

HOGYAN TANÍTSUK A KOVALENS KÖTÉST?

Schrödinger tigrise: a mozdulatlan mozgás

Geszi Tamás, Jávor Márta
ELTE Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

A kémia számtalan helyen találkozik a fizikával, és ez állandóan visszatérő problémát jelent az oktatásban: akár két tantárgyról van szó, akár – amint az már többször felmerült – valamilyen egységes természettudományi oktatásról, mindannyian érezzük, hogy kár lenne két környezetben kétféle ismeretet tanítani ugyanarról a jelenségköréről.

Ennek különösen éles példáját jelenti a kémiai kötés tanítása. Az 1900 előtti és utáni évtizedek váratlanul mély betekintést engedtek a kémia mögötti atomi-molekuláris világba, és e betekintés csúcsa volt a kémiai kötés természetének feltárása a megszülető kvantummechanika felhasználásával.

A történet kezdete egyszerűnek látszott, ha elfogadjuk, hogy egyes atomok szeretnek elektront leadni, mások azt lenyelni, ezzel létrejön egy pozitív és egy negatív ion, amelyeket erős Coulomb-vonzás köt össze egy molekulává. Ebben még a fizika és a kémia tanára békésen megfér egymással: a fizikatanár megtanítja, mi az, hogy Coulomb, a kémiatanár meg azt, hogy a periódusos rendszerben hol vannak az elektront leadó és hol az elektront felvevő atomok. A bonyodalmak a rejtélyes kovalens kötéssel

kezdődnek: két egyforma atom, egyik se kap töltést, akkor hát mi tartja össze őket?

A válasz a kvantummechanika egyik első látványos sikere volt. A kezdet még egyszerű: a két atom lead egy-egy elektront, hátrahagyva két egyforma pozitív iont, amelyek magukra hagyva taszítják egymást. Ami a folytatást illeti, egy évszázad távlatából nézve eléggé világos, hogy a kötés magyarázata a mozgás hullámtermészetének felismerésén alapul: amire egy pontszerű részecske aligha lenne képes, mindkét elektron kiterjedt hullámként rátelepülhet két ionra, egyszerre érezheti vonzásukat, miközben negatív töltésükkel leárnyékolják az ionok közötti taszítóerőt. Ezáltal a két elektron a két iont egymáshoz tudja kötni, velük stabil, semleges molekulát alkotva [1]. Hozzátehetjük még, hogy a Pauli-elv szerint egy ilyen hullámalakzaton (elkerült neve: *molekulapálya*) tényleg egyszerre éppen két, ellentétes spinű elektron fér el; ezzel tulajdonképpen megkapunk mindent, ami a kovalens kötés elemi kémiájához kell.

Ha ennél tovább szeretnénk lépni a kovalens kötés természetének feltárásában, kezdjük ott, hogy az eddigiek szerint a kötés a Coulomb-erőkből eredő *negatív* helyzeti energia formájában van jelen. Igen, negatív, mert ha szét akarjuk választani a molekulává kötődött két atomot, ennyi pozitív energiát kell befektetni, hogy felhozzuk őket a nulla energia szintjére, ahonnan már külön-külön szabadon mozoghatnak akármerre; az ehhez szükséges energiamennyiséget hívjuk kötési energiának. A kötéshez szükséges negatív helyzeti energiát az elektron-ion vonzás biztosítja. Ott van azonban az ion-ion és elektron-elektron taszítás is, ezekhez pozitív helyzeti energia tartozik, ami a kötést gyengíti. Kettejük közül az első a markánsabb: túl rövid kötésnél, ahol már a két ion közé nem férnek be az elektronok, a két ion szemtől szemben látja egymást; erős taszításuk helyzeti energiája a mérleget a kötő negatívból pozitívba fordíthatja, ami szétszakítaná a molekulát. Hogy ez ne történjen meg, a kötésnek elég hosszúnak kell maradnia.

A kvantummechanika nem elégszik meg az eddigiekkel: ha közelebbről is ránézünk a hullámszerű mozgásra, rákényszerülünk, hogy az energia mérlegébe a mozgási energiát is belevegyük. A mozgás azért jön a történetbe, mert a vonzás minél jobb kiaknázásához az elektronhullámnak minél közelebb kell kerülnie az összekötni kívánt atommagokhoz. Ehhez

A szerzők köszönetet mondanak Szabados Ágnesnek, aki a kvantumkémia aktív kutatójaként számos megbeszélésen fáradhatatlanul finomította a cikkben kifejtett nézeteinket.



Geszi Tamás fizikus, az ELTE emeritus professzora. Nyugdíjasként az utóbbi húsz évben „a kvantummechanika alapjai” néven ismert területen végez kutatómunkát.



Jávor Márta az ELTE matematika-fizika tanári és ezzel párhuzamosan meteorológia szakán végzett 1980-ban, később kémiatanári oklevelet is szerzett. Az oktatás minden szintjén (általános és középiskola, főiskola, egyetem) tanított. Jelenleg az ELTE Fizikai Doktori Iskola Fizika Tanítása programjának doktorandusza.

viszont mindenképpen rövid hullámhossz kell, mert egy félhullámhossznál rövidebb hullám már nem hullám. És itt jön a képbe a kvantummechanika: m tömegű, v sebességű részecske (hullámjellegű mozgásban: „hullámcsomag”) λ átlagos hullámhosszához *de Broglie* alapvető összefüggése szerint

$$p = m v = \frac{h}{\lambda} \quad (1)$$

impulzus tartozik, ahol h a Planck-állandó. Az ennek megfelelő kinetikus energia

$$E_{kin} = \frac{m v^2}{2} = \frac{p^2}{2 m} = \frac{h^2 / 2 m}{\lambda^2}, \quad (2)$$

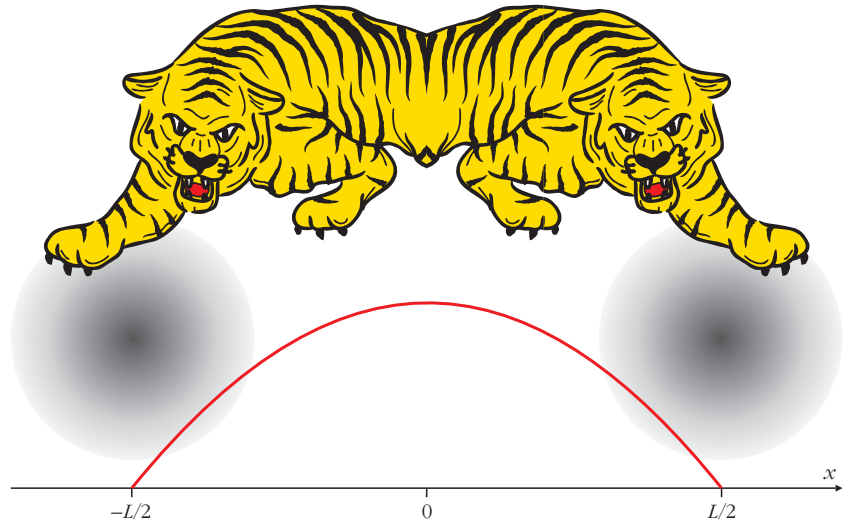
ami mindig pozitív, tehát ellene hat a lokalizációval nyerhető negatív potenciális energiának, ezzel gyengíti a kötést, annál inkább, minél kisebb λ méretre próbálja az elektronhullám belegyömöszölni magát az atommag vonzó potenciálgödrébe.¹

A teljes energia a potenciális és a kinetikus energia összege; a kémia azt az optimális nyereséget keresi, ami egy megfelelően mértékletes lokalizációval mérhető. Végző soron az így megtalált optimum definiálja a kémiai kötés energiáját.

A képet bonyolítja, hogy egy kötésben több elektron vesz részt, amelyek negatív töltésükkel egymást is taszítják. Ezt számításba venni igencsak igénybe veszi a kvantumelmélet és a hozzá kapcsolódó számítástechnika lehetőségeit; a bonyodalmak kezelésére egy önálló tudományág jött létre: a kvantumkémia, amely mára része lett életünknek [2]. Az alapvető fizikai képen azonban ezek a bonyodalmak nem változtatnak: a kötő elektronok megkeresik maguknak azt a hullámalkazatot, amely a lehető legnegatívabbá teszi a potenciális és kinetikus energia összegét, ezzel létrehozva a tőlük telhető legerősebb kötést.

Most értünk el ahhoz a ponthoz, amire a címben jelzett kérdés utalt: ha a kémiai kötésben az elektron álló hullámként van jelen, hogy beszélhetünk a *mozgási* energiájáról? Aki egyetemi szinten tanulta a kvantummechanikát, abban fel se merül a kérdés, mert megszokta, hogy állandó szorzóktól eltekintve, a kinetikus energia a hullámfüggvény hely szerinti második deriváltja, több dimenzióban Laplace-operátorral leolvasott hajladozása. Egy középiskolásnak ez a szöveg nyilván semmitmondó; marad a kérdés: hogy jön ide a mozgási energia?

¹Azt, hogy a kötés lényegében a Coulomb-vonzásból ered, a mozgási energia ezt csak gyengíti, látványosan igazolja a *virialtétel*, lásd például [3]. A hullám két atomra való szétterjedése ugyan csökkenti a kinetikus energiát, de ennél nagyobb mértékben növeli az, hogy közben a kötőpálya befűződik, így ez nem segíti a kötést.



1. ábra. Két atom között létrejött kovalens kötés: Schrödinger tigrise, amely egyszerre ugrik jobbra és balra, ezért helyben marad és erősen fogja a két atomot. Lent: ennek leg-egyszerűbb matematikai modellje, lásd a (3) egyenlet körüli diszkussziót.

A válasz, amit ajánlunk, ez: mindenki hallott Schrödinger macskájáról, aki él is, hal is egyszerre, vagyis kétféle hullámállapot szuperpozíciójában létezik. Itt valami hasonlóról van szó, csak nem életről és halálról: az álló hullámot tekinthetjük úgy, mint egy jobbra és egy balra mozgó hullám szuperpozícióját. Nevezzük hát így: Schrödinger tigrise, aki egyszerre ugrik jobbra is, balra is, telve mozgási energiával a (2) egyenletnek megfelelően, miközben végül is helyben marad.

Hogy tényleg helyben marad, az egyszerű középiskolás matematikával belátható! Vegyünk egy jobbra és egy balra haladó hullámot, adjuk őket össze, és használjunk némi elemi trigonometriát:

$$\begin{aligned} \sin 2\pi \left(\nu t - \frac{x}{\lambda} \right) + \sin 2\pi \left(\nu t + \frac{x}{\lambda} \right) &= \\ = 2 \sin(2\pi \nu t) \cdot \cos \left(2\pi \frac{x}{\lambda} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Az eredmény láthatóan egyhelyben maradván oszcillál: a tigris helyben marad.

Ha már egyszer számolni kezdtünk, akkor még nincs a vége. Az x változótól koszinusz alakjában függő hullámamplitúdó mindkét irányban korlátlanul oszcillálna, miközben a kémiai kötés L hossza véges. Ennek reprodukálásához mindenekelőtt tegyük az $x = 0$ origót a kötés közepére; akkor a (3) egyenlet jobb oldalát a λ hullámhossz megválasztásával úgy tudjuk beállítani, hogy az $x = \pm L/2$ helyen néhány hullámzás után 0-ra csökkenjen. Mivel ezt a lehető legkisebb kinetikus energiával, vagyis a lehető legnagyobb hullámhosszal akarjuk elérni, úgy járunk a legjobban, ha az egész L hosszúságot egyetlen félhullámmal töltjük ki. Ekkor $\lambda = 2L$.²

²Az ennek megfelelő kinetikus energia a (2) egyenlet szerint $h^2/(8mL^2)$, de ahogy már az előző lánjegyzetben utaltunk rá, ez nem a teljes kinetikus energia; pontos számolásnál a kötés vonalára merőleges irányokat is számításba kell vennünk.

Az egyszerű matematikai modellünk úgy lesz teljes, ha az $x = \pm L/2$ határon túl a hullámot állandó 0-ra vágjuk, ez fejezi ki a kötés véges hosszát. A levágás matematikája mögött az a fizika működik, hogy az ionok vonzása a kötésen belül szabad mozgást enged az elektronhullámnak, de – amint el akarna távolodni – visszahúzza az elektront. Ez a vonzóerő készteti arra a tigrist, hogy lábaival megragadja a két atomot (1. ábra).

Ami még változhat, az a kötés L hossza; ettől egyaránt függ a potenciális és a kinetikus energia. A kettő összege, a teljes energia valamilyen L_0 hosszúságnál lesz a legkisebb, ez határozza meg a kötés hosszúságát, amit például röntgendiffrakciós kísérletekben lehet megmérni. A megvalósuló energiaminimum mélysége – ahogy már mondtuk – a kötési energia, amelynek a fenti játékos modellnél pontosabb kiszámítása a kvantumkémia egész apparátusát igénybe veszi; az eredményt ellenőrizni termodinamikai vagy spektroszkópiai mérésekkel tudjuk.

Végül egy kitekintés a „kvantumrejtélyek” népszerű témája felé: az elterjedt mese szerint Schrödinger macskája, ahogy rápillantunk, beugrik vagy az élő,

vagy a halott állapotba, és a továbbiakban már ottmarad. A kémiai kötés életerős tigrisével ilyen nem történik; egy rápillantástól nem ugrik be egyik vagy másik atom vonzó gödrébe, ilyet csak akkor tesz, ha befektetjük a kötési energiát. Schrödinger élő-halott macskája a maga összes vélt vagy valós rejtélyeivel a klasszikus-kvantum határ magas hegyein lakik; a stabil molekulák kémiájának lakhelye a biztonságos kvantumvölgy. „Hullám is, részecske is” – ilyen csak oda-fönt létezik. Idelent csak hullám van, különben nem lennének a molekulák, amelyekből felépülünk.

Irodalom

1. Számos cikk foglalkozik a témával az *American Journal of Physics* folyóiratban, lásd például R. Piel és E. Huggins, 43 (1975) 482; V. F. Weisskopf, 53 (1985) 399; R. D. Harcourt, 56 (1988) 660; lásd még: J.-P. Grivet, *Journal of Chemical Education* 79 (2002) 127; népszerű magyar feldolgozása Marx György: *Életerővel atomok*. Akadémiai Kiadó, Budapest (1978).
2. Peter W. Atkins, Ronald S. Friedman: *Molecular Quantum Mechanics*. 5. kiadás, Oxford University Press (2010); régebbi kiadásai internetről szabadon letölthetők.
3. Geszti Tamás: *Kvantummechanika*. 3. kiadás, Typotex, Budapest (2014) 15.6 pont.