

Elektronikai anyagtudomány

1. előadás

Dr. Bonyár Attila, egyetemi tanár

bonyar.attila@vik.bme.hu

Budapest, 2025.02.13.

Bemutakozás - a tantárgy előadói

Magyar és angol kurzusok



Dr. Bonyár Attila
egyetemi tanár
ETT
tárgyfelelős



Dr. Szabó Péter János
egyetemi tanár
ATT



Dr. Hurtony Tamás
egyetemi docens
ETT

bonyar.attila@vik.bme.hu
szabo.peter.janos@gpk.bme.hu
hurtony.tamas@vik.bme.hu

Német kurzus



Dr. Sántha Hunor
egyetemi docens
ETT

santha.hunor@vik.bme.hu

Bemutakozás – a tárgyfelelős



- **2009: okleveles villamosmérnök** (ötéves képzés),
- **2011: egészségügyi mérnök** (MSc),
- **2014: PhD** (Fémes nanoszerkezetek vizsgálata atomierő mikroszkópiával (AFM)),
- **2021: Habilitáció**
- **2024: MTA doktora** (DSc): Plazmonikus elvű bioérzékelők kutatás- fejlesztése,
- **Oktatott tárgyak:** **Nanotudomány** (MSc), Alkalmazott nanotudomány (PhD), **Bio- és nanoszenzorika** (MSc), Nanoelektronika, nanotechnológia (MSc), Alkalmazott szenzorika (MSc).

- **Kutatási területek:** bioszenzorok, optikai (plazmonika) szenzorok, nanometrológia (AFM).
- **Fontosabb pozíciók:** villamosmérnöki szakbizottság (2016-), egészségügyimérnöki szakbizottság (2018-), MTA-EETTB (2017-), IEEE Nanotechnology Council (NTC) TC-11 chair (2021-).

Célkitűzés

Az anyagtudomány jelentése: az anyagok szerkezete és tulajdonságai közötti kapcsolatok tudománya¹.

Elektronikai anyagtudomány c. természettudományos alaptárgy elsődleges célja a villamosmérnökök számára szükséges alapvető anyagszerkezeti és anyagtechnológiai ismeretek átadása a hallgatóknak².

Ez magában foglalja a különböző anyagmodellek megismerését, kristálytani alapismeretek elsajátítását, valamint a főbb, villamosmérnöki gyakorlatban alkalmazott vezető, félvezető, szigetelő, mágneses és optikai anyagok alapvető fizikai tulajdonságainak és ebből adódó viselkedésének megértését².

A tárgy további célja a geometria skálázásból (méretcsökkentésből) adódó anyagtulajdonság megváltozások, illetve fontosabb kvantummechanikai jelenségek ismertetése, amelyek a modern mikroelektronika, illetve elektronikus eszközök működésének alapját képezik².

Célkitűzés

Az anyagtechnológia jelentése: A **technológia** szó lépésekből álló eljárások és módszerek összességére utal, amellyel egy adott cél elérhető (pl. egy termék előállítása). Az **anyagtechnológia** az anyagok szerkezete és tulajdonsága között feltárt kapcsolatot használja új anyagok, szerkezetek előállítására, amelyek tervezett tulajdonságokkal rendelkeznek.

Anyagcsaládok:

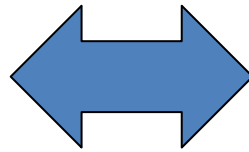
Fémek, ötvözetek

Félvezető és szigetelő kristályok

Kerámiák és üvegek

Polimerek

Kompozitok



Anyagi tulajdonságok:

Mechanikai (terhelés, alakváltozás)

Elektromos (vezetési tul. és E-tér hatása)

Mágneses (mágneses tér hatása)

Termikus (hővezetés, hőátadás...)

Optikai (reflexió, áteresztés...)

Kémiai (oldhatóság, korrózió...)

Célkitűzés

Az első három előadás célja alulról felfelé építkezve (bottom-up) felépíteni egy anyagmodellt, amely segítségével az anyagcsaládok fő fizikai tulajdonságai megérthetővé, levezethetővé válnak.

Ehhez rendszerezünk a korábbi alapvető fizikai/kémiai ismereteinket, valamint egyesítjük azokat modern fizikai ismeretekkel.

A többi előadás az itt felépített modellre támaszkodva mélyül el az anyagcsaládok fizikai tulajdonságiban.

Célkitűzés

Milyen ismeretekre épít az Elektronikai anyagtudomány?

- Alapvető középiskolai fizikai, matematikai és kémiai ismeretek.
- A BSc képzésen párhuzamosan tanult fizikai ismeretek (elsősorban Fizika II).

Milyen későbbi tantárgyak építenek az Elektronikai anyagtudományra?

- **Kötelező tárgyak a BSc képzésen:**
 - Elektronikai Technológia (3. szemeszter),
 - Mikroelektronika (3. szemeszter).
- **Mikroelektronikai hardvertervezés és integráció BSc specializáció (EET, ETT):**
 - Mikroelektronikai tervezés és integráció ágazat (EET),
 - Elektronikai hardvertervezés és integráció ágazat (ETT).
- **MSc képzés választható természettudományos tárgyai:**
 - Fizika 3, Nanotudomány, Fotonikai eszközök, Villamos szigetelések és kisülések.
- **MSc képzés fő és mellékspecializációk:**
 - Elektronikai rendszerintegráció főspecializáció (EET-ETT),
 - Alkalmazott szenzorika mellékspecializáció (ETT),
 - Zöld villamos energetika mellékspecializáció (EET-VET).

A tantárgy féléves menetrendje

1. hét (02.13): Tárgyismertetés – bevezetés, atommodellek. (BA)
2. hét (02.20): Kémiai kötések és makroszkopikus tulajdonságok kapcsolata. (BA)
3. hét (02.27): Elektronszerkezet, sáv szerkezet, vezetési tulajdonságok. (BA)
4. hét (03.06): Kristálytani alapismeretek, kristálytípusok és hibák. (SZPJ)
5. hét (03.13): Egykristályok, polikristályok, amorf anyagok és polimerek. Ötvözetek. (SZPJ)
6. hét (03.20): Fémek mechanikai tulajdonságai, azok vizsgálata. (SZPJ)
7. hét (03.27): Félvezető anyagok tulajdonságai, félvezető egykristályok. (HT) **2025-03-28, P 8-10**
8. hét (04.03): Félvezető adalékolási eljárások, szilícium vegyületek. (HT) **ZH1**
9. hét (04.10): Fémek vezetési tulajdonságai. Vezeték és ellenállás anyagok. (SZPJ)
10. hét (04.17): *Tavaszi szünet*
11. hét (04.24): *Tavaszi szünet*
12. hét (05.01): *Állami ünnep*
13. hét (05.08): Mágneses anyagok. Ferro, para és diamágneses anyagok. (SZPJ)
14. hét (05.15): Szigetelő anyagok villamos tulajdonságai. (HT)
15. hét (05.22): Optikai anyagok / skálázás-kvantumhatások (HT/BA) **2025-05-23, P 8-10**

A tantárgy követelménye

- A félév során a tárgyból két nagyZH-t írunk (egyenként 60 perces).
- Az aláírás megszerzésének feltétele mindkét ZH elégséges teljesítése (40%).
- A félév végi megajánlott jegy a két ZH 50-50%-os átlagával alakul ki.
- Az összegző értékelések pótlására, javítására egyszeri lehetőség biztosított (részenként).
- Pót-pótzárthelyi csak a korábbi zárthelyik teljesítésének alacsony sikeressége (kevesebb, mint egyharmad) esetén biztosított.
- Ponthatárok a végső elszámolásnál (%):
 - 40-54% - 2
 - 55-69% - 3
 - 70-84% - 4
 - 85-100% - 5

Még egyeztetni fogjuk

Felkészülés a zárthelyire

- Alapvetően csak azt kérjük számon, ami az előadáson elhangzik és a diasor tartalmazza.
- Az előadások végén felsoroljuk a felkészüléshez javasolt irodalmat.
- Az előadások végén ellenőrző kérdésekkel segítjük a megértés elmélyítését.
- Az előadások anyagai elérhetőek itt:
 - **MS Teams csoport.**

Hogyan néz ki egy ZH?

Elektronikai anyagtudomány ZH1 – magyar kurzus

1. A feladat megnevezése: ...

2. A feladat célja: ...

3. A feladat leírása: ...

4. A feladat megoldása: ...

5. A feladat értékelése: ...

6. A feladat megoldásának ellenőrzése: ...

7. A feladat megoldásának értékelése: ...

8. A feladat megoldásának értékelése: ...

9. A feladat megoldásának értékelése: ...

10. A feladat megoldásának értékelése: ...

11. A feladat megoldásának értékelése: ...

12. A feladat megoldásának értékelése: ...

13. A feladat megoldásának értékelése: ...

14. A feladat megoldásának értékelése: ...

15. A feladat megoldásának értékelése: ...

1. A feladat megnevezése: ...

2. A feladat célja: ...

3. A feladat leírása: ...

4. A feladat megoldása: ...

5. A feladat értékelése: ...

6. A feladat megoldásának ellenőrzése: ...

7. A feladat megoldásának értékelése: ...

8. A feladat megoldásának értékelése: ...

9. A feladat megoldásának értékelése: ...

10. A feladat megoldásának értékelése: ...

11. A feladat megoldásának értékelése: ...

12. A feladat megoldásának értékelése: ...

13. A feladat megoldásának értékelése: ...

14. A feladat megoldásának értékelése: ...

15. A feladat megoldásának értékelése: ...

	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15
A									x				x		x
B	x		x					x		x					
C		x			x	x	x					x		x	
D				x							x				

Hogyan töltsük ki a ZH-t?

- Egyértelmű jelölés
- Tollal
- Nem javítva

	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15
A									x				x		x
B	x		x					x		x					
C		x			x	x	x					x		x	
D				x							x				

Ahogy inkább ne...

	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15
A	H	H	H	H	H	H	I	H	H	H	H	I	I	I	I
B	I	H	I	H	H	H	H	H	I	I		H			H
C	H	I	H	H	I	I		I	H	H		H	H		H
D	H	H	H	I	H	H	H	H	H	H		H	H		H

erejéig megemlíteni? Táblázat: csak a **HELYES** választ jelölje be (1db)!

Ahogy végképp ne...

	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15
A	D	B	B	D	C	A	C	B	D	B	B	C	A	C	X
B	X														
C		X				X									
D											X				

Table: mark only the **TRUE** answer (1 per question)!

A tavalyi félév eredményei (statisztika)

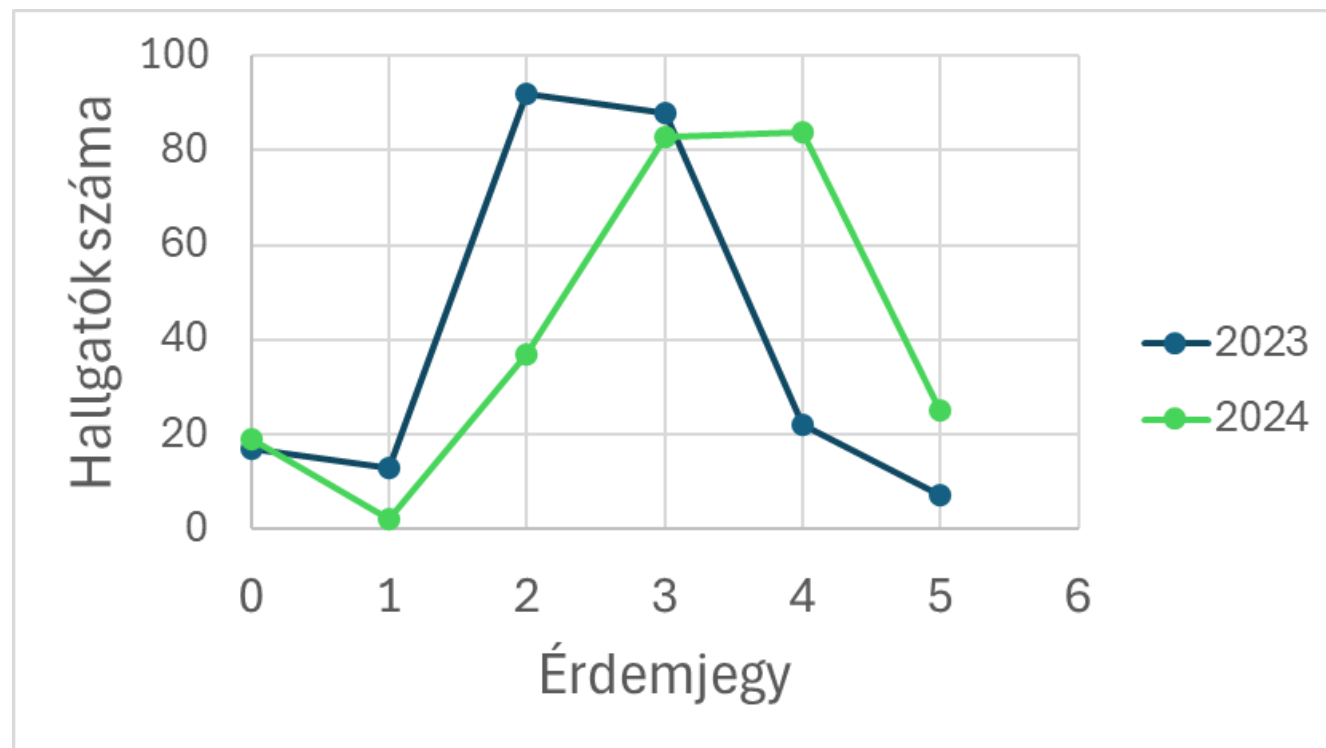
Magas teljesítési ráta (87.5%, 91.6%) 😊

A ZH-t írók ~93%-a kapott kreditet. 😊

Javuló átlag 😊

A második ZH kicsit rosszabbul sikerült

Cél: jobbra tolni a görbét...
(Tavalyról, jelentem sikerült...)



Áttekintés (az első három előadás)

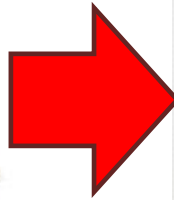
1. Bevezetés: A négy alapelemtől a standard modelling
2. Az atom felépítése – atommodellek
3. Az elemek periódusos rendszere
4. Kémiai kötések és a makroszkopikus fizikai tulajdonságok kapcsolata
5. Az anyagok elektronszerkezete

Miért fontos az anyagtudomány? Hol tart a technológia?

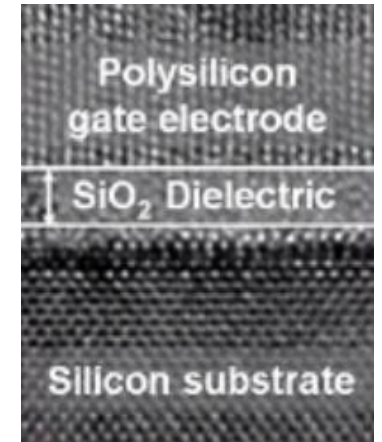
Példa: nanoelektronika – mindenki zsebében.



Egy marék homok



Qualcomm SM8450 Snapdragon 8 Gen 1 (2022)
4 nm-es technológia (4LPE, Samsung)
145MTr/mm² tranzisztor sűrűség



Elektronmikroszkópos kép egy tranzisztor gate-elektrodájáról (nem az SM8450!)
Meg tudjuk számolni az atomokat...

1. Bevezetés

Méretskálák

Maroszkopikus (10^{-4} <)
Mikroszkopikus (10^{-7} - 10^{-4})
Nano-tartomány (10^{-10} - 10^{-7})
Szubatomi ($<10^{-10}$)

Az egyes tartományokon megváltozik:

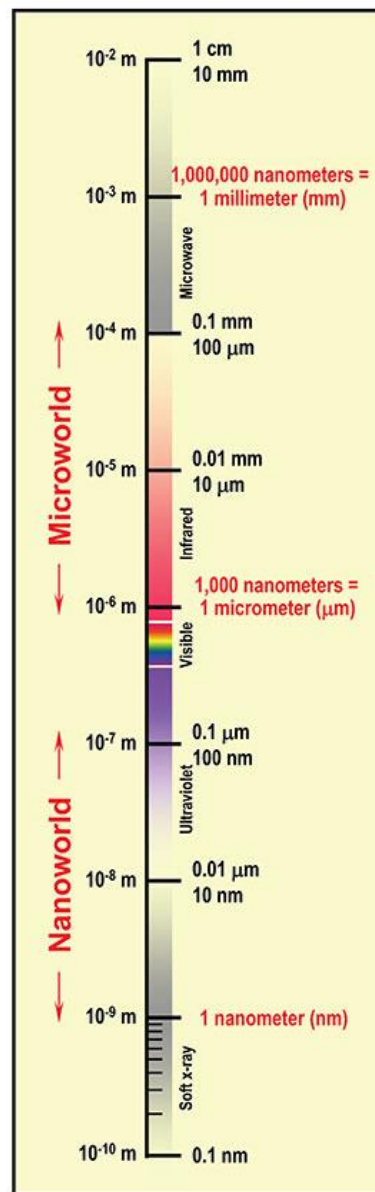
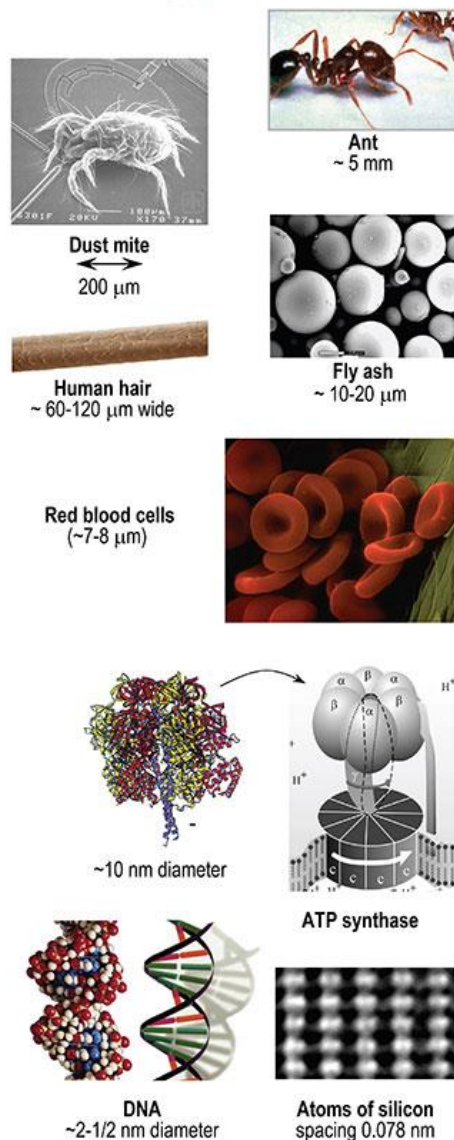
- a struktúra,
- a fizikai tulajdonságok,
- az előállítási/megmunkálási technológiák.

Lásd későbbi előadásban:
a geometriai skálázás hatásai.

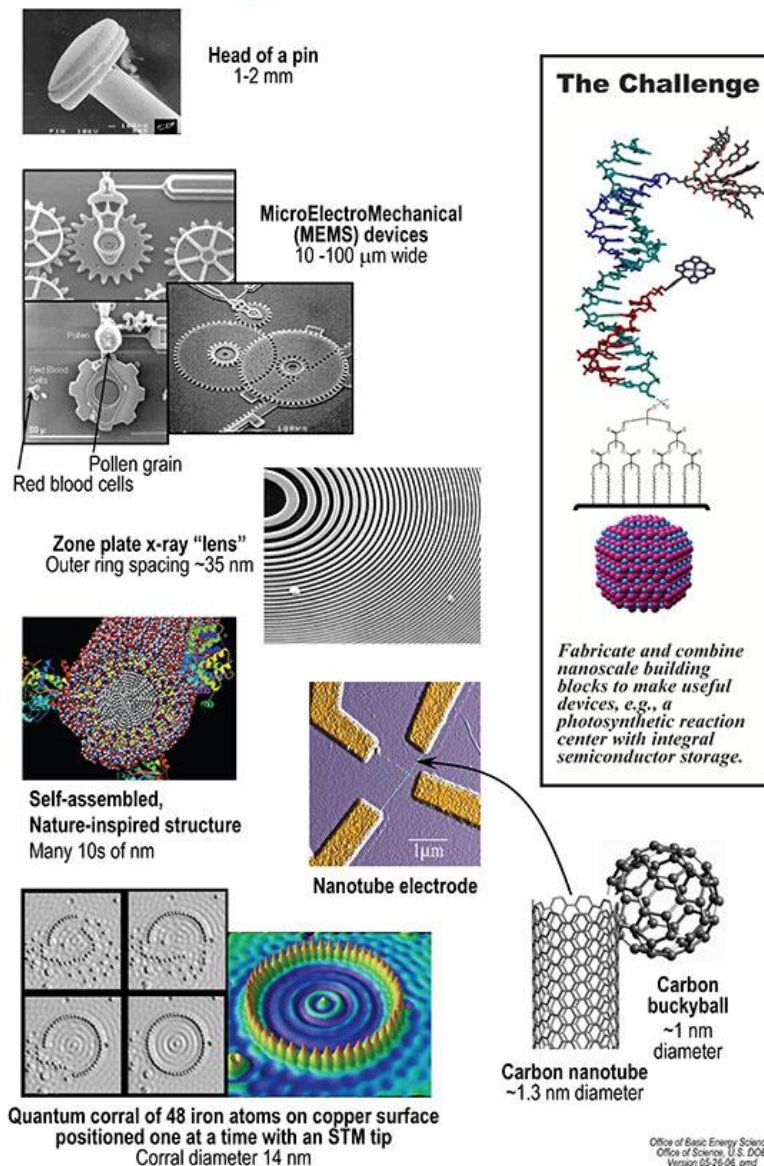
The Scale of Things – Nanometers and More



Things Natural



Things Manmade

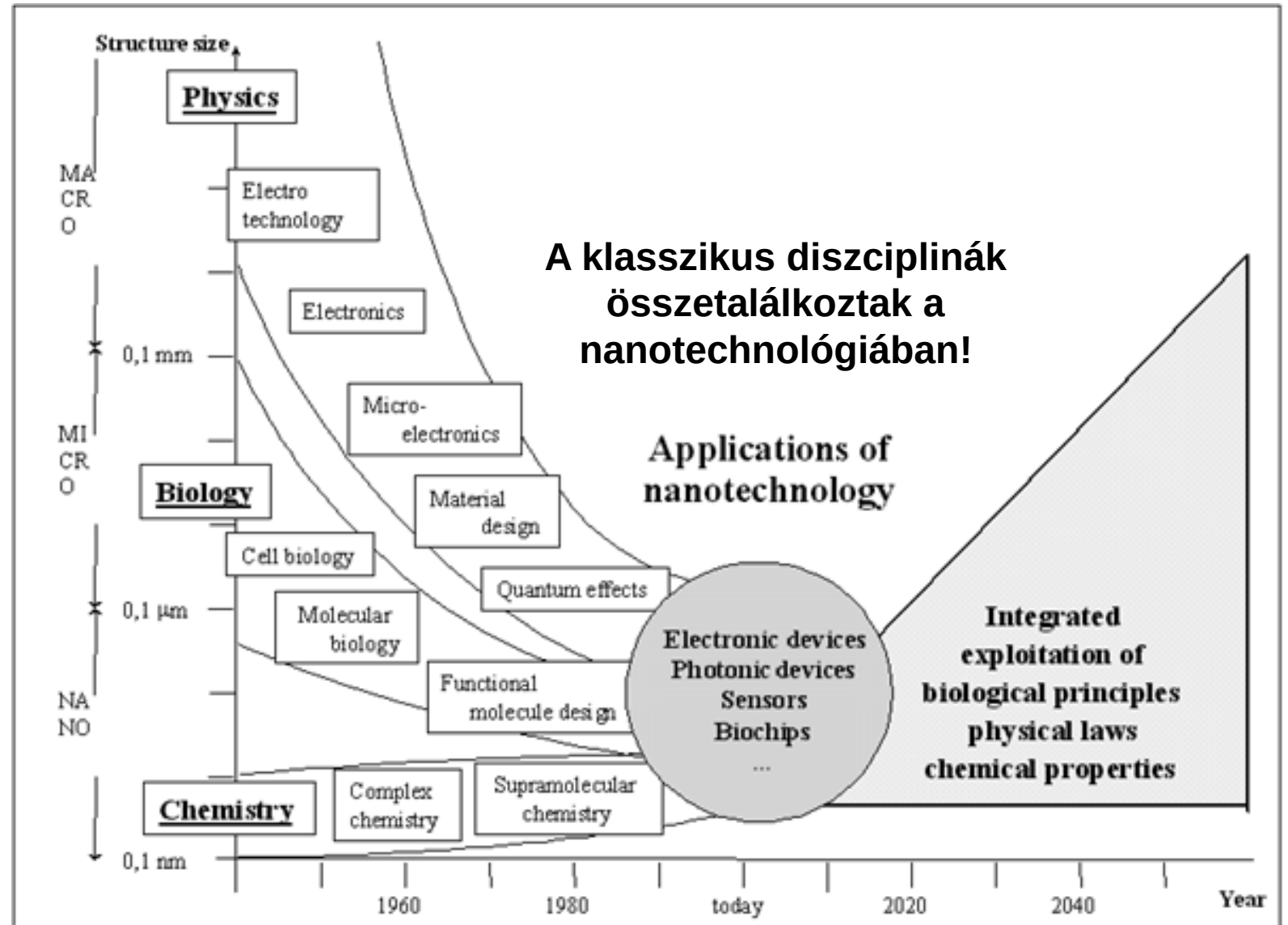


1. Bevezetés

Ma a state-of-the-art technológia a nanotechnológia.

A nanotechnológia pedig **multidisziplináris!**

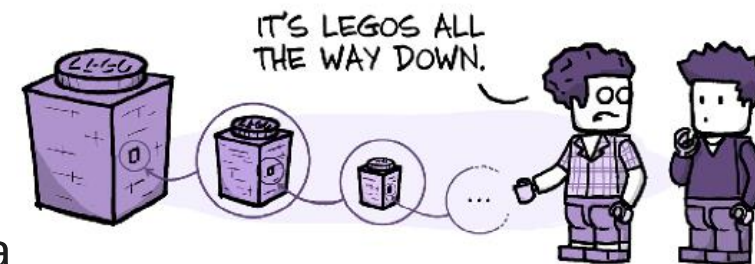
Ezért villamosmérnökként sem szabad megijednünk alapvető kémiai, biológiai fogalmaktól.



1. Bevezetés

Az atom (mint alapkő) története:

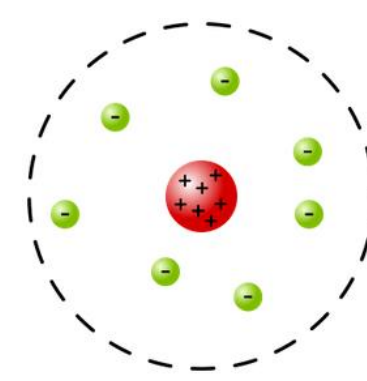
- Az ókori görögök (Empedoklész ~i.e. 450) négy eleme és tulajdonsága
- Arisztotelész (~i.e. 330) folytonos anyaga
- Atom = oszthatatlan Demokritosz (~i.e. 420), atomisták
- 1803 John Dalton – molekulákká csoportosulás arányai
- 1905 Einstein – Brown mozgás magyarázata
- 1897 Thomson – elektron felfedezése: az atom nem is oszthatatlan
- 1904 Thomson – ‘szilvás puding’ atommodell
- 1911 Rutherford – pozitív atommag felfedezése, ‘planetáris’ modell
- 1913 Bohr – rögzített elektron pályák és energia állapotok
- 1932 Chadwick – neutron is van a magban
- 1964 Murray Gell-Mann – kvark elmélet (felfedezésük egészen 1990ig)
- Azóta: Standard modell, Higgs-bozon stb.



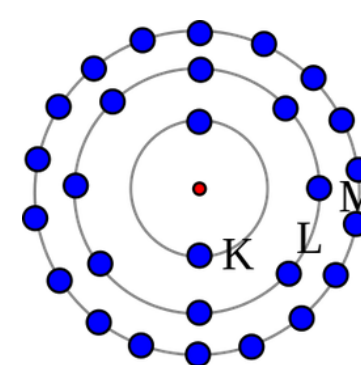
1904 Thomson



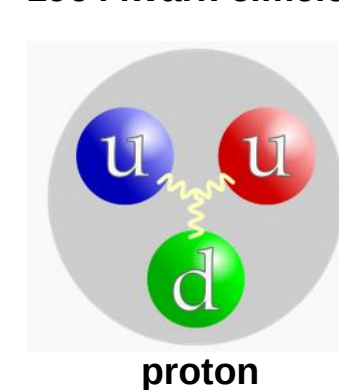
1911 Rutherford



1913 Bohr



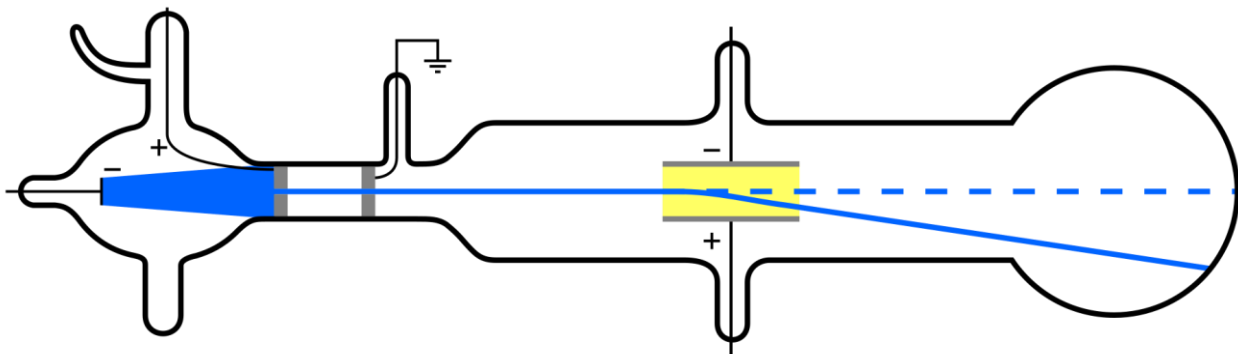
1964 kvark-elmélet



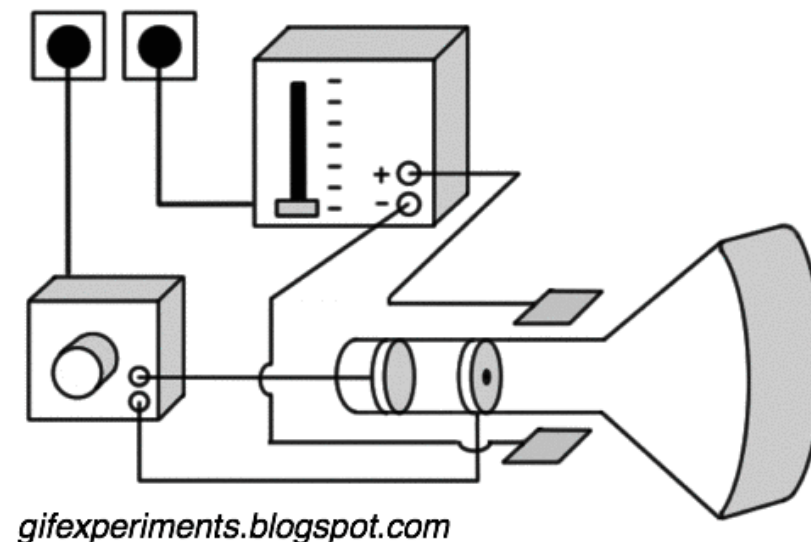
proton

1. Bevezetés

Érdekesség (1): A Thomson-kísérlet (1897)

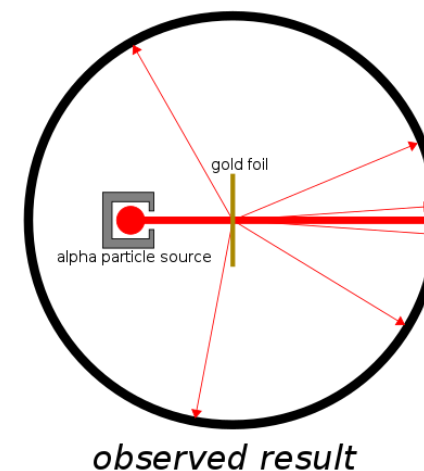
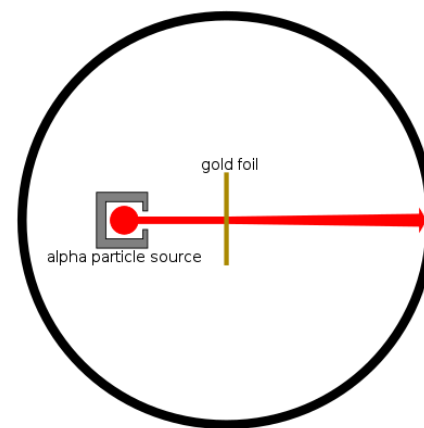
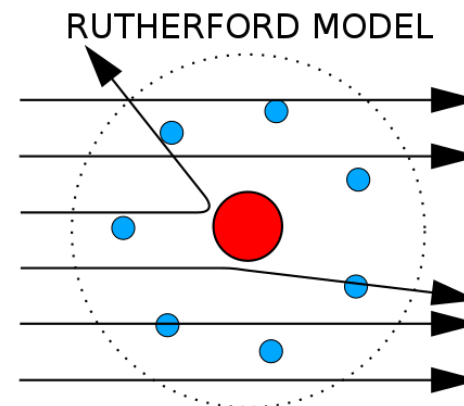
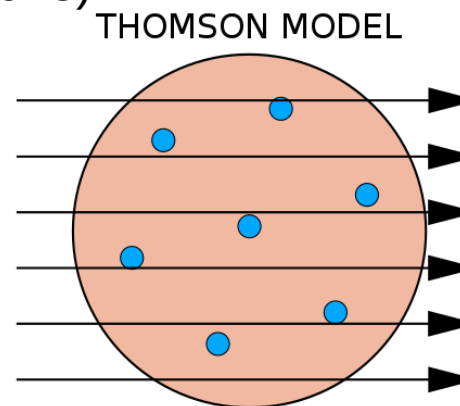
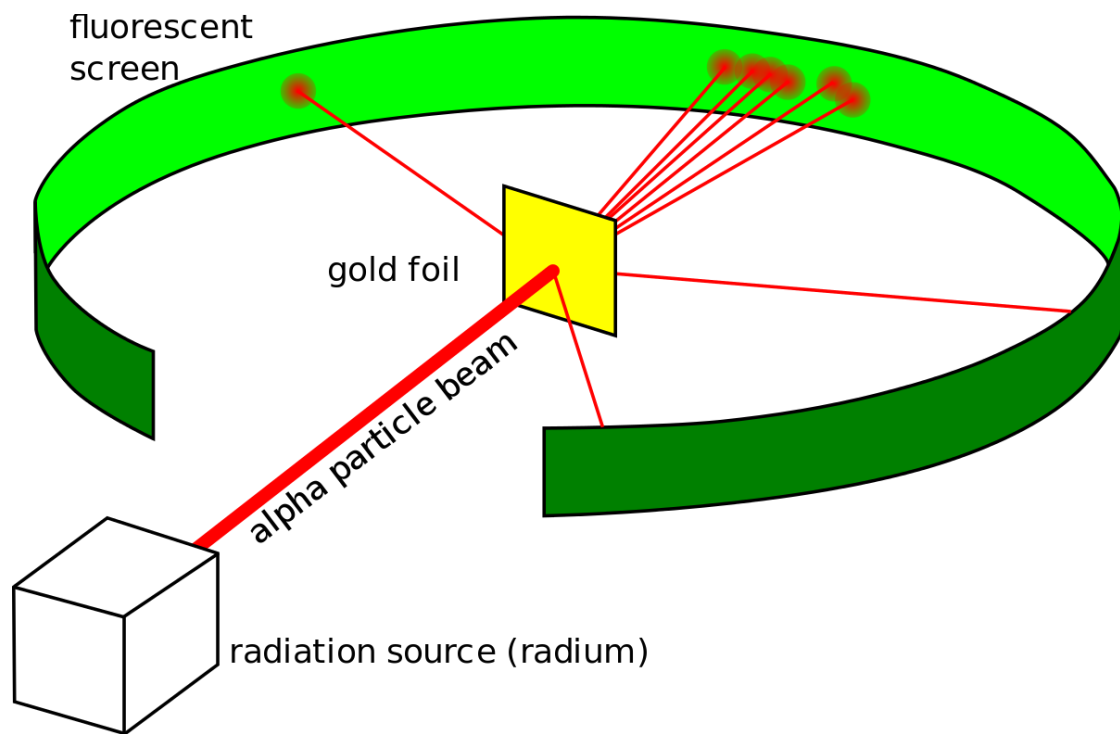


- Katódsugárcső (a csőben vákuum van).
- Nagy negatív feszültség hatására a katódból kilépő elektronsugár fényes foltot világít meg a búra hátoldalán.
- Thomson mutatta meg, hogy a sugár elektromos térrel is terelhető.
- Mágneses térrel is működik (ez már ismert volt).
- Thomson **corpuscule**-nak nevezte az elektronokat, megmérte a tömegüket (1800-ad része a hidrogénnek...)



1. Bevezetés

Érdekesség (2): A Rutherford-Geiger-Marsden kísérlet (1908-1913)



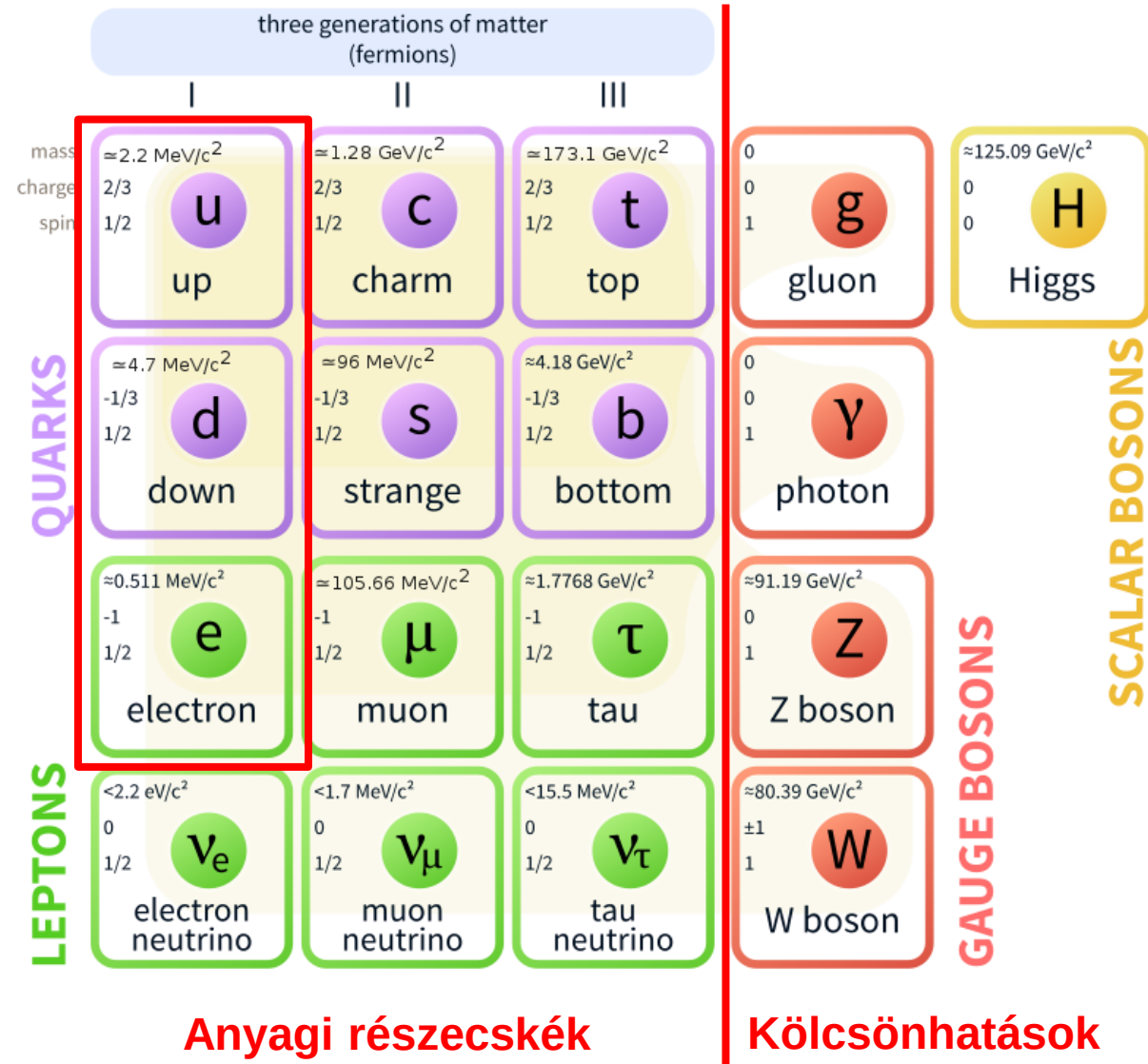
Az alfa részecskék szóródása bizonyítja, hogy a pozitív töltések
fókuszáltak az atomon belül

1. Bevezetés: a részecskefizika standard modellje

Érdekességek:

- Minél nagyobb egy részecske energiája, annál nehezebb “előállítani”. A nagyenergiájú ütköztetésekhez kellett az emberiség technológiai fejlettsége is, ez késleltette a felfedezésüket.
- A körülöttünk lévő anyag felépítéséhez mindössze csak a bekeretezett három részecske kell!
- Az anyagi részecskék magasabb generációinak felfedezése mutat hasonlóságot a periódusos rendszer kialakulásával (lásd később), megjósolták a létezésüket.

Standard Model of Elementary Particles



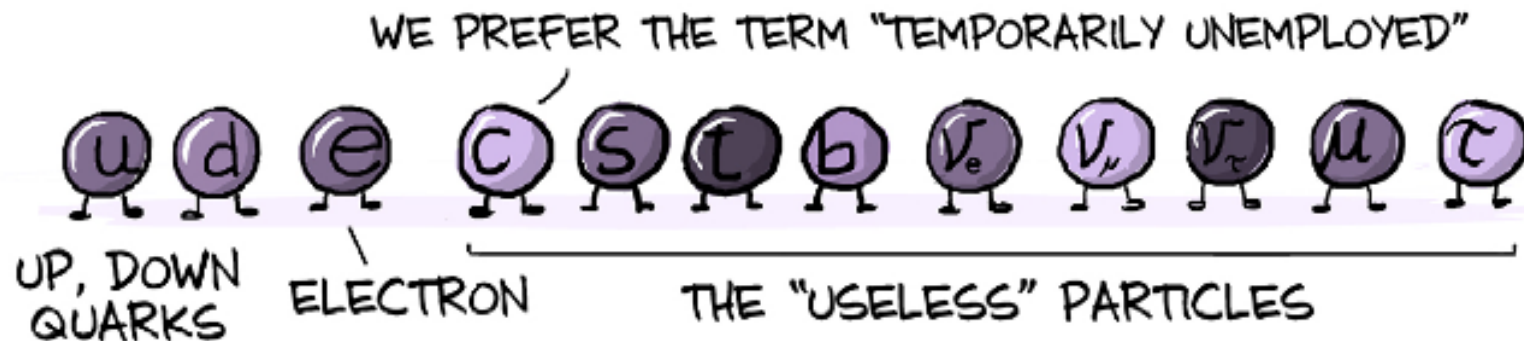
1. Bevezetés: a részecskefizika standard modellje

Az összes elemi részecske két nagy csoportba sorolható. Az anyagokat a **fermionok** építik fel, míg a kölcsönhatásokat a **bozonok** (mint kvázi-részecskék) hordozzák.

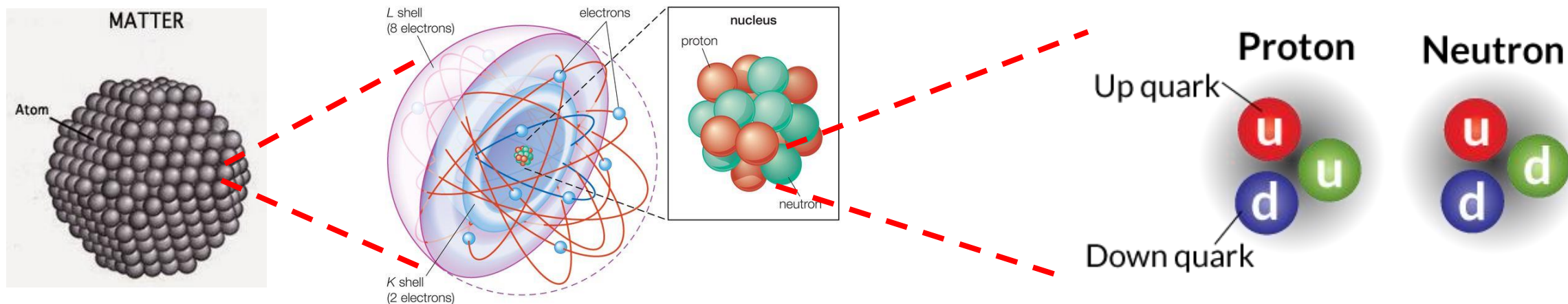
A fermionok a **Fermi-Dirac statisztika** szerint töltik be a lehetséges energiaállapotokat, a bozonok az **Einstein-Bose statisztika** szerint. Előbbiek engedelmeskednek a **Pauli-féle kizárási** elvnek és nem egész spinűek, míg utóbbiak nem engedelmeskednek és egész spinnel rendelkeznek.

A négy alapvető fizikai kölcsönhatás az **elektromágneses** (foton), a **gyenge magerő** (W, Z), az **erős magerő** (gluon) és a **gravitáció** (Higgs). A **kvarkok** építik fel az atommagot alkotó **protonokat** és **neutronokat** (a kvarkok által felépített részecskéket *hadronoknak* is hívjuk). A **leptonok** nem érzik az erős magerőt, és van belőlük töltött részecske (pl. **elektron**) és töltéssel nem rendelkező (pl. *neutrínó*).

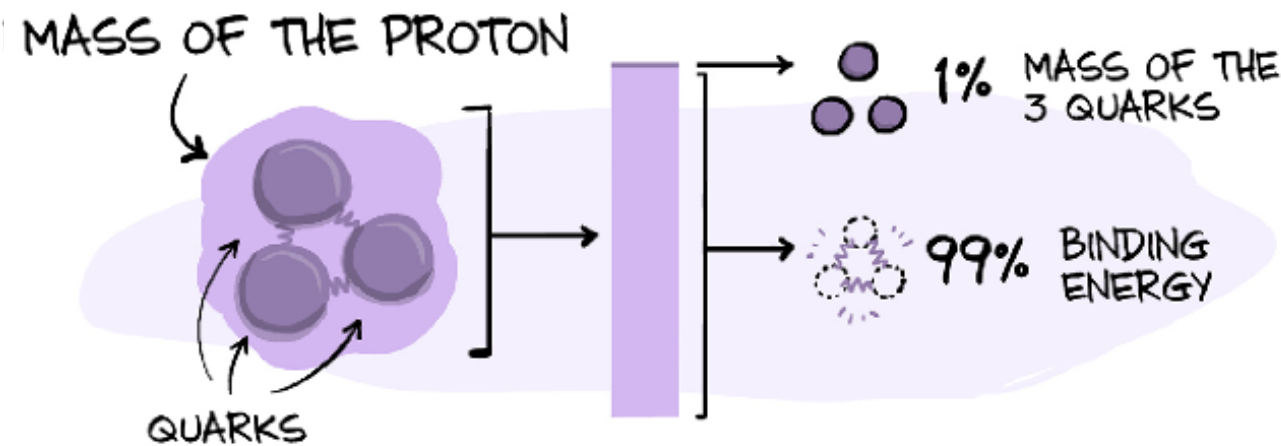
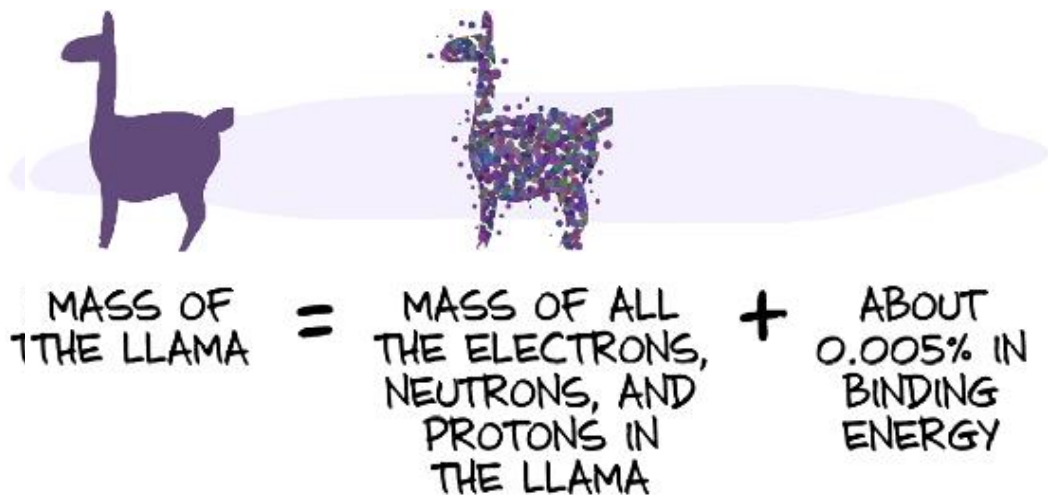
Szerencsénkre mindahoz, amivel az anyagtudomány foglalkozik csak három fermionra (up, down kvark, elektron) és egy bozonra (foton) lesz szükségünk 😊



1. Bevezetés: a részecskefizika standard modellje



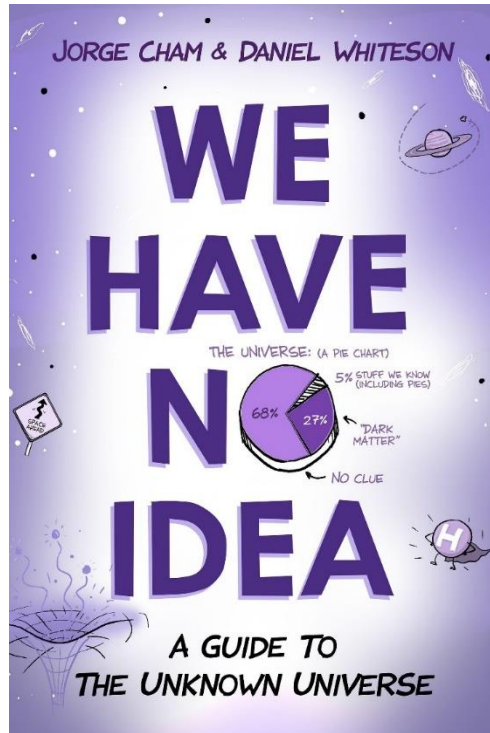
Érdekesség (1): Ha szétdaraboljuk az anyagot atomokra, majd az atomokat protonokra, neutronokra és elektronokra, akkor az anyag kiindulási tömegének 99.995% a $p+n+e$ tömege, és csak 0.005%-a az őket összetartó erőben tárolt energia. Viszont, ha a magot alkotó protonokat vagy neutronokat szétdarabolom 1% az őket felépítő kvarkok tömege és 99% a köztük lévő kötési energia.



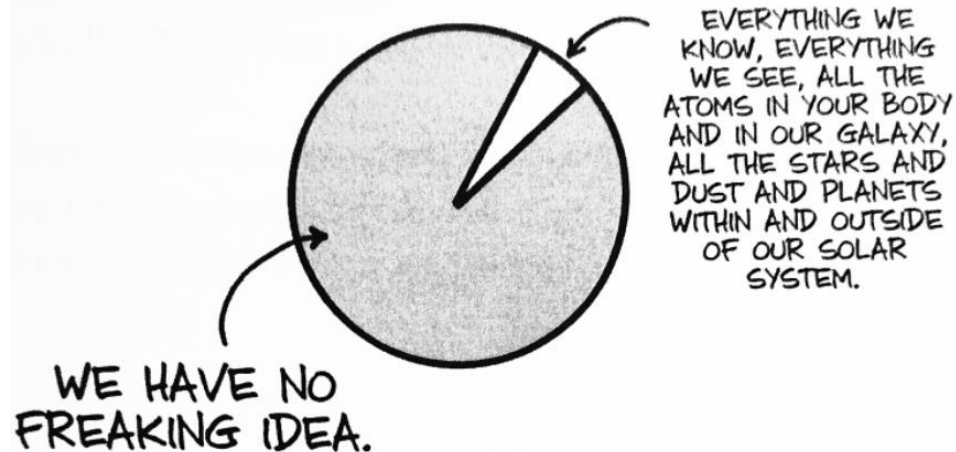
1. Bevezetés: a részecskefizika standard modellje

Érdekesség (2): Minden általunk ismert, fermionokból felépülő anyag az univerzum egészének (összes energiájának), csak az 5%-át teszi ki.

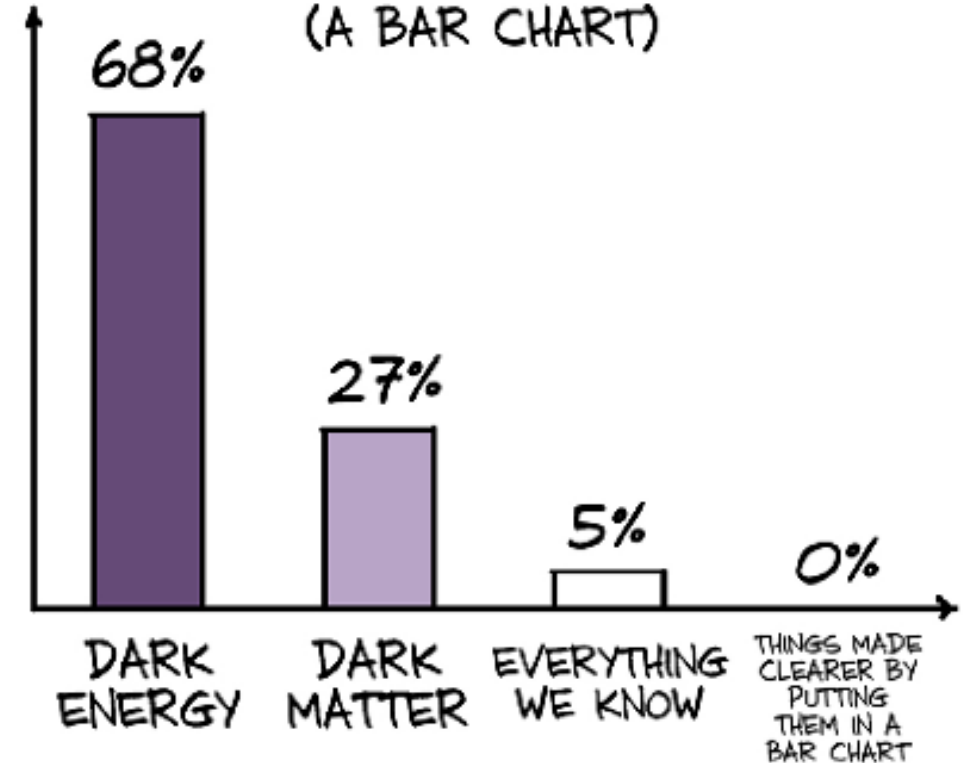
Könyvajánló: Aki közérthetően szeretné megérteni miért.



THE UNIVERSE AS WE KNOW IT:



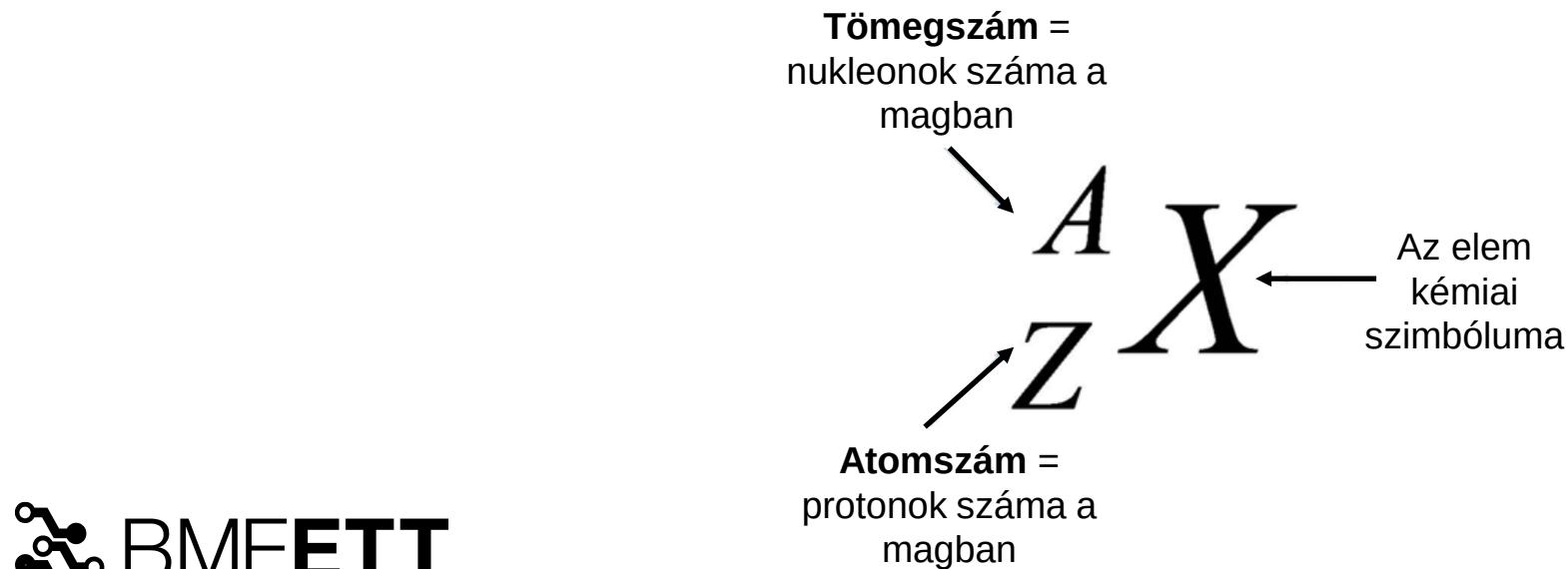
THE UNIVERSE (A BAR CHART)



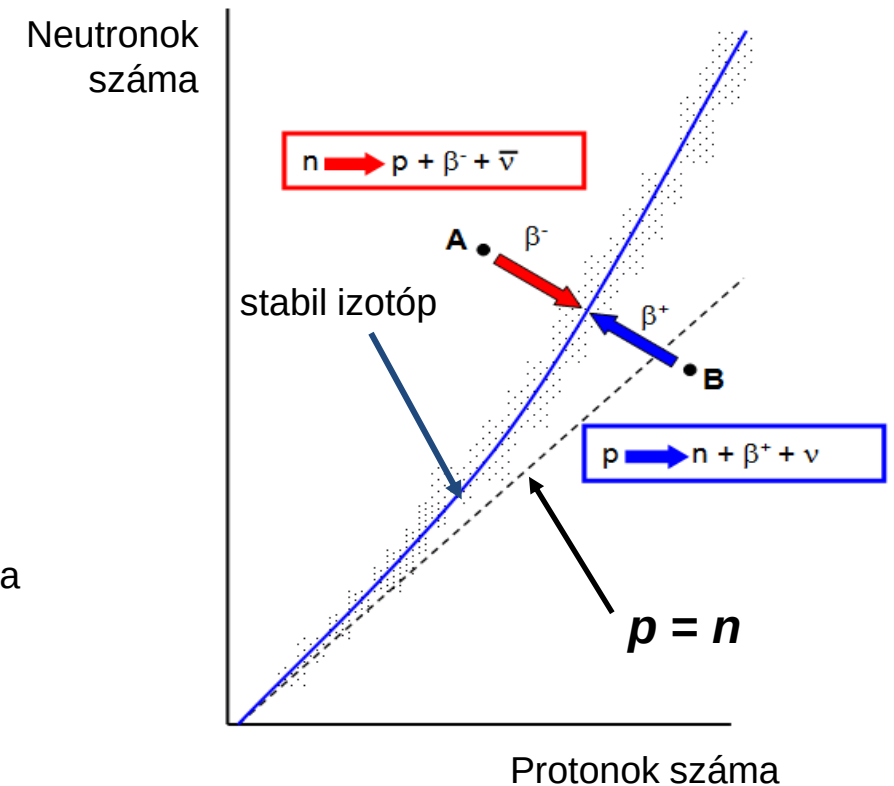
2. Az atom felépítése

Az atom három részecskéből, az atommagban (*nukleusz*) található **protonokból** és **neutronokból** (*nukleonokból*), valamint az atommag körül orbitáló **elektronokból** áll.

- semleges atomban: protonok száma (p) = elektronok száma (e)
- rendszám (ritkán atomszám, Z) = p
- tömegszám (A) = $p + n$
- a stabilitás feltétele: $n \geq p$ (lásd az ábrán)
- **izotóp**: azonos protonszám mellett különböző számú neutronnal rendelkező elemek



A stabil atommag feltétele



2. Az atom felépítése

A Bohr féle atommodell (Bohr-Rutherford-modell, 1913)

Az elektronok energiaveszteség nélkül csak a magtól adott, diszkrét távolságra elhelyezkedő, **stacionárius orbitokon** helyezkedhetnek el. Az adott távolsághoz tartozó orbitokat **elektronhéjaknak** nevezzük.

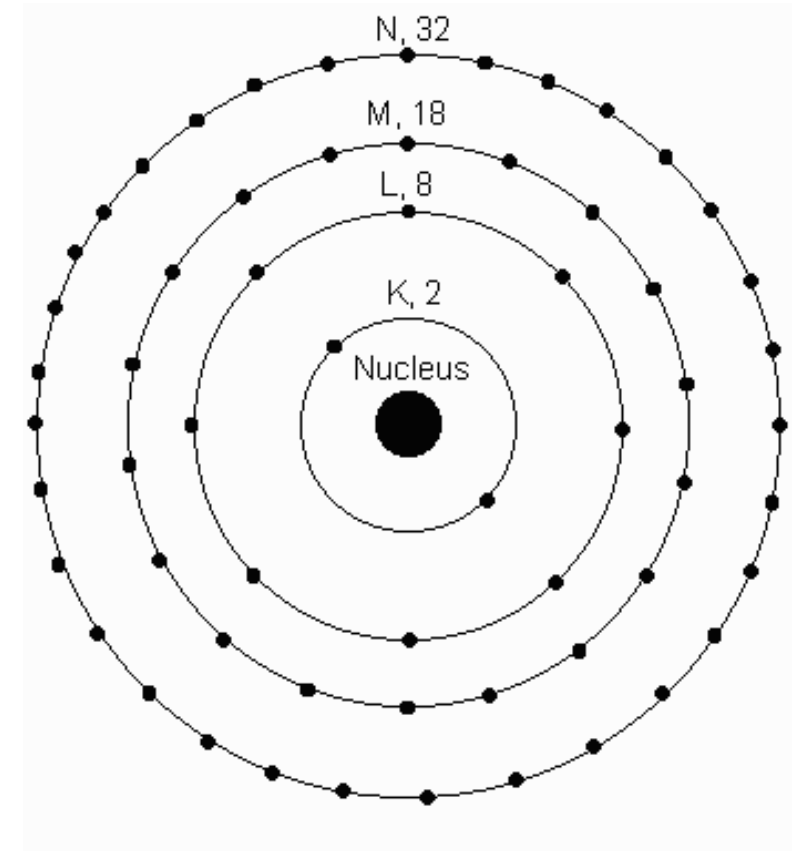
Az elektronhéjat a **főkvantumszámmal** (n) jellemezzük, és a magtól távolodva K, L, M, N, O betűkkel jelöljük.

$$n_K = 1, n_L = 2, n_M = 3, n_N = 4 \dots$$

A héjon lévő maximális elektronok száma: $2n^2$ azaz: 2, 8, 18, 32...

A főkvantumszám tehát egyszerre jellemzi az elektronok magtól vett távolságát és az energiáját.

Érdekesség: a modell közvetlen előzményének tekinthető a Naprendszer bolygóinak keringésére 1901-ben kidolgozott modell, ahol a vonzóerőt a gravitációs vonzás biztosítja (a Bohr-modellben elektromos vonzás).



2. Az atom felépítése

A Bohr-féle atommodell (Bohr-Rutherford-modell, 1913)

Az elektronokat a mag vonzóereje tartja cirkuláris pályán. Így a mozgásból adódó **centripetális erő** megegyezik a **Coulomb-vonzás** erejével, ahol r a körpálya sugara, m_e az elektron tömege, e a töltése, v pedig a sebessége. Z a protonok száma, k pedig a Coulomb-állandó.

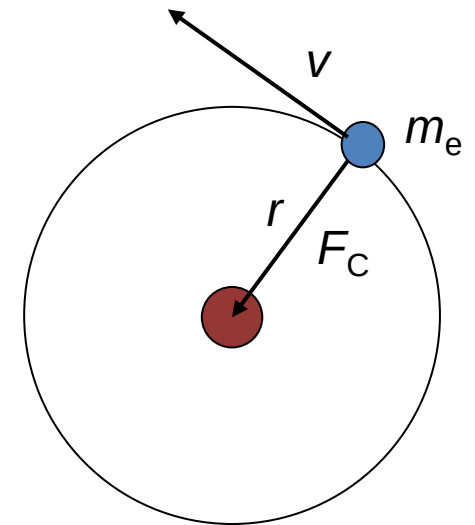
$$F_C = \frac{m_e \cdot v^2}{r} = k \frac{Z \cdot e^2}{r^2}$$

A pálya sugara és a perdület (impulzuszmomentum, L) közötti **kvantálási szabály**, ahol n a főkvantumszám, h és $\hbar$ a sima, ill. redukált Planck-állandók.

$$L = r \times p = r \cdot m_e \cdot v = n \cdot \hbar = n \frac{h}{2\pi}$$

A két egyenletből az adott n -hez tartozó sugár, sebesség és energia is kifejezhető.

$$r_n = \frac{\hbar^2}{k \cdot Z \cdot m_e \cdot e^2} \cdot n^2; \quad v_n = \frac{k \cdot Z \cdot e^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{n}; \quad E_n = -\frac{m_e \cdot k^2 \cdot Z^2 \cdot e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$



2. Az atom felépítése

A Bohr-féle atommodell (Bohr-Rutherford-modell, 1913)

E_n negatív előjele jelzi, hogy az elektron kötve van, valamint látható, hogy az energia fordítottan arányos a sugárral és $1/n^2$ -el arányosan nő a magtól távolodva.

Példa: behelyettesítve a fizikai állandókat a hidrogénre ($Z=1$): $E_n = (-13.6 \text{ eV}) \cdot \frac{1}{n^2}$

Az így adódó energiaszintek: -13.6 eV; -3.4 eV; -1.5 eV...

Megfordítva, az energia, ami ahhoz szükséges, hogy az elektront kiszeddjük a kötésből az **ionizációs energia**. Ez pl. a hidrogén egy elektronjára 13.6 eV.

Ha egy elektron magasabb energiaszintről alacsonyabbra kerül, az energiakülönbséget egy foton formájában sugározza ki, ahol f a foton frekvenciája.

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = -\frac{m_e \cdot k^2 \cdot Z^2 \cdot e^4}{2\hbar^2} \cdot \left(\frac{1}{(n+1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) = h \cdot f$$

Megjegyzés: egynél több elektron esetén figyelembe kell venni az elektronok közötti kölcsönhatást is, ami analitikusan nem kezelhető!

2. Az atom felépítése

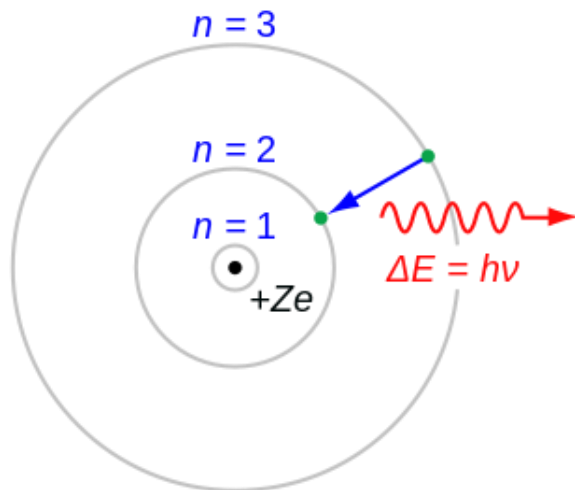
A Bohr-féle atommodell alkalmazása:

Példa (1): A látható fény energia (hullámhossz) tartománya 3.1 eV (~400 nm) – 1.55 eV (~800 nm). A hidrogénre számolt energiaszintek esetén $n \geq 3$ és $n=2$ közötti átmenetekre az energia ebben a tartományban lehet. Ezek az ún. **Balmer-vonalak**. Ez a jelenség adja a **plazmák (ionizált gázok) karakterisztikus színét is!**



Különböző plazmák RF-generátorban (saját képek)

A Balmer-vonalak és a folyamat illusztrációja (forrás: Wikipedia)



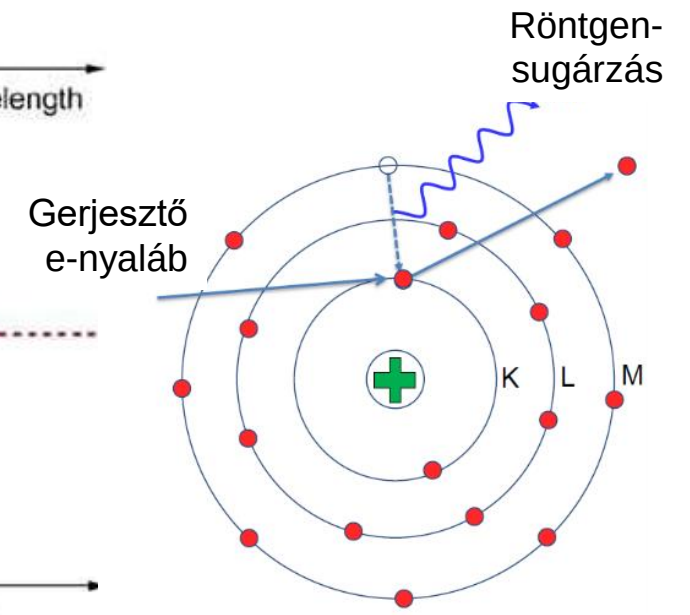
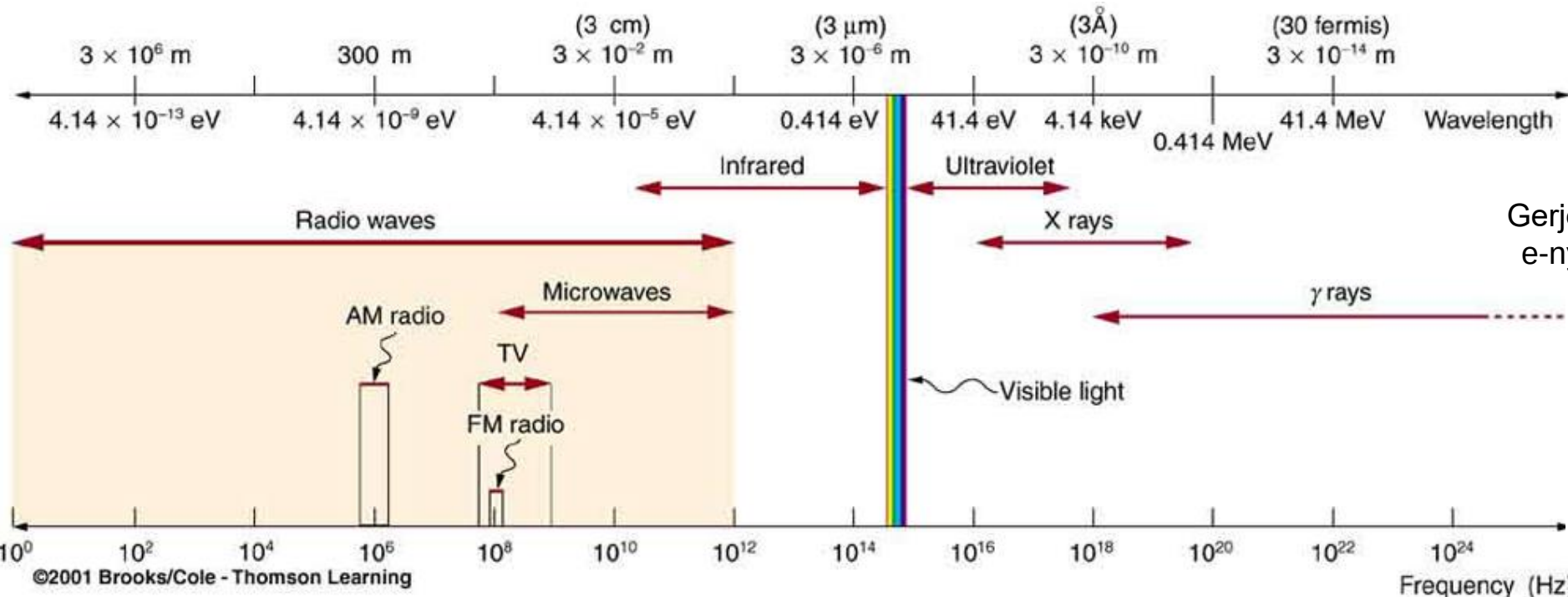
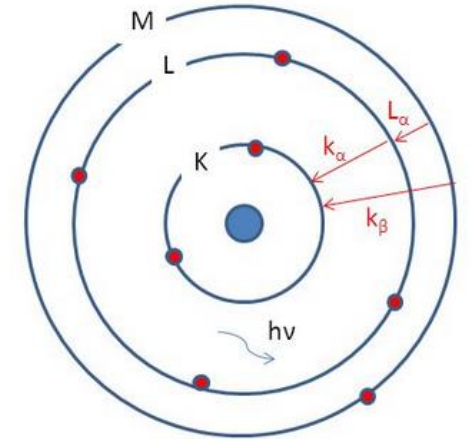
2. Az atom felépítése

A Bohr-féle atommodell alkalmazása (2):

Példa (2): Az energiakülönbség alumínium ($E_L - E_K$) átmenete között 1487 eV.

Ez az energia Röntgen-tartományban van, ez a **karakterisztikus Röntgen-sugárzás**.

(Ez az alumínium ún. K_α vonala.) Ez teszi lehetővé a **Röntgenes elemanalízist**.



2. Az atom felépítése

A kvantummechanikai atommodell

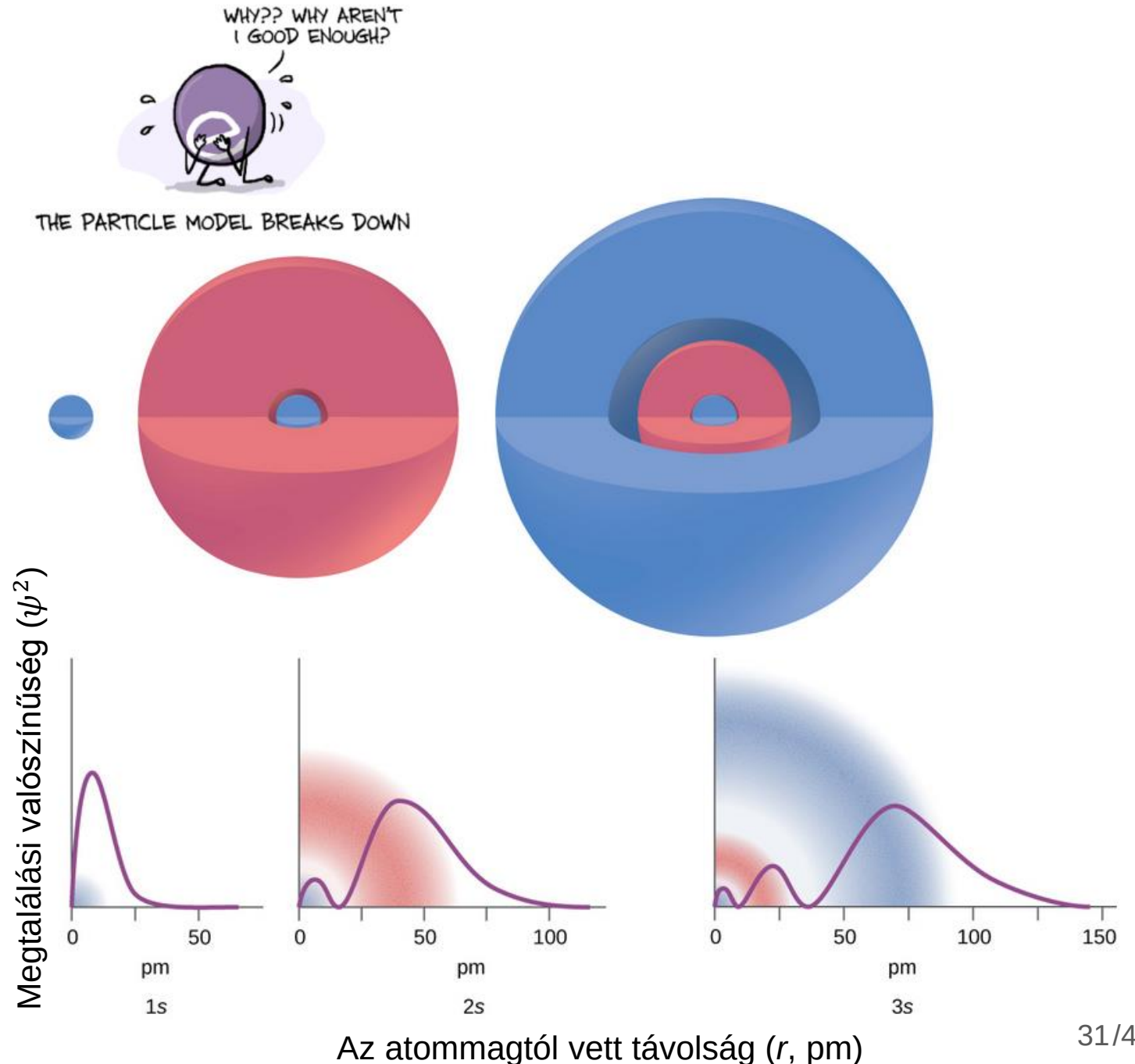
Kiindulás: de Broglie (1924) felvetette, hogy az anyagi részecskéknek is hullámtemésze van. Erre alapozva Schrödinger bevezette a valószínűség sűrűség fogalmát és a hullámegyenletet (1926).

Az elektronok de Broglie-hullámhossza (λ)

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

A Schrödinger-egyenlet

$$((\hat{H} \cdot \psi = E \cdot \psi))$$



2. Az atom felépítése

A kvantummechanikai atommodell

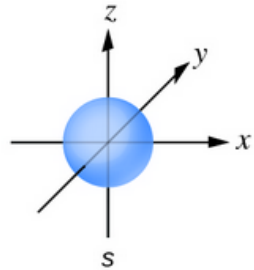
Elektronpálya (atompálya): az a térrész, amelyen az elektron megtalálási valószínűsége 90%.

Elektronhéj: az atommagtól azonos távolságra lévő pályák összessége (K, L, M, N, O).

Az elektronhéjat a **főkvantumszámmal** (n) jellemezzük. A főkvantumszám tehát jellemzi az elektron magtól vett átlagos távolságát.

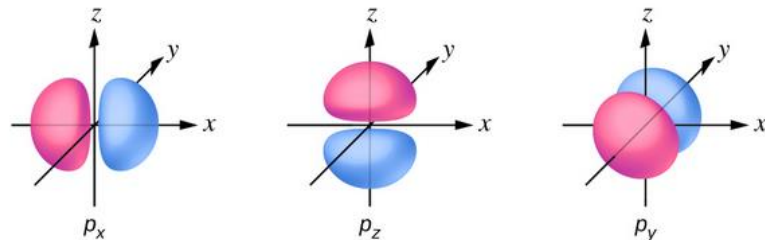
Minden n esetén a pályák száma n^2 . Mivel minden pályán két ellentétes spinű elektron tartózkodhat, ezért egy héjon az elektronok száma $2n^2$. Eddig teljesen analóg a Bohr-moddellel.

s

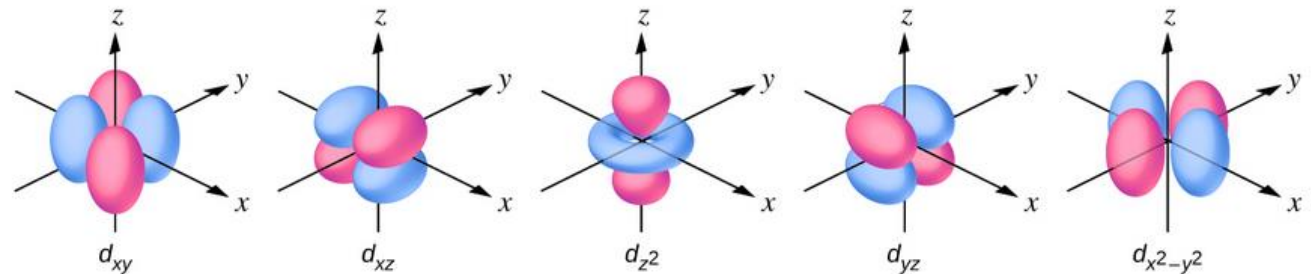


Alhéj: azonos nagyságú és alakú elektronpályák. s, p, d és f alhéjakat különböztetünk meg, a **mellékvantumszám** (l) jellemzi őket ($n-1 \geq l \geq 0$). (sharp, principal, diffuse, and fundamental).

p



d



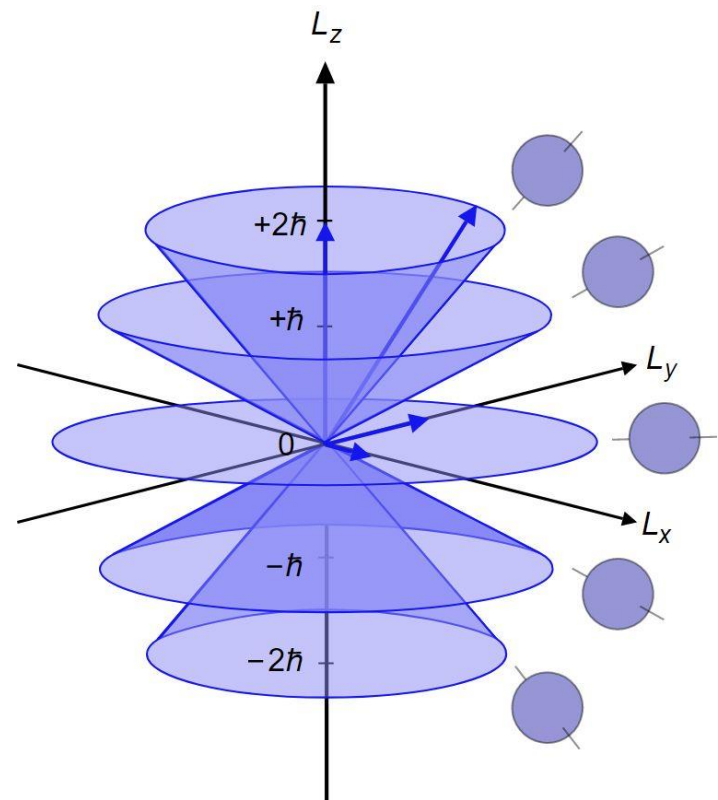
2. Az atom felépítése

A kvantummechanikai atommodell

A mellékkvantumszám (l) jellemzi továbbá az elektron mag körüli mozgásából származó impulzusmomentumát (pályaperdületét) is.

Mágneses kvantumszám (m): az alhéjon belül lehetséges pályák megkülönböztetésére (irány, energiaeltolódás) szolgál ($l \geq m \geq -l$). Jellemzi továbbá az elektron mozgásából adódó **mágneses momentumot**.

Az <i>n</i> főkvantumszám (héj)	Az <i>l</i> mellékkvantumszám lehetséges értékei (alhéjak)	Az alhéjon lévő elektronpályák alakja, típusa	Az <i>m</i> mágneses kvantumszám lehetséges értékei
<i>n</i> = 1	<i>l</i> = 0	s-pálya	<i>m</i> = 0
<i>n</i> = 2	<i>l</i> = 0	s-pálya	<i>m</i> = 0
	<i>l</i> = 1	p-pálya	<i>m</i> = -1 <i>m</i> = 0 <i>m</i> = 1
<i>n</i> = 3	<i>l</i> = 0	s-pálya	<i>m</i> = 0
	<i>l</i> = 1	p-pálya	<i>m</i> = -1 <i>m</i> = 0 <i>m</i> = 1
	<i>l</i> = 2	d-pálya	<i>m</i> = -2 <i>m</i> = -1 <i>m</i> = 0 <i>m</i> = 1 <i>m</i> = 2



A perdület klasszikusan és a Bohr-modellből

$$L = r \times p = r \cdot m_e \cdot v = n \cdot \hbar$$

A pályaperdület a mellékkvantumszámból:

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

A pályaperdület z-irányú komponense:

$$L_z = m \cdot \hbar$$

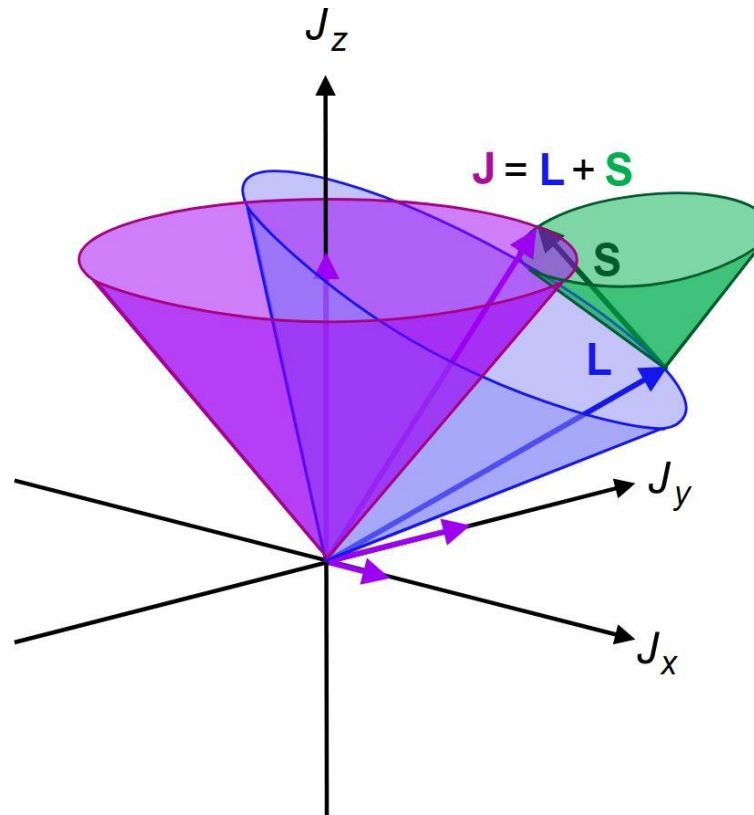
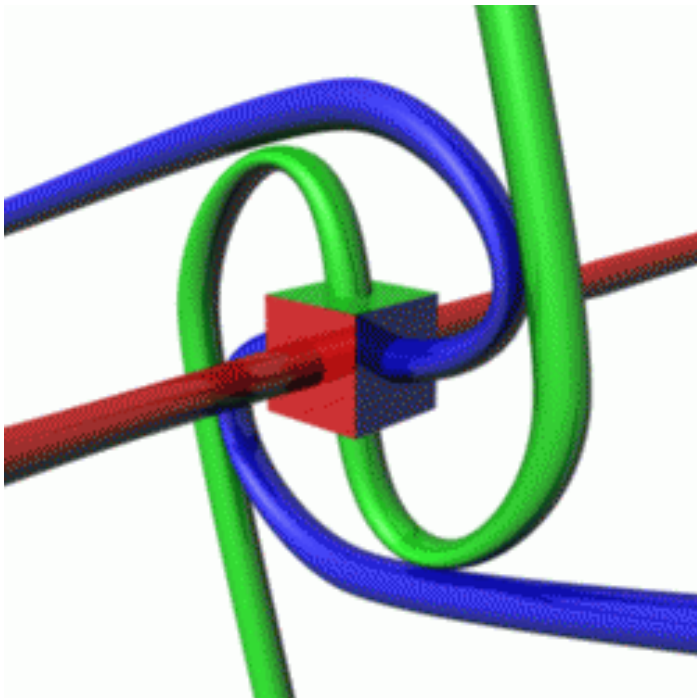
2. Az atom felépítése

A kvantummechanikai atommodell

Az elektronnak van **sajátperdűlete** is, amit a **spinkvantumszám (s)** jellemez!

Pauli kizárási elv: egy atom két elektronjának nem lehet teljesen ugyanaz minden kvantumszáma -> minden alhéjhoz (vagyis adott n és l-hez) 2 db elektron tartozik, különböző **spinkvantumszámmal (s= 1/2 vagy -1/2)**.

1/2-es spin illusztrációja



A sajátperdület a mellékkvantumszámból:

$$S = \sqrt{s(s + 1)} \cdot \hbar$$

A sajátperdület z-irányú komponense:

$$S_z = s \cdot \hbar$$

Az elektron teljes perdűlete:

$$J = L + S$$

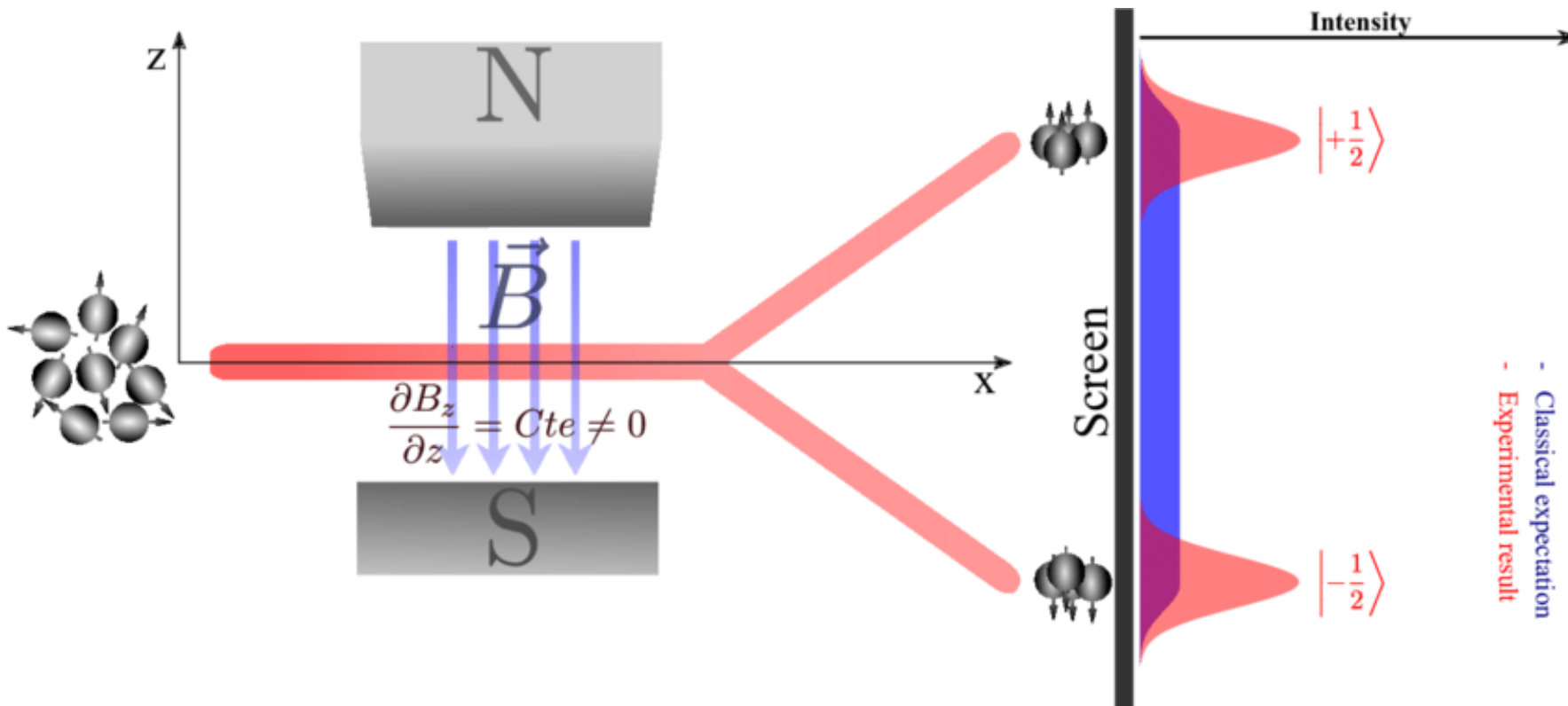
2. Az atom felépítése

Érdekesség: A Stern–Gerlach-kísérlet (1922)

Különböző atomokat hajtunk át inhomogén mágneses téren.

A külső mágneses tér erőt fejt ki az atomokra azok eredő mágneses momentumának függvényében.

A kísérlet eredeti várakozása az volt, hogy ez eloszlás a kimeneten egyenletes lesz, ezzel szemben diszkrét sávokba csoportosultak az eltérített atomok.



Gondoljuk végig hány sávra szakadnak fel az alábbi atomok sugarai:

- Higrogén
- Hélium
- Nitrogén
- Oxigén

2. Az atom felépítése

A kvantummechanikai atommodell

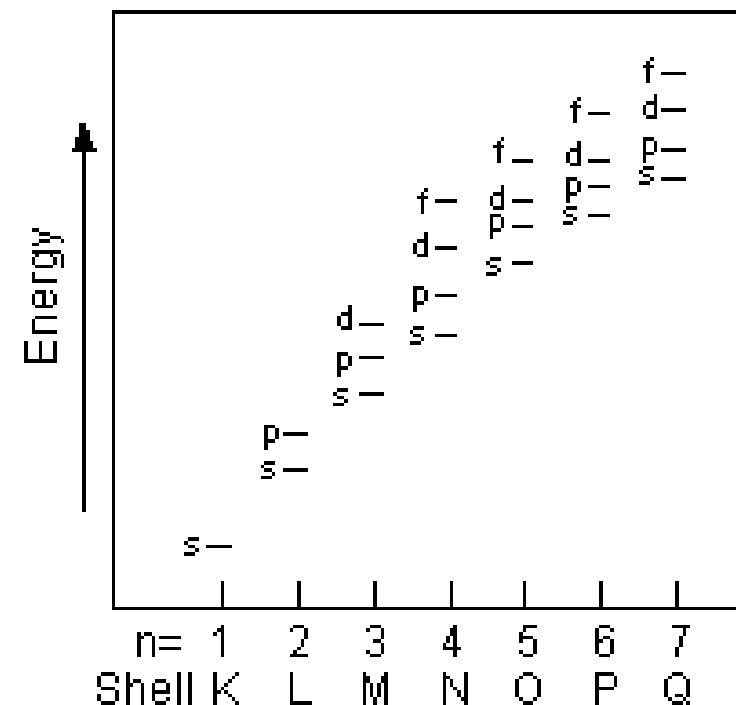
Pauli kizárási elv: egy atom két elektronjának nem lehet teljesen ugyanaz minden kvantumszáma -> minden alhéjhoz (vagyis adott n és l -hez) 2 db elektron tartozik, különböző **spinkvantumszámmal** ($s = 1/2$ vagy $-1/2$).

Megfigyelhető, hogy az elektronpályák energia szerinti betöltése n és l vonatkozásában nem monoton!

Kémiai szempontból a **mellékvantumszám kiemelt fontosságú**, mivel ez adja meg a kialakuló pályák alakját, ami hatással van az atomok között létrejövő kémiai kötésekre és azok szögére.

Az atomok közötti kölcsönhatásokban (pl. kötések kialakítása) az **elektronok** vesznek részt!

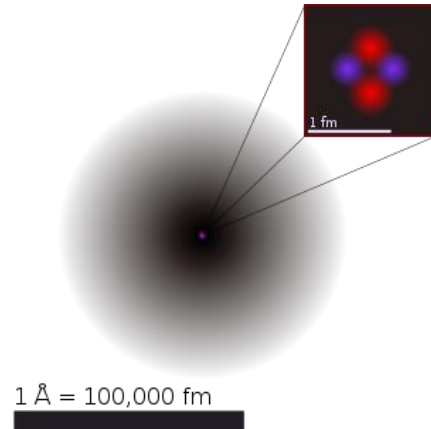
Az anyagok makroszkopikus fizikai tulajdonságainak döntő többségéért az **elektronszerkezetük** felel!



2. Az atom felépítése

Érdekesség (1):

Hogyan képzeljük el az atomokat és az atomi méreteket?



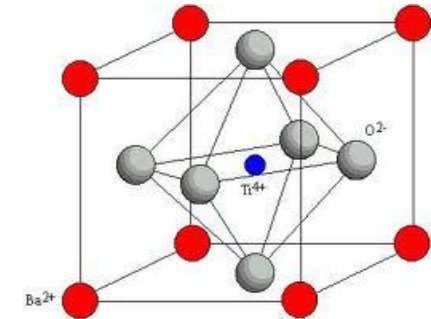
Az atommag
átmérője



váltószám: $x * 10^4$

$1,7 * 10^{-15} \text{ m (H)} - 1,17 * 10^{-14} \text{ m (U)}$

Atomok átmérője és
kötéstávolság pl. szomszédos
atom a rácsban



$x * 10^{-10} \text{ m} = x * 1 \text{ Å}$
(ångström)

Az atommag –
atomátmérő közötti
váltószám
nagyságrendileg
megegyezik a Föld
átmérője és a Föld-Nap
távolság közöttivel...



Föld
átmérője

Föld-Nap
távolság



váltószám: $1.2 * 10^4$



2. Az atom felépítése

Érdekesség (2): A kvantummechanika hatásköre – meddig tart?

John Gribbin „kockacukor” hasonlata

Kiindulás Plack-állandó: $6,55 \times 10^{-27}$ ergs (erg: g, cm, s rendszer)

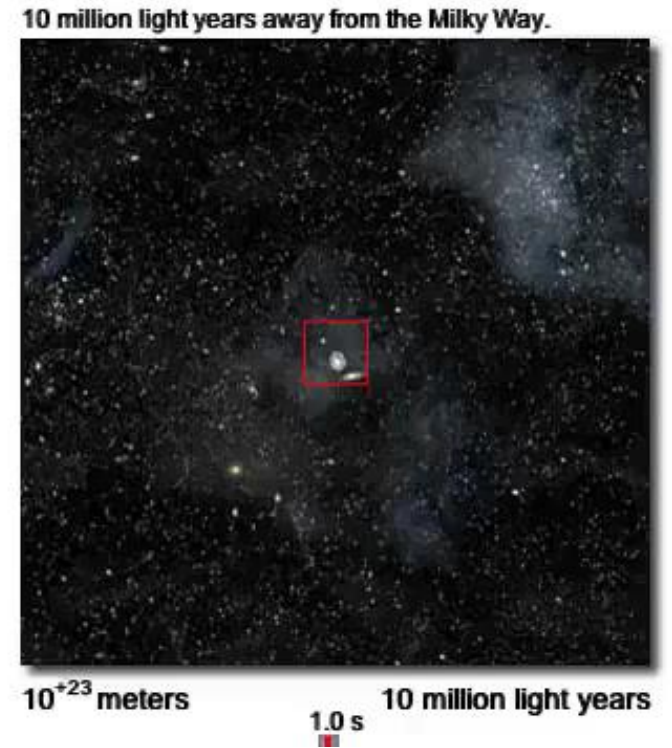
Elektron tömege: 9×10^{-28} g – ebben a nagyságrendben „hat igazán” a k-m.

Hasonlítsuk valami számunkra megfogható dologhoz:

Vegyünk 10^{27} db 1 cm-es kockacukrot (10^{27} cm)

Egy fényév kb. 10^{18} cm $\rightarrow$ kockacukor sorunk hossza 10^9 fényév

Ismert legtávolabbi galaxis távolsága 10^{10} fényév

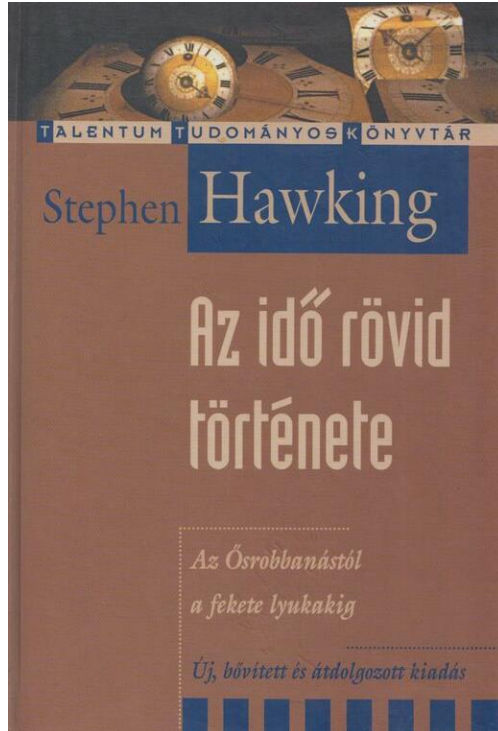


Az ember a logaritmusos
hosszskála közepén



2. Az atom felépítése

Könyvajánló: Akinek sikerült felkelteni az érdeklődését:



Stephen Hawking
Az idő rövid története



John Gribbin
Schrödinger macskája



John Gribbin
Schrödinger kiscicái
és a valóság keresése

Ellenőrző kérdések

- Alapfogalmak definiálása (pl. elemi részecskék, atompálya, kvantumszámok, ionizációs potenciál...).
- A Bohr-modell alapvető összefüggései.
- A kvantummechanikai atommodell, a kvantumszámok jelentése.

Példák igaz-hamis kérdésekre:

- A Bohr-féle atommodellben a nagyobb energiájú elektronok a nukleuszhoz közelebb helyezkednek el. (H)
- A Bohr-féle atommodellben az elektronok energiája és a magtól vett távolsága egyenesen arányos. (I)
- Minél közelebb helyezkedik el egy elektron a maghoz képes, annál könnyebb őt kiszakítani az atomból. (H)
- A mellékkvantumszám felel az atompályák alakjáért. (I)
- A fő különbség a fermionok és a bozonok között, hogy a fermionoknak lehet minden kvantumszáma azonos, a bozonoknak nem. (H)
- Az atompályán kívül az elektron kb. 10% valószínűséggel található meg. (I)