

Schiller Róbert

## Te miért gondold, hogy vannak molekulák? Meg atomok is?

Elnézést a tegező megszólításért a címben – arra kívánnék csak utalni ezzel, hogy középiskolásoknak beszéltem erről, és nagyjából abban a szellemben, ahogy az a továbbiakban olvasható. Azt ugyanis föltettem, hogy minden diák tudja, egy vegyület valamekkora adagja – egy pohár víz vagy egy cukorkristály – nagyon sok egyforma molekula sokaságából áll. Ahogyan azt is, hogy az elemek meg atomjaik sokaságából állnak. A vegyületeket pedig elemek, tehát a molekulákat atomok építik föl. Ezzel a nagyon természetesen tartott ismerettel kapcsolatban akartam kétségeket ébreszteni az ifjú hallgatókban. Persze nem úgy, hogy végül az derüljön ki, tévedés az egész. Azt igyekeztem csak megmutatni, hogy okos kémiai kísérletek hogyan sugallták, kiváló elmék miért vonták kétségbe, nagyszerű fizikai elméletek, mérések és számítások hogyan bizonyították vagy éppen mennyiben cáfolták, majd hogyan tették teljesebbé, máshonnan származó ismeretekkel összhangzóvá azt, amit ma atomokról, molekulákról tudunk, gondolunk. Amiből persze egyebek mellett az is nyilvánvaló, hogy nem vagyunk az út végén – az ilyen útnak ugyanis nincsen vége.



*Epikurosz, aki szerint csak atomok vannak és az űr.*



*Parmenidész, aki szerint nincsen űr*



*Robert Boyle a fizikai kémia atyja*

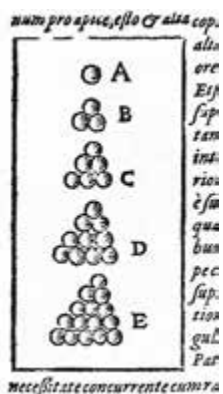
A történetet, tudjuk jól, a görögök kezdték. *Epikurosz*, aki szerint a világot a mindig létezett, soha nem keletkező, el soha nem pusztuló atomok alkotják – nincsen más, csak atomok és közöttük az űr. Ahogyan a római költő, *Lucretius* fogalmazta (Tóth Béla fordítása): *Nincsen azonban a mindenség teletömve anyaggal, / Mert hisz üresség is van mindenben, mit a szem lát.* Ez a mondás más görögök véleményével szállt vitába, azokéval, akik azt mondták, hogy űr nem létezik, hiszen azt el se lehet gondolni. Ezen a módon, a kísérletezés gondolata nélkül, legfeljebb véletlen megfigyelésekre hagyatkozva, pusztán töprenkedés útján nyilván nem lehetett eldönteni a kérdést. *De föltenni a kérdést, érvelni mellette és ellene* nagyon is lehetett.

A középkort szemmel láthatóan nem nagyon érdekelte az anyag szerkezete. Sokkal szellemibb: teológiai és filozófiai problémákat, vagy ellenkezőleg, közvetlen gyakorlati feladatokat akartak megoldani. A kérdés csak a XVI. században került elő újra. Ez *Huygens* és *Newton* ideje, amikor megszületett a mechanika tudománya, fellépett a természet leírásában a szigorú matematikai gondolkodás igénye. *Robert Boyle*, akit joggal tekintünk a fizikai kémia atyjának, természetesnek tartotta, hogy a születő mechanika elveit alkalmazza a kémia jelenségeire. Mechanikán akkor a testek mozgására vonatkozó tudományt értettek. Milyen testekre gondolhatott a vegyész? Neki a testek belsejében lejátszódó folyamatokra kell magyarázatot találnia. Boyle ezt írta: „*A korpuszkuláris [vagyis] mechanikai filozófia [célja, hogy] kísérletek segítségével tegyem valószínűvé, lehetséges-e az, hogy szinte minden minőséget mechanikai úton hozzunk létre – úgy érve, hogy másra ehhez nincsen szükség, mint az anyag saját részeinek mozgására, méretére, alakjára és szerkezetére.*”

Az anyag saját részei – felújította ezzel a programmal Boyle az atomelméletet? Vagy még inkább: megalapozta mai felfogásunkat? Nem hinném; nincsen itt szó oszthatatlanságról, állandóságról, átalakulásról vagy át nem alakulásról, még a részek összetételéről se beszél. Mindössze az a célja, hogy a mechanika frissen felismert törvényeit és módszereit alkalmazza, hogy megmutassa, jó dolog a mechanika a vegyésznek is, már amennyiben léteznek ilyen apró részek.

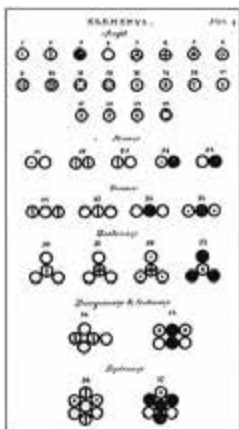
Hogy léteznek-e, csak *sejteni* lehetett ebben a korban; sejtésen azt érteve, hogy vannak olyan megfigyelések vagy kísérletek, amelyeket

könnyebb értelmezni, ha léteznek atomok, mint úgy, ha tagadjuk a létezésüket. *Kepler* egy téli napon a prágai Károly-hídon sétálva észrevette, hogy ugyan nincsen két egyforma hópehely, de mindegyikük hatos szimmetriájú (van egy tengely, amely körül forgatva a kristályt, minden  $60^\circ$ -os elfordítás után ugyanazt a képet látjuk). Hogyan lehet ezt megérteni? Például úgy, hogy *feltesszük*, a víz kis gömbökből áll. Ha ezeket szorosan egymás mellé illesztjük, hatszöges szimmetriájú testet nyerünk. *Kepler* erről egy rövid tanulmányt írt, ezt adta egy barátjának újévi ajándéknak. Bőkezű barát volt.



Egy ábra *Kepler* tanulmányából a hókristályok atomi felépítéséről

Ebben az időben azonban a fizikának nincsenek, és még a rákövetkező században sem lesznek módszerei az atomok, molekulák létének bizonyítására. Az atomelmélet a vegyészek kezébe került. A vegyületek tömegének és térfogatának viszonyait vizsgálták, és megbűvölte őket, hogy kis egész számokra találtak. Hogy a szén-dioxidban pontosan kétszer nagyobb az oxigén tömege a szén tömegéhez viszonyítva, mint a szén-monoxidban; vagy, hogy a hidrogén-peroxidban fele olyan tömegű hidrogén van az oxigén tömegéhez képest, mint a vízben. *Dalton*, aki természetesnek tartotta az atomok létezését, örömmel magyarázta ezeket a megfigyeléseket azzal a *feltevéssel*, hogy a vegyületek részecskéit egymáshoz kapcsolódó atomi golyócskák alkotják.



Egy lap Dalton könyvéből – atomokból molekulák

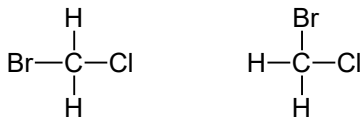
Hasonló eredményre jutott *Avogadro* a reagáló gázok térfogatával kapcsolatban. Ő azt vette észre, hogy például egy térfogatrész oxigénből és két térfogatrész hidrogénből két térfogatrész víz keletkezik; meg hogy egy térfogatrész klórgáz és egy térfogatrész hidrogéngáz két térfogatrész sósavgázzá egyesül. Ilyen eredmények birtokában joggal *hihetette*, hogy minden gáz móltömegnyi mennyiségében ugyanannyi részecske van.

A vegyészek szorgalma és kísérletező kedve egyre több fogalmat tisztázott. Megszületett a vegyérték fogalma, kiderült például, hogy a szénnek négy vegyértéke van (vagyis négy hidrogénatomot tud megkötni), és az is, hogy ezek a vegyértékek mindenben egyformák. Könnyű volt ezért a metánmolekulát ilyen alakúnak *képzeln*.

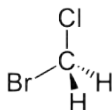


Metánmolekula modellje a XIX. század közepéről

Könnyű volt, tévedés volt. Ha helyes lett volna, úgy például a  $\text{CH}_2\text{ClBr}$  összetételű klór-bróm-metánnak két változata (későbbi szóval két izomerje) léteznék. Ez a kettő:



De ennek a vegyületnek nem ismerjük két izomerjét. Úgy látszik ebből, helytelen volt a fenti modell. Nem síkban kell elgondolni a négy vegyértéket, hanem úgy, hogy azok egy tetraéder csúcsai felé mutatnak. Ilyennek kell ez a vegyület gondolni:



Ez az *elképzelés* már összhangban áll azzal, hogy a  $\text{CH}_2\text{ClBr}$  tapasztalati képletnek csak egyetlen atomi elrendezés, egyetlen izomer felel meg.

A szénatom vegyértékeinek ez a geometriája, a tetraédes modell, *Le Bel* és *van't Hoff* eszméje, nagyon termékenynek bizonyult. A szerves vegyületek felépítését ilyennek gondoljuk, sok észleletet lehet megmagyarázni a segítségével. Nemcsak azt, ha kevesebb izomert találunk, mint a síkbeli elrendezés alapján várnánk, azt is, ha többet. Az optikai izoméria esetére gondolunk itt; erről a nagyon fontos területről azonban nem írunk most.

Mindezek alapján ilyen kézbe vehető, forgatható, nézegethető modelleket szoktak készíteni a kémia XIX. századi klasszikusainak a nyomán.



*Molekulamodell*

A különböző színű golyók különböző atomfajtákat jelölnek (ezen az ábrán a szén fekete, a hidrogén fehér, az oxigén piros, a nitrogén kék), a kémiai kötések pedig a sötét pácák vagy ívek jelenítik meg. Szép, szemléletes ez a módszer. Sok mindent meg lehet érteni a segítségével. Éppen csak azt nem bizonyítottuk eddig, hogy igazak azok a sejtések, amelyeken alapszik.

Nagyon sok ellenzője volt annak a felfogásnak, amit ez a modell kifejez, már a kezdetek kezdetén is. Nem is akárcik voltak ellene. A leghatározottabban egy oxfordi kémiaprofesszor, *John C. Brodie* kelt ki magából. Azt írta: „Az atomelmélet teljességgel materialista asztalosmunka.” (Ez a szó akkor erős sértésnek számított.) Látott ugyanis egy olyanfajta modellt, mint a fenti, és mérhetetlenül felháborította, hogy ilyen, fagolyókból és drótokból összegányolt tákolmányról kelljen azt hinnie, ez minden kémia alapja. *Faraday* véleménye se volt jobb: szerinte Dalton elmélete nagyon ügyetlen hipotézis. És „ő maga már kinőtte az atom fogalmát”. Ezek igényes gondolkodók voltak, és jól tudták, pusztán az, hogy egy modell alkalmas néhány jelenség magyarázatára, még nem bizonyítja, hogy az igaz is.

Ráadásul kezdetben az sem volt egészen világos, hogy mit is jelentenek a szavak. A nagy szerves kémikus, *Kekulé* így kétségeskedik: „Nem állapították meg, hogy az anyagnak az a legkisebb része, amely reakcióba lép, ugyanaz, mint az anyagnak az a legkisebb része, amely a hőjelenségekben szerepet játszik.” Vagyis nem tudni, vajon vegyészek és fizikusok ugyanarról beszélnek-e, ha azt mondják, atom vagy molekula. Ezt az atomok mozgásának elméletét kidolgozó, a hőjelenségeket így magyarázó nagy teoretikus, *Maxwell* sem tudta biztosan. Óvatosan csak annyit írt: „A matematikai vizsgálatok szempontjából nem lényeges feltételeznünk, hogy a molekulák atomokból állnak.” Ezeket a kétségeket a kémia, a nagy szorgalommal végzett analízisek és szintézisek sokasága eloszlatta. Ettől a fogalmak tisztázódtak ugyan, világosabbá lett, hogy mit állít az atomelmélet. De igazi bizonyítéknak az elmélet még mindig híjával volt.

Igazi bizonyítékra csak *Einstein* talált a múlt század elején. Ha az anyagok valóban atomok, molekulák sokaságából állnak, úgy az anyag állapota, minden tulajdonsága az őt felépítő részecskék tulajdonságainak az átlaga. A nyomás a részecskéknek az edény falára kifejtett átlagos erejéből származik, a hőmérséklet a molekulák energiájának

átlagát méri, a sűrűség azt, hogy egységnyi térfogatban átlagosan mennyi részecskét találunk. Ha ez így van, akkor egyik-másik helyen vagy egyik-másik pillanatban az átlagostól eltérő erőt, energiát, sűrűséget kell tapasztalnunk. Az átlag attól átlag, hogy vannak eltérések tőle. A mérhető mennyiségek az átlagértékük körül ingadoznak, fluktuálnak.

Például kell lennie kisebb meg nagyobb sűrűségű tartományoknak is minden anyagban. Vannak is – ezektől kék az ég. Ezt próbálja meg szemléltetni az alábbi ábra.



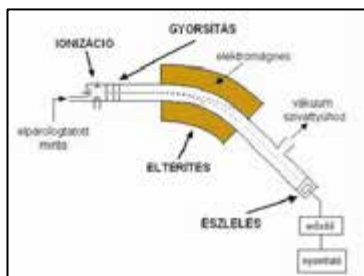
*Különböző színű fénysugarak útja eltérő sűrűségű gázrétegekben*

Különböző sűrűségű gázrétegeken áthaladva, a fénysugár útja megtörik; minél sűrűbb az anyag, annál nagyobb a törési szög. Ez azonban még a szintől, tehát a fény hullámhosszától is függ: a kék fény jobban, a vörös kevésbé törik. Általában, minél rövidebb a hullámhossz, annál nagyobb a törés. Ezt – törési szög, hullámhossz és gázsűrűség összefüggéseit – már régebben is jól ismerték. Amit ezen felül fel kellett ismerni, az az ingadozások törvénye; annak a megjósolása, hogy milyen módon, milyen mértékben tér el a sűrűség az átlagostól, ha a gáz atomos szerkezetű.

Einstein meghatározta az ingadozások törvényét, alkalmazta a fénytörés törvényeit, és ebből meghatározta a sokszorosán megtört, vagyis szóródott fényben a különböző hullámhosszúságú sugarak arányát, egyszerűen szólva a szórt fény színét. Az pedig – tekintetbe véve a levegő tulajdonságait – megegyezett az ég színével. Bizonyítékához ért tehát az ősi sejtés: *az anyag atomos szerkezetű, mert a tulajdonságai ingadoznak; ilyesmire pedig csak részecskék sokasága képes.*

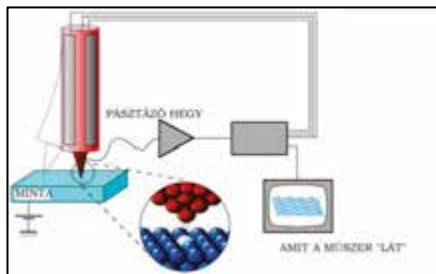
Most már arra is kísérletet tehetek a kutatók, hogy egyesével kézbe vegyék (pontosabban szólva, műszereikkel megragadják) az atomokat.

A tömegspektrométernek nevezett berendezés alkalmas erre. Ebben egy gáz vagy gőz részecskéinek elektromos töltést adnak (ionizálják az atomokat, molekulákat), majd elektromos és mágneses tereken hajtják át az ionokat. A mágneses tér meggömbíti az ionok pályáját, azonban minél nehezebb egy részecske, azt annál nehezebb eltéríteni. A részecske tömegét ki lehet számítani abból, hogy a cső végén melyik pontban észlelik az érkezését. Az így meghatározott tömegek nagyon jól egyeznek azokkal a mennyiségekkel, amelyeket a vegyészek atomsúlyoknak, mólsúlynak neveztek már régtől fogva.



*A mágneses tömegspektrométer vázolata*

Ez megnyugtató és bizonyító erejű tapasztalat. De mindannyiunk természetes és persze naiv törekvése, hogy ne csak következtessünk a létezésére, hanem lássuk is azt a dolgot, amiről beszélünk. Látásról persze erős megszorítással szólhatunk csak. Olyasmit, ami a látható fény hullámhosszánál jóval kisebb, szemmel látni képtelenség. Hagyományos optikai mikroszkópjaink nagyításának is ez szab határt. De mégis, próbáljunk csak valamit! Nézzük meg a pásztázó alagút mikroszkóp nevű műszer vázlatát!

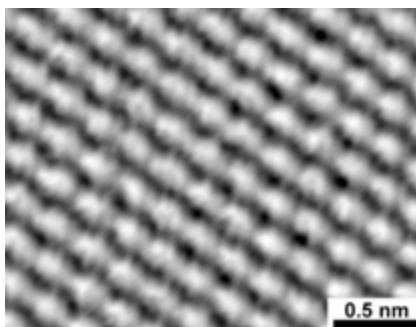


*Pásztázó alagútmikroszkóp*



A pásztázó hegy valóban nagyon hegyes – leggyakrabban egy wolfram tű, amelyet olyan ügyesen munkálnak meg, kémiai maratással, hogy a legvégére csak egyetlen atom jut. A tűt a vizsgálandó felülethez nagyon közel viszik – ügyelnek arra, hogy hozzá ne érjen, de elég kicsi legyen ahhoz a távolság, hogy a felületről a tűre elektronok léphessenek át. Alagúteffektusnak hívják azt a folyamatot, amelynek jóvoltából az elektronok átjutnak a tűre. (Ezt már nem magyarázzuk meg itt. Tessék az Internethez vagy könyvekhez folyamodni ebben a kérdésben is, akár csak a többiben, amelyet csak megemlítettünk az előzőekben, anélkül, hogy becsületesen elmagyaráztuk volna, miről van szó.)

Minél közelebb van egymáshoz tű és felület, annál nagyobb az elektronok árama. Mivel a tű hegye atomi méretű, ezért a felület atomi méretű hegyeit-völgyeit tudja feltérképezni, ahogyan végigpásztázza a mintát. A műszer végül ilyen ábrát jelenít meg.



*Grafitkristály felületének alagútmikroszkópos képe*

A domborulatok egy-egy szénatomot képeznek le. Az az érzésünk valóban, hogy látjuk a grafit felületét felépítő atomokat. Azért óvatosan örüljünk csak! Gondoljuk csak el, mennyi bonyolult fizikai jelenség, mennyi elektronikus lelemény kell ahhoz, hogy létrejöjjön az, amit végül itt látunk. Az atomok itt sem lesznek szemmel láthatóvá.

Röviden tekintsük át, miről is írtunk!

- Az antik természetvizsgálók feltették a kérdést: vannak-e atomok. Szerencsére nem találtak rá egyértelmű választ, ezért évszázadokra való gondolkodni- és kutathatóságot hagytak utódaikra.
- Boyle arra törekedett, hogy a mechanikát tegye a kémia alapjává.

- Dalton, Avogadro és utódaik úgy látták, jól meg lehet érteni a kémiai jelenségek egy részét, ha felteszik, léteznek atomok.
- Az első bizonyítékot a létükre az ingadozási jelenségek segítségével találták; a fényszórással kapcsolatos tapasztalatokat így kell értelmezni.
- Az atomokat, molekulákat egyesével is meg tudták-tudják figyelni, például tömegspektrométer vagy pásztázó alagútmikroszkóp segítségével.

Végigtekintve ezen az úton, szinte azt mondhatjuk, a kételyek legalább annyival vitték előre a megismerést, mint a bizonyítékok.

Ezzel mindent tudunk, mindent elmondtunk az atomokról, molekulákról? Ez a kutatása befejeződött? Világos, hogy ez nincsen így. Az atomokat összetartó erőről helyes fogalmaink csak a múlt század húszas évei óta lehetnek, amikor a fizikusok megalkották a kvantummechanika elméletét. Ezek az ismeretek még ma is gyarapodnak, mélyülnek. Aztán milyen szerepe van a molekulák keletkezésében és tulajdonságaiban a térbeli szerkezetnek? (A tavalyi kémiai Nobel-díj ép ilyen eredményeket ismert el.) Milyen erők hatnak a molekulák között? Hogyan épülnek fel belőlük a folyadékok, kristályok? Mi történik a molekulákkal a kémiai átalakulások alatt? A válaszokat rendre megtalálják a kutatók. A kérdések azonban, úgy látszik, a válaszoknál gyorsabban szaporodnak.