

## Az atompályák és a kvantumszámok

Az elektronok tartózkodási helyei az atomban az elektron hullámtulajdonságai segítségével adhatóak meg. Az atompályák pontthalmazainak megadásához ún. hullám-sűrűségfüggvényeket használunk (pl. Schrödinger-egyenlet).

### Az atompálya:

Azt a térrészt az atomban, amelyet alkotó pontokra igaz, hogy az elektron előfordulási valószínűsége nagy (>90%) az elektron atomi pályájának, röviden atompályának nevezzük.

### A molekulapálya:

Azt a térrészt a molekulában, amelyet alkotó pontokra igaz, hogy a kovalens kötést létrehozó elektronok előfordulási valószínűsége nagy (>90%), molekulapályának nevezzük.

Az atompályák jellemzésére kvantumszámokat használunk. Egy atompályát háromféle kvantumszámmal lehet egyértelműen megadni: a fő-, a mellék-, és a mágneses kvantumszámokkal.

### A főkvantumszám és az elektronhéjak:

A főkvantumszám az atompályák „méretét”/”nagyságát” adja meg. Jele:  $n$  („kis  $n$ ”), lehetséges értékei: pozitív egész számok: 1, 2, 3, ...

Azonos főkvantumszámú atompályák elektronhéjat alkotnak. Az elektronhéjak jelölésére nyomtatott nagy betűket használunk: K, L, M, N, O, ... amelyek ilyen sorrendben  $n=1$ ,  $n=2$ , ... főkvantumszámú atompályák halmazait jelölik.

### A mellék kvantumszám és az alhéjak:

A mellék kvantumszám az atompályák „alakját” adja meg. Jele:  $l$  („kis  $l$ ”), lehetséges értékei természetes számok: 0, 1, 2, ... ( $n-1$ ). Egy adott főkvantumszámú ( $n$ ) atompálya lehetséges maximális mellék-kvantumszám értéke: ( $n-1$ ). A mellék-kvantumszámok jelölésére nyomtatott kis betűket használunk.  $l=0 \rightarrow s$ ;  $l=1 \rightarrow p$ ;  $l=2 \rightarrow d$ ;  $l=3 \rightarrow f$ . (S stood for *Sharp*, P for *Principal*, D for *Diffused*, F for *Fundamental*)

Egy elektronhéjon (K, L, M, N...) belül az azonos mellék kvantumszámú atompályák alhéjakat alkotnak. Az azonos alhéjhoz tartozó atompályáknak így a fő- és a mellék kvantumszáma is megegyezik.

Az alhéjakat ezért a fő- és mellékkvantumszám együttes megadásával tehetjük meg:

pl. 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f ... (miért nincs 2f alhéj? ☺)

Mágneses téren kívül az atompályák energiaszintjeit a fő- és a mellék kvantumszám együttesen határozza meg. Elsősorban a fő- és mellék kvantumszám összege ( $n+l$ ) számít, olyan módon, hogy az alacsonyabb ( $n+l$ ) összeggel jellemezhető alhéj mélyebb energiaszintet jelöl. Ha ez az érték két alhéjra (pl. 2p és 3s) azonos, akkor közülük az a mélyebb energiaszintű, amelynek kisebb a főkvantumszáma (a 2p alhéj alacsonyabb energiaszintű mint a 3s).

### A mágneses kvantumszám:

Mágneses térben az azonos alhéjokhoz tartozó atompályák energiaszintjei is eltérőnek bizonyulnak.

A mágneses kvantumszám az atompályák térbeli irányultságát mutatja meg. Jele:  $m$  („kis  $m$ ”), lehetséges értékei:  $-l$  („mínusz  $l$ ”);  $-(l-1)$  ...,  $-1$ ,  $0$ ,  $+1$  (plusz egy),  $+2$ , ...,  $+(l-1)$ ;  $+l$ . A mágneses kvantumszám lehetséges értékeit az adott alhéjat jellemző mellék kvantumszám határozza meg. Pl. d alhéj esetén:  $-2$ ;  $-1$ ;  $0$ ;  $+1$ ;  $+2$ . A lehetséges értékek darabszáma:  $2l + 1$  („kettő  $l$  plusz egy”). d alhéj esetén a mágneses kvantumszámok lehetséges száma  $2 \cdot 2 + 1 = 5$ .

Az atompályákat a háromféle kvantumszám együttesen adja meg. Pl.  $2p_{-1}$  jelenti azt az atompályát, amelynek főkvantumszáma:  $n=2$ ; mellék kvantumszáma:  $l=1$ ; mágneses kvantumszáma  $m=-1$ . Ugyanez a  $3d_{+2}$  atompályára:  $n=3$ ;  $l=2$ ;  $m=+2$ .

**Ábra a következő oldalon!**

