



KEMIJA U NASTAVI

Uređuje: Nenad Raos

DOI: 10.15255/KUI.2018.035

KUI-27/2018

Stručni rad

Prispjelo 1. srpnja 2018.

Prihvaćeno 15. kolovoza 2018.

Što je atomska orbitala?

M. Grba*

Ovo djelo je dano na korištenje pod
Creative Commons Attribution 4.0
International License



Prva sušačka hrvatska gimnazija u Rijeci, Gajeva 1, 51 000 Rijeka

Sažetak

Pojam *atomske*, odnosno *molekulske orbitale* osnovni je pojam kemije koji svoje potpuno tumačenje dobiva tek u okviru kvantne fizike. *Atomska orbitala* zapravo je pojam izveden iz pojma *valne funkcije* ili *vektora stanja*, koji su stoga prvi objašnjeni, uz primjenu Bornova pravila kao prvog koraka u interpretiranju kvantne mehanike, što znači povezivanju formalizma s tzv. *elementima zbilje*. Kad učenik jednom shvati pojam *valne funkcije*, razumije osnove njezina kolapsa te statistički karakter kvantne teorije pri opisu atomske i subatomske zbilje, bez poteškoća može shvatiti, a i uspješno dalje primjenjivati pojmove *atomska* i *molekulska orbitala* kao i sve koji su s njima povezani. Sve to međutim zahtijeva malo slobodniji pristup kurikulumima kemije, fizike i matematike.

Ključne riječi

Atomska (molekulska) orbitala, valna funkcija, Bornovo pravilo, statistički karakter kvantne teorije

Uvod

Suvremenu kemiju nemoguće je potpuno razumjeti bez razumijevanja pojmova *atomske* i *molekulske orbitale*, koji su preuzeti iz kvantne fizike. Stoga je bez poznavanja osnova kvantne teorije zaista nemoguće pravilno razumjeti kemiju. I već tu i učitelj i učenik nailaze na ozbiljan problem: kako vrlo rano u poučavanju kemije pristupiti tumačenju njezinih osnovnih pojmova, a bez lažnih pojednostavljenja ili spriječiti da se prebrzo odustane i sve ostavi nedorečeno i time stvori još veću zbrku u glavama učenika? Zaista se radi o dvama povezanim problemima: prvi je kako pristupačno četrnaestogodišnjacima ili petnaestogodišnjacima protumačiti osnove kvantne fizike, a drugi kako im približiti matematičke apstrakcije, poput pojma kompleksnog broja, prije nego što to nauče na satovima matematike. Dakako da se sve može odgoditi, kao što se u trenutačno vrijedećem kurikulumu fizike, pa i kemije, i čini, sve do četvrtog razreda gimnazije kad učenici već barataju ne samo prijeko potrebnim matematičkim osnovama već i osnovnim pojmovima i zakonima kvantne fizike. Tada se, dakako, može i dublje ući u pojam *orbitale*, u strukturu periodnog sustava ili u teoriju odbijanja elektronskih parova valentne ljuske – VSEPR (engl. *valence shell electron pair repulsion*). Problem je samo što su učenici praktički već prošli cjelokupno gradivo fizike i kemije, bez prethodnog razumijevanja osnovnih pojmova bilo moderne kemije ili moderne fizike. Ostaje dakle problem kako spojiti nepovezana znanja, premostiti granice mentalne dobi i povezati

naizgled zauvijek odvojene dijelove pojedinih predmetnih kurikula.

Krajnje je neprimjereno da se o atomima na satovima fizike uči opsežnije tek u četvrtom razredu gimnazije,¹ a da, posljedično, tek maturanti, i to ako su maturanti gimnazija, donekle razumiju atomske orbitale. Atomi su osnovni predmet istraživanja fizike i bez njih fizika ne može ništa do kraja objasniti, te odatle proizlazi problematičnost sadašnjeg kurikula fizike. U nastavku je opisan pristup tumačenju atomske i molekulske orbitale koji mogu razumjeti učenici svih razreda srednjih škola u kojima se kemija uči dovoljno iscrpno (nalik gimnazijskom programu).²

Koliko matematike da bi se razumjela kemija?

Da bi se opisali atomi, atomske orbitale, potrebno je prije svega znanje algebre, a ne geometrije. To može isprva djelovati neobično, jer ipak se u konačnici traži vizualizacija nevidljivih čestica materije. Moglo bi se reći da je tu i srž matematičke strane problema: algebra, a ne geometrija! Učitelj to može i sebi i učeniku objasniti na sljedeći način: fizičke veličine kojima se koristimo pri opisu atoma matematičke su funkcije ne realnih brojeva nego brojeva koji su naredni stupanj razvoja pojma *broja* – to su funkcije kompleksnih brojeva.

Kako si predočiti kompleksni broj i može li si tako nešto bez većeg napora predočiti prosječan učenik prvog razre-

* Mr. sc. Marko Grba
e-pošta: marko.grba@skole.hr

da gimnazije? Odgovor je dao još matematičar Gauss, koji je predočivao kompleksne brojeve u obliku $a + bi$, pogodnom za geometrijski prikaz. Naime, ako su a i b realni brojevi, x -os dvodimenzijske Gaussove ravnine bit će realna (i na nju se nanosi dio a u zapisu kompleksnog broja), dok će y -os biti tzv. *imaginarna os* (i na nju se nanosi b u zapisu kompleksnog broja). i je tzv. *imaginarna jedinica* koju se jednostavno uvede kao rješenje jednadžbe $x^2 = -1$, s time da se objasni ima li takva jednadžba rješenje zapravo stvar dogovora matematičara. U skupu realnih brojeva, koji su učenicima već poznati, ta jednadžba nema rješenja, ali ona i slične jednadžbe, općenito mogu imati rješenja. Kao motivaciju učenicima valja odmah dodati da se upravo u atomskoj fizici, kao i kemiji koja se oslanja na tu fiziku, takve jednadžbe, čija su rješenja kompleksni brojevi, pojavljuju kao osnovne jednadžbe. Kompleksne brojeve učenici detaljnije uče već u drugom razredu (svakako gimnazije) te u prvom razredu o toj temi nije potrebno mnogo više reći. Valjalo bi tek objasniti još i pojam *konjugirano-kompleksnog broja* s obzirom na to da je to još jedan od ključnih sastojaka potpunog objašnjenja atomske orbitale.

Valja upozoriti učenike na još neke osobitosti jednadžbi osnovnih zakona kvantne fizike, odnosno kvantne kemije. Ponovno, bez ulaženja u iscrpnu raspravu, treba kazati da te *diferencijalne jednadžbe*, za razliku od *običnih* algebarskih jednadžbi, imaju kao rješenja funkcije, a ne naprosto brojeve, i to funkcije ne nužno realne, nego kompleksne varijable. Promišljenijem učeniku moglo bi već tu pasti na pamet pitanje: “Kako onda mjeriti veličine koje su opisane takvim kompleksnim funkcijama, s obzirom na to da je sve što se mjeri realan broj (zapravo konačna decimalna aproksimacija realnog broja)?” To je jedno od ključnih pitanja u razumijevanju atomske i subatomske zbilje kao i pojma *atomske orbitale*, što treba naglasiti i odgoditi raspravu dok za to ne dođe vrijeme u logičkom izlaganju.

Valja još samo uvesti osnovne pojmove teorije vjerojatnosti i statistike, pa je matematički uvod gotov. Treba naglasiti kako su ti pojmovi općenito korisni za razumijevanje svih problema u znanosti, kako teorijskoj tako i eksperimentalnoj, i zapravo je šteta što se s njima ne kreće i prije u srednjoškolskoj nastavi, jer bez njih učenik ustvari vrlo slabo može razumjeti osnove mjerenja i induktivnog karaktera prirodnih znanosti.

Najlakše je, a i najtočnije za potrebe kvantne fizike ili kemije, vjerojatnost uvesti kao relativnu frekvenciju događaja,³⁻⁴ kao pri ponovljenom bacanju kocke, gdje je vjerojatnost svakog broja $1/6$ ako pokus bacanja ispravne kocke ponovimo dovoljno mnogo puta (tu se *dovoljno mnogo* jednostavno induktivno može definirati kao što više to bolje). Također, valja raspraviti pojam *prostora vjerojatnosti*, s obzirom na to da je to najvažniji sastojak potpunog objašnjenja atomske orbitale, kao prostora svih mogućih događaja, potencijalnih ishoda nekog eksperimenta. Isprva je dovoljno ponovno se pozvati na primjer bacanja kocke ili još jednostavniji primjer bacanja novčića. Oba primjera su i kvantnomehanički relevantni u smislu matematičkog opisa nekih od kvantnih sustava (primjerice spin elektrona opisan je praktički kao i novčić, kao sustav dvaju stanja). Valja naglasiti da se vjerojatnosti u nekom pokusu uvijek zbrajaju do jedinice.

Koja je matematička jednadžba atoma?

U svijetu atoma ne vrijedi drugi Newtonov zakon, pa se ne može jednostavno napisati jednadžbu gibanja elektrona oko jezgre vodika. Zašto je tomu tako, problem je međutim mnogo dublji i zapravo se ne radi o jednom izoliranom pitanju, već o nizu međusobno povezanih i ne do kraja riješenih problema. Ponajprije, ne samo da Newtonova jednadžba gibanja ne vrijedi za atom, već je uopće nemoguć egzaktan prostorno-vremenski opis gibanja čestica u atomskim ili molekulskim sustavima kakav je moguć primjerice za satelite ili planete u Sunčevu sustavu. Opis kojim je u svakom trenutku moguće izračunati, a tada i predvidjeti, položaj i količinu gibanja objekta i to istodobno i jednu i drugu veličinu. Umjesto klasičnog prostorno-vremenskog opisa, atomi i molekule opisani su Schrödingerovom jednadžbom, koja niti opisuje gibanje čestica, niti daje prostorno-vremenski opis sustava, niti je uopće u zbiljskim i realnim varijablama zadanim prostorom i vremenu. Schrödingerova jednadžba ima kao rješenje valne funkcije općenito kompleksne varijable. Prostorne i vremenska koordinata čestice (elektrona) ulaze kao varijable valne funkcije, te stoga nisu neposredno mjerljive niti izračunljive veličine.

Bitno je naglasiti da valna funkcija ne živi u Einsteinovom prostorno-vremenskom kontinuumu niti u Newtonovom (beskrajnom) prostoru i vremenu nego u tzv. *konfiguracijskom prostoru*. Broj dimenzija tog prostora mijenja se s brojem opisanih čestica u sustavu. Dakle riječ je o posve apstraktnom matematičkom prostoru. Dakako da ne treba sve prethodno rečeno tumačiti učenicima na početničkoj razini poučavanja, međutim dio se svakako može ispričati već na početku, tj. svi oni dijelovi za koje se eksplicitno navodi da su za učenike, a ostale dijelove te rasprave moguće je dotaknuti s odabranim učenicima na dodatnoj nastavi i pripremama za natjecanja.

Da stvari budu zanimljivije (ali i gore po svaki pokušaj elementarnog tumačenja), do danas nije posve jasno zašto Newtonova jednadžba ne vrijedi u kvantnoj zbilji. Schrödinger je pak svoju jednadžbu pogodio, a ni do danas je nitko nije formalno izveo iz prvih principa tako da bi se svi složili kako su predloženi principi upravo aksiomi kvantne teorije. Također je dobro znano da je Schrödingerovu jednadžbu analitički moguće jedino riješiti za najjednostavniji od atomskih sustava, atom vodika (i slične jednoelektronske sustave), a da se u svim ostalim slučajevima radi o aproksimacijama za čije računanje najčešće treba moćno računalo. Naposljetku, Schrödingerova jednadžba nije niti jednadžba gibanja elektrona niti strukture atoma, nego bi najpoštenije bilo reći da je to jednadžba atomskih, odnosno molekulskih spektara, ukoliko je primijenjena na atom ili molekulu. Ono što kemičar ili fizičar na kraju proračunava jest spektar, koji onda i eksperimentalno otkriva.

Već u ranoj fazi poučavanja valja posebno naglasiti učenicima da se većina informacija o atomima i molekulama dobiva (danas kao i u početcima atomske fizike) iz njihovih spektara, što će reći energija, time da se vezu energija, koje se na kraju mjere, i valne funkcije može ostaviti nerazjašnjenu bez većeg gubitka. Ili se može tek napomenuti kako postoji matematička veza između tih veličina, čija se priroda djelomično tumači u dijelu ovog teksta o Bornovom pravilu.

Teorijski i eksperimentalni problem kojim se može otpočeti rasprava o prirodi kvantne zbilje i jasno istaknuti ključne razlike klasičnog i kvantnog opisa zbilje jest pitanje gibanja elektrona oko jezgre, što nas izravno uvodi u srž tumačenja strukture atoma, a onda i značenja atomske orbitale. Ukoliko bi elektron mirovao na proizvoljnoj udaljenosti od jezgre (vodika), pao bi na jezgru uslijed elektrostatskog privlačenja s jezgrom. Ukoliko bi se pak gibao po putanji opisanoj bilo kakvom glatkom krivuljom, također bi se naposljetku (spiralno) urušio na jezgru. Zaključak – krajnje paradoksalan: elektron oko jezgre atoma niti smije mirovati niti se smije gibati! To je uistinu izvrstan primjer znanstvenog paradoksa koji nije samo prividan i koji može isprva prouzročiti još veću zbunjenost kod učenika, ali koji, izložen s prethodnim pripremama, pobuđuje osjećaj zaintrigiranosti pa time i većeg oduševljenja za nastavak proučavanja predmeta.

Ne pomaže, naravno, pozivanje na neke elektronske valove, valove elektronske gustoće ili općenito valove materije, jer takvi ne postoje (s obzirom na to da ih niti jedan eksperiment nikad nije otkrio, a da postoji niz teorijskih razloga protiv takvih fizičkih entiteta),⁴ iako je bilo fizičara (pa i među pionirima kvantne teorije) koji su ostali vjerni takvim idejama (de Broglie, Schrödinger, Bohm). Problem kako opisati gibanje elektrona u atomu ostavljen je za sam kraj članka. Na tom stadiju logičkog razvoja ideja potrebnih za opis atoma učenicima se može govoriti i o valno-čestičnom dualizmu, tj. može im se ukazati na to da se sve čestice ponašaju ponekad kao čestice (dakle lokalizirani objekti određene energije i količine gibanja i drugih svojstava), a ponekad kao valovi. Međutim, s obzirom na to da dan-danas postoji više od deset interpretacija kvantne teorije od kojih svaka nudi svoje tumačenje valnog ponašanja kvantnih objekata, ne treba pretjerano ulaziti u detalje.⁵ Prilično iscrpan i učenicima razumljiv osvrt na problem kvantnog dualizma dan je u autorovoj knjizi, gdje se, osim ostaloga, pokazuje kako doktrina valno-čestičnog dualizma nije nikada do kraja ni formalno ni filozofski opravdana, a nije niti prihvaćena u svakoj interpretaciji, dakle nije niti esencijalna za razumijevanje strukture atoma.⁴

Kompleksna valna funkcija i Bornova vjerojatnost

Schrödinger je svoju jednadžbu – temeljnu jednadžbu nerelativističke kvantne teorije – postavio za pretpostavljene valove materije de Broglieja. Rješenje te jednadžbe općenito je kompleksna valna funkcija koju najčešće označujemo s ψ . Kako bi ovaj dio teksta bio matematički formalno točan, sve jednadžbe koje slijede očito su samo za profesore. Jednadžba u slučaju slobodne čestice mase m ograničene na jednu dimenziju, x , i vremenske ovisnosti glasi:

$$i\hbar \frac{\delta \psi}{\delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (1)$$

U slučaju neslobodne čestice i potencijala interakcije V , ista jednadžba glasiće:

$$i\hbar \frac{\delta \psi(\vec{r}, t)}{\delta t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t), \quad (2)$$

gdje je sada \mathbf{r} vektor položaja čestice u tri dimenzije. Separacijom varijabli dobivamo za prostorni dio valne funkcije jednadžbu:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] f(\vec{r}) = E f(\vec{r}), \quad (3)$$

gdje će vrijednosti E biti vlastite vrijednosti energije za česticu kada se uzmu u obzir prikladni rubni uvjeti. \hbar je svuda reducirana Planckova konstanta. Simboli δ , ∂ i ∇ svi stoje za parcijalne derivacije ove ili one vrste, o kojima se detaljnije može naučiti u literaturi.⁹ U svim slučajevima rješenje je valne jednadžbe općenito kompleksna valna funkcija, koju valja interpretirati. U slučaju elektrona uhvaćenog npr. u polje jezgre nekoga atoma dobivamo stojne valove koji predstavljaju niz kvantiziranih vezanih energijskih stanja, tj. njegov diskretni spektar, kao što je to pokazao Schrödinger. Postavlja se samo pitanje odakle doista kvantizacija u atomu, a onda i stabilni atom, ukoliko izmaknemo hipotezu nekakvih valova za koje je jednadžba i postavljena, što zahtijeva odsutnost eksperimentalnih dokaza kao i bitni teorijski razlozi?

O čemu se tu zapravo radi ako ne o valovima? Odgovor bi, ukratko, bio da je jedino u slučaju kompleksne valne funkcije (koja je shvaćena isključivo kao matematička apstrakcija) moguće ispuniti cijeli vjerojatnosni prostor događaja, dok u slučaju realnih ili kakvih drugih brojeva (ispitan je i slučaj kvaterniona) danih funkcija, to nije moguće.⁶ Na neki je način kompleksnost valne funkcije nerazdruživa od Bornove statističke interpretacije prema kojoj je moguće tek poznavati vjerojatnost nalaženja čestice na nekom mjestu u nekom trenutku, ali ne i sa sigurnošću znati da je čestica ovdje i sada. Nažalost, više o fizičkoj interpretaciji valne funkcije nije moguće reći objektivno jer i dalje ne postoji širi konsenzus među fizičarima koja je interpretacija kvantne teorije ispravna.⁴

Max Born prvi je predložio ono što će postati statističkim tumačenjem kvantne teorije, njezinih osnovnih elemenata. Na zamisao da protumači kvadrat (točnije modul) kompleksne valne funkcije kao mjeru statističke vjerojatnosti za nalaženje čestice na nekom mjestu u prostoru, došao je analizirajući procese sudara čestica općenito, imajući na umu da je Einstein na sličan način protumačio intenzitet svjetlosti kao mjeru učestalosti pojave fotona u nekom prostornom elementu.⁷ (Poznato je da je intenzitet svjetlosti razmjern kvadratu amplitude elektromagnetskog vala, tj. valne funkcije koja je rješenje Maxwellovih jednadžbi.)

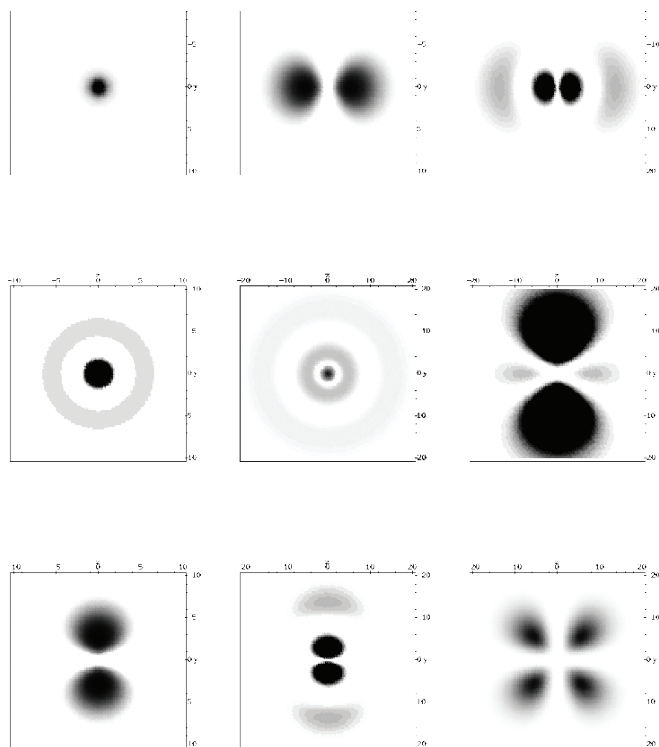
Za svaku valnu funkciju ψ , njezin je modul dan s $\rho = \psi \psi^*$, gdje je ψ^* konjugirano-kompleksna valna funkcija. Ta veličina – tzv. *gustoća vjerojatnosti* – integrirana u odgovarajućem prostoru daje vjerojatnost nalaženja čestice u tom prostoru, ona je pozitivna, realna i mjerljiva. Pomoću Bornova pravila moguće je računati i predvidjeti vrijednosti određene varijable s pripadajućim očekivanjima, tj. dati očekivane vrijednosti varijable, primjerice diskretnoga spektra atoma ili molekule. Učenicima treba kazati da po-

stoji matematičko rješenje problema kvantizacije i nalaženja veličina kojima je opisan atomski ili molekularni sustav, no da je fizička interpretacija i dalje predmet rasprave.*

Što je atomska orbitala i kako izgleda vodikov atom?

Nakon svih priprema, vrijeme je i da se uvede naslovni pojam *atomske orbitale*. To je zapravo tek naziv koji kemičar upotrebljava za valnu funkciju, iako se rabi i kao naziv za kvadrat (modul) valne funkcije koji daje vjerojatnost nalaženja elektrona u tzv. *elektronskom oblaku* oko jezgre atoma.⁹ Slično se definira molekularna orbitala kao zajednička valna funkcija cijele molekule, odnosno zajednički elektronski oblak molekule (slika 1). I tu bi pričali mogli biti kraj da znanstvenika, a može se pretpostaviti i barem darovitog učenika, prirodno ne zanimaju, pored matematičkog opisa atoma i molekula, i fizički atomi i molekule. Naime, i nakon što je riješena Schrödingerova jednadžba, ostaju brojni problemi interpretativne naravi.

Uistinu je naime rješavanjem Schrödingerove jednadžbe, bilo za atom ili molekulu, dano tumačenje – a i ono je parcijalno – tek spektara atoma i molekula. Parcijalno, jer



Slika 1 – Prikaz izbora atomskih orbitala kao dvodimenzijских presjeka trodimenzijске gustoće vjerojatnosti pojedinih stanja atoma

Fig. 1 – A selection of atomic orbitals as two-dimensional cross-sections of three-dimensional probability density of individual atomic states

* Dio ovog poglavlja o Bornovu pravilu u nešto skraćenom obliku već je objavljen.⁸

nije jasno zašto su atomski i molekularni spektri diskretni, a ne kontinuirani poput spektra duginih boja. Bohrova pravila emisije rješavaju problem tek na razini fenomenologije, s obzirom na to da su to postulati, dakle pravila koja se prihvaćaju bez ulaženja u njihov mehanizam ili razlog. To treba jasno istaknuti učenicima kao važan interpretacijski problem atomske fizike, a onda i cijele kemije. Nadalje, nipošto nije jasno odakle statistički aspekt atomskih ili subatomskih objekata. To je problem povezan s problemom tumačenja diskretne prirode spektara, a uvodi učenika u samu srž krajnje neobične kvantne zbilje. Ponovno nije potrebno preduboko ulaziti u diskusiju jer bi to zahtijevalo mnogo više vremena od nekoliko školskih sati, no valjalo bi upozoriti na korijenski problem: Schrödingerova jednadžba, osnovna jednadžba nerelativističke kvantne teorije i kvantne kemije, deterministička je, baš kao i Newtonova jednadžba gibanja! Jednadžba dakle koja u načelu omogućuje potpunu predvidljivost, tj. ako su poznati položaji i brzine čestica za koje se jednadžba postavlja u nekom trenutku, tada bi moralo biti moguće izračunati iste parametre i u bilo kojem sljedećem trenutku. Pa gdje je onda problem?!

Kako je pokazao Heisenberg otkrićem relacija neodređenosti, problem je u tome da položaji i brzine čestica nikada nisu poznati s proizvoljnom točnošću i istodobno. Također se ne može izbjeći baratanje s kompleksnim valnim funkcijama, a onda je jedina dosad eksperimentalno potvrđena interpretacija rješenja Schrödingerove jednadžbe ona Bornova, kao funkcije iz koje se izvodi kvadrat vrijednosti koji se tumači kao vjerojatnost nalaženja čestice negdje u nekom trenutku. Tu valja biti posebno oprezan i naglasiti da je i Bornovo pravilo još jedan od postulata kvantne teorije, tj. da do danas nema potpuno fizičko tumačenje.

Bornovo pravilo zapravo kaže sljedeće: valna funkcija neprestano poprima različite vrijednosti u prostoru i vremenu, ona evoluirala i to deterministički prema Schrödingerovoj jednadžbi, dakle opisuje potencijalno više (ili bezbroj) stanja nekog kvantnog sustava. Pri mjerenju, sustav se na neki, posve nepredvidljiv način *odlučuje* za jedno stanje i to pri svakom mjerenju za drugo stanje koje bira sasvim nasumično. Tu si učenici mogu predočiti neku kozmičku lutriju, koja je, za razliku od ljudskih igara na sreću, doista indeterministička jer ne samo da znanost nije otkrila mehanizam ili barem algoritam te kozmičke lutrije već nikad ni neće s obzirom na to da takav deterministički algoritam (pa onda ni mehanizam) uopće ne postoji (što je i dalje konsenzus među fizičarima). Pojava izbora jednog stanja među mnogima kvantnog sustava naziva se kolaps valne funkcije.

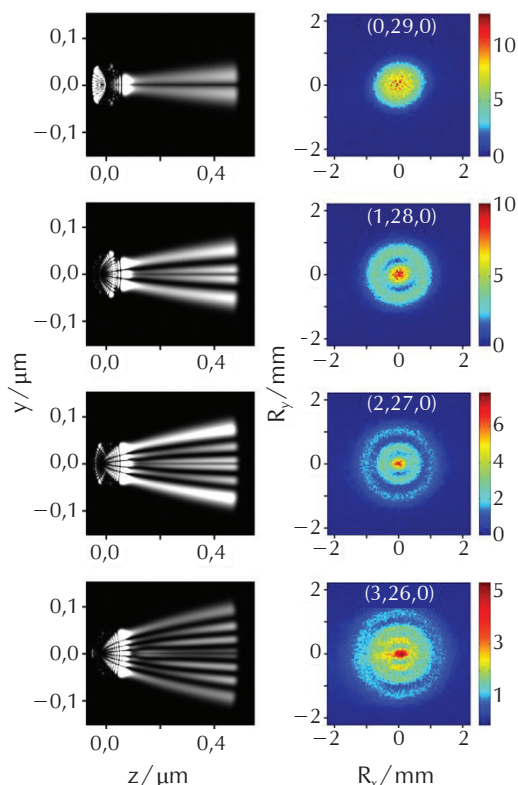
Napokon, kako izgleda atom u stvarnosti, kako može izgledati kvantni sustav više čestica koje se nepredvidljivo i na posve tajnovit način gibaju jedna oko druge ne po nekom egzaktnom algoritmu, već vođene tek vrlo složenom statistikom? Još donedavno u školama se učilo da atome nikada neće biti moguće vidjeti, a kamoli dobiti uvid u strukturu orbitala. Posljednjih desetljeća razvijanjem sve moćnijih mikroskopa, poput skenirajućeg tunelirajućeg mikroskopa (engl. *scanning tunnelling microscope*) ili mikroskopa atomskih sila (engl. *atomic force microscope*), u kojima se primjenjuje kvantni učinak tuneliranja te fotoionizacijskog mikroskopa (engl. *photoionization microscope*), postaje

moгуće ono do nedavno nezamislivo – vidjeti atome i vidjeti u atome!¹⁰

Pokus, izvorno predložen prije tridesetak godina otkriva detaljnu strukturu atomskih orbitala koje pripadaju pobuđenim (Starkovim) stanjima atoma vodika.¹¹ Postupkom fotoionizacijske mikroskopije elektron je isprva laserskim pulsovima pobuđivan redom u prvo, pa drugo i tako sve do stanja ionizacije, pri čemu bi se svaki put dopustilo elektronu da se vrati u osnovno stanje prije naredne pobude. Pritom je elektron imao dva puta povratka u niže stanje, izravni i neizravni, što čini kvantnu faznu razliku i omogućuje kvantnu interferenciju kao rezultat superpozicije stanja. Elektronu se dapače omogućilo da pobjegne iz atoma ne bi li se učinak uvećao na makroskopski opazivu snimku interferencijskih pruga koje točno odgovaraju pobuđenim stanjima. Uređaj za povećavanje je zapravo električno polje prikladnog oblika i jakosti kojim se elektronu istog atoma omogućuje da zamalo pobjegne izvan dometa jezgre, ali nedovoljno da bi mu energija nadmašila energiju ionizacije. Novost je te tehnike što se eksperiment obavlja na istom atomskom sustavu, a ne kao prije na mnogo atoma gdje se rezultat (slika atoma) dobivao kao konflacija mnoštva različitih projekcija (postupkom tomografske inverzije, slično kao pri PET-skeniranju mozga), slika 2. Sve navedeno sugerira da su atomi, gledano izdaleka, doista kuglice, ne baš ispunjene i čvrste kakvima ih je Dalton zamišljao, ali ipak sferične strukture; dok, ako se pogledaju izbliza, doista otkrivaju orbitalnu strukturu kakvu proračunava kvantna mehanika.

Zaključak

Osnovni cilj članka bio je naglasiti ulogu temeljnih ideja moderne kemije (fizike) unutar suvremenih kurikula prirodnih znanosti. Premda i dalje ne postoji jasno iskazan konsenzus o pitanju koliko moderne kemije (fizike) treba biti zastupljeno u srednjoškolskom, odnosno osnovnoškolskom kurikulu kemije (fizike), ne bi trebalo trošiti mnogo riječi na obrazlaganje temeljnog stava da se znanost 21. stoljeća bitno razlikuje od one 19. ili ranijih stoljeća, te se stoga i u nastavi te razlike moraju moći – i na vrijeme, u smislu razine i stadija poučavanja – prepoznati. Argument da je pojam atomske orbitale presložen i preapstraktan, te da ga je potrebno zaobići u poučavanju, dok to ne zahtijevaju drugi, važniji ciljevi nastave kemije, ili ga tek informativno obrađivati jednostavno ne stoji. Kao što uostalom ne stoji da se fiziku ne može poučavati drugačije nego slijedom njezina povijesnog nastanka, pri čemu se atome i subatomske čestice obrađuje na kraju gimnazijskog obrazovanja. To je i dalje praksa u nas, ali ne i u razvijenijim zemljama, koje doduše nisu riješile sva metodička pitanja koja bi se nametnula u realnoj nastavi. Međutim o rješenjima se intenzivno razmišlja, što bi bio i drugi važan cilj ovog teksta: ukazati na neke od korijenskih problema nastave kemije i neraskidivih veza s nastavom fizike i matematike. Zamišljen je kao niz savjeta već osposobljenom i promišljenom suvremenom nastavniku kemije (fizike) koji stvarno drži do vlastitog usavršavanja, pa mu nisu strani svi pojmovi iz sestrinskih znanosti. Također, tekst je zamišljen i kao prijedlog prema razvoju stručnog usavršavanja nastavnika kemije o nekim od tema moderne kemije. Konačno, u tek-



Slika 2 – Prikaz pobuđenih stanja (stupac nadesno) vodikova atoma dobivenih izravnim postupkom mjerenja s pojedinog atoma fotoionizacijskom mikroskopijom. Lijevi stupac prikazuje pripadajuće interferencijske obrasce iz kojih se računalnom obradom dobivaju slike nadesno (preuzeto uz dopuštenje: A. S. Stodolna, A. Rouzée et al., Hydrogen Atoms under Magnification: Direct Observation of the Nodal Structure of Stark States, Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 213001-5, doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.213001>. Autorsko pravo (2018): American Physical Society.).

Fig. 2 – Excited states of hydrogen atom (right column) by direct method of photoionization microscopy. Left column shows respective interference patterns from which the images to the right were generated with the aid of a computer (Reprinted with permission from A. S. Stodolna, A. Rouzée et al., Hydrogen Atoms under Magnification: Direct Observation of the Nodal Structure of Stark States, Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 213001-5, doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.213001>. Copyright (2018) by the American Physical Society.).

stu je nakon dugogodišnjeg promišljanja, ali i publicističke i nastavničke prakse, višestruko naglašavano koji bi dijelovi bili namijenjeni (svim) učenicima prvih razreda gimnazija, a koji isključivo profesoru, koje bi eventualno mogao podijeliti s naprednijim učenicima.

Tekst je namjerno polemički sastavljen ne bi li se ukazalo na svu težinu poučavanja koncepata moderne znanosti, a na jednom značajnom primjeru; nipošto se nije htjelo reći da je to pretežak zadatak ili da je kvantna kemija (fizika) posve nerazumljiva bez temeljitog znanja vrlo apstraktnog pratećeg matematičkog aparata. Najdublje ideje znanosti doista su i najjednostavnije, ali samo ako im se u tumačenju pristupa s najvećom pažnjom, kao što se uostalom i pretpostavlja u suvremenoj nastavi otkrivanjem. Tu neće

glavni problem biti dodatni školski sati, koje će zacijelo trebati odvojiti, niti predznanje učenika ili učitelja, već motivacija i jednih i drugih te ambicija da se znanost shvati onakvom kakva jest, otvorenom i nedovršenom potragom za znanjem o materijalnom svijetu.

Literatura References

1. V. Paar, Fizika 4: udžbenik za 4. razred gimnazije, ŠK, Zagreb, 2009., str. 1–60.
2. D. Turčinović, I. Halasz, Opća kemija 1: udžbenik kemije u prvom razredu gimnazija, ŠK, Zagreb, 2015., str. 48–77.
3. D. Bohm, Quantum Theory, Dover Publications Inc., New York, 1989., str. 81–98.
4. M. Grba, Fizika nakon čuda 1905.: Nove teorije, neočekivani obrati i fantastični eksperimenti moderne fizike, Alfa, Zagreb, 2016., str. 77–142.
5. F. Laloë, Do We Really Understand Quantum Mechanics? Strange Correlations, Paradoxes, and Theorems, Am. J. Phys. **69** (6) (2001) 655–701, doi: <https://doi.org/10.1119/1.1356698>.
6. S. Sýkora, Quantum Theory and Bayesian Inference Problems, J. Stat. Phys. **11** (1974) 17–27, doi: <https://doi.org/10.1007/BF01019475>.
7. M. Born, Zur Quantenmechanik der Stossvorgänge, Z. Physik **37** (1926) 863–867, doi: <https://doi.org/10.1007/BF01397477>.
8. M. Grba, Kako u nastavi pristupiti interpretaciji modela i teorija fizike, u: I. Aviani (ur.), 13. hrvatski simpozij o nastavi fizike: Suvremeni kurikulum i nastava fizike, zbornik radova, HFD, Zadar, 2017., str. 144–149.
9. L. Pauling, General Chemistry, 3rd Ed., Dover Publications, Inc., New York, 1988, str. 120–133.
10. C. T. L. Smeenk, A New Look at the Hydrogen Wave Function, Physics **6** (2013) 58–60, doi: <https://doi.org/10.1103/Physics.6.58>.
11. A. S. Stodolna, A. Rouzée, F. Lépine, S. Cohen, F. Robicheaux, A. Gijsbertsen, J. H. Jungmann, C. Bordas, M. J. J. Vrakking, Hydrogen Atoms under Magnification: Direct Observation of the Nodal Structure of Stark States, Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 213001–5, doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.213001>.

SUMMARY

What is an Atomic Orbital?

Marko Grba

The concept of an *atomic* or *molecular orbital* is a fundamental concept of chemistry, which acquires its full meaning only within the quantum theory. *Atomic orbital* is actually a concept derived from the concept of a *wave function* or a *state vector*, which are, therefore, first explained by applying Born's rule as a first step in interpreting quantum mechanics, which means relating the mathematical formalism with the so-called *elements of reality*. When students properly understand the concept of a *wave function*, the basics of its collapse and the statistical character of the atomic and subatomic reality, they can, without much effort, understand and successfully apply the notions of *atomic* and *molecular orbital* and all the related concepts. However, all the aforementioned requires a slightly more flexible approach to the high school curricula of chemistry, physics or mathematics.

Keywords

Atomic (molecular) orbital, wave function, Born's rule, statistical character of quantum theory

First Croatian Gymnasium
in Sušak
Gajeva 1, 51 000 Rijeka
Croatia

Professional paper
Received July 1, 2018
Accepted August 15, 2018