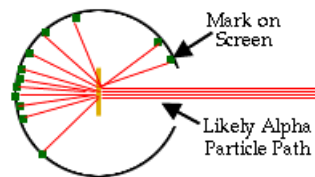
Rutherford, 1911: az atommag parányi tömör centrum az atomban.



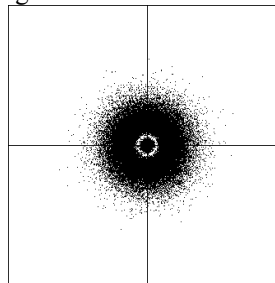
The Predicted Result:



Observed Result:



Mai (*kvantummechanikai*) kép:
 A mag körül "elektronfelhő"



H-atom, 2s (gerjesztett) állapot
<http://www.dartmouth.edu/~genchem/0102/spring/6winn/H.html>

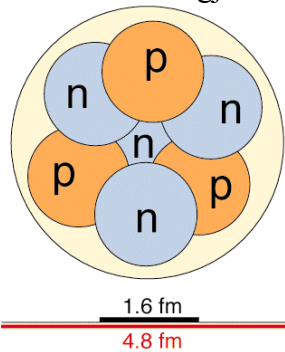
A magnak is van szerkezete:

Table 3-1: The Three Major Subatomic Particles

Name	Charge (a.u.)	Charge/C	Mass/amu	Mass/g
Proton	+1	1.602 x 10 ⁻¹⁹	1.00727	1.673 x 10 ⁻²⁴
Neutron	0	0	1.00866	1.675 x 10 ⁻²⁴
Electron	-1	-1.602 x 10 ⁻¹⁹	0.000548	9.109 x 10 ⁻²⁸

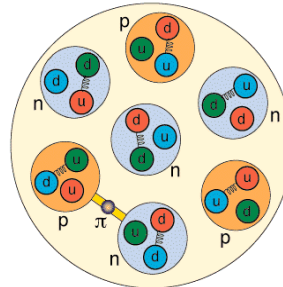
<http://dummies.com/WileyCDA/DummiesArticle/id-1668.html>

Pl. a Li atommagja sematikusan:

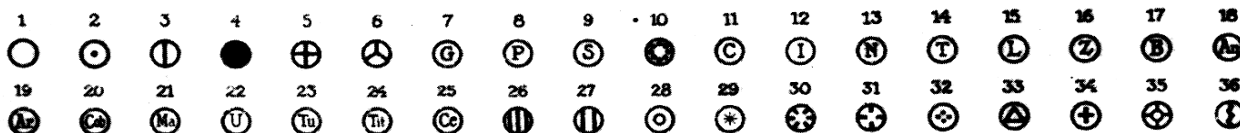


A nukleonoknál sincs vége az oszthatóságnak?

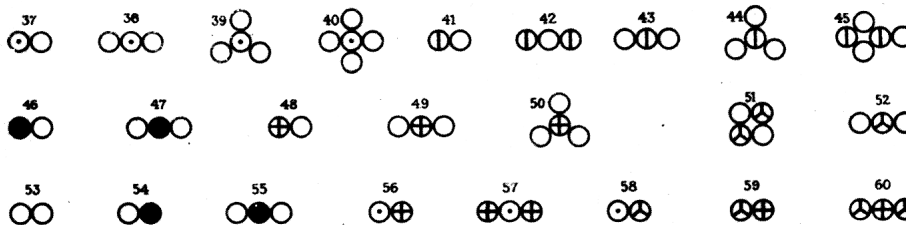
A proton és neutron összetevői a *quark*-ok:



Chemical symbols used by Dalton (19th Century) http://www.levity.com/alchemy/dalton_s.html



Elements. Oxygen. 2. Hydrogen. 3. Nitrogen. 4. Carbon. 5. Sulphur. 6. Phosphorus. 7. Gold. 8. Platinum. 9. Silver. 10. Mercury. 11. Copper. 12. Iron. 13. Nickel. 14. Tin. 15. Lead. 16. Zinc. 17. Bismuth. 18. Antimony. 19. Arsenic. 20. Cobalt. 21. Manganese. 22. Uranium. 23. Tungsten. 24. Titanium. 25. Cerium. 26. Potassium. 27. Sodium. 28. Calcium. 29. Magnesium. 30. Barium. 31. Strontium. 32. Aluminium. 33. Silicon. 34. Yttrium. 35. Beryllium. 36. Zirconium



Compounds. 37. Water. 38. Hydrofluoric acid. 39. Hydrochloric acid. 40. Chloric acid. 41. Nitric oxide. 42. Nitrous oxide. 43. Nitric acid. 44. Nitrogen peroxide. 45. Nitrous acid. 46. Carbon monoxide. 47. Carbon dioxide. 48. Sulphur dioxide. 49. Sulphurous acid. 50. Sulphuric acid. 51. Phosphorous acid. 52. Phosphoric acid. 53. Ammonia. 54. Ethylene. 55. Methane. 56. Compounds of sulphur and hydrogen. 57. Compounds of sulphur and hydrogen. 58. Compounds of sulphur and phosphorus. 59. Compounds of sulphur and phosphorus

Az SI-alapegységek definíciója

Forrás: Riedel Miklós, A fizikai-kémiai definíciók és jelölések

Hosszúság: a **méter** annak az útnak a hosszúsága, amelyet a fény vákuumban $1/(299\,792\,458)$ -ad másodperc alatt tesz meg. (17. CGPM, 1983.)

Tömeg: * a **kilogramm** az 1889. évben Párizsban megtartott Első Általános Súly- és Mértékügyi Értekezlet által a tömeg etalonjának elfogadott, a Nemzetközi Súly- és Mértékügyi Hivatalban, Sevresben őrzött Pt-Ir henger tömege. (3. CGPM, 1901.)

Idő: a **másodperc** az alapállapotú ^{133}Cs -atom két hiperfinom energiaszintje közötti átmenetnek megfelelő sugárzás 9 192 631 770 periódusának időtartama. (13. CGPM, 1967.)

Áramerősség: az **amper** olyan állandó elektromos áram erőssége, amely két párhuzamos, egyenes, végtelen hosszúságú, elhanyagolhatóan kicsiny kör keresztmetszetű és egymástól 1 m távolságban vákuumban levő vezetőben áramolva, e két vezető között méterenként 2×10^{-7} newton erőt hoz létre. (9. CGPM, 1948.)

Hőmérséklet: a **kelvin** a víz hármaspontja termodinamikai hőmérsékletének $1/(273,16)$ -szorososa. (13. CGPM, 1967.)

Anyagmennyiség: a **mól** annak a rendszernek az anyagmennyisége, amely annyi elemi egységet tartalmaz, mint ahány atom van 0,012 kilogramm ^{12}C -ben. Az elemi egység fajt'j't meg kell adni; ez atom, molekula, ion, elektron, más részecske vagy ilyen részecskének meghatározott csoportja lehet. (14. CGPM, 1971.)

Fényerősség: A **kandela** az olyan fényforrás erőssége adott irányban, amely 540×10^{12} hertz frekvenciájú monokromatikus fényt bocsát ki, és sugárerőssége ebben az irányban 1/683 watt per szteradián. (16. CGPM, 1979.)

CGPM: *Conférence Generale des Poids et Mesures.*

*** Új javaslatok egyre erősödnek! A kilogrammot is természeti állandóhoz kötni:**

Chemical & Engineering News, July 18, 2005, Volume 83, Number 29, pp. 29-31

Mills and coauthors The group proposes that the kilogram should be redefined so as to fix its value for all time to a specific value of either the Planck constant or the Avogadro constant, both of which are invariants of nature. The uncertainties of many of the fundamental constants would then immediately be reduced by more than a factor of 10, Mills says.

Prefixumok:

Faktor: 10^n , n=	prefixum	szim- bórum	Faktor: 10^n , n=	prefixum	szim- bórum
18	exa	E	-1	deci	d
15	peta	P	-2	centi	c
12	tera	T	-3	milli	m
9	giga	G	-6	mikro	μ
6	mega	M	-9	nano	n
3	kilo	k	-12	piko	p
2	hekto	h	-15	femto	f
1	deka	da	-18	atto	a

1. Mechanikus ...
2. "Elektronikus"; valójában: **elektromágneses**
<http://www.sensorsmag.com/articles/0602/27/main.shtml>

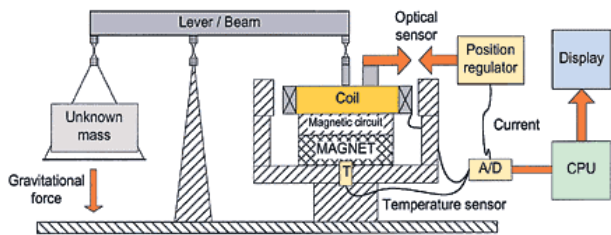
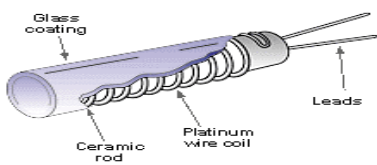


Figure 1. Electromagnetic force restoration (EMFR) balances can be thought of as sophisticated descendents of the classical pan balance. Instead of the pan balance's knife-edges, flexible bearings compensate the gravitational force exerted by the mass to be weighed. An optical sensor detects the zero position that indicates a state of equilibrium

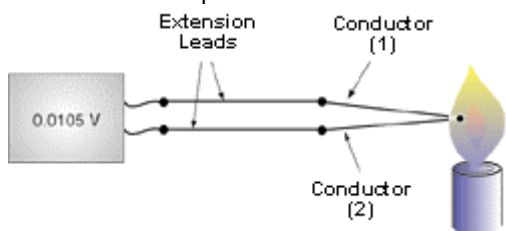
A hőmérséklet mérése www.npl.co.uk/npl/publications/temperature/temp5.html

1. Folyadékhőmérők: üvegben higany, alkohol
2. Ellenálláshőmérők

In the modern world, mercury and spirit-filled thermometers have largely given way to electrical devices, which can be digitised and automated. **Platinum resistance thermometers** are electrical thermometers which make use of the variation of resistance of high-purity platinum wire with temperature. This variation is predictable, enabling accurate measurements to be performed. They are sensitive and, with sophisticated equipment, measurements, can routinely be made to better than a thousandth part of 1 °C...



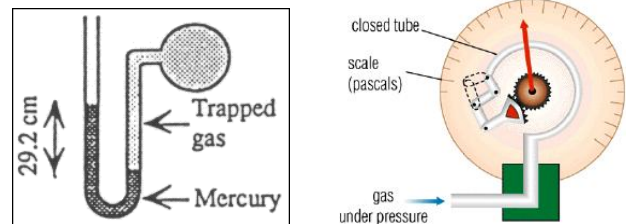
3. Termoelem. Thermocouples are the most common sensors in industrial use. ..., the original paper on thermoelectricity by Seebeck [was] published in 1822. They consist of two dissimilar metallic conductors joined at the point of measurement. When the conductors are heated a voltage is generated in the circuit, and this can be used to determine the temperature.



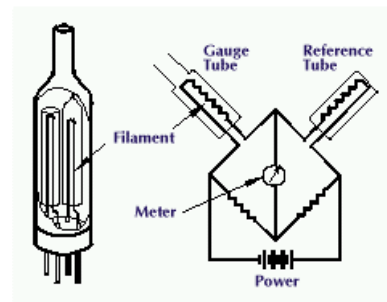
4. Sugárzási hőmérők: Radiation thermometers, or **pyrometers**, make use of the fact that all objects emit thermal radiation, as seen when looking at the bars of an electric fire or a light bulb. The amount of radiation emitted can be measured and related to temperature using the Planck law of radiation. Temperatures can be measured remotely using this technique, with the sensor situated some distance away from the object. Hence it is useful for objects that are very hot, moving or in hazardous environment.

A nyomás mérése (manométer, barométer)

Higanyos: nyitott (itt) vagy zárt. Bourdon:



Kis nyomások (vákuummérők):
 a) Pirani (gáz hővez.képessége p-től függ)



b) **Ionizációs Vákuummérő:** izzó katódból kilépő, felyorsított elektronok ionizálják a gáz molekuláit. Ionáram erőssége a nyomás mértéke ...Piraninál is érzékenyebb.

Térfogatmérés

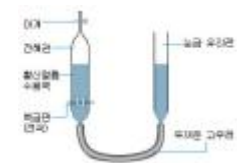
folyadék: kalibrált üvegedények: *mérőbenger, pipetta, büretta, mérőlombik*

gázok: *eudiométercső, gázbüretta*

Szilárd: *piknométer* (tképp rögtön sűrűség is)



piknométer



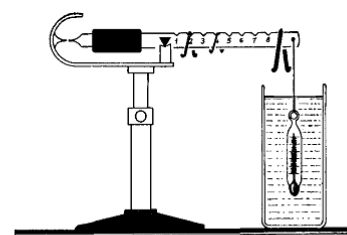
eudiométer

Sűrűségmérés

Folyadékok sűrűsége:



Areométer



Mohr-Westphal

Szilárd anyagok sűrűsége: lásd térf.

Oldatok, koncentrációk.

Molaritás ...mol/L.

Mivel 1 mól A anyag ált. nem 1 mól B-vel reagál, hasznos fogalom (rég): "egyenértéksúly", vagy *val*
 $val = \frac{mol}{n}$; *n* a reakcióra jellemző szám, melyet úgy definiálunk, hogy:

1 val A anyag 1 val B-vel reagál.

n értéke: savaknál: aktív H-ek száma (értékűség)

bázisoknál: aktív OH-k száma;

redoxi reakciókban: ox. szám változása (l. alább)

Angol: *equivalent*

"Normalitás": val/L.

Ionreakciók, elektrolitok

Arrhenius-elm(188?): az áramot vezető oldatokban elevé töltéssel bíró részecskék vannak!

Def.: Elektrolit olyan kondenzált fázis, amely vezeti az elektromos áramot.Elektrolitokban a tényleges reagáló *speciesszek* ionok**Sav-bázis elméletek** Arrhenius; Brønsted-Lowry; Lewisa) *Arrhenius* (~1890) : vizes oldatokra;

Sav: az oldat [hidr]oxónium-ion koncentrációját növeli,

Bázis: hidroxid-ion

A közömbösítési r.: $\boxed{\text{sav} + \text{bázis} \rightarrow \text{só} + \text{víz}}$ b) *Brønsted-Lowry* (1923): hidroxid nem szerepel a

def.ban >> nem csak vizes oldatokra használható (sőt,

oldószer jelenléte egyáltalán nem feltétel)

sav - proton donor; bázis - proton akceptor

alappélda: $\text{NH}_3(\text{g}) + \text{HCl}(\text{g}) \rightarrow \text{NH}_4^+(\text{s}) + \text{Cl}^-(\text{s})$ sav és bázis mindig párban: Konjugált sav-bázis pároksavas oldat: $\text{HF} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{F}^-$ sav₁ bázis₂ sav₂ bázis₁*autoionizáció (öndisszociáció)*: $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$

Hasonlóan, cseppf. ammóniában:

 $\text{NH}_3 + \text{NH}_3 \leftrightarrow \text{NH}_4^+ + \text{OH}^-$

Jégecetben: ...

c) *Lewis* (1923) oldószertől hangsúlyozottan megszabadul,s a protont is kikapcsolja a def.ból;Értsük meg a logikáját: anhidridek vegyülése ugyanúgy sót

ad, mint sav+bázis

pl. $\text{Na}_2\text{O} + \text{SO}_3 \rightarrow \text{Na}_2\text{SO}_4$ a lényeg: $\text{O}^{2-} + \text{SO}_3 \rightarrow \text{SO}_4^{2-}$

elektronpár átadása (l. el. szerk.nél részletesebben)

Tipikus Lewis-sav: AlCl_3 Oláh György: szupersavak (*superacids*)Pl. SbF_5 és HF elegyeLewis-hoz:

<http://dbhs.wvusd.k12.ca.us/webdocs/AcidBase/Intro-to-Lewis-AcidBase.html>

Gilbert Newton Lewis is one of the great chemists in history. His greatest discovery may well be the theory of

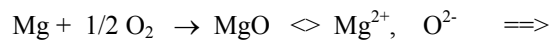
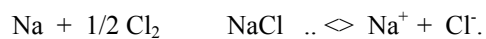
the covalent bond in 1916, but he made many other contributions. One was his theory of acids and bases.

In 1923, he wrote: "We are so habituated to the use of water as a solvent, and our data are so frequently limited to those obtained in aqueous solutions, that we frequently define an acid or a base as a substance whose aqueous solution gives, respectively, a higher concentration of hydrogen ion or of hydroxide ion than that furnished by pure water. This is a very one sided definition"

"We are inclined to think of substances as possessing acid or basic properties, **without having a particular solvent in mind**. It seems to me that with complete generality we may say that *a basic substance is one which has a lone pair of electrons which may be used to complete the stable group of another atom*, and that *an acid is one which can employ a lone pair from another molecule* in completing the stable group of one of its own atoms."

Redoxi reakciók, oxidációs szám

Pl. magnézium égetése:

*elektronátadás*oxigén nélküli esetre is általánosítunk:oxidáció - elektron leadása; redukció - elektron felvételeEgyenletírás (ionegyenletet írjunk):

- oxidációs számok kiegyenlítése

- töltésmérleg: vizes oldatban mindig van H^+ , OH^- , ill. H_2O , ezeket megfelelő oldalra írva állíthatjuk helyre a mérleget

- anyagmérleg (atomok száma) már csak ellenőrzés

Titrálások (titrimetria)térfogatós analízis \triangleleft volumetria;A sztöchiometriai egyenlet alapján $\dots n_a A + n_b B + \dots \rightarrow$

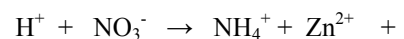
ha egyik mennyiséget (koncentrációt) ismerem, a másik meghatározható.

Feltétel: jelezni kell az "ekvivalenciapontot"

Műszavak: mérőoldat, faktorozás, fogyás, végpont, indikátor

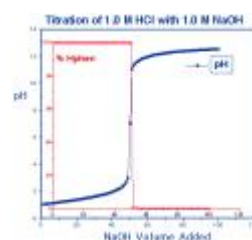
normalitás - már említettük oldat konc.-nál ...

Egy extrém példa: salétromsav redukálása cinkkel:



val = mol/8; viszont savként

Titrimetria két legalapvetőbb típusa:

sav-bázis, ill. redoxi titrálások

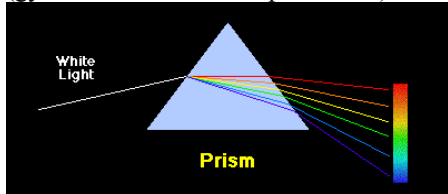
1. A H-atom színe (Balmer, 188?)

<http://csep10.phys.utk.edu/astr162/lect/light/absorption.html>

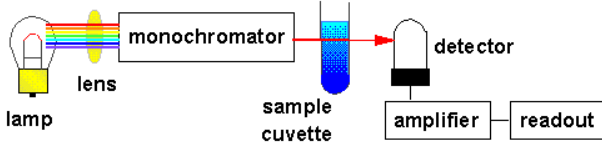
a) Mi a spektroszkópia?

Az anyagok fényt nyelnek el (abszorpció), ill. bocsátanak ki (emisszió).

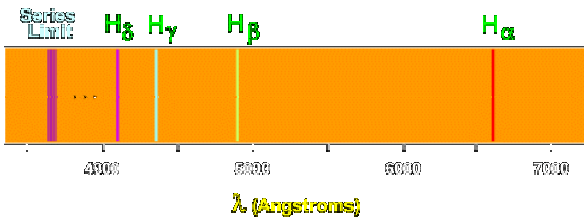
Az (összetett) fény komponenseinek elnyelése (ill. a kibocsátott hullámhosszak) nagyon jellemző az anyagra. Felbontás legegyszerűbb módja: prizma (gyakorlat ma inkább: optikai rács)



Egy mai ("egysugaras") spektrométer elvi vázlata:



b) Balmer 1885: az atomos hidrogén spektruma a látható fény tartományában.



4 vonalat észlelt: 410 nm, 434 nm, 486 nm, and 656 nm. Ezekre egyszerű képlet adódott:

$$1/\lambda = \text{const.} (1/2^2 - 1/n^2)$$

ahol $n = 3, 4, 5, 6$

<http://dbhs.wvusd.k12.ca.us/webdocs/Electrons/Balmer-Formula.html>

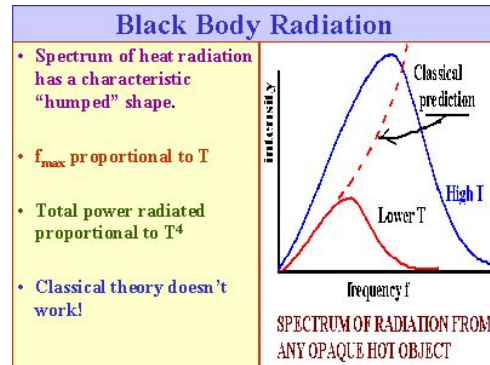
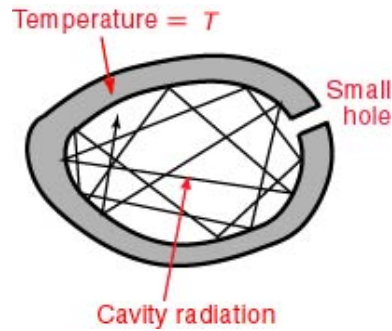
At the time, Balmer was nearly 60 years old and taught mathematics and calligraphy at a high school for girls as well as giving classes at the University of Basle. Balmer was very interested in mathematical and physical ratios and was probably thrilled he could express the wavelengths of the hydrogen spectrum using integers.

Balmer was devoted to numerology and was interested in things like how many sheep were in a flock or the number of steps of a Pyramid. He had reconstructed the design of the Temple given in Chapters 40-43 of the Book of Ezekiel in the Bible. How then, you may ask, did he come to select the hydrogen spectrum as a problem to solve?

One day, as it happened, Balmer complained to a friend he had "run out of things to do." The friend replied: "Well, you are interested in numbers, why don't you see what you can make of this set of numbers that come from the spectrum of hydrogen?" (In 1871 Ångström had measured the wavelengths of the four lines in the visible spectrum of the hydrogen atom.)

Balmer published his work in two papers, both published in 1885. The first, titled 'Notiz über die Spektrallinien des Wasserstoff,' is the source of the equation above. He also gives the value of the constant (3645.6×10^{-7} mm.)

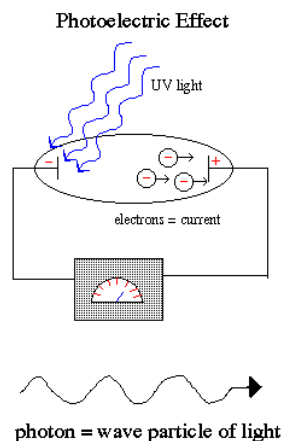
2. A fekete test sugárzása



Planck, 1900: kísérlettel egyezés akkor van, ha feltesszük: a falat alkotó oszcillátorok energiája $h\nu$ kvantumokból áll. (Ő maga is nagyon bizonytalan, hogy mit jelenthet ez. ... [Képletben: ϵ_ν (átlag) = $\{h\nu \exp(-h\nu/kT) + 2h\nu \exp(-2h\nu/kT) + 3h\nu \exp(-3h\nu/kT) + \dots\} / \{1 + \exp(-h\nu/kT) + \exp(-2h\nu/kT) + \exp(-3h\nu/kT) + \dots\} = h\nu / (\exp(+h\nu/kT)-1)$]

3. A fotoelektromos effektus

kísérletek: Lenard és mások.



Elektronok kilépése \Rightarrow áram
Bizonyos frekvencia alatt (piros fény) nincs áram, akármilyen erős a megvilágítás. Hullámmozgás esetén ez teljesen érthetetlen.

Einstein, 1905: használjuk fel a Planck "kvantumjait". A foton energiája legyen kvantált:

$$E = h\nu$$

A kilépő elektron mozgási energiája ekkor:
 $E_{kin} = h\nu - A$; A : kilépési munka.
Csak akkor tud kilépni, ha $h\nu > A$.

Fénnyel kapcsolatos alapfogalmak:

λ : hullámhossz [m], ill. nm, Å, stb.;
 ν : frekvencia [1/s]; ν^* : hullámszám [1/m], inkább: $1/\text{cm}$ (cm^{-1})
 c : fénysebesség [m/s] 3×10^{10} cm/s

Összefüggés: $\lambda = \frac{c}{\nu}$, illetve $\nu^* = \frac{1}{\lambda}$

polarizáció: egy síkban rezeg csak a hullám (pl. lézer)
 transzverzális hullám: a haladás irányára \perp rezeg csak.
 Az el.mágn. hullám tartományai: 1. Brady Fig. 7.2

Megjegyezni: a sorrendet, és : látható fény 400 – 800nm

A H-atom Bohr-modellje, levezetés

Jelölések: T = kinetikus energia;
 I = tehetetlenségi nyomaték; L = I ω , impulzus-momentum;
 $\omega = 2\pi\nu$, körfrekvencia.
 m_e = elektron tömege e = elektron töltése;

A kvantálás: Tegyük fel, hogy a kinetikus energia a következő képlet szerint kvantált:

$T = (1/2) n h \nu$ $n=1,2,3,..$ (1a)

körmozgásnál:

$T = (1/2)I\omega^2 = (\text{ez tehát}) = (1/2) n h \nu$

Ezek szerint az impulzusmomentum is kvantált:

$L = I\omega = n h \nu / \omega = n (h/2\pi)$ (1b)

[(1a) és (1b) ekvivalens megfogalmazás].

Mit akarunk? pályasugár (r), majd E energia:

ált., körmozgásra: $I = m_e r^2$ ezzel (1b)-ből:

$I \omega = m_e r^2 \omega = n (h/2\pi)$ (1c)

Fentiek, (1a)-(1c) csak a kvantálás.

Most nézzük az egyensúlyt a keringés feltételeként, klasszikusan; centrifugális erő = Coulomb-vonzás

$m_e r \omega^2 = (1/4\pi\epsilon) e^2/r^2$ (2)

(1c)-ből $\omega = n (h/2\pi) / (m_e r^2)$, és ω^2 -et (2)-be írva:

$m_e r n^2 h^2 / (4\pi^2 m_e^2 r^4) = (1/4\pi\epsilon) e^2/r^2$

Utóbbiból rögtön adódik: [szokásos jelölés $(h/2\pi) \equiv \hbar$]

$r = n^2 (\hbar^2/m_e e^2) = n^2 a_0$

[1. később, kvantummechanikai leírás, "atomi egységek":

ha $n = 1$, $a_0 = 4\pi\epsilon (\hbar^2/m_e e^2)$ Megállapodás szerint az *atomi hosszegység*, 1 *bohr*; $a_0 = 0.529177 \text{ \AA}$. (Továbbiakban r már a_0 egységben, permittivitás a_0 -ban már benne van.)

Energia: a) kinetikus: $T = (1/2) I \omega^2 = (1/2) m_e r^2 \omega^2$

(2)-t $r/2$ -vel szorozva: $T = (1/2) r e^2/r^2 = (1/2) e^2/r$

b) a Cb-vonzás potenciális energiája: $V = - e^2/r$

Végül: $E = T + V = - (1/2n^2) (e^2/a_0)$

$e^2/a_0 = E_h = 4.36 \text{ aJ}$, "hartree", az energia atomi egysége

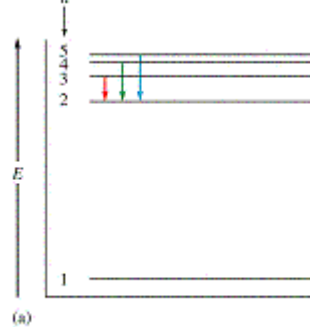
Ezzel, tömören, a H-atom energiája:

$E = - (1/2n^2) E_h$

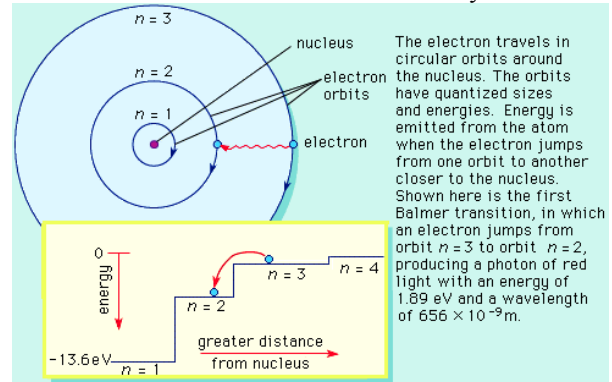
[Megj.: látjuk, $V = -2 T$; az un. *virial tétel*]

A Balmer-képlet ezzel magyarázatot nyert!!

Energiaszintek sematikusan:



"Pályák:"



Az anyag kettős természetéhez:

Fény részecske is: 1. fotoelektromos effektus

Elektron hullám is: de Broglie "heurisztikus" gondolatmenete: (nem igazi levezetés!)

a) Relativitáselméletből: (Einstein, Poincaré)

$E = m c^2$

b) másrészt, a fotoelektromos eff.ból

$E = h\nu$

Kettőt egyesítve, a foton impulzusa:

$p = mc = h\nu/c = h / \lambda$, ill.: $\lambda = h / p$

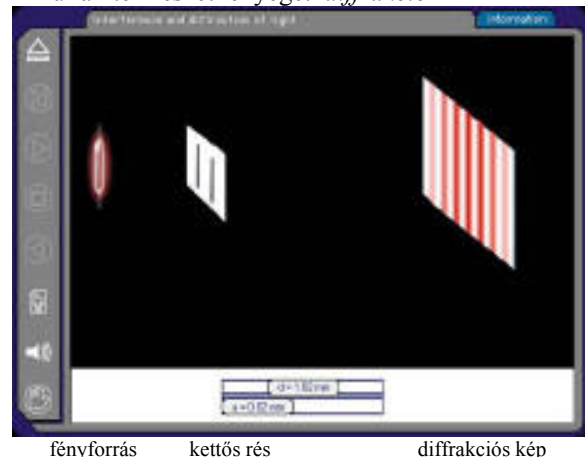
a kv.mech. egyik legalapvetőbb formulája ...

Kísérleti igazolás:

elektrondiffrakció; Davisson és Germer, 1927.

Ma: gáz-el.diffr.; molekulák geometriájának meghatározása!!

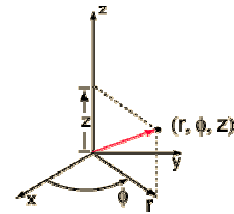
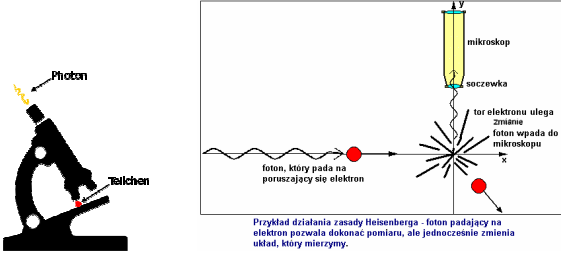
A hullámtermészet lényege: *diffrakció*



A Heisenberg-féle bizonytalansági elv

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2; \text{ itt } \hbar \equiv h/2\pi$$

$h = 6.62620 \cdot 10^{-34} \text{ Js, nagyon kicsi}$



A Schrödinger-egy. megoldása során 3 kv. szám lép fel:

- n – főkvantumszám: 1,2,3,...
- l – mellékvantumszám: 0,1,2,... (n-1)
- m – mágneses kvantumszám: -1,-1+1,...,0,1,...,1 (2l+1)-féle érték

A kvantumszámok lehetséges értékei, áttekintés:

N	l	jelölés	m	pályák száma
1	0	1s	0	1
2	0	2s	0	1
	1	2p	-1, 0, 1	3
3	0	3s	0	1
	1	3p	-1, 0, 1	3
	2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	5
	4	4s	0	1
	1	4p	-1, 0, 1	3
	2	4d	-2, -1, 0, 1, 2	5
	3	4f	-3,-2,-1, 0, 1, 2, 3	7

A Schrödinger-egyenlet

Szimbolikusan: $\hat{H}\Psi_i = E_i\Psi_i$

Schrödinger gondolatmenete az optika klasszikus alapegyenletével indít: legyen $f(x,y,x,t)$;

$$\partial^2 f / \partial x^2 + \partial^2 f / \partial y^2 + \partial^2 f / \partial z^2 = c^{-2} \partial^2 f / \partial t^2 \quad (1)$$

1 dim.ban, egy partikuláris megoldás:

$$f = \psi(x) e^{i\omega t}; \text{ ezt (1)-be írva:}$$

$$e^{i\omega t} d^2\psi/dx^2 = c^{-2} (-\omega)^2 e^{i\omega t} \psi(x)$$

de Broglie nyomán, a hullámhossz legyen: $\lambda = h/p$

$$\text{Igy: } d^2\psi/dx^2 = -4\pi^2 p^2/h^2 \psi = -p^2/\hbar^2 \psi$$

$$-\hbar^2/2m d^2\psi/dx^2 = p^2/2m \psi;$$

$$p^2/2m = T(\text{kin.en.}) = E - V$$

A Schrödinger egyenlet 1-dimenziós mozgásra:

$$-\hbar^2/2m d^2\psi/dx^2 + V\psi = E\psi$$

Modell-példa: a potenciáldoboz

$$V(x) = +\infty, \text{ ha } x < 0, \text{ vagy } x > L,$$

$$V(x) = 0 \text{ if } 0 < x < L.$$

Csak kinetikus energia van, így:

$$-\hbar^2/2m d^2\psi/dx^2 = E\psi$$

Peremfeltétel: a falnál ψ zérusba megy;

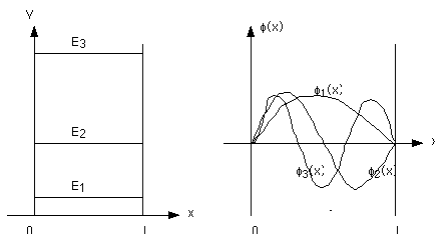
A megoldások, n kv. szám. szerint:

Energiaik:

$$E_n = k^2 \hbar^2 / 8 \pi^2 m = n^2 \hbar^2 / 8 L^2 m,$$

és a hullámfüggvények

$$\phi_n(x) = A \sin(n\pi x / L).$$



A H-atom kvantummechanikai leírása

Szimbolikusan tehát: $\mathbf{H}\psi_i = E_i\psi_i$

A Schrödinger-egyenletben a rendszert specifikálja: a $V = -e^2/r$ a potenciális energia (semmi "különleges" effektus nincs, csak elektrosztatikus kcsk. a mag és elektron között - Coulomb-vonzás) $\psi(x,y,z)$ 3 koordináta függvénye.

Praktikusabb: polárkoordináták

2005/8

A kvantumszámok jelentése:

$$n : \text{energia } E_n = -\frac{1}{2n^2} (E_h)$$

ugyanaz, mint a Bohr-modellben!!

l : az **impulzusmomentum** nagyságát határozza meg:

$$|L| = \sqrt{l(l+1)}(\hbar)$$

m : az **impulzusmomentum z-komponensét** határozza meg

$$L_z = m(\hbar)$$

[elevenítsük fel: körmozgás; $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$, ahol \underline{r} a helyvektor, \underline{p} az impulzus, $\underline{p} = m\underline{v}$;

L nagyságára ez is: $v = r\omega$; $L = mr^2\omega = I\omega$

I a tehetetlenségi nyomaték, ω a szögsebesség]

Keringő töltés - kis elemi **mágnes**; imp. mom. egyben **mágneses momentumot** is jelent, ennek nagysága, ill. z-vetülete úgy adódik, mint fent, csak az egység most a *bohr-magneton*:

$$\text{mechanikai mom. } \hbar \Leftrightarrow \frac{e}{2m_e c} \hbar = \mu_b \text{ mágneses mom.}$$

A rendszert a hullámfüggvény (*állapotfüggvény*) írja le:

$$\psi_i(x,y,z), \text{ vagy explicite kiírva a kv.számokat:}$$

$$\Psi_{nlm}(x,y,z)$$

Jelen esetben ψ az elektron „pályája (orbital)”. Néhány függvény konkrétan ("atomi egységeket" használva):

$$1s \text{ pálya, } \Psi_{1,0,0} = \text{const. } e^{-r}$$

$$2s \text{ pálya, } \Psi_{2,0,0} = \text{const.}(2-r) e^{-r/2}$$

$$2p_z \text{ pálya, } \Psi_{2,1,0} = \text{const. } r e^{-r/2} \cos\theta, \text{ ahol } \theta \text{ a polárkoordináták}$$

A hullámfüggvény nem a klasszikus értelemben adja meg a részecske mozgását. (nincs is benne t, idő). Csak statisztikus-valószínűségi kijelentés tehető, melyben Ψ négyzete jelenik meg: $|\Psi(x,y,z)|^2 dx dy dz$ annak a valószínűsége, hogy az elektron az x,y,z pont körüli $dx dy dz$ infinitezimális térfogatelemben van.