

# Kémiai anyagszerkezet

Előadó: Kubinyi Miklós

tel: 21-37

[kubinyi@mail.bme.hu](mailto:kubinyi@mail.bme.hu)

Grofcsik András

tel: 14-84

[agrofcsik@mail.bme.hu](mailto:agrofcsik@mail.bme.hu)

Tananyag az intraneten (tavalyi):

[http://oktatas.ch.bme.hu/oktatas/  
konyvek/fizkem/kasz/](http://oktatas.ch.bme.hu/oktatas/konyvek/fizkem/kasz/)

- eload04
- jegyzet02

Tananyag az intraneten (idei):

[http://oktatas.ch.bme.hu/oktatas/  
konyvek/fizkem/kasz/](http://oktatas.ch.bme.hu/oktatas/konyvek/fizkem/kasz/)

- eload05
- jegyzet05

# Emelt szintű tananyag

2006 tavasz, ~ 5 előadás

# Fizikai Kémia

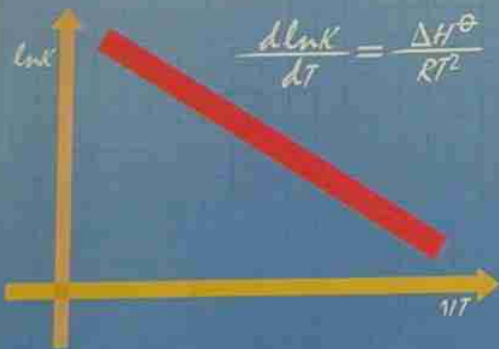
- Fizikai Kémia I. - egyensúlyok (fázisegyensúlyok, kémiai egyensúlyok)
- Fizikai Kémia II. - változások (reakciókinetika, transzportfolyamatok)
- Fizikai Kémia III. - szerkezet (molekulák szerkezete, anyagok szerkezete)



P. W. ATKINS

# FIZIKAI KÉMIA I.

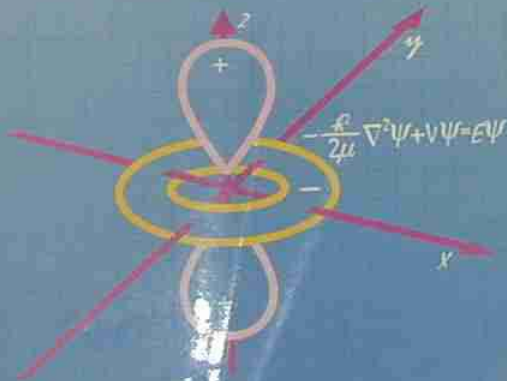
Egyensúly



P. W. ATKINS

# FIZIKAI KÉMIA II.

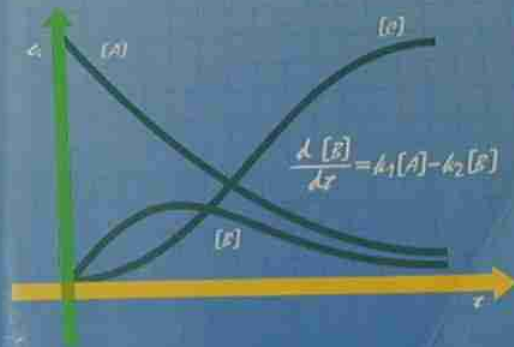
Szerkezet



P. W. ATKINS

# FIZIKAI KÉMIA III.

Változás



# Tananyag (eload04)

**I. BEVEZETÉS (Bevez04)**

**II. A KVANTUMMECHANIKA AXIÓMÁI (Axiom04)**

**III. A HIDROGÉNATOM SZERKEZETE (H\_atom04)**

**IV. A TÖBBELEKTRONOS ATOMOK ELEKTRONSZERKEZETE (Tobbel04)**

**V. OPTIKAI SPEKTROSKÓPIA (Optsp04)**

**VI. A MOLEKULÁK FORGÓMOZGÁSA (Forgo04)**

**VII. A MOLEKULÁK REZGŐMOZGÁSA (Rezgo04)**

**VIII. A MOLEKULÁK ELEKTRONSZERKEZETE (Molel04)**

**IX. FOTOELEKTRON-SPEKTROSKÓPIA (UPSXPS04)**

**X. LÉZEREK, LÉZERSPEKTROSKÓPIAI MÓDSZEREK (Lezer04)**

**XI. AZ ATOMMAGOK ENERIGIAÁLLAPOTAI } (Magszerk04)**

**XII. A MÁGNESES MAGREZONANCIA }**

**XII. AZ ELEKTRONSPIN-REZONANCIA (nem tananyag)**

**XIV. TÖMEGSPEKTROSKÓPIA (Tomegsp04)**

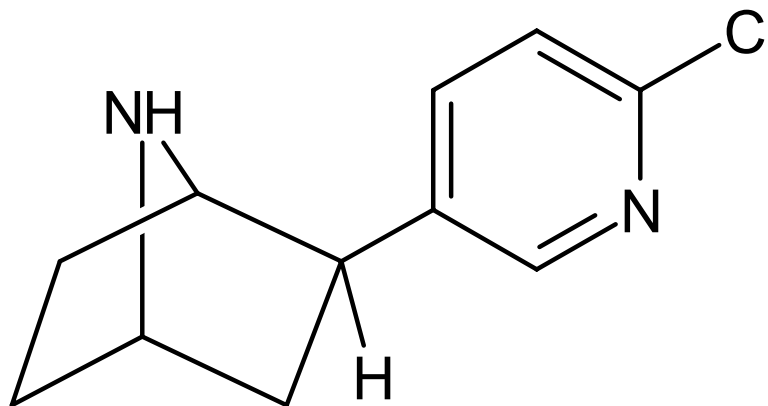
**XV. A RÖNTGENDIFFRAKCIÓ (Rontg04)**

# Bevezetés I.

Példák kémiai  
szerkezetvizsgálati feladatokra



# Gyógyszer-hatóanyag

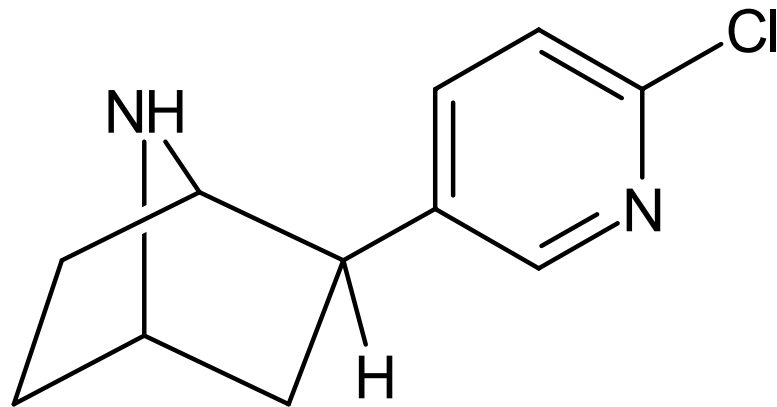


## Epibatidin

Erős fájdalomcsillapító

Trópusi béka bőréből izolálták

Származékok szintézise: Szerves Kémia Tanszék



Szerkezeti képlet igazolása

Királis C-atom konfigurációja

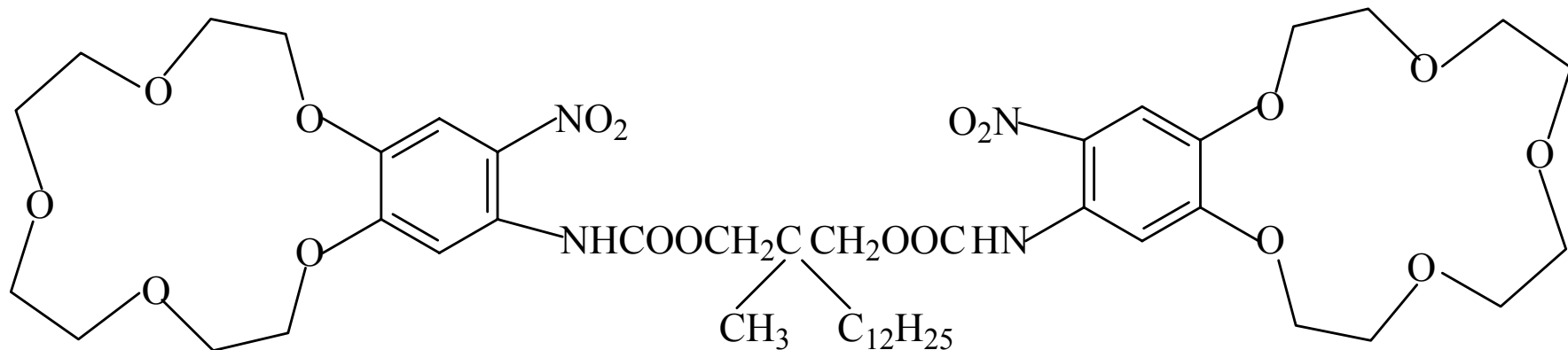
Gyógyszerhatás mechanizmus felderítéséhez (az élő szervezettel hogyan lép kölcsönhatásba):

térszerkezet (= „molekulageometria”),

atomi töltések, stb.

Kristálymódosulat azonosítása

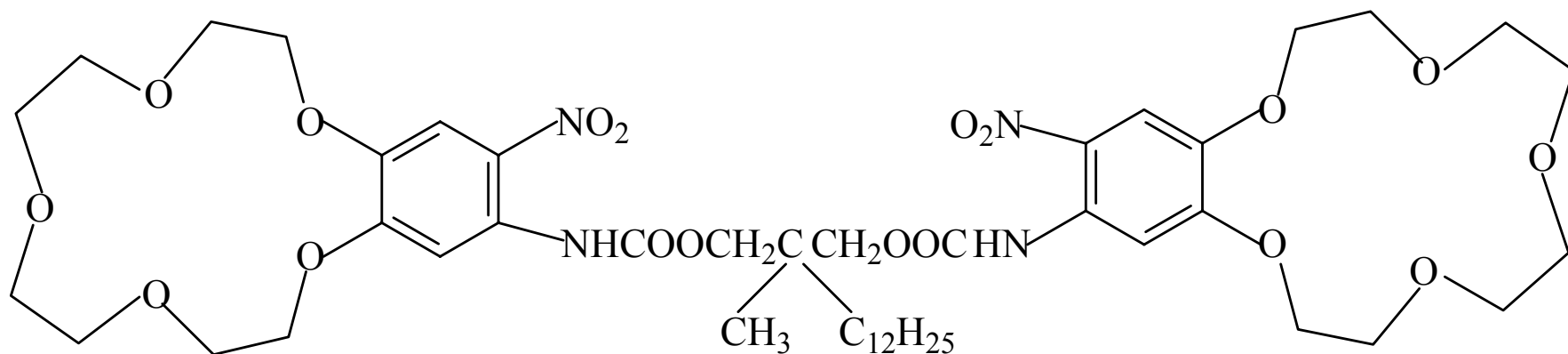
# Elektrokémiai szenzor hatóanyaga



„BME 44” koronaéter

Kálium ionnal komplexet képez. Szelektív!

Orvosi, biológiai minták káliumtartalmát meghatározó műszerben alkalmazzák (HORIBA)



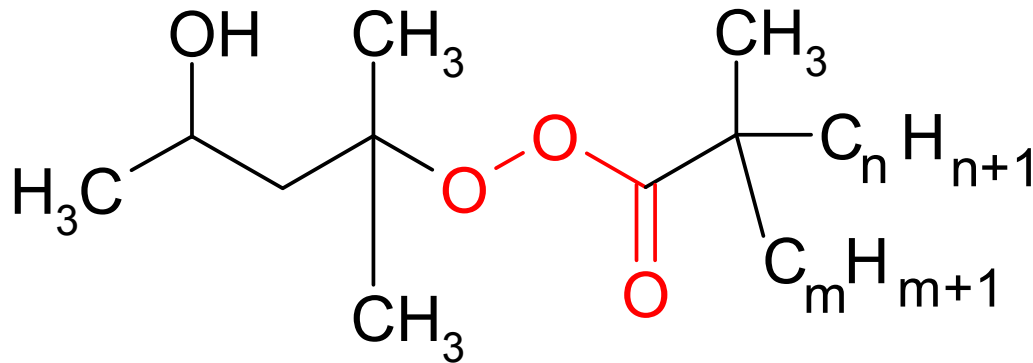
Szerkezeti képlet

A koronaéter-gyűrű geometriája

K<sup>+</sup>- BME44 „szupramolekuláris” komplex szerkezete

(koordinatív kötések, töltéseloszlás)

# Iniciátor PVC polimerizációjához



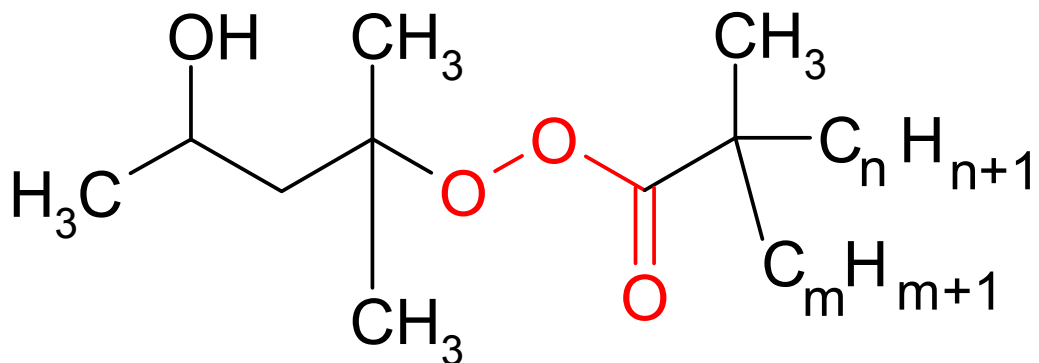
**HPPN**

$$n+m=7$$

Hő hatására gyökösen hasad (peroxikötés)

Felhasználásával kiváló minőségű PVC állítható elő

(BORSODCHEM-ben alkalmazzák)



$$n+m=7$$

**HPPN**

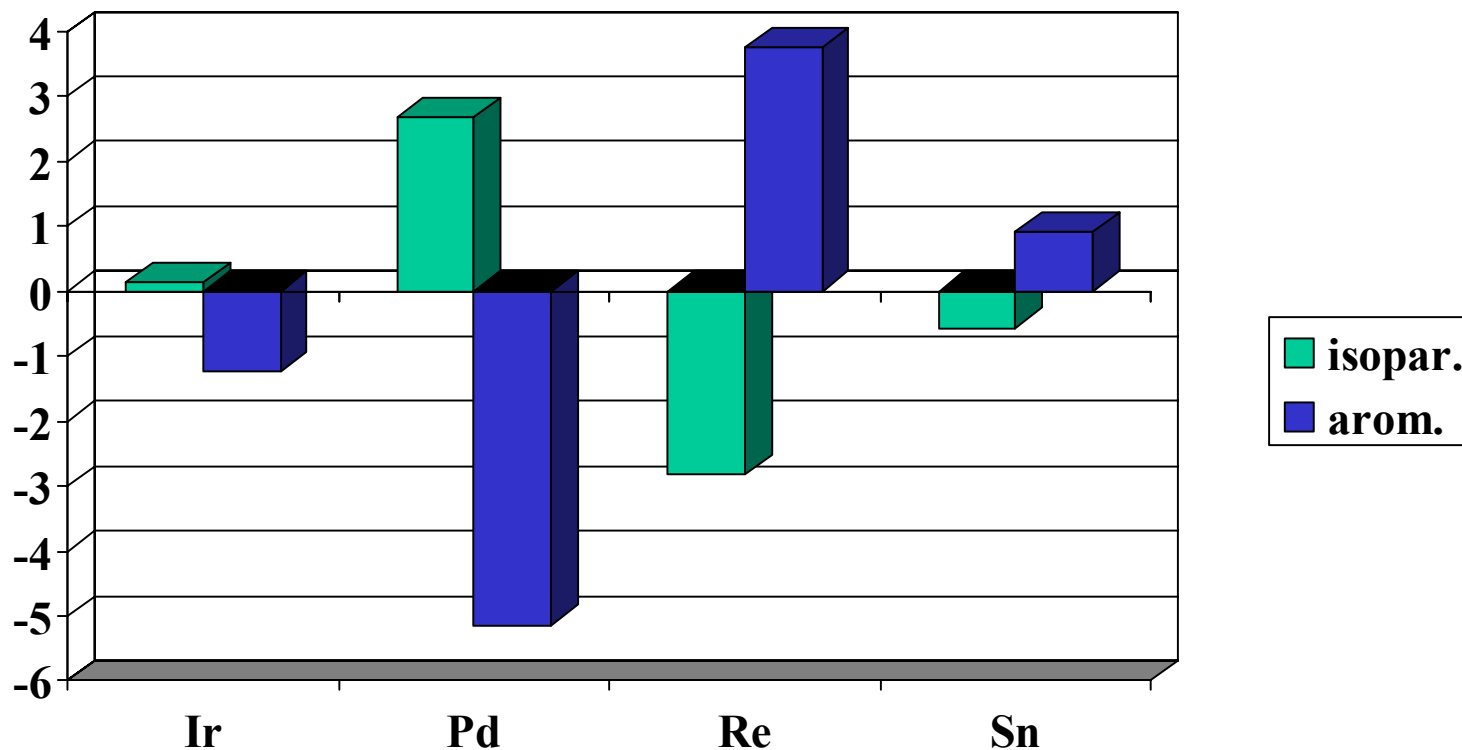
Szerkezeti képlet

O-O kötés erőssége

Gyök szerkezete és reakciókészsége

Gyökkoncentráció követése a reakció során

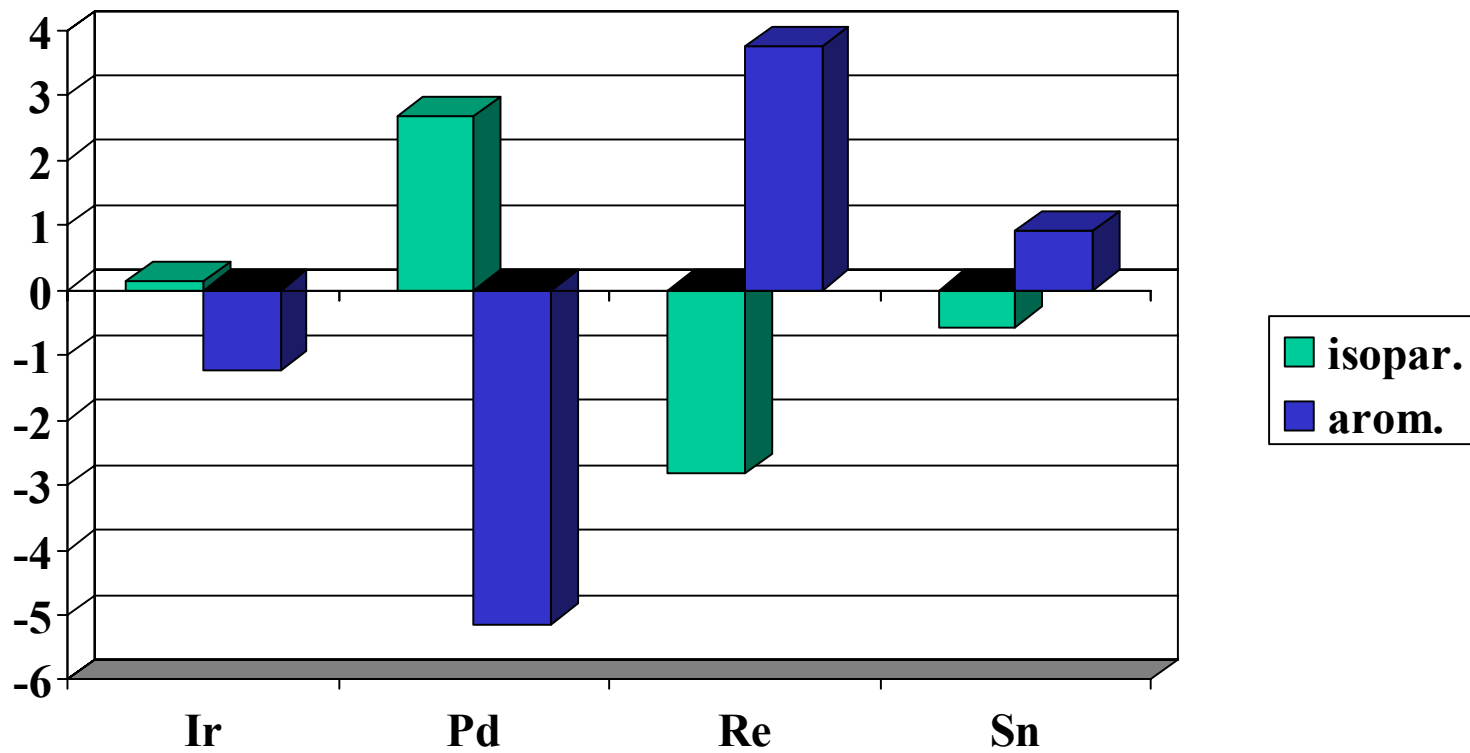
# Szénhidrogén konverziója Pt-katalizátorral



Kiindulási anyag: n-oktán

Termékek i-oktán (motorbenzinben előnyös), aromások (káros)

Az ötvöző anyag hatására megváltozik a termékösszetétel



Az ötvözet elemi összetétele

Felületi összetétel

Felületen megkötődő szénhidrogének kimutatása



# 1.1. Bevezetés a spektroszkópiába

A molekuláknak és a többi mikrorészecskének szerkezetét a kvantummechanika írja le.

A kvantummechanika alapvető törvényeit az 1920-as években ismerték fel.

Előzmény: néhány kísérlet, amely a klasszikus fizikának ellentmondó eredményre vezetett.

# Joseph Fraunhofer kísérlete 1815

A Nap fényét optikai rácson felbontotta.

A folytonos színeképpen fekete vonalakat észlelt.



# A nap színeképe



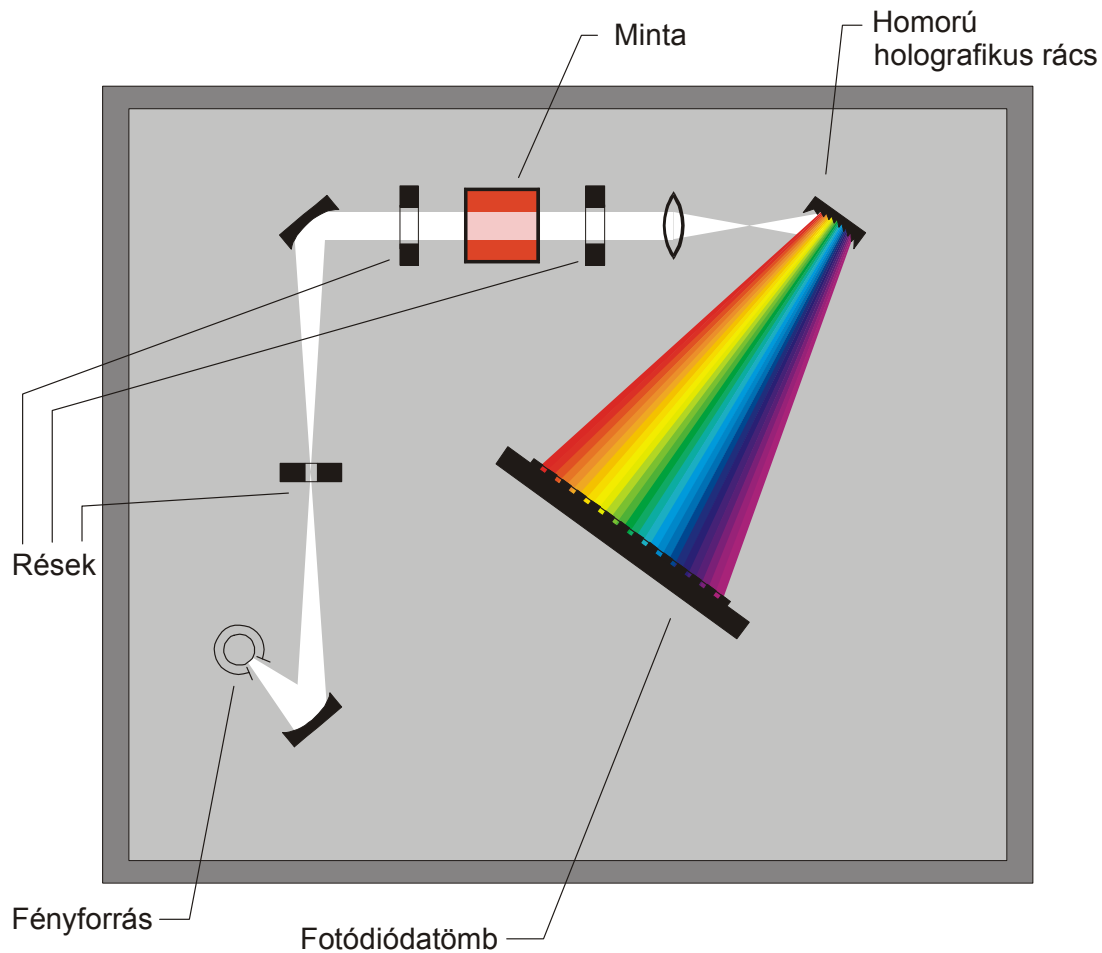
## Magyarázat:

- a Nap folytonos sugárzást ad
- • a Napot és a Földet körülvevő gázburok részecskéi csak bizonyos hullámhosszú/frekvenciájú fotonokat (fénykvantumokat) nyelnek el.
- • • Az A részecske a rá jellemző  $\nu_{A1}, \nu_{A2}\dots$   
a B részecske a rá jellemző  $\nu_{B1}, \nu_{B2}\dots$
- • • • Ezért az A részecske energiája  $\Delta E_A = h \cdot \nu_{A1}, h \cdot \nu_{A2}\dots$   
energiakkvantumokkal változhat,  
a B részecskéjé  $\Delta E_B = h \cdot \nu_{B1}, h \cdot \nu_{B2}\dots$  energiakkvantumokkal, stb.

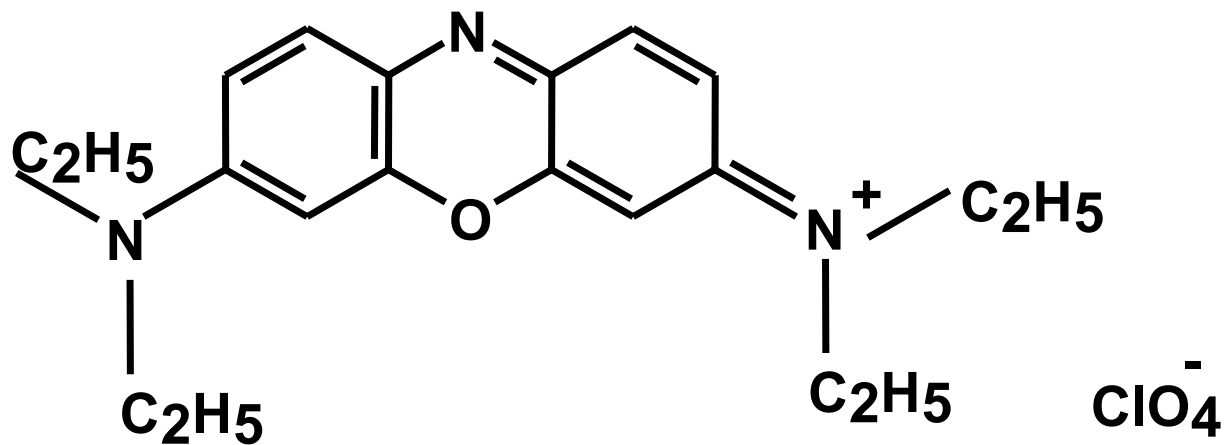
A mikrorészecskék fizikai sajátságai közül egyesek - köztük az energiájuk - csak bizonyos meghatározott - **kvantált** - értékeket vehetnek fel.

Erre utal a **kvantummechanika** elnevezés.

# EGYSUGARAS UV-LÁTHATÓ ABSZORPCIÓS SPEKTROMÉTER

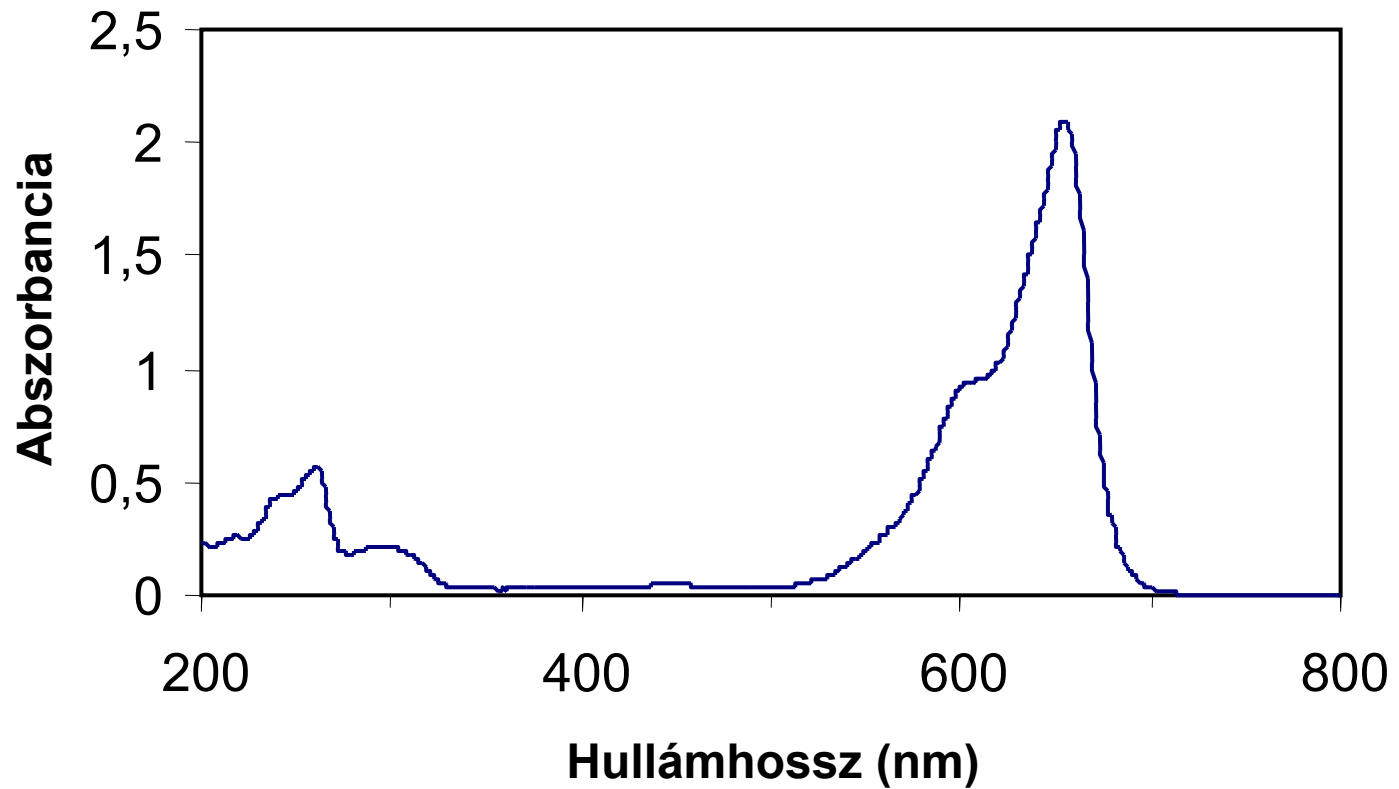


# Oxazin 1





# Oxazin 1 UV-látható abszorpciós spektruma



## 1.2. Bevezetés a kvantummechanikába

# Erwin Schrödinger: Quantisierung als Eigenwertproblem (1926)



# A Schrödinger-egyenlet

A kvantummechanika legfontosabb összefüggése!

$$\hat{H}\Psi(\tau) = E\Psi(\tau)$$

(Röviden:  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  )

$$\hat{H}\Psi(\tau) = E\Psi(\tau)$$

Differenciálegyenlet

a molekulát alkotó atommagok és elektronok helykoordinátái szerinti differenciálhányadosokat tartalmaz

ezen koordináták közös jelölése:  $\tau$

$$\hat{H}\Psi(\tau) = E\Psi(\tau)$$

Pl.: H<sub>2</sub>S molekula esetében  $\tau$

$\tau \equiv x_S, y_S, z_S; x_{H1}, y_{H1}, z_{H1}; x_{H2}, y_{H2}, z_{H2};$  (magok)

$x_{e1}, y_{e1}, z_{e1}; \dots \dots x_{e16}, y_{e16}, z_{e16}$  (elektronok)

$$\hat{H}\Psi(\tau) = E\Psi(\tau)$$

$\hat{H}$  Hamilton-operátor

Az operátor függvényen végzett műveletet jelöl ki.

A Hamilton-operátor több tagból áll, amelyek közül egyesek a magok és az elektronok térkoordinátái szerinti parciális deriválást tartalmaznak.

$\Psi(\tau)$  a molekula állapotfüggvénye

$E$  a molekula energiája

$$\hat{H}\Psi(\tau) = E\Psi(\tau)$$

A differenciálegyenletek megoldásai függvények.

A Schrödinger-egyenlet megoldásai

a  $\Psi_1(\tau)$ ,  $\Psi_2(\tau)$ ,  $\Psi_3(\tau)$ ... állapotfüggvények

és a hozzájuk tartozó

$E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$ ... energia-sajátértékek



# Az állapotfüggvény jelentősége I.

A molekula  $\lambda$ -ik állapotát jellemző  $\Psi_\lambda(\tau)$  állapotfüggvény megadja, hogy a tér egyes pontjaiban mekkora az elektronok és a különféle atommagok tartózkodási valószínűsége.

Ebből leszámaztatható

- a magok elhelyezkedését jellemző kötéstávolságok, kötésszögek (molekulageometria)
- az atomok parciális töltései (reakciókészséghez fontos)
- kémiai kötések erőssége

# Az állapotfüggvény jelentősége II.

Elméleti úton számítható a spektrum!

Elnyelési (abszorpciós spektrum): a fényelnyelés intenzitása a fény frekvenciájának függvényében.

Kibocsátási (emissziós) spektrum: a fénykibocsátás intenzitása a fény frekvenciájának függvényében.

# Az állapotfüggvény jelentősége II.

Elméleti úton számítható a spektrum!

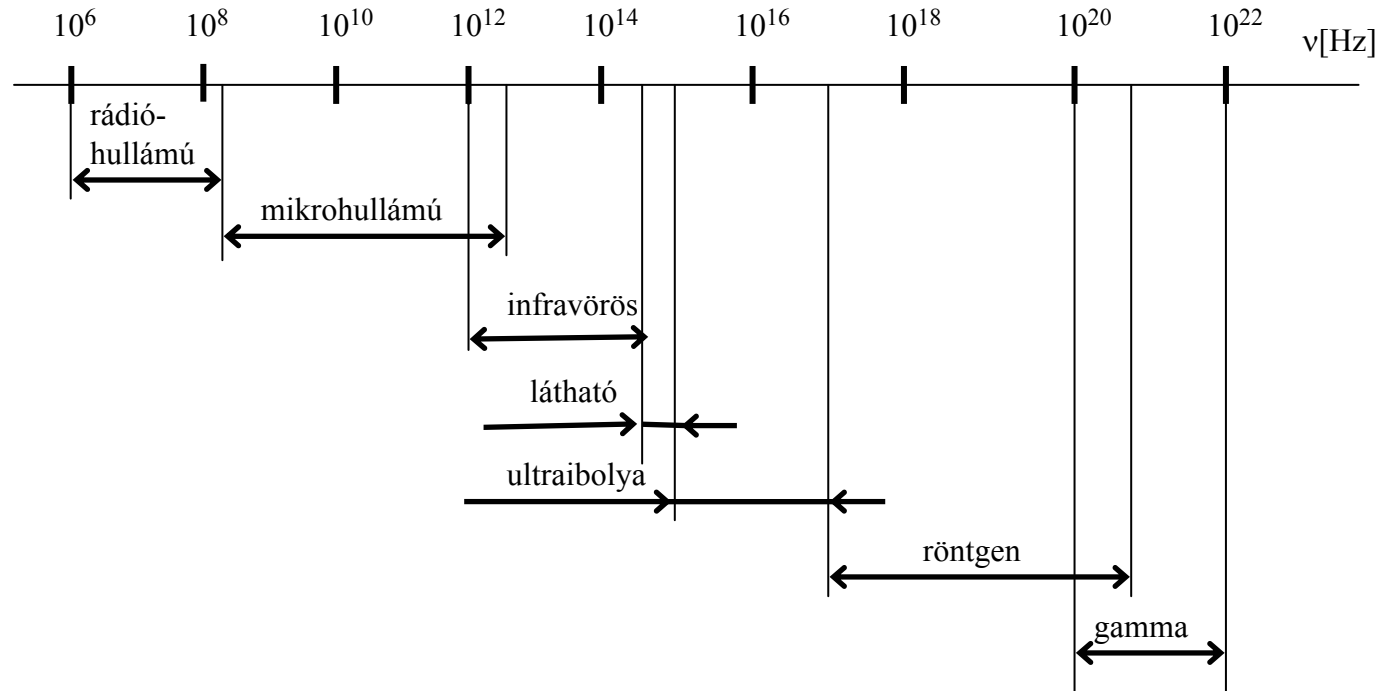
Az elnyelési frekvenciákat a kiindulási állapot ( $\kappa$ ) és a végállapot ( $\lambda$ ) energiájának különbsége határozza meg:

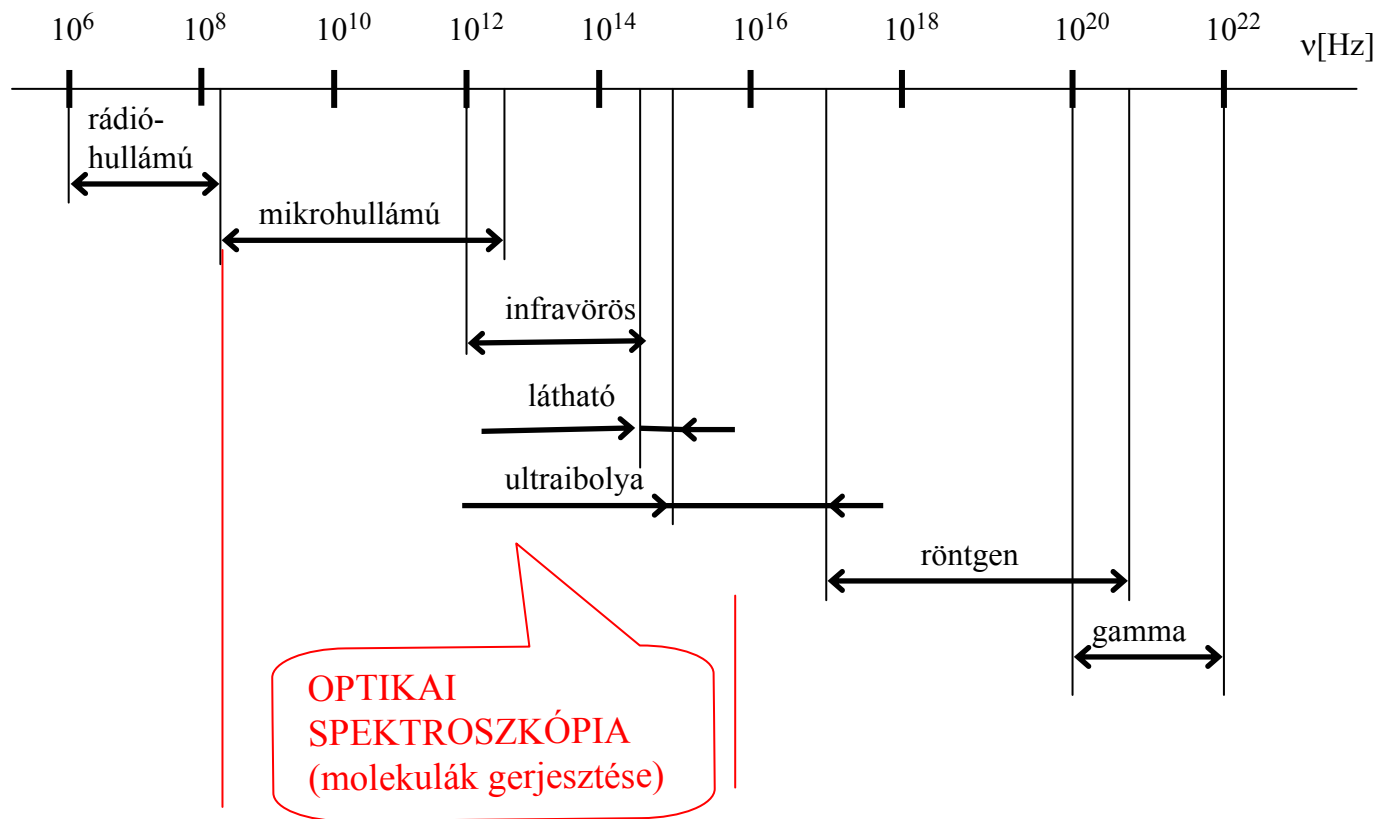
$$E_{\lambda} - E_{\kappa} = h\nu_{\kappa\lambda}$$

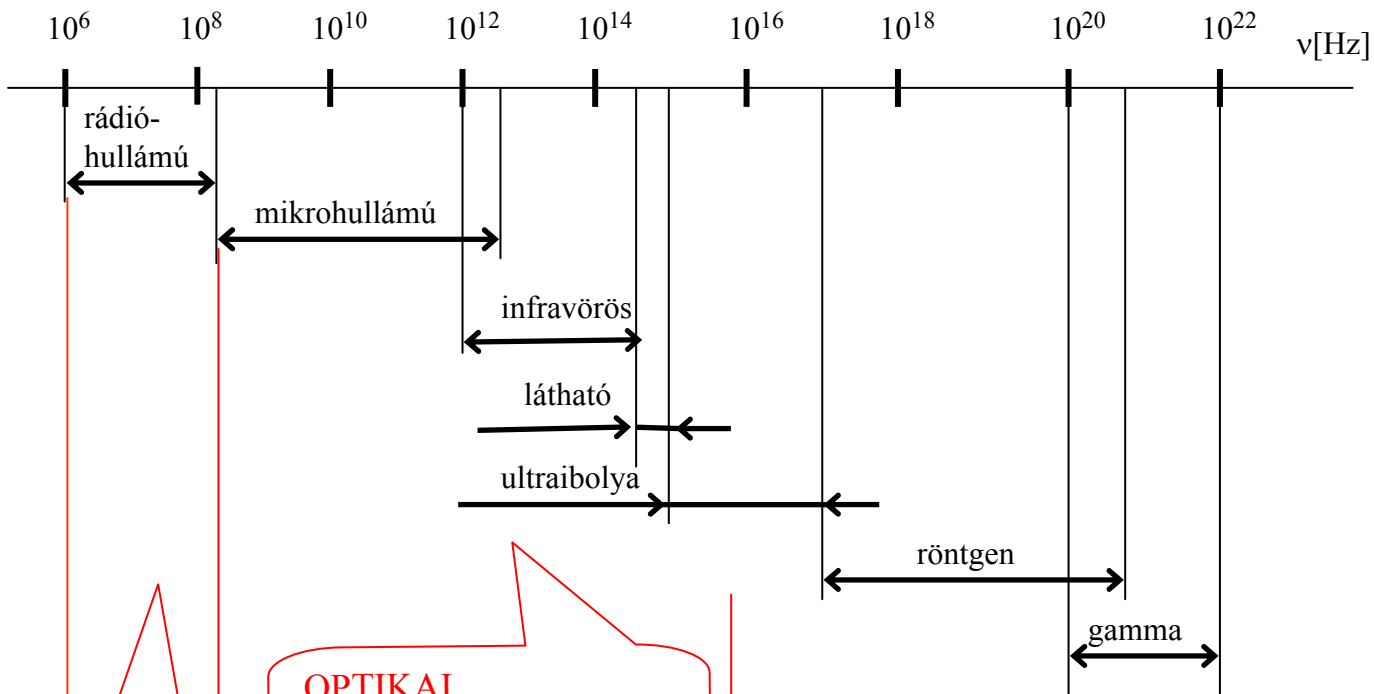
A spektrumvonal intenzitása arányos a két állapot ( $\lambda$  és  $\kappa$ ) közötti sugárzásos átmenet valószínűségével, amely kiszámítható, ha ismerjük a molekula állapotfüggvényét kiindulási állapotban ( $\Psi_{\lambda}(\tau)$ ) és a végállapotban ( $\Psi_{\kappa}(\tau)$ ).

## 1.3. A kémiai szerkezetvizsgálati módszerek áttekintése

# Az elektromágneses sugárzás tartományai



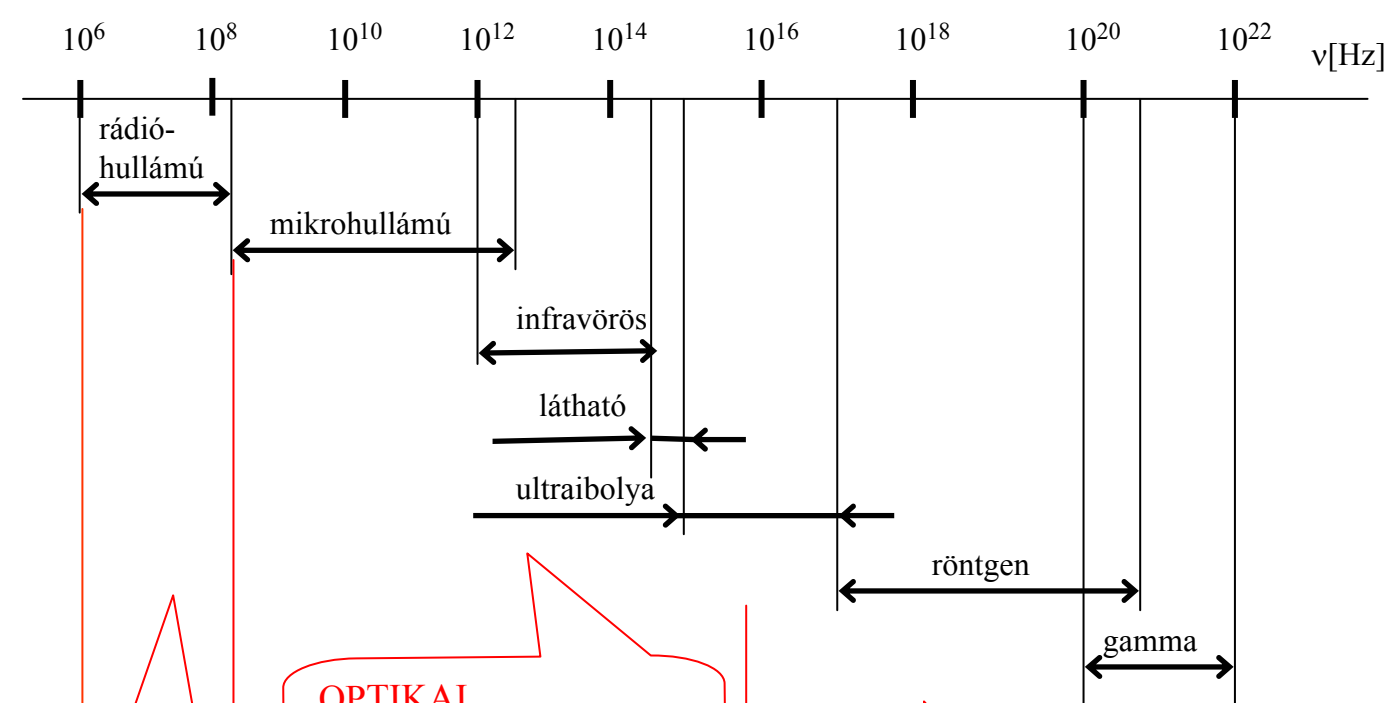




**OPTIKAI  
SPEKTROSKÓPIA  
(molekulák gerjesztése)**

**NMR SPEKTROSKÓPIA  
(magok gerjesztése)**

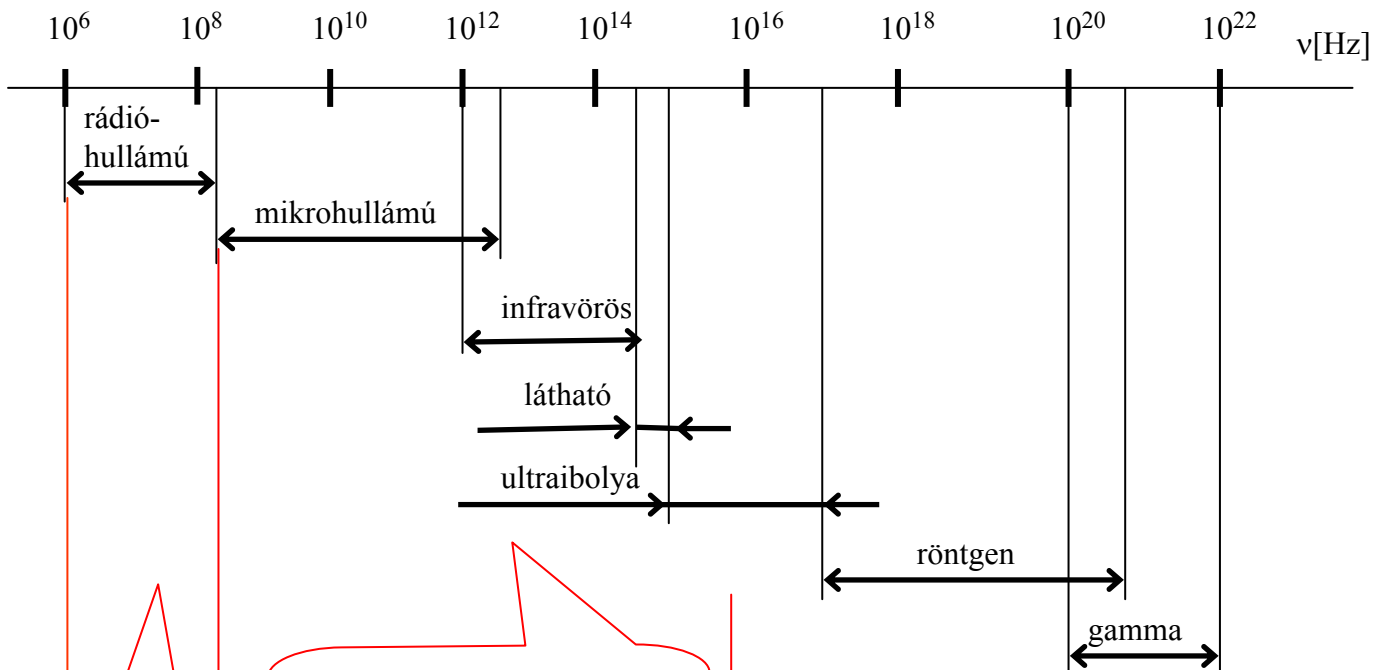




**NMR SPEKTROSZKÓPIA**  
(magok gerjesztése)

**OPTIKAI SPEKTROSZKÓPIA**  
(molekulák gerjesztése)

**FOTOELEKTRON SPEKTROSZKÓPIA**  
(molekulák ionizálása)



**OPTIKAI  
SPEKTROSKÓPIA**  
(molekulák gerjesztése)

**NMR SPEKTROSKÓPIA**  
(magok gerjesztése)

**FOTOELEKTRON  
SPEKTROSKÓPIA**  
(molekulák ionizálása)

**MÖSSBAUER  
SPEKTROSKÓPIA**  
(magok gerjesztése)

# Kémiai szerkezetvizsgálati módszerek

## Számításos kémia

Kvantumkémiai  
számítás

Molekula-  
modellezés

## Kísérletek

Fotonnal

Elektronnal

Neutronnal

abszorpció

emisszió

rugalmatlan  
szórás

rugalmas  
szórás

ionizáció

rugalmas  
szórás

ionizáció

rugalmas  
szórás

