



SZÉCHENYI ISTVÁN  
EGYETEM  
GYŐR

# Anyagszerkezet

Horváth András  
SZE, Fizika és Kémia Tsz.

2006. szeptember 29.

Magyarország célba ér



Készült a HEFOP 3.3.1-P.-2004-09-0102/1.0 pályázat támogatásával



## Bevezetés

- Bevezetés

## Molekulafizika

## Az ionos kötés

## A kovalens kötés

## A molekulák kötéshossza és kötési energiája

## A molekulák energiaszintjei

## Másodlagos kötések

## A szilárdtestek szerkezete

## Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# Bevezetés



## Bevezetés

### • Bevezetés

### Molekulafizika

### Az ionos kötés

### A kovalens kötés

### A molekulák kötéshossza és kötési energiája

### A molekulák energiaszintjei

### Másodlagos kötések

### A szilárdtestek szerkezete

### Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# Bevezetés

## Az anyag kis építőkövei:

- **Atommagok** (radioaktivitás, hasadás és fúzió)
- **Atomok** (elektronhéjak szerkezete, kémiai elemek tulajdonságai, atomok színeképe)

Erről tanultunk az előzőekben.



## Bevezetés

### • Bevezetés

### Molekulafizika

### Az ionos kötés

### A kovalens kötés

### A molekulák kötéshossza és kötés energiája

### A molekulák energiaszintjei

### Másodlagos kötések

### A szilárdtestek szerkezete

### Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# Bevezetés

## Az anyag kis építőkövei:

- **Atommagok** (radioaktivitás, hasadás és fúzió)
- **Atomok** (elektronhéjak szerkezete, kémiai elemek tulajdonságai, atomok színeképe)

Erről tanultunk az előzőekben.

Ami most jön:

- Néhány atom kapcsolódásával **molekulák** kialakulása.
- Makroszkopikus mennyiségű atom kapcsolódásával **szilárd testek** kialakulása.



Bevezetés

**Molekulafizika**

- Fizikai jelenségek
- Az atomok összekapcsolódása

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# Molekulafizika



Bevezetés

Molekulafizika

● **Fizikai jelenségek**

● Az atomok  
összekapcsolódása

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Fizikai jelenségek

A fő jelenségek, melyek szerepet játszanak:

**Az elektronok hullámtulajdonsága:** A molekulák méretskáláján az elektronok kvantummechanikai leírása szükséges, az elektron „szét van kenve”.

**Energiaminimum-elv:** minden rendszer az adott körülmények közt megengedhető állapotok közül a minimális energiáját igyekszik felvenni.

**Pauli-elv:** Nem létezhet két elektron ugyanabban az állapotban.



Bevezetés

Molekulafizika

• Fizikai jelenségek

• **Az atomok  
összekapcsolódása**

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# Az atomok összekapcsolódása

Mi történik két atom közeledésekor?



Bevezetés

Molekulafizika

• Fizikai jelenségek

• **Az atomok  
összekapcsolódása**

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# Az atomok összekapcsolódása

## Mi történik két atom közeledésekor?

Az atomok semlegesek, ezért közel tudnak kerülni egymáshoz.

Az elektronfelhők kezdik átfedni egymást: újfajta állapotok jöhetnek létre.

Mikor lesz ebből a két atom összekapcsolódása?





Bevezetés

Molekulafizika

• Fizikai jelenségek

• Az atomok  
összekapcsolódása

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# Az atomok összekapcsolódása

## Mi történik két atom közeledésekor?

Az atomok semlegesek, ezért közel tudnak kerülni egymáshoz.

Az elektronfelhők kezdik átfedni egymást: újfajta állapotok jöhetnek létre.

Mikor lesz ebből a két atom összekapcsolódása?

Akkor, ha az elektronok találhatnak új, alacsonyabb összenergiájú állapotot, melyet a Pauli-elv megenged.



Bevezetés

Molekulafizika

• Fizikai jelenségek

• Az atomok  
összekapcsolódása

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# Az atomok összekapcsolódása

## Mi történik két atom közeledésekor?

Az atomok semlegesek, ezért közel tudnak kerülni egymáshoz.

Az elektronfelhők kezdik átfedni egymást: újfajta állapotok jöhetnek létre.

Mikor lesz ebből a két atom összekapcsolódása?

Akkor, ha az elektronok találhatnak új, alacsonyabb összenergiájú állapotot, melyet a Pauli-elv megenged.

Ha nincs ilyen új állapot, akkor az atomok lendületet, mozgási energiát cserélnek, esetleg megváltoztatják egymás gerjesztettségi állapotát, de kötés nem alakul ki.



Bevezetés

Molekulafizika

• Fizikai jelenségek

• Az atomok  
összekapcsolódása

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Az atomok összekapcsolódása

### Mi történik két atom közeledésekor?

Az atomok semlegesek, ezért közel tudnak kerülni egymáshoz.

Az elektronfelhők kezdik átfedni egymást: újfajta állapotok jöhetnek létre.

Mikor lesz ebből a két atom összekapcsolódása?

Akkor, ha az elektronok találhatnak új, alacsonyabb összenergiájú állapotot, melyet a Pauli-elv megenged.

Ha nincs ilyen új állapot, akkor az atomok lendületet, mozgási energiát cserélnek, esetleg megváltoztatják egymás gerjesztettségi állapotát, de kötés nem alakul ki.

A pontos leírás összetett kvantummechanikai számításokkal lehetséges. A fő tendenciák számítások nélkül is megismerhetők.



Bevezetés

Molekulafizika

**Az ionos kötés**

- Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötés  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# Az ionos kötés



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

● Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötés  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

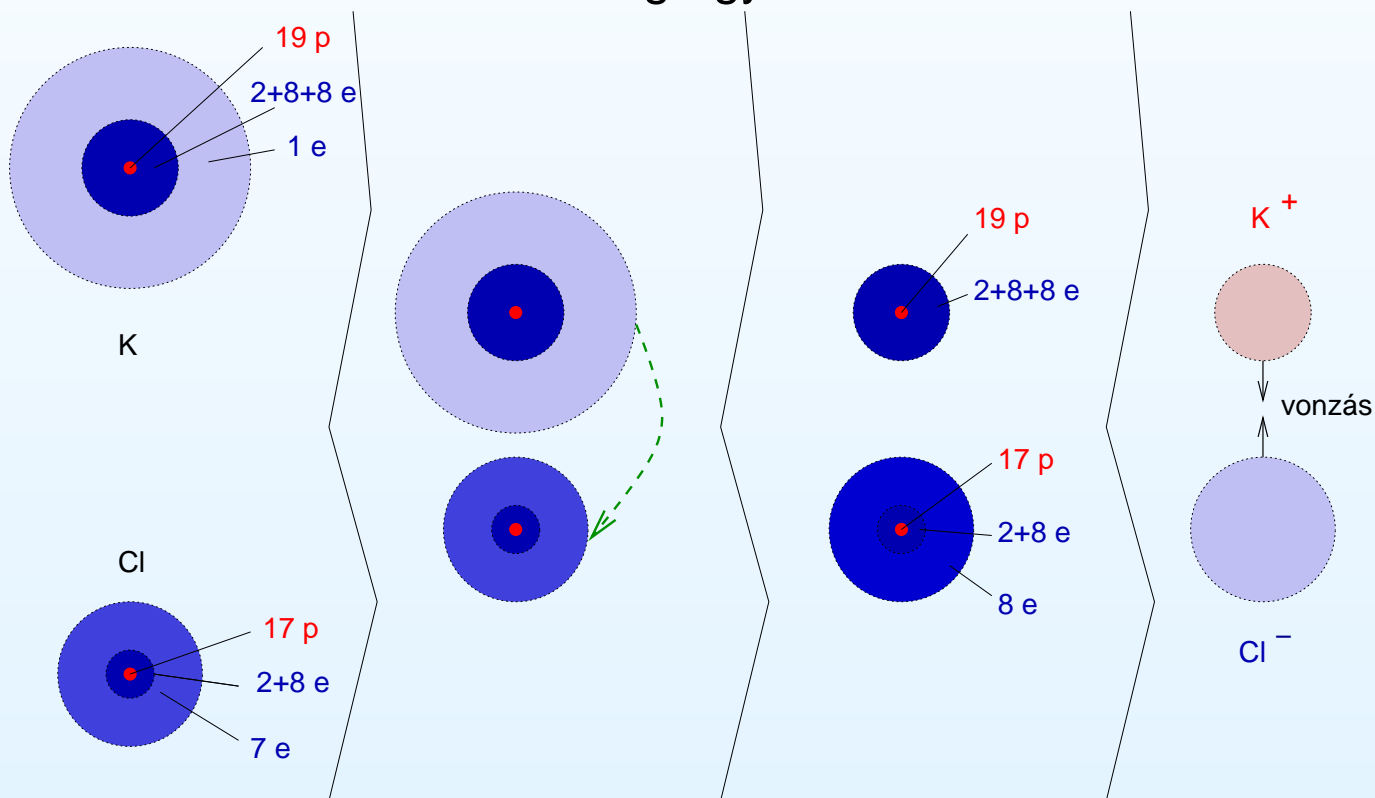
Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Az ionos kötés

Ha egy 'A' atomot könnyebb egy elektronjától megfosztani, mint amennyi energia felszabadul, ha az elektron egy 'B' atomhoz kötődik, akkor az elektron átmegy 'B' atomra és a megmaradó két ion elektrosztatikusan kötődni fog egymáshoz.



KCl molekula kialakulása



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

● Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötés  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

...

Több atom között is lehetséges, mint pl.: alumínium-klorid ( $\text{AlCl}_3$ ).

Akár makroszkopikus mennyiségű atom is kapcsolódhat így. (Lásd az ionrácsos kristályoknál.)



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

**A kovalens kötés**

- A kovalens kötés
- A  $H_2$ -molekula kialakulása
- Kötő- és lazító elektronpárok
- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák
- Többszörös kötések
- Delokalizált kötések
- A kötések polarizációja

A molekulák kötéshossza és kötés energiája

A molekulák energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek szerkezete

Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# A kovalens kötés



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

● A kovalens kötés

● A  $H_2$ -molekula kialakulása

● Kötő- és lazító elektronpárok

● Más kovalens molekulák

● Sok atomból álló molekulák

● Többszörös kötések

● Delokalizált kötések

● A kötések polarizációja

A molekulák kötéshossza és kötési energiája

A molekulák energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek szerkezete

Elektronok viselkedése szilárdtestekben

## A kovalens kötés

A közeli atomok elektronjai találhatnak olyan, alacsony energiájú állapotot, melynek elektronfelhője **mindkét atom magját tartalmazza**. („A két mag körüli közös pályára áll.”)

Ezek az állapotok sok szempontból hasonlóak, mint az egyetlen atomon belüliek (pl. diszkrét energiaszintek jellemzik őket, az energiaminimum-elv és a Pauli-elv is vonatkozik rájuk), de szerkezetük jóval bonyolultabb.





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- **A  $H_2$ -molekula kialakulása**
- Kötő- és lazító elektronpárok
- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák
- Többszörös kötések
- Delokalizált kötések
- A kötések polarizációja

A molekulák  
kötéshossza és kötés  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

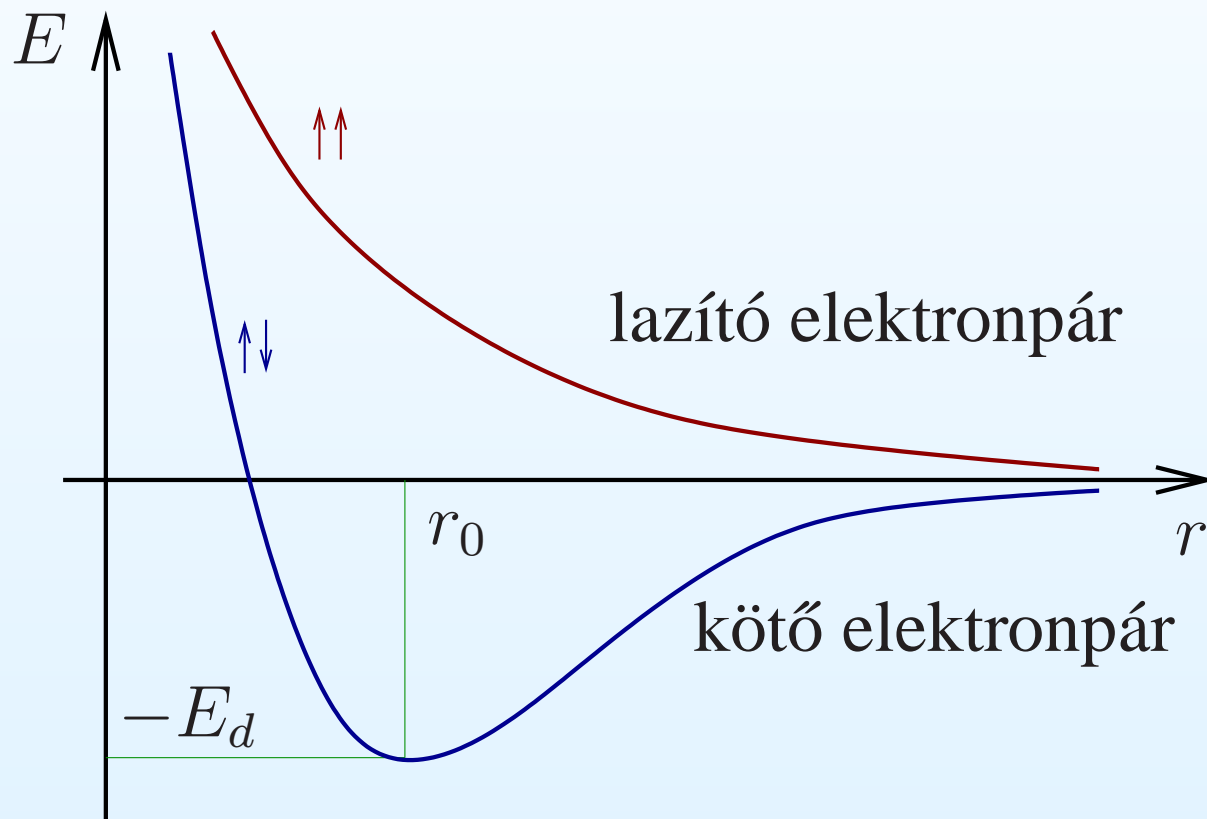
A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A $H_2$ -molekula kialakulása

Gondolatkísérlet: 2 proton  $r$  távolságban van. Odaengedünk 2 elektront, megnézzük, milyen energiájú állapotok jönnek létre.

Az elektronok spinje számít! Pauli-elv: azonos spin esetén nem tudnak mindketten a lehető legalacsonyabb energiaszintre beülni.





## Bevezetés

## Molekulafizika

## Az ionos kötés

## A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- A  $H_2$ -molekula kialakulása

## • Kötő- és lazító elektronpárok

- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák

- Többszörös kötések
- Delokalizált kötések
- A kötések polarizációja

A molekulák kötéshossza és kötésenergiája

A molekulák energiaszintjei

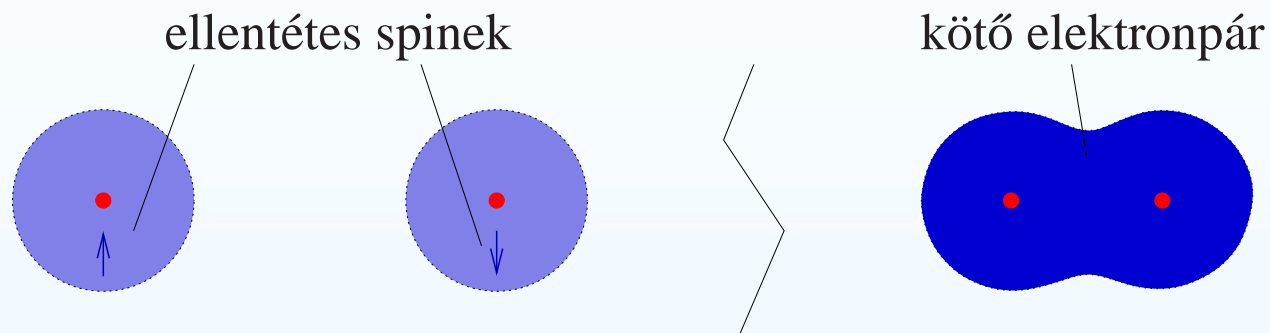
## Másodlagos kötések

A szilárdtestek szerkezete

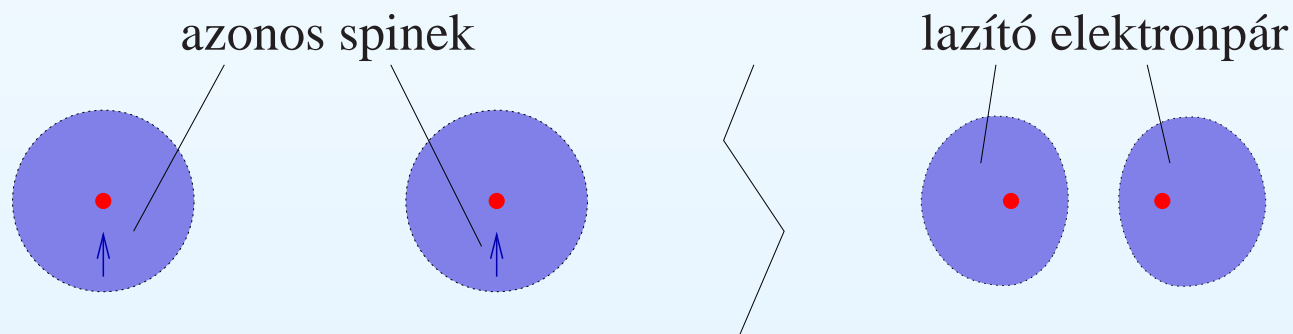
Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# Kötő- és lazító elektronpárok

Ellentétes spinek esetén kialakul kötés: **kötő elektronpár:**



Azonos spinek esetén nincs kötés: **lazító elektronpár:**





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- A  $H_2$ -molekula kialakulása

- **Kötő- és lazító elektronpárok**

- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák

- Többszörös kötések

- Delokalizált kötések
- A kötések polarizációja

A molekulák kötéshossza és kötés energiája

A molekulák energiaszintjei

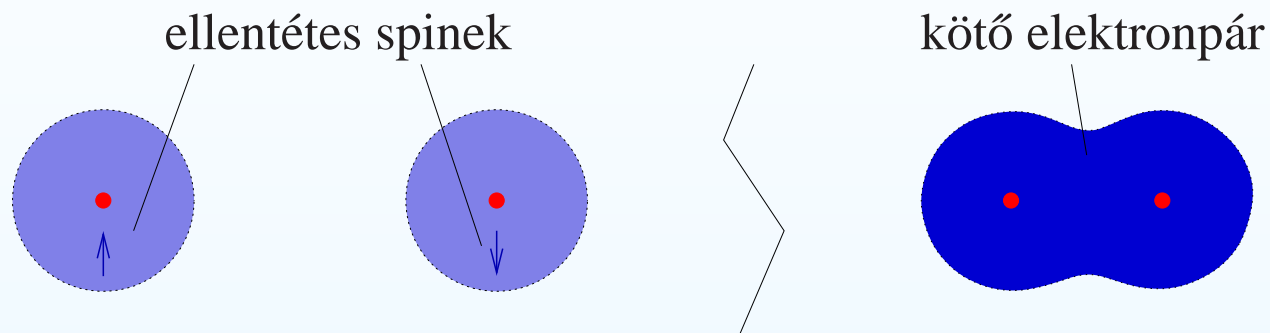
Másodlagos kötések

A szilárdtestek szerkezete

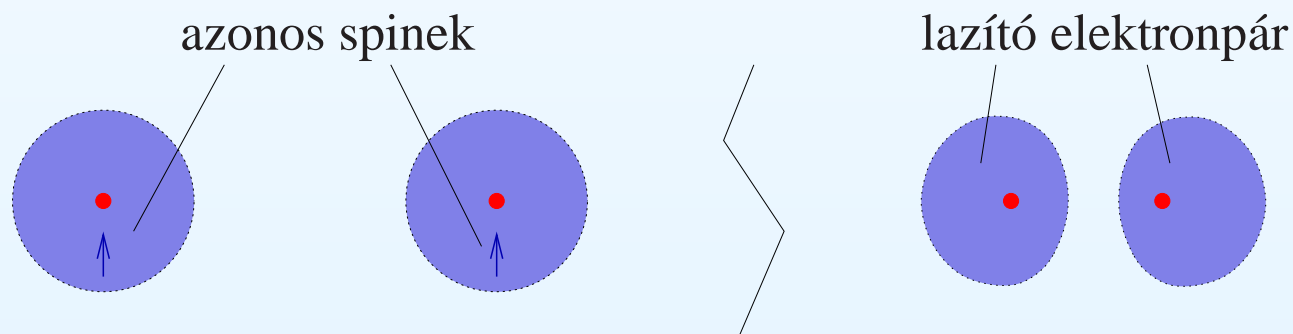
Elektronok viselkedése szilárdtestekben

## Kötő- és lazító elektronpárok

Ellentétes spinek esetén kialakul kötés: **kötő elektronpár**:



Azonos spinek esetén nincs kötés: **lazító elektronpár**:



**Kicserélődési energia:** az ellentétes spinű elektronok közti kapcsolat alacsonyabb energiájú, mint az azonos spinűek között. Ezt jellemzi számszerűen a kicserélődési energia.

## Más kovalens molekulák

A  $\text{H}_2$ -molekulához hasonló folyamat más, többelektronos atomokkal is lezajlódik. Ebbe beleszól a többi elektron is.

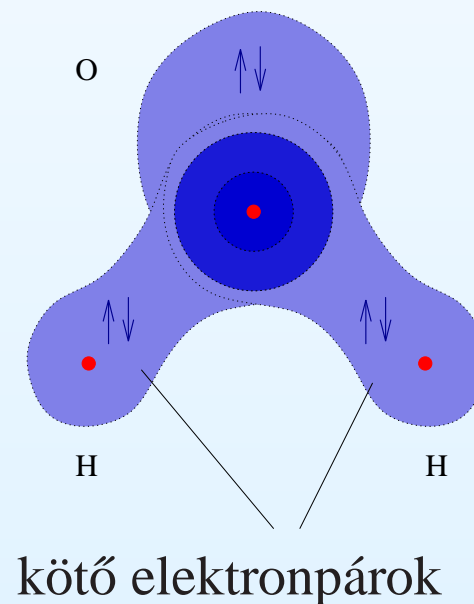
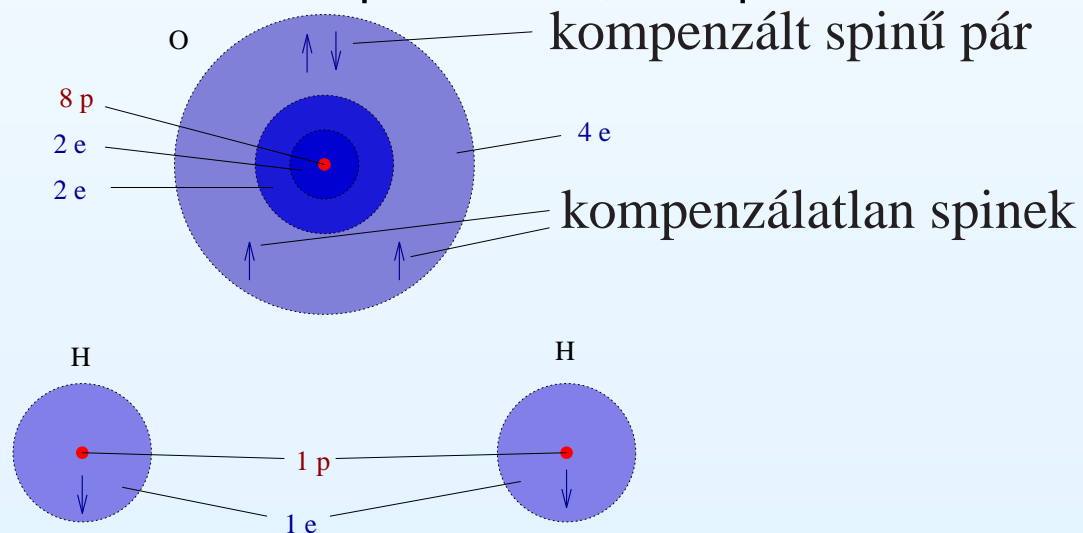
Pl. H-He molekula nem jöhet létre, mert a He 2 elektronja teljesen betölti az  $n = 1$ -es elektronhéjat, így a kötő elektronok valamelyike mindenképp  $n = 2$ -es állapotba kényszerülne, ami energetikailag nem kedvező.

## Más kovalens molekulák

A  $\text{H}_2$ -molekulához hasonló folyamat más, többelektronos atomokkal is lezajlik. Ebbe beleszól a többi elektron is.

Pl. H-He molekula nem jöhet létre, mert a He 2 elektronja teljesen betölti az  $n = 1$ -es elektronhéjat, így a kötő elektronok valamelyike mindenképp  $n = 2$ -es állapotba kényszerülne, ami energetikailag nem kedvező.

Több atom is kapcsolódhat, mint pl. a víz esetében:

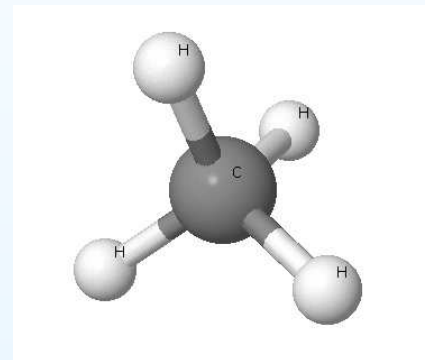
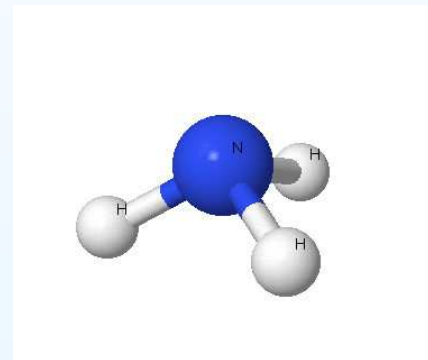
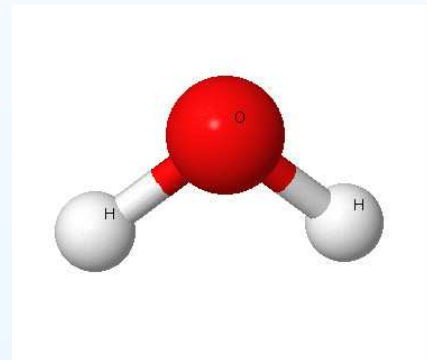
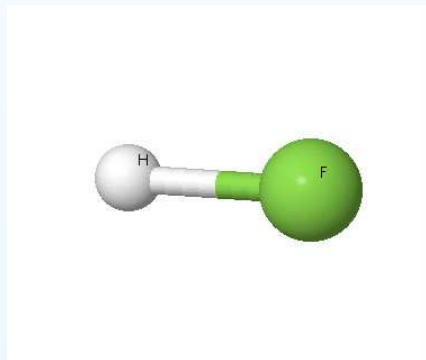


...

Egyszerűsített ábrázolás:

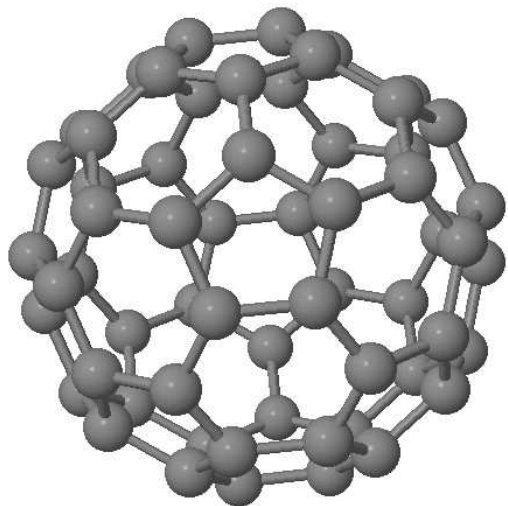
- atomtörzsek körrel vagy gömbbel
- kötő elektronpárok egy pálcikával

Például az O szomszédjai és H közötti kötések:

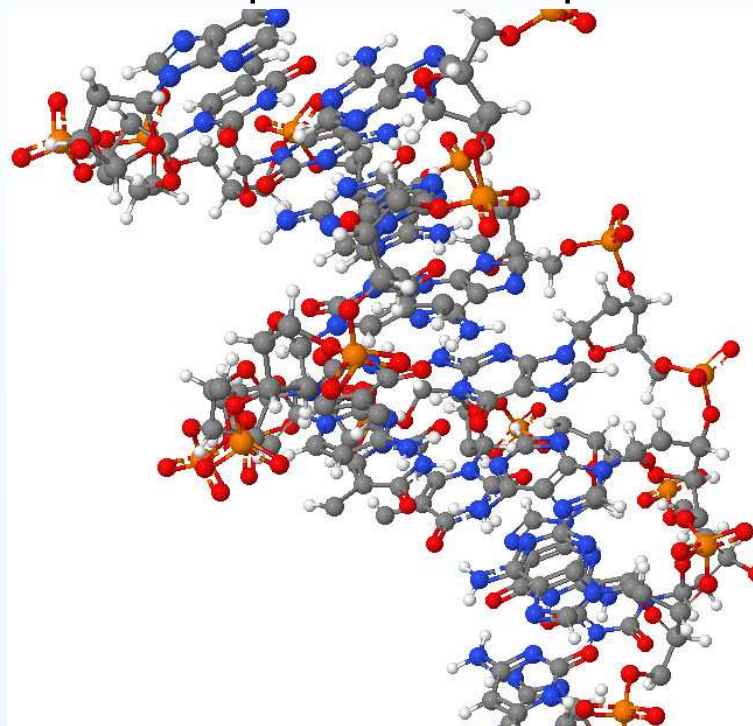


## Sok atomból álló molekulák

Nemcsak néhány, hanem igen sok atom is összekapcsolódhat. 2 példa:



*A C<sub>60</sub> molekula*



*A DNS molekula részlete*

Az emberi DNS molekula  $10^9$  nagyságrendű atomból áll.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- A  $H_2$ -molekula kialakulása

- Kötő- és lazító elektronpárok

- Más kovalens molekulák

- Sok atomból álló molekulák

- **Többszörös kötések**

- Delokalizált kötések

- A kötések polarizációja

A molekulák kötéshossza és kötés energiája

A molekulák energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek szerkezete

Elektronok viselkedése szilárdtestekben

## Többszörös kötések

Két atom között akár kettő (ritkán még több) elektronpár is lehet az, ami a kötést kialakítja.

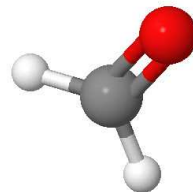
Ez az egyszeres kötésnél erősebb kötés jelent, de általában nem kétszer olyan erőset, mert a két elektronpár egymást taszítja.

Pl.: két, egyforma atomból álló molekulák több kompenzálatlan vegyértékelektronnal. Ilyen az  $O_2$  (kétszeres kötés) és az  $N_2$  (háromszoros kötés).

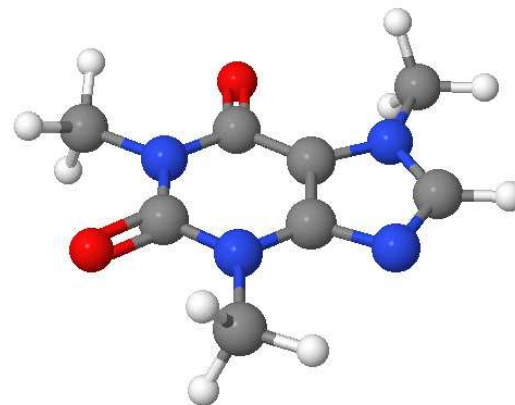
Egyéb példák:



$C_2H_2$



$CH_2O$



*koffein*





## Bevezetés

## Molekulafizika

## Az ionos kötés

## A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- A  $H_2$ -molekula kialakulása
- Kötő- és lazító elektronpárok
- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák
- Többszörös kötések
- **Delokalizált kötések**
- A kötések polarizációja

A molekulák  
kötéshossza és kötés  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

## Másodlagos kötések

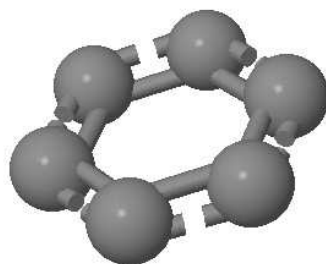
A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

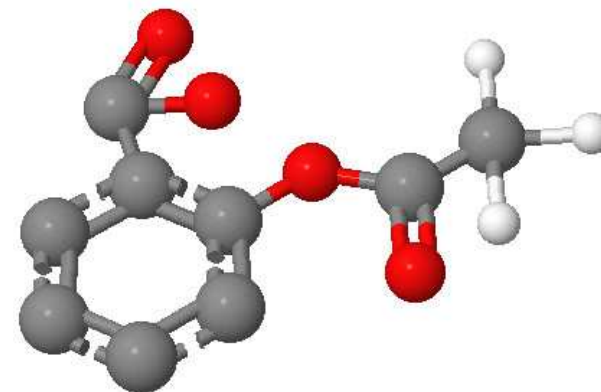
# Delokalizált kötések

Az elektronfelhő kiterjedhet több atomra is. Ekkor **delokalizált kötés**ről beszélünk.

Példák: (a zavaró sok H-atom leghagyásával)



*benzol*



*aszpirin*



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- A  $H_2$ -molekula kialakulása
- Kötő- és lazító elektronpárok
- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák
- Többszörös kötések
- Delokalizált kötések
- **A kötések polarizációja**

A molekulák kötéshossza és kötési energiája

A molekulák energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek szerkezete

Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# A kötések polarizációja

A kovalens kötés elektronfelhője nem feltétlen szimmetrikusak.



## Bevezetés

## Molekulafizika

## Az ionos kötés

## A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- A  $H_2$ -molekula kialakulása
- Kötő- és lazító elektronpárok
- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák
- Többszörös kötések
- Delokalizált kötések
- A kötések polarizációja

## A molekulák kötéshossza és kötési energiája

## A molekulák energiaszintjei

## Másodlagos kötések

## A szilárdtestek szerkezete

## Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# A kötések polarizációja

A kovalens kötés elektronfelhője nem feltétlen szimmetrikusak.

Például a  $H_2O$  molekulában a kötő elektronpárok hullámfüggvénye kicsit jobban koncentrálódik az O-atom környékén, mint a H-atomoknál.

A H-atomok enyhén pozitív, az O-atom enyhén negatív töltésűek lesznek.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- A  $H_2$ -molekula kialakulása
- Kötő- és lazító elektronpárok
- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák
- Többszörös kötések
- Delokalizált kötések
- A kötések polarizációja

A molekulák kötéshossza és kötésenergiája

A molekulák energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek szerkezete

Elektronok viselkedése szilárdtestekben

## A kötések polarizációja

A kovalens kötés elektronfelhője nem feltétlen szimmetrikusak.

Például a  $H_2O$  molekulában a kötő elektronpárok hullámfüggvénye kicsit jobban koncentrálódik az O-atom környékén, mint a H-atomoknál.

A H-atomok enyhén pozitív, az O-atom enyhén negatív töltésűek lesznek.

Összességében semleges a molekula, de **polarizált**.

Ez hatással van a molekulákból álló anyag minden tulajdonságára. (Lásd később a másodlagos kötéseknel.)



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

- A kovalens kötés
- A H<sub>2</sub>-molekula kialakulása
- Kötő- és lazító elektronpárok
- Más kovalens molekulák
- Sok atomból álló molekulák
- Többszörös kötések
- Delokalizált kötések
- A kötések polarizációja

A molekulák kötéshossza és kötési energiája

A molekulák energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek szerkezete

Elektronok viselkedése szilárdtestekben

## A kötések polarizációja

A kovalens kötés elektronfelhője nem feltétlen szimmetrikusak.

Például a H<sub>2</sub>O molekulában a kötő elektronpárok hullámfüggvénye kicsit jobban koncentrálódik az O-atom környékén, mint a H-atomoknál.

A H-atomok enyhén pozitív, az O-atom enyhén negatív töltésűek lesznek.

Összességében semleges a molekula, de **polarizált**.

Ez hatással van a molekulákból álló anyag minden tulajdonságára. (Lásd később a másodlagos kötéseknél.)

Ez kicsit hasonlít az ionos kötéshez. Vannak olyan molekulák (pl. a HF), melyek átmenetet képeznek az ionos és kovalens kötés között.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

**A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája**

• Kötéshossz és kötési  
energia

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# A molekulák kötéshossza és kötési energiája



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

● Kötéshossz és kötési  
energia

A molekulák  
energiaszintjei

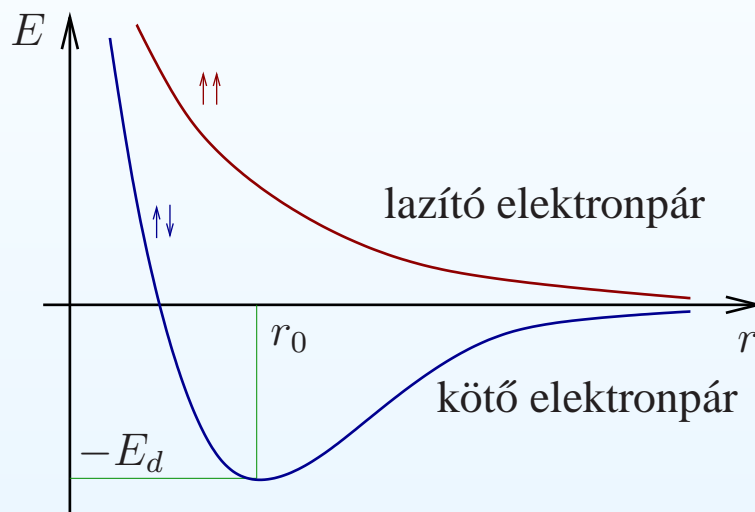
Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Kötéshossz és kötési energia

- Mennyi energia szükséges a kötés felbontásához? ( $E_d$ )
- Milyen távol vannak energiaminimum esetén a magok? ( $r_0$ )



név	$E_d$ [eV]	$r_0$ [nm]
NaCl	4,26	0,236
NaF	4,99	0,193
NaBr	3,8	0,250
KCl	4,43	0,267
KBr	3,97	0,282
H <sub>2</sub>	4,5	0,075
N <sub>2</sub>	9,8	0,11
O <sub>2</sub>	5,2	0,12
F <sub>2</sub>	1,6	0,14
Cl <sub>2</sub>	2,5	0,20
CO	11,2	0,113
HCl	4,4	0,127
HF	5,8	0,092
NO	7,0	0,115



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

● Kötéshossz és kötési  
energia

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Két példa

**Példa:** A hidrogénmolekula disszociációs energiája  $E_d = 4,52 \text{ eV}$ .  
Hány joule energia szükséges 1 mól  $H_2$  atomokra való felbontásához?





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

● Kötéshossz és kötési  
energia

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Két példa

**Példa:** A hidrogénmolekula disszociációs energiája  $E_d = 4,52 \text{ eV}$ .  
Hány joule energia szükséges 1 mól  $H_2$  atomokra való felbontásához?

**Megoldás:** 1 mól  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$  darab, ezért:

$$E = E_d \cdot N_A = 4,52 \text{ eV} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} = 2,72 \cdot 10^{24} \text{ eV} = 436\,000 \text{ J}$$



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

● Kötéshossz és kötési  
energia

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Két példa

**Példa:** A hidrogénmolekula disszociációs energiája  $E_d = 4,52 \text{ eV}$ .  
Hány joule energia szükséges 1 mól  $H_2$  atomokra való felbontásához?

**Megoldás:** 1 mól  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$  darab, ezért:

$$E = E_d \cdot N_A = 4,52 \text{ eV} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} = 2,72 \cdot 10^{24} \text{ eV} = 436\,000 \text{ J}$$

**Példa:** Milyen hullámhosszúságú és melyik színképtartományba esik az a foton, melynek energiája elegendő egy  $O_2$  molekula disszociációjához?



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

● Kötéshossz és kötési  
energia

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Két példa

**Példa:** A hidrogénmolekula disszociációs energiája  $E_d = 4,52 \text{ eV}$ .  
Hány joule energia szükséges 1 mól  $H_2$  atomokra való felbontásához?

**Megoldás:** 1 mól  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$  darab, ezért:

$$E = E_d \cdot N_A = 4,52 \text{ eV} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} = 2,72 \cdot 10^{24} \text{ eV} = 436\,000 \text{ J}$$

**Példa:** Milyen hullámhosszúságú és melyik színeképtartományba esik az a foton, melynek energiája elegendő egy  $O_2$  molekula disszociációjához?

**Megoldás:** A fotonról tanultak szerint:  $h\nu = E_d = 5,2 \text{ eV}$ .

$$c = \lambda\nu \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E_d} = 2,4 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 240 \text{ nm}.$$

Ez az ultraibolya tartományba esik.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

**A molekulák  
energiaszintjei**

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- A molekulák forgása
- A molekulák  
energiaszintjei
- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# A molekulák energiaszintjei



## Bevezetés

### Molekulafizika

### Az ionos kötés

### A kovalens kötés

### A molekulák kötéshossza és kötési energiája

### A molekulák energiaszintjei

#### ● Bevezetés

- A molekulák rezgése
- A molekulák forgása
- A molekulák  
energiaszintjei
- A molekulák színe

### Másodlagos kötések

### A szilárdtestek szerkezete

### Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# Bevezetés

Molekulán belül az elektronállapotok ugyanúgy 4 kvantumszámmal jellemezhetők, mint az atomon belül.

Az atomoktól eltérően a molekulák nem szimmetrikusak (több atommag van bennük), ezért speciális állapotok is létrejönnek:

- rezgés
- forgás



## Bevezetés

### Molekulafizika

### Az ionos kötés

### A kovalens kötés

### A molekulák kötéshossza és kötési energiája

### A molekulák energiaszintjei

#### ● Bevezetés

- A molekulák rezgése
- A molekulák forgása
- A molekulák energiaszintjei
- A molekulák színe

### Másodlagos kötések

### A szilárdtestek szerkezete

### Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# Bevezetés

Molekulán belül az elektronállapotok ugyanúgy 4 kvantumszámmal jellemezhetők, mint az atomon belül.

Az atomoktól eltérően a molekulák nem szimmetrikusak (több atommag van bennük), ezért speciális állapotok is létrejönnek:

- rezgés
- forgás

A kvantummechanikai számítások szerint ezek is diszkrét energiaszintekkel lesznek jellemezhetők.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

• Bevezetés

• **A molekulák rezgése**

• A molekulák forgása

• A molekulák  
energiaszintjei

• A molekulák színeképe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A molekulák rezgése

A molekulák rezgése egy  $v$  nemnegatív egész számmal, a **vibrációs kvantumszámmal** jellemezhető.

A rezgésben tárolt energia:

$$E_v(v) = hf \left( v + \frac{1}{2} \right)$$

$f$  neve: **vibrációs frekvencia**.

név	$f$ [ $10^{12}$ Hz]
H <sub>2</sub>	132
N <sub>2</sub>	70
O <sub>2</sub>	47
CO	64
NO	57



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés

- A molekulák rezgése

- A molekulák forgása

- A molekulák  
energiaszintjei

- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

...

Érdekesség:  $v = 0$  esetben is van rezgési energia!  $E_v(0) = hf/2$   
neve: **zérus ponti energia**.

A molekulák egy kicsit mindig rezegnek. Ez az energia kissé csökkenti a molekulák disszociációs energiáját. ( $H_2$ -re  $E_d = 4,52 \text{ eV}$ ,  $E_v(0) = 0,27 \text{ eV}$ .)





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- A molekulák forgása
- A molekulák energiaszintjei
- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

...

Érdekesség:  $v = 0$  esetben is van rezgési energia!  $E_v(0) = hf/2$   
neve: **zéruspon ti energia**.

A molekulák egy kicsit mindig rezegnek. Ez az energia kissé csökkenti a molekulák disszociációs energiáját. ( $H_2$ -re  $E_d = 4,52 \text{ eV}$ ,  $E_v(0) = 0,27 \text{ eV}$ .)

Ha a molekula csak a vibrációs állapotát változtatja  $v_1$ -ről  $v_2$ -re, az energiakülönbség:  $\Delta E_v = hf(v_2 - v_1)$ .

Tisztán vibrációs átmenetkor  $hf$  egész számú többszöröse energiájú fotonok keletkeznek, azaz frekvenciájuk  $f$  egész számú többszöröse.



## Bevezetés

## Molekulafizika

## Az ionos kötés

## A kovalens kötés

## A molekulák kötéshossza és kötési energiája

## A molekulák energiaszintjei

- Bevezetés
- **A molekulák rezgése**
- A molekulák forgása
- A molekulák energiaszintjei
- A molekulák színe

## Másodlagos kötések

## A szilárdtestek szerkezete

## Elektronok viselkedése szilárdtestekben



Érdekesség:  $v = 0$  esetben is van rezgési energia!  $E_v(0) = hf/2$   
neve: **zérusponthoz tartozó energia**.

A molekulák egy kicsit mindig rezegnek. Ez az energia kissé csökkenti a molekulák disszociációs energiáját. ( $H_2$ -re  $E_d = 4,52 \text{ eV}$ ,  $E_v(0) = 0,27 \text{ eV}$ .)

Ha a molekula csak a vibrációs állapotát változtatja  $v_1$ -ről  $v_2$ -re, az energiakülönbség:  $\Delta E_v = hf(v_2 - v_1)$ .

Tisztán vibrációs átmenetkor  $hf$  egész számú többszöröse energiájú fotonok keletkeznek, azaz frekvenciájuk  $f$  egész számú többszöröse.

Többatomos molekulákban a rezgések benyomultabb módon történnek.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- **A molekulák rezgése**
- A molekulák forgása
- A molekulák  
energiaszintjei
- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Két példa

**Példa:** Milyen hullámhosszúságú fotont bocsát ki egy  $N_2$  molekula, ha a  $v = 1$ -es szintről a  $v = 0$ -ra megy át?



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés

- **A molekulák rezgése**

- A molekulák forgása

- A molekulák  
energiaszintjei

- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Két példa

**Példa:** Milyen hullámhosszúságú fotont bocsát ki egy  $N_2$  molekula, ha a  $v = 1$ -es szintről a  $v = 0$ -ra megy át?

**Megoldás:** Ekkor  $\Delta E = hf$ , ezért a foton  $f$  frekvenciájú.

A foton hullámhossza:  $\lambda = c/f = 4,29 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 4290 \text{ nm}$ .

Ez egy infravörös tartományba eső foton.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

• Bevezetés

• **A molekulák rezgése**

• A molekulák forgása

• A molekulák  
energiaszintjei

• A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Két példa

**Példa:** Milyen hullámhosszúságú fotont bocsát ki egy  $N_2$  molekula, ha a  $v = 1$ -es szintről a  $v = 0$ -ra megy át?

**Megoldás:** Ekkor  $\Delta E = hf$ , ezért a foton  $f$  frekvenciájú.

A foton hullámhossza:  $\lambda = c/f = 4,29 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 4290 \text{ nm}$ .

Ez egy infravörös tartományba eső foton.

**Példa:** Mekkora hőmérsékleten lesz az egy szabadsági fokra jutó  $(1/2)kT$  energia egyenlő az  $N_2$  molekula  $v = 0$  és  $v = 1$  rezgési állapotai közti energiakülönbséggel? ( $k$  a Boltzmann-állandó.)



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

• Bevezetés

• **A molekulák rezgése**

• A molekulák forgása

• A molekulák  
energiaszintjei

• A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Két példa

**Példa:** Milyen hullámhosszúságú fotont bocsát ki egy  $N_2$  molekula, ha a  $v = 1$ -es szintről a  $v = 0$ -ra megy át?

**Megoldás:** Ekkor  $\Delta E = hf$ , ezért a foton  $f$  frekvenciájú.

A foton hullámhossza:  $\lambda = c/f = 4,29 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 4290 \text{ nm}$ .

Ez egy infravörös tartományba eső foton.

**Példa:** Mekkora hőmérsékleten lesz az egy szabadsági fokra jutó  $(1/2)kT$  energia egyenlő az  $N_2$  molekula  $v = 0$  és  $v = 1$  rezgési állapotai közti energiakülönbséggel? ( $k$  a Boltzmann-állandó.)

**Megoldás:**

$$\Delta E = hf = \frac{1}{2}kT \quad \Rightarrow \quad T = \frac{2hf}{k} = 6700 \text{ K}.$$

Ezért szobahőmérsékleten az  $N_2$  molekulák igen kis hányadának gerjesztődik a vibrációja.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- A molekulák forgása
- A molekulák energiaszintjei
- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A molekulák forgása

A molekulák forgása egy  $J$  nemnegatív egész számmal, a **rotációs kvantumszámmal** jellemezhető.

A forgásban tárolt energia:

$$E_r(J) = \frac{h^2}{8\pi^2\Theta} J(J+1) = E_r^* J(J+1)$$

Itt  $\Theta$  a molekula tehetetlenségi nyomatéka,  $E_r^*$  a rotációs energiaállandó.

név	$E_r^*$ [eV]
H <sub>2</sub>	0,00739
N <sub>2</sub>	0,00025
O <sub>2</sub>	0,00013
CO	0,00024
NO	0,00021



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- A molekulák forgása
- A molekulák energiaszintjei
- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

...

A rotációs energia lehet 0, ha  $J = 0$ . (A molekula nem forog.)

A rotációs szintek közti különbség nem egyenletes:  $E_r(0) = 0$ ,  
 $E_r(1) = 2E_r^*$ ,  $E_r(2) = 6E_r^*$ , stb.





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- **A molekulák forgása**
- A molekulák  
energiaszintjei
- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Egy példa

**Példa:** Egy oxigénmolekula a  $J_1 = 10$ -es forgási állapotából a  $J_2 = 9$ -esbe megy át. Milyen hullámhosszúságú fotont sugároz ki eközben?



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- **A molekulák forgása**
- A molekulák  
energiaszintjei
- A molekulák színeképe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Egy példa

**Példa:** Egy oxigénmolekula a  $J_1 = 10$ -es forgási állapotából a  $J_2 = 9$ -esbe megy át. Milyen hullámhosszúságú fotont sugároz ki eközben?

**Megoldás:**

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_r(10) - E_r(9) = E_r^* (10(10 + 1) - 9(9 + 1)) = 20E_r^* \\ &= 0,0026 \text{ eV.}\end{aligned}$$

Az ehhez tartozó foton hullámhossza:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{c}{\Delta E/h} = \frac{hc}{\Delta E} = 0,000477 \text{ m} \approx 0,5 \text{ mm.}$$

Ez a távoli infravörös és a mikrohullámú tartomány határán van.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- **A molekulák forgása**
- A molekulák  
energiaszintjei
- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Még egy példa

**Példa:** Mekkora hőmérsékleten lesz az egy szabadsági fokra jutó  $(1/2)kT$  energia kisebb, mint a rotációs gerjesztéshez szükséges minimális energia az  $O_2$  molekula esetében?



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- **A molekulák forgása**
- A molekulák energiaszintjei
- A molekulák színeképe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Még egy példa

**Példa:** Mekkora hőmérsékleten lesz az egy szabadsági fokra jutó  $(1/2)kT$  energia kisebb, mint a rotációs gerjesztéshez szükséges minimális energia az  $O_2$  molekula esetében?

**Megoldás:** Az előbb tanultak szerint a legkisebb energia a  $J_1 = 0$  és  $J_2 = 1$ -es szintek közti átmenethez szükséges, és ennek értéke  $2E_r^*$ . A keresett feltétel:

$$\frac{1}{2}kT < 2E_r^*, \quad \Rightarrow \quad T < \frac{4E_r^*}{k} = 6,0 \text{ K}$$

$O_2$  esetén  $E_r^* = 0,00013 \text{ eV}$ .

Tehát 6 K-nél alatt az oxigénmolekulák többsége nem forog.

Szobahőmérsékleten viszont már a sokadik gerjesztett állapotban vannak.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- A molekulák forgása
- A molekulák  
energiaszintjei
- A molekulák színe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A molekulák energiaszintjei

Az előzőek szerint:

$$E_{mol} = E_0 + E_v(v) + E_r(J),$$

ahol  $E_0$  az elektronok állapotának megfelelő energia.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

- Bevezetés
- A molekulák rezgése
- A molekulák forgása
- **A molekulák  
energiaszintjei**
- A molekulák szinképe

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A molekulák energiaszintjei

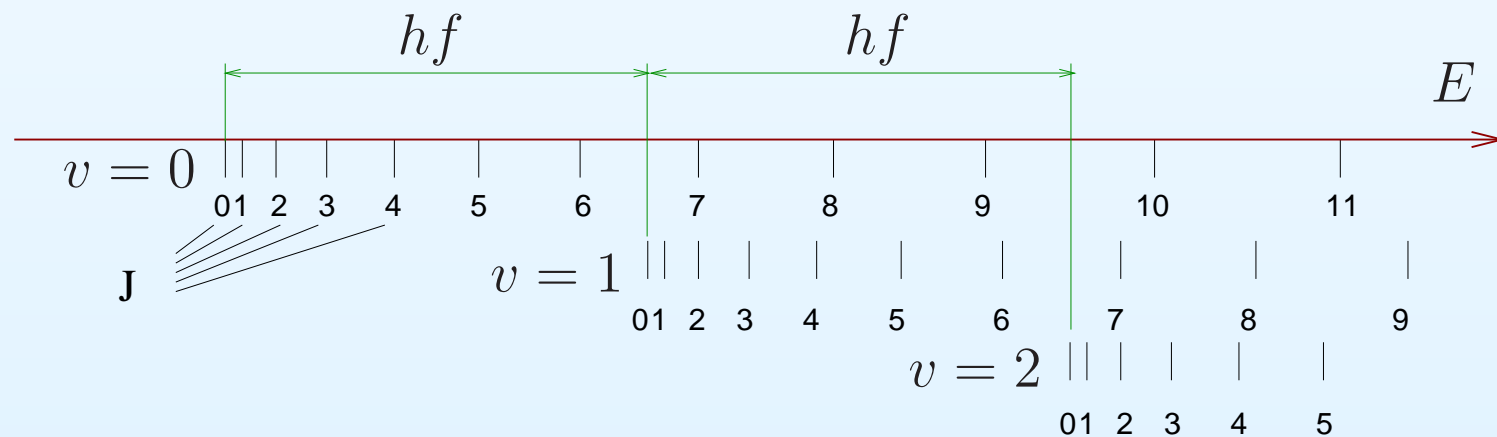
Az előzőek szerint:

$$E_{mol} = E_0 + E_v(v) + E_r(J),$$

ahol  $E_0$  az elektronok állapotának megfelelő energia.

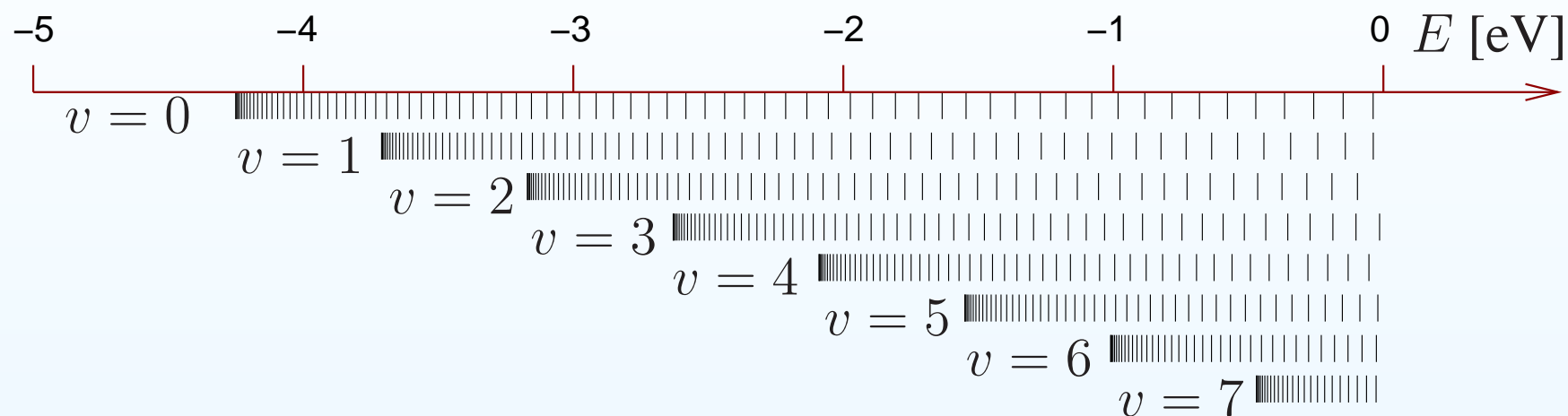
Ha  $v$  és  $J$  is változhat, igen sok lehetséges energiaszintet kapunk.

Általános séma:



## A molekulák színeképe

H<sub>2</sub> méretarányos energiaszintjei:



Igen sok energiaszint, melyek sűrűsödnek is itt-ott. Sok lehetséges energiaszint-különbség.

A molekulák színeképében igen sok színeképvonal van, melyek bizonyos frekvenciákon nagyon besűrűsödnek.

Ahol ezek összemosódnak (természetes vonalszélesség), vonalas színekép helyett folytonos alakul ki. A jelenség neve: **molekulasávok**.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

- Másodlagos kötések
- Poláros-poláros  
kapcsolatok
- Hidrogénhíd-kötés
- Indukált polarizáció  
hatása

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Másodlagos kötések





[Bevezetés](#)

[Molekulafizika](#)

[Az ionos kötés](#)

[A kovalens kötés](#)

[A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája](#)

[A molekulák  
energiaszintjei](#)

[Másodlagos kötések](#)

● **Másodlagos kötések**

● Poláros-poláros  
kapcsolatok

● Hidrogénhíd-kötés

● Indukált polarizáció  
hatása

[A szilárdtestek  
szerkezete](#)

[Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben](#)

## Másodlagos kötések

Elsődleges kötés: amiről eddig szó volt, azaz az atomokat molekulákba rendező kötések. Kötési energia: 1–10 eV nagyságrendű.

**Másodlagos kötés:** a molekulák között fellépő vonzóerők. Kötési energia: 0,01–0,1 eV nagyságrendű.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

● Másodlagos kötések

● Poláros-poláros  
kapcsolatok

● Hidrogénhíd-kötés

● Indukált polarizáció  
hatása

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Másodlagos kötések

Elsődleges kötés: amiről eddig szó volt, azaz az atomokat molekulákba rendező kötések. Kötési energia: 1–10 eV nagyságrendű.

**Másodlagos kötés:** a molekulák között fellépő vonzóerők. Kötési energia: 0,01–0,1 eV nagyságrendű.

A másodlagos kötések felelősek sok makroszkopikus jelenségért, mint pl. a  $\text{H}_2\text{O}$  folyékony állapotának tulajdonságai.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

● Másodlagos kötések

● Poláros-poláros  
kapcsolatok

● Hidrogénhíd-kötés  
● Indukált polarizáció  
hatása

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Másodlagos kötések

Elsődleges kötés: amiről eddig szó volt, azaz az atomokat molekulákba rendező kötések. Kötési energia: 1–10 eV nagyságrendű.

**Másodlagos kötés:** a molekulák között fellépő vonzóerők. Kötési energia: 0,01–0,1 eV nagyságrendű.

A másodlagos kötések felelősek sok makroszkopikus jelenségért, mint pl. a  $\text{H}_2\text{O}$  folyékony állapotának tulajdonságai.

Főbb típusok:

- Poláros-poláros kapcsolatok
- Hidrogénhíd-kötés
- Indukált polarizáció hatása



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

- Másodlagos kötések

- **Poláros-poláros  
kapcsolatok**

- Hidrogénhíd-kötés

- Indukált polarizáció  
hatása

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Poláros-poláros kapcsolatok

A polarizált molekulák semlegesek, de nem egyenletes töltéseloszlásúak, ami a molekula közelében elektromos teret jelent.

Ha különböző előjelű molekularészek kerülnek közel egymáshoz, kötés alakulhat ki.

Sok folyadék kialakulásáért ez a kölcsönhatás felelős.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

- Másodlagos kötések
- Poláros-poláros  
kapcsolatok
- **Hidrogénhíd-kötés**
- Indukált polarizáció  
hatása

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Hidrogénhíd-kötés

Kovalens kötésben a H körül a kötő elektronpár felhőjének sűrűsége kicsi: majdnem egy csupasz protont kapunk.

Ez a majdnem csupasz proton más molekulák elektronpárjával is kölcsönhatásba tud lépni.

Ez a jelenség azokra az esetekre jellemző, amikor a H-atom N, O vagy F atomokkal áll kapcsolatban.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

- Másodlagos kötések
- Poláros-poláros  
kapcsolatok
- **Hidrogénhíd-kötés**
- Indukált polarizáció  
hatása

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Hidrogénhíd-kötés

Kovalens kötésben a H körül a kötő elektronpár felhőjének sűrűsége kicsi: majdnem egy csupasz protont kapunk.

Ez a majdnem csupasz proton más molekulák elektronpárjával is kölcsönhatásba tud lépni.

Ez a jelenség azokra az esetekre jellemző, amikor a H-atom N, O vagy F atomokkal áll kapcsolatban.

Érdekesség: térbeli orientáció: a két nagy elektronvonzó képességű atomnak a hidrogén ellentétes oldalán kell elhelyezkednie.



## Bevezetés

## Molekulafizika

## Az ionos kötés

## A kovalens kötés

## A molekulák kötéshossza és kötési energiája

## A molekulák energiaszintjei

## Másodlagos kötések

- Másodlagos kötések
- Poláros-poláros  
kapcsolatok
- Hidrogénhíd-kötés
- Indukált polarizáció  
hatása

## A szilárdtestek szerkezete

## Elektronok viselkedése szilárdtestekben



Ez és a poláros kapcsolat felel pl. a víz sok tulajdonságáért.

Pl.  $0-10^{\circ}\text{C}$  között még nem tudják összetartani a vízmolekulák nagy halmazait, de kisebb molekulahalmazokat igen. Ezért az  $1^{\circ}\text{C}$ -os víz kisebb sűrűségű, mint a  $4^{\circ}\text{C}$ -os.

A hidrogénhíd-kötés orientációja felelős a jég és a hópelyhek szerkezetéért is.

A hidrogénhíd- és a poláros-poláros kötés a bonyolultabb molekulák esetében is jelentős szerepű lehet. Ilyen sok szerves, az élet szempontjából is fontos molekula esete.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

- Másodlagos kötések
- Poláros-poláros  
kapcsolatok
- Hidrogénhíd-kötés
- Indukált polarizáció  
hatása

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Indukált polarizáció hatása

Ha egy atom vagy molekula elektronfelhője eltolódik az atommag(ok)hoz képest, akkor is polarizált molekulát kapunk. Ez spontán módon is bekövetkezik.

Ebből gyenge vonzás alakul ki, amit **van der Waals kölcsönhatásnak** nevezünk.





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

- Másodlagos kötések
- Poláros-poláros  
kapcsolatok
- Hidrogénhíd-kötés
- Indukált polarizáció  
hatása

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Indukált polarizáció hatása

Ha egy atom vagy molekula elektronfelhője eltolódik az atommag(ok)hoz képest, akkor is polarizált molekulát kapunk. Ez spontán módon is bekövetkezik.

Ebből gyenge vonzás alakul ki, amit **van der Waals kölcsönhatás**nak nevezünk.

Ez minden atom és molekula között fellép, de kicsi a kötési energiája.

Gázok esetén ez enyhe eltérést eredményez az ideális gázok állapotegyenletétől.

Alacsony hőmérsékleten ez felelős a gázok cseppfolyósodásáért és megfagyásáért. (Például az  $O_2$  90 K-en cseppfolyóssá, 54 K-en szilárdná válik.)



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

**A szilárdtestek  
szerkezete**

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

# A szilárdtestek szerkezete



## Bevezetés

### Molekulafizika

### Az ionos kötés

### A kovalens kötés

### A molekulák kötéshossza és kötés energiája

### A molekulák energiaszintjei

### Másodlagos kötések

### A szilárdtestek szerkezete

#### ● Bevezetés

#### ● Pár szó a kristályszerkezetről

#### ● A szilárdtestek kötéstípusai

#### ● Ionos kötés

#### ● Kovalens kötés

#### ● Fémes kötés

#### ● Másodlagos kötések

#### ● A kötések tartóssága

### Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# Bevezetés

Az atomok és molekulák közti vonzóerők nemcsak néhány atomot képesek együtt tartani, hanem makroszkopikus mennyiségűt is. Ezzel magyarázható a szilárd anyagok létrejötte.



## Bevezetés

### Molekulafizika

### Az ionos kötés

### A kovalens kötés

### A molekulák kötéshossza és kötési energiája

### A molekulák energiaszintjei

### Másodlagos kötések

### A szilárdtestek szerkezete

#### ● Bevezetés

#### ● Pár szó a kristályszerkezetről

#### ● A szilárdtestek kötéstípusai

#### ● Ionos kötés

#### ● Kovalens kötés

#### ● Fémes kötés

#### ● Másodlagos kötések

#### ● A kötések tartóssága

### Elektronok viselkedése szilárdtestekben

# Bevezetés

Az atomok és molekulák közti vonzóerők nemcsak néhány atomot képesek együtt tartani, hanem makroszkopikus mennyiségűt is. Ezzel magyarázható a szilárd anyagok létrejötte.

A szilárd testben az atomok elhelyezkedése lehet rendezett vagy (részben) rendezetlen:

- rendezett: **kristályok**
- rendezetlen: **amorf anyagok**



## Bevezetés

### Molekulafizika

### Az ionos kötés

### A kovalens kötés

### A molekulák kötéshossza és kötési energiája

### A molekulák energiaszintjei

### Másodlagos kötések

### A szilárdtestek szerkezete

#### ● Bevezetés

#### ● Pár szó a kristályszerkezetről

#### ● A szilárdtestek kötéstípusai

#### ● Ionos kötés

#### ● Kovalens kötés

#### ● Fémes kötés

#### ● Másodlagos kötések

#### ● A kötések tartóssága

### Elektronok viselkedése szilárdtestekben

## Bevezetés

Az atomok és molekulák közti vonzóerők nemcsak néhány atomot képesek együtt tartani, hanem makroszkopikus mennyiségűt is. Ezzel magyarázható a szilárd anyagok létrejötte.

A szilárd testben az atomok elhelyezkedése lehet rendezett vagy (részben) rendezetlen:

- rendezett: **kristályok**
- rendezetlen: **amorf anyagok**

Sokszor ugyanabból az alapanyagból kristályos és amorf szilárd test is összeállhat. (Fémüvegek.)



## Bevezetés

### Molekulafizika

### Az ionos kötés

### A kovalens kötés

### A molekulák kötéshossza és kötési energiája

### A molekulák energiaszintjei

### Másodlagos kötések

### A szilárdtestek szerkezete

#### ● Bevezetés

#### ● Pár szó a kristályszerkezetről

#### ● A szilárdtestek kötéstípusai

#### ● Ionos kötés

#### ● Kovalens kötés

#### ● Fémes kötés

#### ● Másodlagos kötések

#### ● A kötések tartóssága

### Elektronok viselkedése szilárdtestekben

## Bevezetés

Az atomok és molekulák közti vonzóerők nemcsak néhány atomot képesek együtt tartani, hanem makroszkopikus mennyiségűt is. Ezzel magyarázható a szilárd anyagok létrejötte.

A szilárd testben az atomok elhelyezkedése lehet rendezett vagy (részben) rendezetlen:

- rendezett: **kristályok**
- rendezetlen: **amorf anyagok**

Sokszor ugyanabból az alapanyagból kristályos és amorf szilárd test is összeállhat. (Fémüvegek.)

A kristályszerkezet és hibái kihatással vannak a szilárdtest mechanikai tulajdonságaira, és igen fontosak a gyakorlat szempontjából.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- **Pár szó a  
kristályszerkezetről**
- A szilárdtestek  
kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Pár szó a kristályszerkezetről

**Elemi cella:** a kristály egy olyan kicsi darabja, melynek egymás mellé rakott másolataiból az egész kirakható.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

● Bevezetés

● **Pár szó a  
kristályszerkezetről**

● A szilárdtestek  
kötéstípusai

● Ionos kötés

● Kovalens kötés

● Fémes kötés

● Másodlagos kötések

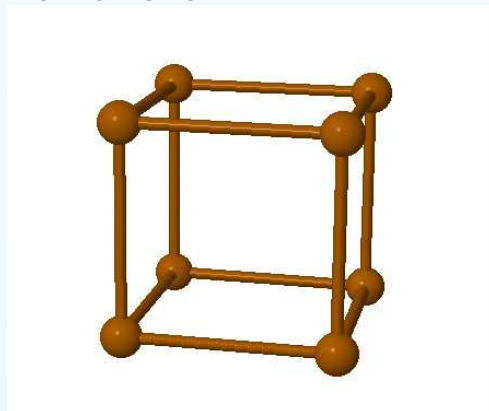
● A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

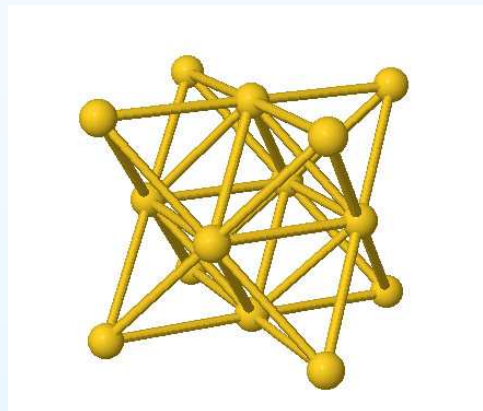
## Pár szó a kristályszerkezetről

**Elemi cella:** a kristály egy olyan kicsi darabja, melynek egymás mellé rakott másolataiból az egész kirakható.

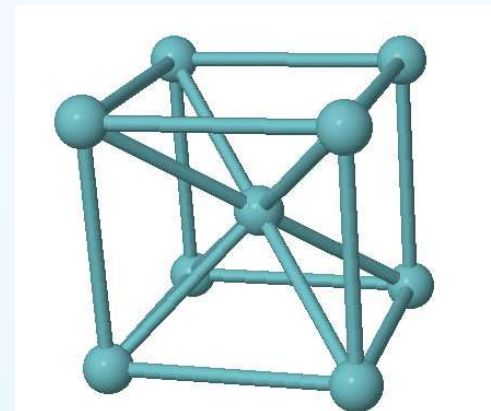
Sokféle elemi cella lehetséges. A legegyszerűbbek a kockarács változatai:



*Egyszerű kockarács*



*lapcentrált kockarács*



*tércentrált kockarács*

Ebben a tárgyban nem foglalkozunk részletes ismertetésükkel.





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötés  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- **A szilárdtestek kötéstípusai**
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A szilárdtestek kötéstípusai

Az előzőekben tárgyalt **ionos** és **kovalens** kötések bizonyos körülmények között képesek makroszkopikus mennyiségű atom együtt tartására.

Ezen kívül lesz még egy kötésfajta: a **fémes** kötés.

Gyengébb kötést jelentenek, de szerepet játszanak a **másodlagos kötések** is, ezek is összetarthatnak szilárd testeket.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

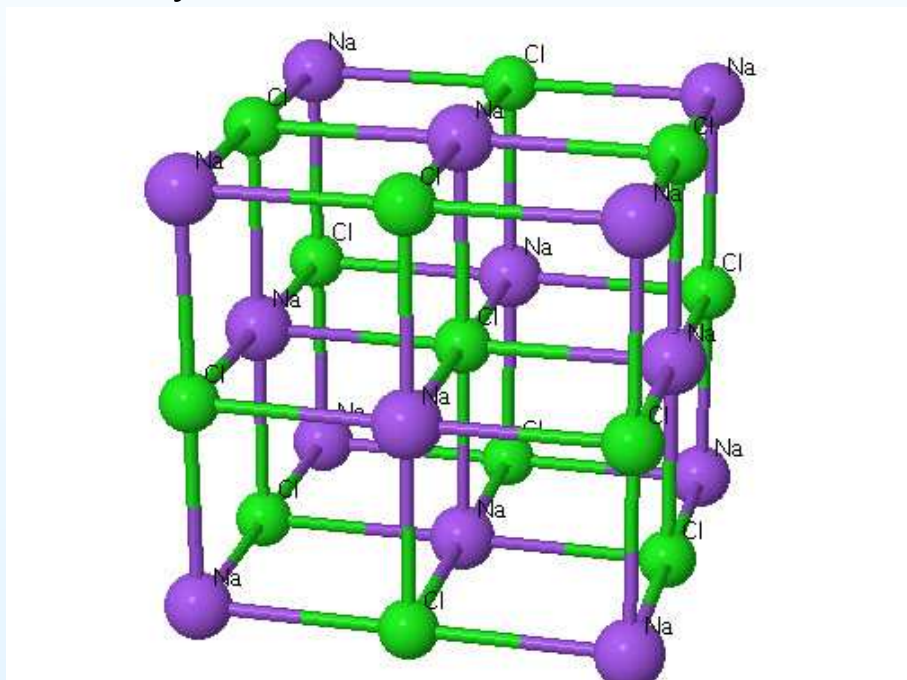
- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
  - **Ionos kötés**
  - Kovalens kötés
  - Fémes kötés
  - Másodlagos kötések
  - A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Ionos kötés

Az ionok vonzása megfelelően rendezett atomhalmazt is egyben tud tartani.

Pl.: NaCl, azaz a konyhasó.:





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

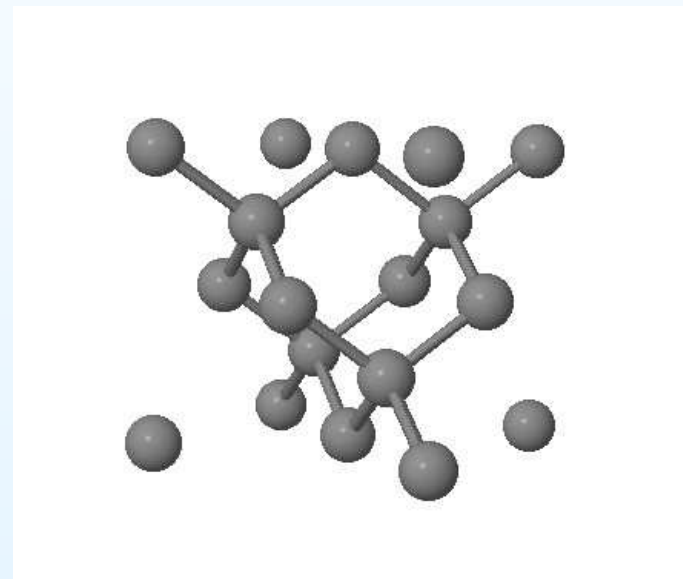
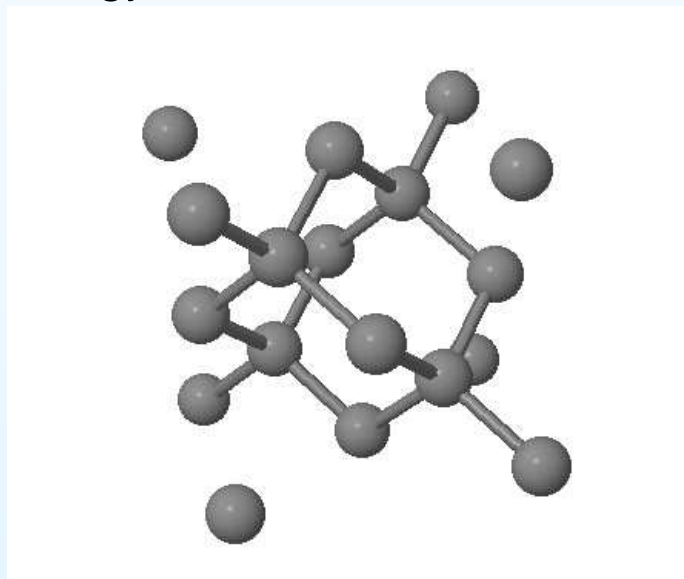
- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- **Kovalens kötés**
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Kovalens kötés

Amennyiben egy atom több másikkal is képes kovalens kötést kialakítani, előfordul, hogy ezek a kötések makroszkopikus méretű láncolatá szerveződnek.

Pl.: gyémánt. A C-atomok 4-4 szomszédval vannak kötésben.





## Bevezetés

## Molekulafizika

## Az ionos kötés

## A kovalens kötés

## A molekulák kötéshossza és kötési energiája

## A molekulák energiaszintjei

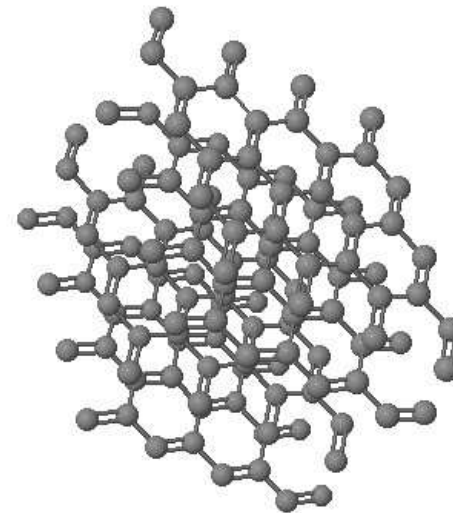
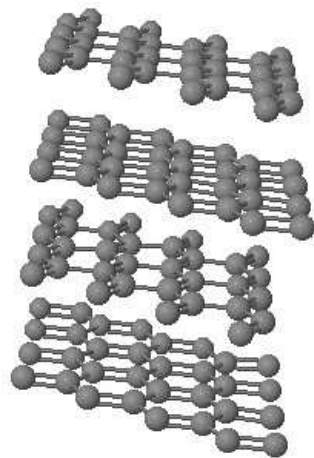
## Másodlagos kötések

## A szilárdtestek szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- **Kovalens kötés**
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

## Elektronok viselkedése szilárdtestekben

A C-atomok más körülmények között grafitrácsba szerveződnek:





## Bevezetés

## Molekulafizika

## Az ionos kötés

## A kovalens kötés

## A molekulák kötéshossza és kötési energiája

## A molekulák energiaszintjei

## Másodlagos kötések

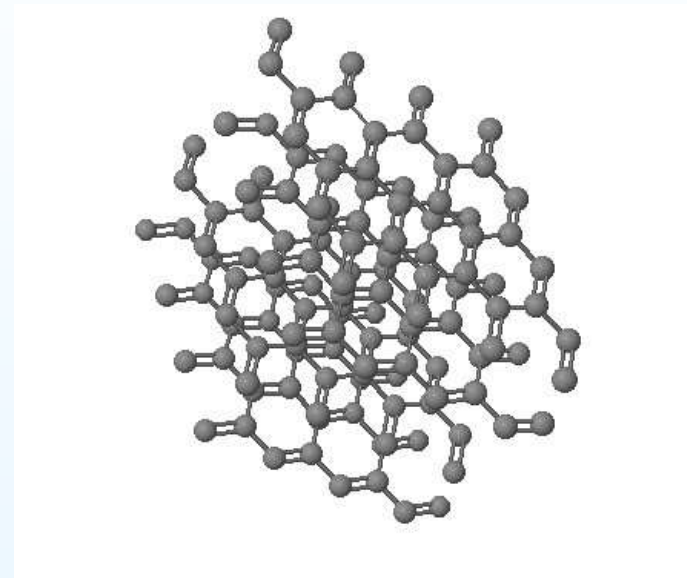
## A szilárdtestek szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- **Kovalens kötés**
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

## Elektronok viselkedése szilárdtestekben

...

A C-atomok más körülmények között grafitrácsba szerveződnek:



A gyémánt és a grafit sok tulajdonságában eltér.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- **Fémes kötés**
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Fémes kötés

Olyan kovalens kötés, mely esetén a kötő elektronok az egész rácsra vonatkozóan delokalizáltak lesznek, azaz lényegében szabadon elmozdulhatnak benne.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- **Fémes kötés**
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Fémes kötés

Olyan kovalens kötés, mely esetén a kötő elektronok az egész rácsra vonatkozóan delokalizáltak lesznek, azaz lényegében szabadon elmozdulhatnak benne.

A fémekre jellemző: ezek vegyértékelektronjaikat „beadják a közösbe” és ezek az egész fémdarabon belül képesek elmozdulni.

Ezért vezetik jól az áramot és a hőt a fémek.



[Bevezetés](#)

[Molekulafizika](#)

[Az ionos kötés](#)

[A kovalens kötés](#)

[A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája](#)

[A molekulák  
energiaszintjei](#)

[Másodlagos kötések](#)

[A szilárdtestek  
szerkezete](#)

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- **Másodlagos kötések**
- A kötések tartóssága

[Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben](#)

## Másodlagos kötések

A molekulák közti másodlagos kötések is képesek szilárdtesteket egyben tartani.





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- **Másodlagos kötések**
- A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## Másodlagos kötések

A molekulák közti másodlagos kötések is képesek szilárdtesteket egyben tartani.

Egyszerű molekulák esetén általában szabályos kristályszerkezetek alakulnak ki. (Pl. jég, jódkristály).

Hosszú láncmolekulák esetén, melyek több helyen tartalmaznak poláros vagy hidrogénhíd-kötésre alkalmas részeket nem lesz teljesen rendezett. Ilyenkor szilárd, de nem kristályos anyagok jönnek létre. (Pl. fa, bőr)

A másodlagos kötések sokkal kisebb energiával szétbonthatók, mint az elsődlegesek, így ezek már alacsonyabb hőmérsékleten felbomlanak.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- **A kötések tartóssága**

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A kötések tartóssága

Leggyengébbek a másodlagos kötések: csak nagy relatív molekulatömeg esetén eredményeznek szobahőmérsékleten is szilárd állapotot.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- **A kötések tartóssága**

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A kötések tartóssága

Leggyengébbek a másodlagos kötések: csak nagy relatív molekulatömeg esetén eredményeznek szobahőmérsékleten is szilárd állapotot.

A poláros és hidrogénhid kötések már elég erősek ahhoz, hogy szobahőmérsékleten is együtt tartsák folyékony vagy szilárd állapotban a molekulákat. Pár száz °C-on mind felbomlik, de sok már kicsivel a szobahőmérséklet felett is.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- **A kötések tartóssága**

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

## A kötések tartóssága

Leggyengébbek a másodlagos kötések: csak nagy relatív molekulatömeg esetén eredményeznek szobahőmérsékleten is szilárd állapotot.

A poláros és hidrogénhid kötések már elég erősek ahhoz, hogy szobahőmérsékleten is együtt tartsák folyékony vagy szilárd állapotban a molekulákat. Pár száz  $^{\circ}\text{C}$ -on mind felbomlik, de sok már kicsivel a szobahőmérséklet felett is.

Az elsődleges kötések a legtartósabbak, akár több ezer  $^{\circ}\text{C}$ -on is együtt tartják az anyagot.

## Egy példa

**Példa:** Az öntöttvas szobahőmérsékleten  $7210 \text{ kg/m}^3$  sűrűségű, relatív atomtömege  $55,8 \text{ g/mol}$ , és szerkezete tércentrált köbös. Mekkora egy elemi cellának vehető kocka alakú térrész élhossza?

## Egy példa

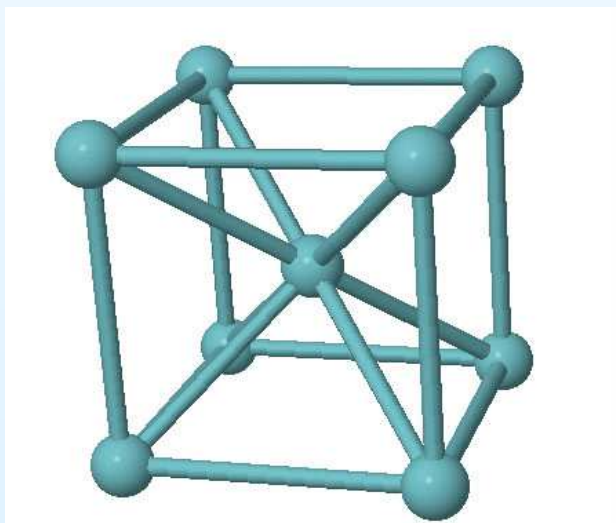
**Példa:** Az öntöttvas szobahőmérsékleten  $7210 \text{ kg/m}^3$  sűrűségű, relatív atomtömege  $55,8 \text{ g/mol}$ , és szerkezete tércentrált köbös. Mekkora egy elemi cellának vehető kocka alakú térrész élhossza?

**Megoldás:** 1 m élhosszúságú vaskocka tömege  $7210 \text{ kg}$ .

1 mol, azaz  $6,02 \cdot 10^{23}$  db vasatom tömege  $55,8 \text{ g}$ .

Tehát  $1 \text{ m}^3$ -nyi vasban az atomok száma:

$$N = \frac{7210}{0,0558} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} = 7,78 \cdot 10^{28}$$



Egy cellában 1 teljes atom + 8 atom  $1/8$  része, azaz 2 atom van.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

- Bevezetés
- Pár szó a kristályszerkezetről
- A szilárdtestek kötéstípusai
- Ionos kötés
- Kovalens kötés
- Fémes kötés
- Másodlagos kötések
- A kötések tartóssága

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

...

A cellák száma tehát:

$$N_c = \frac{N}{2} = 3,89 \cdot 10^{28}$$

Ha az 1 m-es élhossz mentén  $n$  számú elemi cella van, akkor:

$$N_c = n^3 \Rightarrow n = \sqrt[3]{N_c} = 3,39 \cdot 10^9$$

Ennyi cella élhossz tesz ki 1 m-t, ezért egy cella mérete:

$$a = \frac{1 \text{ m}}{n} = 2,95 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,295 \text{ nm.}$$

Megjegyzés: a rácshibák hatását elhanyagoltuk.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

**Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben**

- Szilárdtestek  
sávszerkezete
- A sávszerkezet  
ábrázolása
- Az elektronok energia  
szerinti eloszlása
- Szigetelők,  
félvezetők, vezetők közti  
különbség

# Elektronok viselkedése szilárdtestekben





Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

● Szilárdtestek  
sávszerkezete

- A sávszerkezet  
ábrázolása
- Az elektronok energia  
szerinti eloszlása
- Szigetelők,  
félvezetők, vezetők közti  
különbség

## Szilárdtestek sávszerkezete

Láttuk, hogy a molekulák energiaszerkezete sokkal több lehetséges szintből áll, mint az atomoké.

A szilárdtesteknél ez a jelenség még fokozódik.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

- Szilárdtestek  
sávszerkezete
- A sávszerkezet  
ábrázolása
- Az elektronok energia  
szerinti eloszlása
- Szigetelők,  
félvezetők, vezetők közti  
különbség

## Szilárdtestek sávszerkezete

Láttuk, hogy a molekulák energiaszerkezete sokkal több lehetséges szintből áll, mint az atomoké.

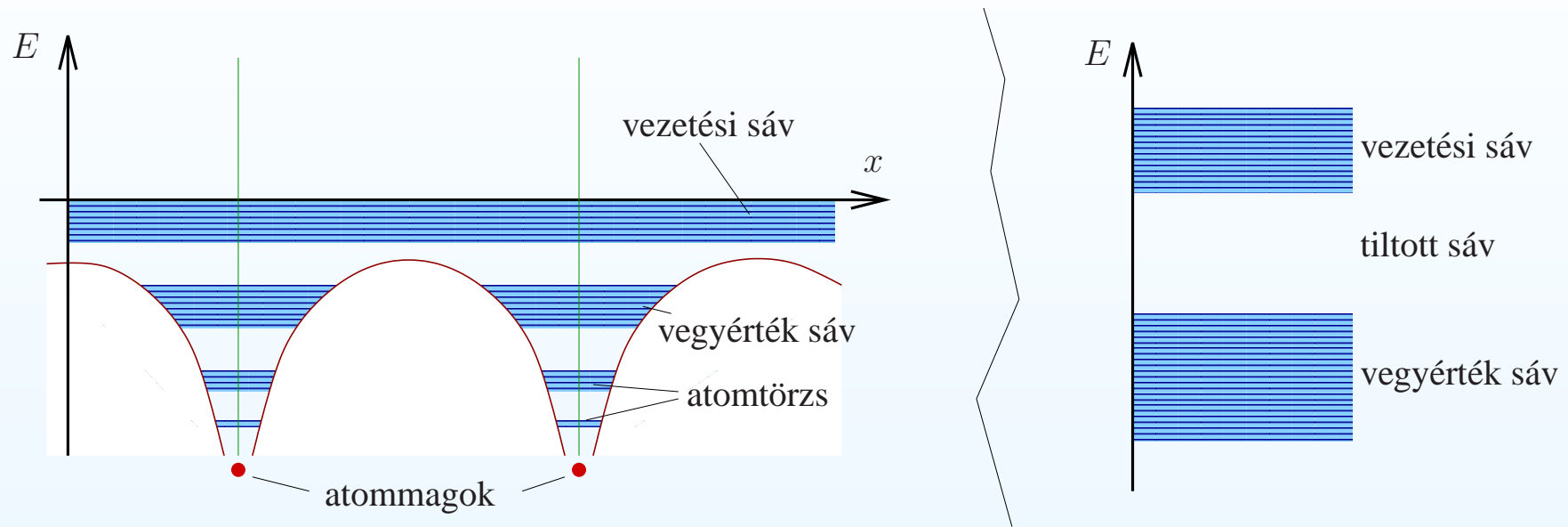
A szilárdtesteknél ez a jelenség még fokozódik.

A közeli atomok torzítják egymás elektronszerkezetét, így **az eredeti atomi szintek igen sok részre széthasadnak**.

A sok közeli szint összemosódik, és a megengedett állapotok **energiasávokba** csoportosulnak. Az egyes sávok különböző jellegű elektronállapotnak felelnek meg:

- **vegyértéksáv**: az atomokhoz kötődő elektronok
- **vezetési sáv**: a rácson belül tetszőleges távolságra elmozdulni képes elektronok
- **tiltott sáv**: itt nem lehetnek elektronok.

# A sávszerkezet ábrázolása



Vigyázat! Az ábra sok egyszerűsítést tartalmaz!



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

- Szilárdtestek  
sávszerkezete
- A sávszerkezet  
ábrázolása
- Az elektronok energia  
szerinti eloszlása
- Szigetelők,  
félvezetők, vezetők közti  
különbség

## Az elektronok energia szerinti eloszlása

A sávszerkezeten belül az elektronok eloszlását az energiaminimum-elv és a Pauli-elv határozza meg.

Hőmozgás nélkül az elektronok a lehető legalacsonyabb energiaszintre ülnének be, amit a Pauli-elv enged, azaz egy szintig feltöltenék az összes lehetséges állapotot. Ennek a szintnek a neve: **Fermi-szint.**



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

- Szilárdtestek  
sáv szerkezete
- A sáv szerkezet  
ábrázolása
- Az elektronok energia  
szerinti eloszlása
- Szigetelők,  
félvezetők, vezetők közti  
különbség

## Az elektronok energia szerinti eloszlása

A sáv szerkezeten belül az elektronok eloszlását az energiaminimum-elv és a Pauli-elv határozza meg.

Hőmozgás nélkül az elektronok a lehető legalacsonyabb energiaszintre ülnének be, amit a Pauli-elv enged, azaz egy szintig feltöltenék az összes lehetséges állapotot. Ennek a szintnek a neve: **Fermi-szint**.

Hőmozgás esetén már jutnak elektronok a magasabb szintekre is. A statisztikus fizika szerint  $T$  hőmérsékleten annak a valószínűsége, hogy egy  $E$  energiához tartozó energiaszint be van töltve:

$$p(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$

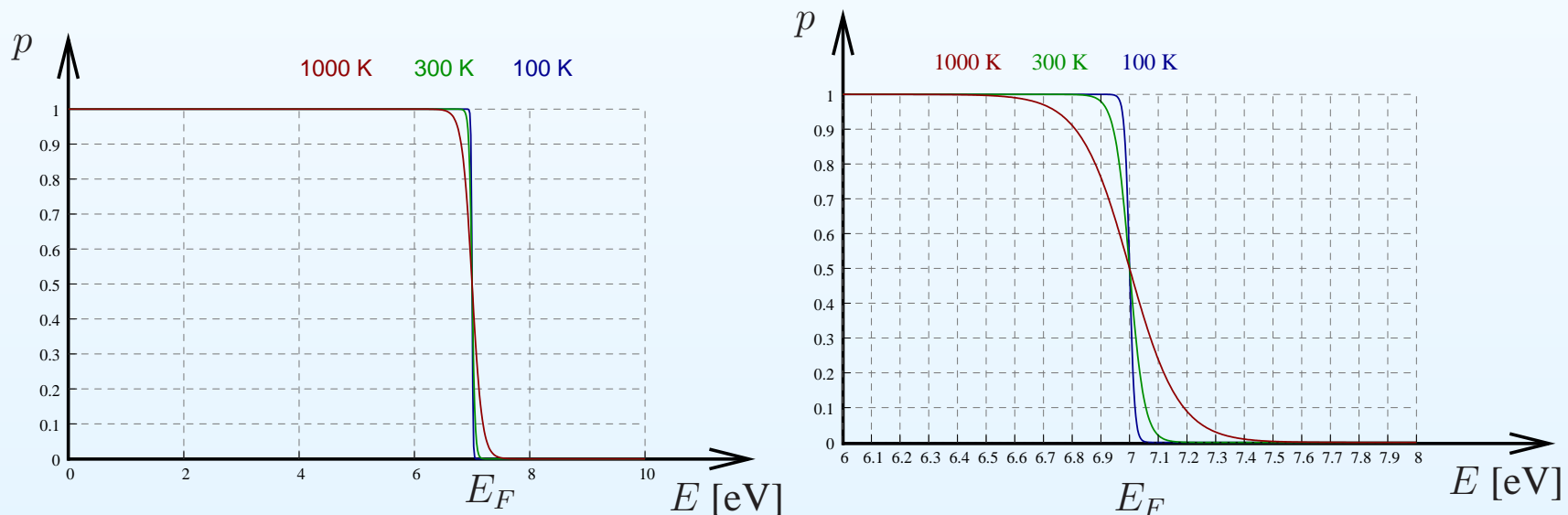
ahol  $E_F$  a Fermi-szint,  $k$  a Boltzmann-állandó.

...

- Ha  $E - E_F \ll -kT$ , akkor  $p(E) \approx 1$ .
- Ha  $E = E_F$ , akkor  $p(E) = 0,5$ .
- Ha  $E - E_F \gg kT$ , akkor  $p(E) \approx 0$ .

$E_F$  tipikus értéke: 5–10 eV. Szobahőmérsékleten  $kT \approx 0,025$  eV.

Pl.  $E_F = 7$  eV esetére, 3 különböző hőmérsékleten:



A váltás szobahőmérsékleten nagyon éles.



Bevezetés

Molekulafizika

Az ionos kötés

A kovalens kötés

A molekulák  
kötéshossza és kötési  
energiája

A molekulák  
energiaszintjei

Másodlagos kötések

A szilárdtestek  
szerkezete

Elektronok viselkedése  
szilárdtestekben

- Szilárdtestek  
sávszerkezete
- A sávszerkezet  
ábrázolása
- Az elektronok energia  
szerinti eloszlása
- **Szigetelők,  
félvezetők, vezetők közti  
különbség**

## Szigetelők, félvezetők, vezetők közti különbség

Egy anyag vezetőképesége elsősorban azon múlik, hol helyezkedik el egymáshoz képest a Fermi-szint és a vezetési sáv alja.

- **szigetelők:**  $E_F$  a tiltott sáv közepén, a tiltott sáv szélessége több eV, ezért alig van vezetési elektron.
- **fémek:** kicsi a tiltott sáv szélessége,  $E_F$  benne van a vezetési sávban, ezért sok a vezetési elektron.
- **félvezetők:** a tiltott sáv szélessége kb. 1 eV,  $E_F$  a tiltott sáv közepén van. Kevés elektron van a vezetési sávban.

