

A tetraéderes szén atom és a kovalens kötés.

1879-ben van't Hoff az optikai izomérek megmagyarázása céljából a szén atom modelljeül a szabályos tetraédert választotta. Ennek az elképzelésnek megfelelően a szén atom egy tetraéder középpontjában foglal helyet s vegyértékei a tetraéder csúcsai felé irányulnak. Ezzel a modellel az optikai aktivitással kapcsolatos minden jelenség magyarázható volt, úgyhogy a tetraéderes szén atom valósággal az organikus kémia alapja lett. A legújabb vizsgálati módszerek is, mint Röntgen sugár vizsgálatok és elektron diffrakciós kísérletek csak megerősítettek van't Hoff eredeti elgondolását, hogy a szén atom vegyértékei a szabályos tetraédernek megfelelően egymással $109^{\circ}, 28'$ -es szöveget zárnak be.

Az alábbi táblázat néhány szénvegyületben levő kötés szögét mutatja, ahogyan azok az elektron diffrakciós kísérletekből meghatározhatók:

| vegyület | kötés atomjai | kötésszög. |
|-------------------------|---------------|-----------------------------|
| Propan | C— C— C | $111^{\circ} 30'$ |
| CH_2FCl | F— C— Cl | $110^{\circ} \pm 2^{\circ}$ |
| Hexamethylen tetramin | N— C— N | $110^{\circ} \pm 2^{\circ}$ |

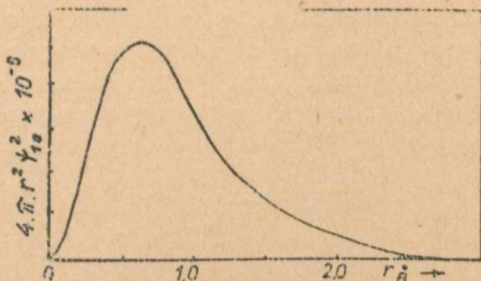
A szén atom Bohr-féle modellje teljesen alkalmatlan volt ilyen irányított kovalens kötések leírására. Annál érdekesebb, hogy a modern kvantum elmélet, különösen annak hullám mechanikának nevezett alakja a szén atom esetében teljesen a van't Hoff által elképzelt modellre vezetett.

A kvantum mechanikában nincsenek elektron pályák, ezek helyébe az „elektron állapot“ lépett. Egy elektron állapotához tartozik egy meghatározott energia és további jellemzéshez egy függvény, Ψ . Ezt hullám függvénynek, saját függvénynek, vagy gyakran amplitudó függvénynek is nevezik. Ez a függvény a koordináták függvénye és egy rezgés amplitudójának térbeli eloszlását adja. A hozzá tartozó energia pedig a rezgés hullámhosszát adja meg. Egy állapot leírásához legtöbbször a saját függvény ismerete elég, a teljes leíráshoz azonban az elektron spinre vonatkozó adat is kell.

A hidrogén atomban a Bohr modell szerint egy elektron kering a mag körül egy $0,529 \text{ \AA}$ sugarú pályán, konstans sebességgel. ($2,182 \times 10^8 \text{ cm/sec.}$) A kvantum mechanikai kép hasonló ehhez csak kevésbé határozott. Az elektron pálya mozgását leíró hullám egyenletnek, $\Psi_{1,s}$ -nek csak a mag közelében

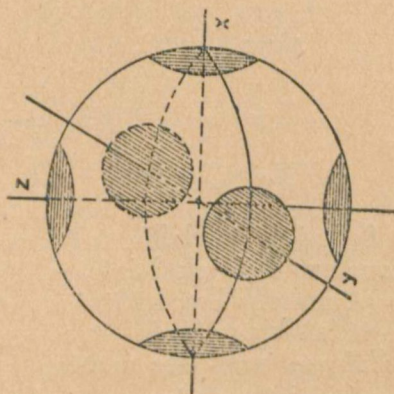
vannak nagy értékei, 1—2 Å-ön túl gyorsan csökken a nullára. Ennek a függvénynek négyzetéből alkotott függvény maximuma éppen a Bohr által adott távolságra van, (1. ábra.) mutatván, hogy az elektron legnagyobb valószínűséggel itt található.

1. ábra.



A valószínűségi függvény lefutása a sugár mentén.

2. ábra.



P elektronok eloszlása sematikusan.

A kvantum mechanikának megfelelően tehát leírhatjuk a hidrogén atómot úgy, hogy egy elektron mozog a mag körül ide s tova — olyan sebességgel, amely átlagban megegyezik a Bohr által előírt sebességgel, — de átlagban 0,5 Å-n belül marad. Ha elég időt engedünk az elektronnak a mag körüli keringésre, akkor úgy képzelhető el a hidrogén atom, mint egy mag, amelyet gömbszimmetrikusan negatív elektromosság vesz körül.

Általában az *s* elektronok saját függvényei gömbszimmetrikusak. (Egy atom *s* termjein levő elektronokat nevezzük *s* elektronnak). A *p* elektronok esetében a töltéseloszlás már nem ilyen gömbszimmetrikus. Ezek eloszlására jellemző, hogy azok három egymásra merőleges tengely irányában helyezkednek el.

A 2. ábra durván és csupán sematikusan mutatja hat p elektronnak a mag körüli eloszlását.

Ismeretes, hogy a kvantum mechanika milyen tökéletes diadalt aratott az atom energia állapotainak és a spectrumvonalak létrejöttének leírásában. Hogy a kémiai kötés is leírható segítségével, azt először Heitler és London mutatták meg 1927-ben. Azóta különösen Pauling, majd Hückel vizsgálatai nyomán a kémiában is mind nagyobb tért hódít a kvantum mechanika. 1927 előtt a kovalens kötésnek kielégítő magyarázata nem volt. Lewisnak az a föltevése, hogy két elektron ad egy kovalens kötet, nem nagyon volt fejlődésnek nevezhető, minthogy nem adott feleletet arra, hogy mi az összekapcsolódás lényege és mi a kötés energiájának forrása.

Heitler és London mutattak rá, hogy két egymáshoz közelített neutrális hidrogén atom között a hullám mechanika szerint föllépnek olyan erők, melyek felelősek a hidrogén molekulában levő kötési energiáért. A kötés az úgynevezett kvantum mechanikai rezonancia eredménye, ami a két elektron fölcserelehetőségéből következik, a kötés lényege pedig az, hogy két elektron ellentétes spinnel kapcsolódik.

Komplikáltabb összetételű molekulák esetében a számolási nehézségek már olyan nagyok, hogy itt a kovalens kötés leírása csak megközelítő megoldásokkal sikerül.

Heitler és London által követett módszert Slater és Pauling fejlesztették tovább komplikált molekulákra alkalmazva. Ennek megfelelően a kovalens kötésben az atomnak csak stabilis pályákat leíró saját függvénnyel bíró elektronjai vehetnek részt. Hidrogén esetében ilyen az $1s$ termen levő elektron, a periódusos rendszer első sorában pedig a $2s$ és $2p$ termeken levő elektronok. Minthogy a saját függvény vonatkozásban van azzal a valószínűséggel, hogy az elektront egy bizonyos pontban találjuk, föltételezték, hogy a kötés éppen abban az irányban jön létre, amelyikben legnagyobb a valószínűsége, hogy az elektron található. Az s elektronok által létre hozott kötésnek tehát nincs irányítottsága, míg a p elektronokkal létrejött kötések három egymásra merőleges tengely irányába mutatnak.

A szén atom normál konfigurációjának ($2s^2 2p^2$) megfelelő állapotában az L héjban két ellentétes spinnel összekapcsolt s elektront tartalmaz. E szerint a szén atom két kovalens kötés létrehozásában tudna részt venni. Ez azonban csak nagyon ritkán fordul elő. Valójában, mielőtt a szén atom kötésben részt venne előbb „gerjesztett” állapotba kerül. Ebben az állapotban négy azonos irányítottsággal, bíró elektront tartalmaz, mégpedig egy s és három p elektront.

Azt gondolhatná az ember, hogy egy ilyen szén atom három p elektronjával — három egymásra merőleges kötetet és az s

elektronnak megfelelően egy negyediket képezhet valamilyen más irányban.

Pauling vizsgálatai arra vezettek, hogy a szén atom által alkotott négy kötés akkor a legerősebb, ha elektronjai nem jellegüknek megfelelően vesznek részt a kötés kialakításában, hanem előbb összekeverednek és négy új, kevert jellegű elektront alkotnak. Ennek az összekeveredésnek vagyis hybrid képzésnek a feltételezése arra a meglepő eredményre vezetett, hogy négy ilyen módon keletkezett hybrid-elektron legerősebb kötésekkel a szabályos tetraéder csúcsainak megfelelő irányban tud kialakítani. A kötések közötti szög a számítások szerint $109^{\circ} 28'$, ami tökéletesen azonos azzal a szöggel, amelyet van't Hoff tételezett föl a szén atom vegyértékei között.

Nem lesz talán érdektelen rámutatni, hogy a szilárd anyagok modern kvantum elmélete a gyémánt kristály leírása kapcsán megerősíti Pauling föltevését a szén atom s és p elektronjainak hybridizációjáról.

A szilárd anyagok, említett elméletének megfelelően egy periodikus szabályszerűséggel felépített szilárd anyagban az elektronok nem tartoznak egy meghatározott atomhoz, hanem az egész kristályhoz. Úgy képzelhető el, hogy az atom individuális energia nívói (termjei) sok egymáshoz közelhozott atom esetében szorosan egymás mellé helyezett energia nívókat adnak. Más szóval az individuális atom termek a szilárd anyagban mintegy folytonos sávvá szélesednek ki. Annak megfelelően, hogy ezek a sávok a Pauli principiumnak megfelelően teljesen be vannak-e töltve elektronokkal, vagy nem, az anyagnak az elektromosság vezetése szempontjából nem fémes, illetőleg fémes tulajdonságai lesznek. Némely egyszerűbb szilárd anyag esetében ezeknek a sávoknak kialakulása visszafelé követhető az eredeti individuális atom termekig. A 3. ábrán látható, hogy a szerint, ahogyan az atomokat jobban és jobban távolítjuk egymástól, ezek a sávok vékonyodnak, míg végül nagy távolságban egészen az eredeti atomtermeket adják.

Ennek az új elméletnek a gyémántra való alkalmazása Kimball-tól származik. A gyémántban a szén atom konfigurációjának megfelelően ($2s^2 2p^2$) atomonként négy és kristály egységenként nyolc elektron van. Hasonlóképpen egy egységben két $2s$ term és hat $2p$ term van. Ezek a termek a gyémánt struktúrának megfelelően, amint az atomok egymáshoz közelednek, sávokká szélesednek ki. A 3. ábráról is látható, hogy elég nagy távolságnál az s termekből alkotott sáv még el van választva a p termeknek megfelelő sávtól. Ha az atomokat most mind jobban és jobban közelítjük egymáshoz, a két sáv találkozik és összekeveredik, majd további közelítésnél ismét két csoport-

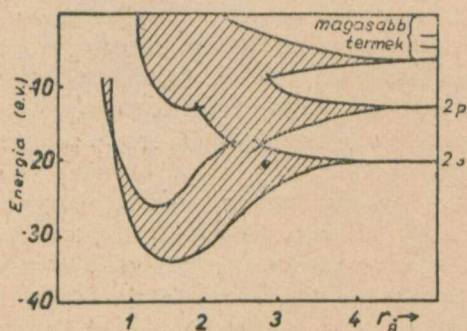
ra bomlik. Most azonban mindegyik csoport az eredeti összekeveredett s és p sávokból alakult ki.

Nyilvánvalóan a rendszernek az lesz a stabilis állapota, mikor egy kristály egység 8 elektronja az ábrán látható alsó sávot népesít be és az atomok olyan távolságra helyezkednek el egymástól, amely távolságnál az alsó, betöltött sávnak éppen minimuma van. (1,42 Å).

Ha a legstabilisabb állapot ott volna, ahol a sávok még nem váltak szét, akkor a gyémánt fémes vezető volna, (minthogy ezt a széles sávot az elektronok már nem tudnák teljesen betölteni). A grafit kristály-rácsában az egyes rétegek 3,69 Å távolságra vannak egymástól. A grafitban tehát lehet egy olyan átlagos távolság az atomok között, ahol a sávok még nem váltak el egymástól, ami megmagyarázza a grafit fémesen vezető tulajdonságát.

Pauling föltételezte, hogy a szénatom s és p elektronjai mint hybrid elektronok vesznek részt a kémiai kötésben. A szilárd anyagok modern elmélete alapján felépített gyémánt modell az s és p termeknek ezt a hibridizálódását egyenesen előírja. A gyémánt kristály elektronokkal benépesített energia sávja ugyanis az atom eredeti s és p termjeiből alakult ki.

3. ábra.



A gyémánt kristály energia-spectrumának kialakulása az atomok közötti távolságnak megfelelően.

Dr. PÓCZA JENŐ:

Az izotopok szétválasztása.

Ha az új fizikai kutatások területét tekintjük, szembeötlő, hogy mennyi kutató foglalkozik az izotop elemek elválasztásával. Alig jelenik meg folyóirat, amelyikben ne lennének erre vonatkozólag eredményt.

Az izotopok olyan elemek, melyek atommagjának töltés-