

Mit tudunk a kémiai szerkezetről és mit tanítsunk?*

ERDEY-GRÚZ TIBOR
a Magyar Tudományos Akadémia elnöke

Előadásom bevezetéseként legyen szabad hangsúlyoznom, hogy nem a leendő új iskola-rendszer egyik tárgyának a tantervéről vagy tananyagáról fogok szólni. A jövő iskolarendszérének szerkezetével, tantárgyi tagozódásával, tananyagának, valamint oktatási-nevelési módszereinek előkészítésével a szakemberek tekintélyes grémiumai foglalkoznak, közöttük a Tudományos Akadémia elnökségének a Közoktatási Bizottsága. Az új iskolarendszer kialakításáig még további elmélyülő vizsgálatokra, sokoldalú vitákra és széles körű kísérletekre van szükség. Konkrét tananyag helyett ezért előadásomban inkább néhány kémiai alapfogalommal összefüggő szemléleti problémáról szeretnék beszélni, amelyek a tárgyi ismeretek oktatásában és a dialektikus materialista gondolkodásra nevelésben érvényesíthetők, függetlenül a tanterv beosztásától és a tananyag terjedelmétől.

Rátérve az előadás tárgyára, vagyis a kémiai szerkezetre, illendő először definiálni: mi a szerkezet és mi a kémia.

A szerkezet — e fogalom filozófiai definíciója szerint — az adott rendszer alkotóelemeinek viszonylag állandó egysége, az elemek viszonya egymáshoz és a tárgy egészéhez, a rendszer viszonylag változatlan aspektusa. Kiindulókként, alkotóelemekként, a tárgy szerkezetének analízisében különféle fogalmak tekinthetők.

E definícióból világos, hogy a szerkezet a viszonylag állandó egységes egész (az objektum) és alkatrészei közötti viszonyra vonatkozik. Konkrét kifejezése jelentékeny mértékben azon múlik, hogy mit tekintünk az objektum alkatrészeinek, más szóval építőelemeinek. A kémiai szerkezet vonatkozásában erre a kérdésre nyilván a „kémiai” jelző ad felvilágosítást. Alapjában véve ui. bizonyos határok között elhatárol-

zásunktól függ, hogy egy tudományág keretein belül mit tekintünk egy tárgy alkatrészeinek, vagyis mit tekintünk e vonatkozásban kiindulási elemeknek.

Első hallásra talán filozófiai idealizmusnak tűnik az a nézet, miszerint elhatározásunktól függ az, hogy mit tekintünk egy tárgy alkatrészeinek. Való igaz, hogy egy reális tárgy összetétele objektív tény, amely teljesen független a róla alkotott nézeteinktől. A tudomány egyes ágai azonban nem foglalkozhatnak az objektív valóság teljes egészével minden vonatkozásban, hanem a valóságnak csak egy-egy szektorával, egy vagy néhány vonatkozásban. A szektorok határainak és a vonatkozásoknak megválasztásában már nem kötnek egyértelműen az objektív törvényszerűségek, csupán bizonyos kereteket szabnak meg, amelyekben belül elhatározásunkon múlik, hogy miként határolunk el egy-egy tudományágot (más néven saktudományt) a többitől. Ez természetesen a kémiára is érvényes, és kihat arra, hogy mit tekintünk a kémiai szerkezetben alkatrésznek, szerkezeti elemnek.

A kémia a természettudományok egyik ága. A természettudományok egészének tárgya a világ anyagának és az anyag mozgásának mindenirányú vizsgálata, beleértve az anyag fejlődését az egyszerűbbtől az összetettebb felé, s ennek során a különféle anyagfajták és mozgásformák kialakulását, ill. átalakulásait, valamint az azonos és különböző anyagfajtákhoz tartozó egységek kölcsönhatásait. Idetartozik annak a kutatása is, hogy milyenek az objektumok alkatrészeinek a viszonyai a geometriai elrendeződés, a kölcsönhatásaik módja és energiája tekintetében.

Amint a természet és a társadalom a maga sokrétűségében és változatosságában alapjában egységes rendszer, amelyben közvetlenül vagy közvetve minden összefügg minden mással, úgy a tudomány is a maga egészében egységes rendszer, amely az anyag sajátságait, az anyag fej-

* Előadás a Kémiantanárok VI. Országos Konferenciáján (Eger, 1974. június).

Az „A kémia oktatása” c. rovatunk első közleménye. A rovatot szerkeszti: Dr. Pálfalvi Aladárné.

lődését, a különböző fejlettségű anyagok szerkezetét, mozgásait és kölcsönhatásait igyekszik felderíteni. A szaktudományok ennek részeit alkotják.

Ha általában anyagszerkezetről beszélünk, akkor a szerkezet fogalmában szereplő összetevő alkatrészeknek (építőelemeknek) a *legegyszerűbb ismert anyagi részecskéket* kell tekintenünk. Noha e mondat nagyon tárgyilagosnak (úgy értem szubjektív véleménytől függetlennek) hangzik, mégis utal tudásunk pillanatnyi szintjére, vagyis történeti mozzanatra is van benne. Hiszen legegyszerűbb anyagi részecskéknél a múlt században az atomokat tartotta a tudomány, századunk első negyedében a protont és az elektront, második negyedében hozzájuk jött a pozitron és a neutron, majd századunk közepétől kezdve ismertté váltok további elemi részecskék. Ezekből napjainkban sok ismert, de manapság azt gyanítják a tudósok, hogy e sok ismert elemi részecske két-három még kisebb, még elemibb részecskéből áll. Valaha a természettudományokban az „elemi” jelző azt jelentette, hogy legegyszerűbb, tovább semmiképpen sem bontható, belső szerkezet nélküli; ma már azonban devalválódott a jelző értéke, és relatívvá vált a tartalma: legszigorúbb értelemben is csupán annyit jelent az elemi jelző, hogy jelenlegi módszereinkkel még egyszerűbb részecskéket eddig nem sikerült megfigyelni. A tudomány történetének tanulságait figyelembe véve azonban aligha kételkedhetünk abban, hogy léteznek még egyszerűbb, „szubelemi” részecskék, és idővel sikerül őket is megfigyelni.

Az „elemi” jelzőnek manapság van azonban egy másik, *viszonylagosabb jelentése* is, amely mégis egyértelműbb: adott viszonylatban eleminek azokat az objektumokat tekintjük, amelyeket a *jelenségek adott körében szereplő energiákkal nem lehet még egyszerűbbekre szétbontani*. Ez az értelmezés adja meg a kulcsot a kémia tárgykörének és kémiai szerkezetnek korszerű értelmezéséhez.

Energetikai oldalról megközelítve a kémia tárgykörét, azok a folyamatok tartoznak e tudományágba, amelyekben a részecskék kölcsönhatásának az energiája elég nagy ahhoz, hogy szétválassa az atomokat egymástól, ill. megváltoztassa az atomok külső elektronjainak állapotát, elektronokat vihessen át egyik atomról a másikra, de nem elég nagy ahhoz, hogy szétbontsa az atomokat, ill. megváltoztassa az atommag vagy az elektron belső állapotát.

Nagyjából azt tapasztaljuk, hogy atomonként mintegy 0,1 eV-nál kisebb energiával nem idézhető elő kémiai változás, vagyis nem vihető át részben vagy egészben elektron egyik atomról a másikra, viszont mintegy 10 eV-nál nem igen szükséges nagyobb energia ilyenféle változásokhoz. Ennek megfelelően a *kémia tárgykörébe* azok a kölcsönhatások tartoznak, amelyek hozzávetőleg atomonként 0,1–10 eV energiával járnak. Ez annyiban egyértelmű elhatárolás, hogy az atommag megváltoztatásához több mil-

lió eV nagyságrendű kölcsönhatás szükséges, a határ tehát — legalábbis a tipikus folyamatok vonatkozásában — nem mosódik el.

* * *

A kémiai szerkezet vonatkozásában ezek szerint a viszonylag *egyszerű összetevő az atom*, az *összetett rendszer* pedig a *kémiai individuuum* (sok esetben a molekula, de nem mindig ez). A kémiai individuuum két vagy több — határozott módon összekapcsolódó — atomból keletkezett anyagi rendszer, amely alkatrészeitől minőségileg eltérő sajátságú, viszonylag önálló és viszonylag állandó. Ez más szóval azt jelenti, hogy a kémiai individuumon belüli atomok között nagyobbak az összetartó erők, mint az adott individuuum és a környezete között (de kisebbek, mint az atom alkarészeit összetartó erők.) Ha két olyan kémiai individuuum találkozik egymással, amelyek atomjai között erősebb a kölcsönhatás, mint egy-egy individuuum saját atomjai között, akkor kémiai átalakulás következik be.

Kémiai folyamatok (reakciók) azok az anyagi változások, amelyek során kémiai individuuumok keletkeznek, átalakulnak vagy elbomlanak. Kémiai vonatkozásban az atom szerkezetének csak a külső elektronhéja érdekel, egyébként általában olyan építőelemeknek tekinthetők az atomok, amelyek belső szerkezete változatlan (ezzel az atomfizika foglalkozik). A kémiai individuuumok egészének egymás közötti kölcsönhatásai, amelyek során ők maguk nem változnak meg lényegesen, szintén nem tartoznak a szoros értelemben vett kémia körébe (ezekkel a makrofizika, ill. fizikai kémia foglalkozik).

Indokolt itt két megjegyzés.

1. A kémiai individuuum sok esetben molekula, de egyáltalában nem mindig. Pl. kémiai individuuum a kősó, noha nincsenek benne molekulák, hanem a Na^+ - és a Cl^- -ionok térbeli hálózata alkotja a kristályt. Kémiai individuuumok továbbá a fehérjék, a cellulóz, a műanyagok, noha makromolekulákból állnak, amelyek nem egyszerűen óriási molekulák, hanem ezektől minőségileg eltérő anyagi rendszerek. Kémiai individuuumok a felületi vegyületek is (ezek képződésén alapul többek között a textíliák színezése), amelyekből nem állíthatók elő makroszkópicusan háromdimenziós objektumok.
2. A kémiai individuuumokban az *atomok nem változatlanok*, hanem minőségileg megváltozott sajátságúak, mert a kémiai kötést az atomok külső elektronjai mozgásának, ill. állapotának megváltozása valósítja meg. Gondoljunk e vonatkozásban pl. a nátrium és a kősóban lévő nátriumion különbözőségére. Ezért nem szabatos, ha azt mondjuk, hogy a kémiai individuuumok atomokból állanak: szabatosabb úgy kifejezni a tényeket, hogy atomokból *keletkeztek*. Szabatosan úgy is leírhatjuk a valóságos

helyzetet, hogy a kémiai individuumok atomtörzsekből és az őket összefűző elektronokból állnak. (Atomtörzs az atommag + a kémiai kötésben részt nem vevő elektronok.)

Atomokra — és nem még kisebb alkotórészekre — utalni azonban mindenképpen szükséges. Egyrészt ui. 0,1—10 eV nagyságrendű energiákkal egyértelműen különválaszthatók az atomok a kémiai individuumból, és visszaállíthatók eredeti sajátságaik, másrészt az atomoknál kisebb alkatrészek (az atommagok ill. az elemi részecskék) nem változnak meg a kémiai folyamatokban. Az atomok tehát (külső elektronhéjuktól eltekintve) kémiai változásokban ma is változatlanoknak, oszthatatlanoknak tekinthetők.

* * *

Az előzőekben vázolt értelmezéssel összhangban a kémiai szerkezet fogalma arra vonatkozik, hogy a kémiai individuum milyen atomokból keletkezett, milyen geometriai elrendezésben és mekkora kölcsönös távolságban helyezkednek el benne az atomtörzsek, milyen állapotban vannak a kémiai kötést létrehozó elektronok (vagyis milyen jellegű a kémiai kötés), mely atomtörzseknek számottevő a kölcsönhatása egymással és mekkora erők származnak ettől, milyenek az atomtörzsek periodikus mozgásai egyensúlyi helyzetük körül, milyen szerkezeti alegységek (atomcsoportok, ionok, molekulák) vannak jelen. A kémiai szerkezet leírásának azt is figyelembe kell vennie, hogy a kémiai individuumok önállósága, lezárt mivolta csak viszonylagos. Gyenge vonzóerők (és persze megfelelő taszítóerők) mindenféle kémiai individuumok között működnek. Ezek idézik elő többek között pl. a gázok cseppfolyósodását és a folyadékok kristályosodását.

A kémiai szerkezettel kapcsolatban felmerülhet a kétely: vajon *megállapítható-e* egyértelműen az atommagok, illetve atomtörzsek kölcsönös helyzete a kémiai individuumban, amikor tudjuk, hogy az elektronok helyzetének ilyen megállapítása az atomban nem lehetséges. Erre a kérdésre a Heisenberg-féle határozatlansági reláció ad választ. Eszerint m tömegű részecske x koordináta menti helyzetének Δx határozatlansága és sebességének Δv határozatlansága között a

$$\Delta x = \frac{h}{m \cdot \Delta v}$$

összefüggés érvényes (h a Planck-állandó). Az elektron tömegének kicsinyisége folytán az elektron helyzetének határozatlansága az atomban olyan nagyságrendű, mint az atom mérete. Nincsen tehát értelme a pontszerűnek képzelt elektronok atombeli pontos helyzetéről beszélni. Az atomok tömege azonban legalább kétezereszer, de általában több ezerszer nagyobb az elektronok tömegénél, ezért helyzetük határozatlansága elenyészően kicsi a molekulák (atomoknál nagyobb) méreteihez képest. A kémiai szerkezet vonatkozásában tehát joggal beszél-

hetünk az atommagoknak (illetve atomtörzseknek) a kémiai individuumban elfoglalt helyzetéről, illetve geometriai elrendeződésükről.

* * *

A következő kérdés, hogy miként lehet megismerni a kémiai szerkezetet. A múlt század második felég visszanyúló legrégebb közvetett módszer tudvalevően a kémiai sajátságok tanulmányozása. A makroszkópikus kémia sajátságok tk. az adott kémiai individuum átalakulásainak, kémiai reakcióinak összességéből adódnak. Mivel a kémiai individuumok közötti kölcsönhatások következményei a kémiai szerkezettől függenek, a kölcsönhatások makroszkópikus termékeiből bizonyos határok között vissza lehet következtetni a kölcsönhatásban résztvevők kémiai szerkezetére. Századunk elejéig ez volt a kémiai szerkezetkutatás egyetlen módja. Valamely kémiai individuum szerkezetének ily módon való kutatása tk. az adott individuum elpusztulásával jár együtt. Ezen az áron is csak hozzávetőleges kvalitatív képet lehetett kapni a kémiai szerkezetről.

A kémiai individuumok roncsolása nélküli szerkezetvizsgálatokat az atomfizika kibontakozása tette lehetővé, ami századunk tizes éveitől kezdődően indult meg, és kvantitatív eredményekhez is vezetett. E vizsgálatok zöme a kémiai individuumok által elnyelt és kibocsátott, illetve szórt elektromágneses sugárzásokon, továbbá az elektronok és neutronok szóródásán, illetve interferenciáján alapszik.

A kémiai individuumok szerkezetének geometriáját, vagyis az atomtörzsek egyensúlyi helyzetének térbeli rendjét főleg a röntgen-, valamint elektronugarak interferenciájának (diffrakciójának) vizsgálata, továbbá a molekulaszinképek révén lehet meghatározni. A molekulaszinképek tanulmányozásából a kémiai individuumok mechanikai (dinamikai) sajátságaira, vagyis az egész rendszernek és részeinek forgására, rezgésére, az atomtörzsek között működő erők nagyságára és irányára is lehet következtetni. A látható és az ultraibolya szinképek tanulmányozása mellett mind nagyobb fontosságra tesz szert az infravörös, a mikrohullám, illetve a rádiófrekvenciás spektroszkópia, valamint a mágneses rezonancia jelenségeit felhasználó spektroszkópia. Mindezek alapján meghatározható a kémiai individuumban kialakult elektronburok szerkezete, felderíthetők az atommag és az elektronburok kölcsönhatásai, s ezáltal részletesen vizsgálhatók a kémiai kötések tulajdonságai. A molekulák elektromágneses szerkezetére értékes következtetések vonhatók a dielektromos állandó, a törésmutató, az optikai forgatóképesség, valamint a mágneses tulajdonságok elemzéséből is.

* * *

A kémiai individuumok határozott szerkezetű anyagi rendszerek, amelyekben az őket alkotó atomtörzsek összekapcsolódnak, de megtartják viszonylagos különállásukat, illetve önállóságukat. Ebből következik, hogy a kémiai individuumban — mint minden határozott szerkezetű anyagi rendszerben — ellentétes erők működ-

nek. Egyrészt vonzzák egymást az atomtörzsek, s ennek hatására közelednek egymáshoz, másrészt, amint elég közel kerültek egymáshoz, tasztítóerők ébrednek, amelyek a kölcsönös távolság csökkenésével rohamosan növekszenek. Mivel a vonzó erők kisebb mértékben növekszenek az atomtörzsek egymáshoz közeledtével, mint amilyen mértékben a tasztító erők növekszenek, egy bizonyos távolságban a tasztító erők egyenlővé lesznek a vonzó erőkkel. Ebben a helyzetben az atomtörzsek kölcsönhatásának eredője nulla, ez felel meg egyensúlyi helyzetüknek. Ez az egyensúly azonban csak viszonylagosan idéz elő nyugalmi állapotot, valójában az atomtörzsek rezegnek és foroghatnak az egyensúlyi helyzetük körül, éspedig annál nagyobb energiával, minél magasabb a hőmérséklet. (Ebből persze az következik, hogy pl. kémiaiilag teljesen tiszta vegyületek egyes molekulái sem teljesen azonosak egymással, mert alkatrészeik pillanatnyi rezgésállapotai általában különbözőek; vagyis a kémiai azonosság is csak viszonylagos.)

A kémiai individuumok tehát csak a vonzás és tasztítás dialektikus ellentétének egysége révén jöhetnek létre. Ha az atomok nem vonzzák egymást (illetve a vonzás hatótávolsága kisebb, mint a tasztításé), akkor nem kapcsolódnak egymáshoz az atomok. Ha viszont nem tasztítanak egymást az atomtörzsek, akkor nem helyezkedhetnének el határozott szerkezet szerint viszonylag elkülönülten, hanem teljesen összeolvadnának, vagyis a kémiai individuumban nem lennének atomtörzsek megkülönböztethetők. Mivel sokféle vizsgálattal kétségtelenül megállapítható az atomtörzsek viszonylag elkülönült léte a kémiai individuumokban, kétségtelen a tasztító erők jelenléte is. A tasztító erők nagyságára utal egyébként az is, hogy milyen nagy erő kell szilárd vagy cseppfolyós testek összenyomásához, vagyis atomjaiknak az egyensúlyi helyzetükön túli közelítéséhez.

Érdeemes megjegyezni, hogy vannak a természetben részecskék közötti olyan kölcsönhatások, amelyekben *csak vonzás* érvényesül, és elmarad a tasztítás. Ilyen egyebek között az elektron és a pozitron fotonná alakulása. Elektron és pozitron egymáshoz közeledése során nem ébred tasztítás, ezért oly bensőleg egyesülnek egymással, oly mélyrehatóan alakulnak át, hogy a belőlük keletkező fotonban már nem különböztethetők meg viszonylag különálló maradványaik. A szokott értelemben közelítőleg sem állíthatjuk, hogy a foton elektronból és pozitronból áll.

* * *

A kémiai individuumokban működő vonzás és tasztítás egyaránt az elektronok mozgásával, illetve állapotával függ össze. A vonzást, ami a kémiai kötést idézi elő, az atomok legkülső héjának az elektronjai valósítják meg. Ezeknek a kémiai kötés létrejöttékor megváltozik a mozgása, illetve a kvantumállapota, többnyire részben vagy egészben egyik atomról át is mennek egy másikra. Mivel a külső elektronhéj állapota

többnyire nem gömbszimmetrikus, a kémiai kötések gyakran irányítottak a térben, és a kötő elektronok állapotától, illetve kölcsönhatásaitól függően specifikusak.

A tasztító erők zömmel az atomtörzsektől származnak, vagyis az atomoknak a kívülről számított második elektronhéjától erednek. Mivel ez a héj gyakran közelítőleg gömbszimmetrikus lezárt héj, a tasztító erők kémiaiilag kevésbé specifikusak, mint a vonzó erők. Az atomtörzsek közötti tasztító erők — amelyek viszonylagos különállásukat idézik elő — lényegében attól a kölcsönhatástól származnak, amelyre a Pauli-féle „tilalmi elv” vonatkozik. Eszerint egy atomi erők által összekapcsolt anyagi rendszerben („részecskében”) nem lehet két vagy több olyan elektron, amelynek azonos az állapota, vagyis mind a négy kvantumszáma azonos. Ha az atomtörzsek annyira közelítenék meg egymást, hogy elektronhéjuk egymásba hatol, akkor ebben két vagy több azonos állapotú elektron lenne. Ezt pedig nagy tasztító erő ébredése akadályozza meg. Mivel az atomtörzsek alapállapotukban többnyire gömbszimmetrikusak és elektronjaik a kémiai reakciókban nem gerjesztődnek, az egy atomtörzsből kiinduló tasztításnak általában nincs kitüntetett iránya, és kevésbé specifikus.

* * *

Az atomok közötti *vonzó erőt* — ami a kémiai kötést létesíti — az egymással összekapcsolódó atomok külső elektronhéjában levő *elektronok mozgásának, illetve állapotának megváltozása idézi elő*. Ez az állapotváltozás nagyon sokféle lehet (sokféle lehet a kvantumállapotuk). Ennek folytán a kémiai erők nagyon változatosak, specifikusak. Fő vonásaiban könnyen áttekinthető a kémiai kötés, részleteiben, finoman árnyalt individualitásaiban azonban — amelyek a vegyületek sajátosságainak beláthatatlan változatosságát idézik elő — rendkívül bonyolult jelenség a kémiai kötés. Részletes elméletén még napjainkban is dolgoznak a tudósok.

Fő vonásaiban, a domináló hatások tekintetében a kémiai kötések tudvalevően három nagy csoportba sorolhatók: az ionkötés, a kovalens kötés és a fémes kötés csoportjába, amelyekben belül azonban sok a változat, és amelyek között sok az átmenet. Mindezek mélyebb megértése, illetve elméleti megközelítése csak a kvantumelmélet idevonatkozó ágazata: a kvantumkémia révén lehetséges. Ennek részletesebb tárgyalása messze meghaladná az általános iskola és a középiskola színvonalát. Arra azonban törekedni kell, hogy a kvalitatív (esetleg félkvantitatív) szemlélet lényeges vonásaiban ne legyen ellentétben a kvantumkémia szemléletével. És ez megvalósítható a kémia iránt nem különösen érdeklődő tanulók számára is elfogadható módon.

Viszonylag legegyszerűbb az *ionkötés*, ami fémek és nemfémek között tudvalevően áltálal létesül, hogy a fématomról egy vagy több elektron (ún. vegyérték-elektron) megy át a nemfémes jellegű atomra, illetve atomcsoportra. Ezáltal pozitív és negatív töltésű ionok (pl. Na⁺

és Cl^-) keletkeznek, s ezek elektrosztatikus vonzása tartja össze a kémiai individuumot (pl. a kősókristály). A különféle korszerű szerkezetvizsgáló módszerekkel egyértelműen kimutatható, hogy az ionkristályban és olvadékában nincsenek molekulák (a kősóban nincsen NaCl molekula), hanem a szabályos geometriai rendben, egyenletes eloszlásban elhelyezkedő ionoknak az egész kristályra kiterjedő térbeli hálózata alkotja a vegyületet. Az elektrosztatikus vonzóerők nagyságának és a térbeli hálózat merevségének következménye az ionkristályok viszonylag nagy keménysége, magas olvadáspontja és kis gőznyomása. A kristályrácsban uralkodó rend szétrombolásához csak viszonylag magas hőmérsékleten elegendő a termikus energia, és még nagyobb energia szükséges ahhoz, hogy egy-egy elektromosan semleges molekula kiszakadjon a kristályból. Gőzállapotban ui. az ionkötésű vegyületek is valódi molekulákból állnak (pl. a kősó gőzében NaCl molekulák vannak).

Találkozunk azzal az „álhírrrel”, hogy az ionkötés megérthető a klasszikus makrofizika alapján, hiszen a Coulomb-féle elektrosztatikus vonzásról van szó. Ez azonban csak rész igazság, és ez a hír alaptalan, mert a klasszikus fizika alapján érthetetlen, hogy miért megy át egy elektron a fématomról a nemfémes atomra. Erre csak a kvantumelmélet ad magyarázatot; vagyis még ebben a legegyszerűbb esetben is kivülálik: a makrofizika törvényei nem eléggé híven és nem elég mélyrehatóan írják le a valóságot ahhoz, hogy megérthetők legyenek az atomok világának a folyamatai. Az atomok elektronjainak és egyéb alkotórészeinek a mozgástörvényeit a kvantumelmélet írja le, amely az anyag olyan sajátágaival, illetve mozgástörvényeivel is foglalkozik, amelyek a makroszkopikus testek folyamataiban, illetve mozgástörvényeiben közvetlenül nem mutatkoznak meg.

A kémiai kötések második fő típusa a kovalens kötés. Ezt olyan elektronok valósítják meg, amelyek egyidejűen, kollektíve tartoznak két vagy több atomtörzshöz, amelyek mozgásának pályája — képletesen szólva — két vagy több atomtörzset vesz körül. A kovalens kötések legtipikusabb példáival a kémiai elemek kétatomos molekuláiban találkozunk: pl. a H_2 molekulában a kötést létesítő két elektron egyenletesen veszi körül a két hidrogénatom-magot. Helyesebben szólva a két elektron átlagosan egyenletes töltéeloszlást idéz elő a két atommag körül, a molekula elektromosan szimmetrikus, a pozitív és a negatív elektromosság súlypontja egybe esik. Hasonlóan közös — mintegy kollektívizált — elektronok révén valósulnak meg a kovalens kötések különböző atomok között (pl. HCl , H_2O). Ezekben azonban az elektronok nem teljesen egyenletesen oszlanak el a két különböző atomtörzs között, aminek következtében az atomcsoport, illetve a molekula nem szimmetrikus. A kötést létesítő elektronok az egyik atomtörzs közelében átlagban hosszabb ideig tartózkodnak, mint a másik közelében, ezért nem esik egybe a pozitív és a negatív elektromosság súlypontja,

két pólus alakul ki, illetve az atomcsoport poláris.

A domináló közvetlen hatásokat tekintve általában az egy vegyértéknek megfelelő tipikus egyszeres kémiai kötést egy elektronpár (vagyis két ellentétes spinű elektron) létesíti, amelyek mozgása két atomtörzset vesz körül. Más szóval a klasszikus kémia szerkezeti képletei egy vegyértékvonalának a legegyszerűbb tipikus esetekben egy elektronpár felel meg, amit az újabb típusú szerkezeti képletekben két ponttal szokás jelölni (pl. $\text{H} : \text{Cl}$; $\text{H} : \text{N} : \text{H}$).

$\ddot{\text{H}}$

Kettős kötést a legegyszerűbb esetekben két elektronpár, hármas kötést pedig három elektronpár valósít meg.

A kovalens kötést létesítő elektronok állapota az összekapcsolt atomok kvantumállapotaiból alakul ki, s bizonyos mértékig örökli ezek sajátosságait. Ha pl. az atom s kvantumállapotú elektronjai létesítik a kötést, akkor az innen származó vegyértéknek nincsen határozott térbeli iránya, mert az s -állapotban gömbszimmetrikus a töltéeloszlás. Ha viszont az atom p kvantumállapotát foglalják el a kötést létesítő elektronok, akkor a tőlük származó vegyérték a térben határozott irányú, mert a p -állapotokban az elektroneloszlás nem gömbszimmetrikus, hanem három egymásra merőleges irányban elnyújtott alakú. Ez az oka pl. annak, hogy a H_2O molekula háromszög alakú, az NH_3 molekula pedig háromoldalú piramis alakú: az alapháromszög csúcsaiban a három hidrogénatom van, a piramis csúcsán pedig a nitrogénatom. Ha s és p állapotú elektronok együtt vesznek részt a kémiai kötésekben (pl. a szén egyszerű vegyületeiben), akkor a tér egyenletesen elosztott négy irányába mutatnak a vegyértékek, és tetraéderes atomelrendezés alakul ki. Ha több atom vagy atomcsoport kapcsolódik egymáshoz, akkor ezek többékevésbé megváltoztatják a vegyértékek irányultságát.

A kovalens kötést létrehozó elektronok okozta töltéeloszlás határozott irányú maximumai, vagyis a kovalens vegyértékek térbeli irányított mivolta az oka annak, hogy a kovalens kötésű molekulák sokféle alakúak. Ennek nagy szerepe van a vegyületek rendkívül sokféle és differenciált sajátágaiban. A molekulák térbeli alakjának a sajátágokkal való összefüggéseivel foglalkozik a sztereokémia.

A kovalens kötések ugyan nem merevek, hanem bizonyos mértékig elhajlíthatók és nyújthatók (ezért rezeghetnek a kovalens kötéssel összekapcsolt atomok), de a kovalens kötéssel összekapcsolt atomok kölcsönös elhelyezkedése nagy mértékben és tartósan csak a kémiai kötések elszakadása révén változtatható meg. Ezért merevek, illetve nem sajtolhatók, nem hengerelhetők, kalapálással nem alakíthatók a térbeli kötéshálózatú szerves anyagok (pl. a bakelit és számos más műanyag). A hosszú atomláncokat tartalmazó makromolekulákból álló anyagok nyújthatók, ill. hajlíthatók (pl. a kaucsuk, a PVC), de tartós alakításuk csak kovalens kötések elszaká-

tása (vagy új kötések létesítése) által lehetséges, ami nagy energiát igényel (pl. magas hőmérsékletre hevítést).

A kémiai kötések harmadik fő csoportját a *fémek kötése* alkotja. Szilárd és cseppfolyós állapotban a fématomokról az ionkötéshez hasonlóan leszakadnak a külső elektronok, de — az ionkötéssel ellentétben — nem csatlakoznak más atomhoz, hanem a pozitív fémionok között többé-kevésbé szabadon mozogva (mintegy elektrongázt képezve) tartják össze a fématomokat. A fémek kötése szerint bizonyos mértékben hasonlít az ionkötéshez, de egyben a kovalens kötéshez is, mert több atomtörzshöz kollektíve tartozó elektronok valósítják meg, de nem lokalizálva. A külső elektronok leszakadása után visszamaradó ionok többé-kevésbé gömbszimmetrikusak, kötései csak kevésbé irányítottak. Ezért alakíthatók a fémek tartósan pl. hengerléssel, sajtolással vagy kalapálással. E műveletek közben a fémionok mintegy elgördülnek egymáson, és kölcsönös helyzetük viszonylag nagy mértékű megváltozásának a hatására sem szakadnak meg a kapcsolataik. A fémek kötése sokkal kevésbé változatos, mint a kovalens kötés, és csak fématomok között valósulhat meg.

* * *

A kémiai kötés fő típusai idealizált határesetek, a valóság többé-kevésbé úgyszólván mindig eltér tőlük.

Az ideális ionkötésben két gömbszimmetrikus ion kapcsolódnék össze. Leginkább megközelíti ezt a határesetet a két legkisebb ionból álló vegyület, a LiF. Kis mértékben azonban ebben a vegyületben is — és még inkább a többiben — a pozitív ion a körülményektől függő mértékben maga felé vonzza a negatív ion külső elektronjait, a negatív ion pedig taszítja a pozitív ion külső elektronjait, ami által eltorzul, deformálódik mindkét ion gömbszimmetriája. Más szóval ionkötések esetében sem teljesen igaz az, hogy a kémiai kötés létesítő elektronok csak egy atomtörzshöz kapcsolódnak, hanem a külső héj elektronjai többé-kevésbé mindkét atomtörzs hatásának ki vannak téve. Mivel a kovalens kötés jellemzi az, hogy két vagy több atomtörzs együttes hatásának kitett elektronok valósítják meg, az előbb vázolt tényt úgy is kifejezhetjük, hogy az ionkötésnek a valóságban mindig van kovalens jellege is.

Másrészt viszont a kovalens kötésnek többnyire van ionos jellege is. A kötő elektronok ui. többnyire nem egyenletesen oszlanak el az összekapcsolt atomok között, ezért az egyik atomtörzs körül pozitív, a másik körül negatív töltésfelesleg („parciális töltés”) alakul ki, amelyek elektrosztatikus vonzása is hozzájárul a kémiai kötéshez. Ez pedig az ionkötésre jellemző.

A kémiai kötés némely tulajdonsága alapján meg is becsülhető az ionkötésben a kovalens hányad, a kovalens kötésben pedig az ionos részesedés.

* * *

Az a megállapítás, hogy egy-egy vegyértékvonallal jelképezett kovalens kémiai kötés egy

elektronpár létesít, több vonatkozásban csupán nagyon durva megközelítése a valóságnak, sőt sok esetben még közelítésként sem fogadható el. Elég helyütt csak néhány bonyolító tényezőre rámutatni a sok közül.

Igaz ugyan, hogy gyakran domináló a kémiai kötésben a két atomtörzset összekötő elektronpár (a kétcentrumos kötés), a valóságban azonban azok az atomok is hatnak egymásra, amelyek nincsenek ily módon összekapcsolva. Az ilyen általánosabb kölcsönhatások is befolyásolják a sajátosságokat, és módosítják a közvetlen kötéseket. A kémiai individuumokban tehát figyelembe kell venni az atomok közötti általános kölcsönhatásokat, aminek következménye az, hogy a molekula, ill. makromolekula viszonylag egységes anyagi rendszer, amelynek sajátosságait összes atomjainak összes kölcsönhatásai szabják meg. Sok esetben ill. némely vonatkozásban bizonyos kölcsönhatások dominálók lehetnek (ezeket jelezzük vegyértékvonallakkal), mások viszont alárendeltebbek.

De ez nem is mindig ill. minden vonatkozásban van így. Főleg sokszor nem is helytálló az a nézet, hogy a kötő elektronok két atommaghoz tartoznak. Számos nagy jelentőségű vegyületcsoport van, amelyekben több atom kölcsönhatása oly mértékű, hogy a kötő elektronok kettőnél több atomtörzshöz tartoznak egyenlő mértékben (többcentrumos kötés). Ilyenek egyebek között a benzol összes származékai, az élővilágban oly fontos aromás vegyületek. A benzol, C_6H_6 , molekulájában a hat szénatom gyűrűt alkot, amelyben egyrészt két-két szomszédos szénatomot egy-egy elektronpár köt össze, másrészt hat elektron (az ún. π -elektronok) egyenletesen veszik körül mind a hat szénatomot, és egységes elektronburkot alakítanak ki az egész molekula körül. Képletesen úgy is kifejezhető ez, hogy a hat π -elektron az egész molekulát átfogó molekulapályákon mozog. Ezekről az elektronektól, ill. az általuk létesített egységes burkotól erednek a benzolnak és származékainak a jellemző specifikus tulajdonságai, amelyek a klasszikus vegyértékelmélet alapján sem érthetők.

Többcentrumos kötés, ill. egységes elektronburok több atomból összetevődő csoport körül nemcsak a szerves vegyületek körében elterjedt, hanem a szervesetlen vegyületek körében is. Pl. a szulfátiont, SO_4^{2-} , is egységes elektronburok veszi körül, aminek következtében a négy oxigénatom egyenlően kötődik a centrális kénatomhoz. Tévesnek bizonyult tehát a régi vegyértékelméletből származó azon kép, amely szerint a szulfátionban két oxigénatom kettős kötéssel, a másik két oxigénatom viszont egyszeres kötéssel kapcsolódik a kénatomhoz.

* * *

Messze vezetne a kémiai individuumokban működő kölcsönhatások további részletezése. Tudomásul kell vennünk azt a tényt, hogy a kémiai individuumokban az atomok közötti kölcsönhatás általános. Egyesek közülük dominálhatnak, mások esetleg kevésbé feltűnőek, de a

valóságban az összes kölcsönhatások együttesen alakítják ki a kémiai sajátságok azon rendkívüli változatosságát, individualitását, finoman differenciáltságát, amivel a beláthatatlanul sokrétű, sokoldalú és sokszínű élettelen és élő természetben, valamint a mesterségesen előállított anyagok körében találkozunk.

A vegyértékvonalakkal felírt klasszikus szerkezeti képletek mindezt a sok finomságot figyelmen kívül hagyják, és csak a domináns — vagy dominánsnak vélt — kölcsönhatásokat vázolják. Ezért a szerkezeti képletek csak nagyon egyszerűsítve, sematizálva tükrözik a kémiai sajátságokat, sőt sok esetben téves következtetésekre is vezetnek.

Ez még ismeretelméleti zavarokra is okot adhat. Abból ui., hogy a primitív módon felírt szerkezeti képletek sok esetben nem adnak számot a vegyületek sajátságainak a részleteiről, egyesek arra következtetnek, hogy a molekulák szerkezete nem ismerhető meg. Ez az idealista nézet azonban alaptalan. A modern kémia sokféle fizikai módszer és korszerű műszer segítségével napról napra pontosabban ismeri meg kvantitatíve is a kémiai individuumok valódi szerkezetét, és értelmezi ennek alapján a kémiai anyagok sajátságait részleteikben is mind hívebben.

A rendkívül sematizált *vegyértékvonal használata*, a szerkezeti képletek hagyományos írásmódja tk. már régen *idejét múlt*. A vegyértékvonalak szinte minden esetben mást jelentenek. A kötő elektronoknak pontokkal való jelképezése, ill. az elektronburkot mechanikusan ábrázoló kalotta modellek sokat segítenek, de még ezek sem olyan képei a valóságnak, amelyek kielégítenék a mai igényeket. Korszerű új szimbolika kidolgozására történtek kísérletek, eddig azonban egyik sem vezetett általánosan elfogadható eredményekre.

* * *

Végezetül figyelmet érdemel még egy megjegyzés. Tudomásul véve a kémiai individuumok atomjainak általános kölcsönhatásait, indokolt a kérdés, miként adódik a klasszikus kémiának két egyszerű alaptétele: *a vegyértékek egészszámúsága és telíthetősége*. Noha ma már tudjuk, hogy e tételek is csak közelítőek, de első közelítésben mégis érvényesek.

A vegyértékek egészszámúsága és telíthetősége a kvantumelmélet alapján magyarázható. Egy atomhoz normális körülmények között csak annyi elektronpár kapcsolódhat, amennyi alapállapotban az n , l és m kvantumszámok által jellemzett kvantumállapotok (energiaszintek) száma a külső héjban. Ez pedig az atom rendszámától (megtöltésétől) függő egész szám. Tehát egy atomhoz csak egészszámú elektronpár kapcsolódhat. Ha a külső héj valamennyi kvantumállapota igénybe van véve (vagyis be van töltve elektronokkal, amelyek egy része több atomhoz is tartozhat), akkor további elektronok már nem létesíthetnek kémiai kötést, ilyen körülmények

között további vegyértékkapcsolatok már nem valósulhatnak meg: bekövetkezik a kémiai telítettség. A vegyértékek egészszámúsága és telíthetősége eszerint a kvantumállapotok egészszámmal jellemezhető diszkrét voltából következik.

Nem hagyható azonban figyelmen kívül, hogy az egészszámúság és a telíthetőség csak közelítőleg érvényes. Atomok, ill. molekulák ui. nemcsak a klasszikus értelemben vett vegyértékkötésekkel (vagyis egyik atomról, ill. atomcsoportról a másikra részben vagy egészen átmenő elektronok által) kapcsolódhatnak egymáshoz. Pl. poláris molekulák dipólusainak egymásra vagy ionokra kifejtett hatása, továbbá nempoláris molekulák kölcsönös deformációja folytán keletkezett dipólusok hatása is előidézhetheti két vagy több — közönséges értelemben telített — kémiai individuum összekapcsolódását. Az ilyenféle ún. *van der Waals-féle erők* okozta kapcsolatok azonban általában sokkal lazábbak, mint a szoros értelemben vett kémiai kötések. A klasszikus vegyértéken túlmenő különleges kémiai kötések létesíthet a hidrogén is, amelynek atomjai — a korábbi nézetekkel ellentétben — nemcsak egy, hanem két más atommal kapcsolódhatnak. A második kapcsolat (az ún. *hidrogénkötés* vagy hidrogénhid) ugyan sokkal gyengébb, mint az első (a klasszikus vegyértéknek megfelelő), mégis igen nagy szerepe van az élettelen és élő természetben egyaránt.

* * *

Egy előadásban (még ha hosszúra nyúlik is) a kémiai szerkezetre vonatkozó korszerű nézeteknek csak néhány vonásáról lehet szó. Azt hiszem, az általános és középiskolai oktatásban sem lenne helyes túlságosan elmélyedni a részletekben. Inkább a korszerű szemlélet kialakítására kellene törekedni.

Ehhez kívántam némi segítséget adni azzal, hogy a korszerű szemléletnek a hagyományostól eltérő néhány vonásáról szoltam.

РЕЗЮМЕ

После определения понятия химической структуры и содержания дисциплины химии автором подробно обсуждена химическая структура. На примерах наглядно показаны основные типы химических связей. Обращается внимание и на то, что свойства молекулы определены взаимодействием всех ее атомов. Наконец подчеркивается автором, что при обучении химии в общей и средней школах не правильно слишком глубоко входить в подробности, а лучше стремиться к созданию современного взгляда.

SUMMARY

After defining the concept of structure and topics of chemistry the chemical structure itself is described in details. The main types of the chemical bonds are presented by illustrative examples. Attention is called on the fact that the properties of a molecule are determined by the interaction of all of its constituent atoms. Finally, it is emphasized, that in the basic and high schools it is not proper to go into details but an effort has to be made for developing an up-to-date aspect.