



KEMIJA U NASTAVI

Uređuje: Nenad Raos

<https://doi.org/10.15255/KUI.2021.019>

KUI-42/2021

Stručni rad

Prispjelo 6. travnja 2021.

Prihvaćeno 17. svibnja 2021.

Kako definirati veličinu atoma

N. Raos*

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



Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska cesta 2, p.p. 291, 10 001 Zagreb

Sažetak

Iako se u školi uče iznosi ionskih, van der Waalsovih i kovalentnih radijusa, ne uči se što oni zapravo jesu – školske definicije prikrivaju njihovu pravu, kvantnomehaničku prirodu. U radu je ispitano značenje definicija veličine atoma te opisan njihov izvod: iz elektronske gustoće (povezane s funkcijom koju zovemo atomskom orbitalom), iz duljine kovalentne veze i položaja jezgara, iz prvog virijalnog koeficijenta jednadžbe realnog plina te Lennard-Jonesova potencijala (van der Waalsov radijus). Iz navedenog se vidi da se veličina atoma ne može jednoznačno definirati ili, točnije, da se ne može govoriti o veličini atoma na isti način na koji se govori o veličini makroskopskih objekata.

Ključne riječi

Nastava kemije, kvantna kemija, modeli atoma, kovalentni radijus, van der Waalsov radijus, duljina veze

Uvod

Problem veličine atoma pojavio se kad se pojavio pojam nedjeljive, točnije rečeno nescjecive (*άτομον*) čestice u grčkoj filozofiji.¹⁻⁴ Ako je atom nedjeljiv u apstraktnom, dakle pojmovnom smislu, onda ne može imati veličinu. Osjetilna, empirijska spoznaja nužno je naime vezana za prostor: sve što osjećamo ili zamišljamo kao objekt mora zauzimati prostor, pa tako i “nedjeljivi” atom. Demokrit je atome smatrao osjetilima nedostupnim česticama, ne samo zbog njihove sićušnosti. Grci su naime oštro razlikovali dva reda bića. Prva su bila „bića uma“ (*νοούμενων*), tj. pojmovi („matematička bića“), a druga su bića bila fizička (= prirodna) bića (*φαινόμενων*), a to znači promjenjiva, propadljiva i vremenita. Atomi su, kao nedjeljiva, pa stoga i nepromjenjiva bića, pripadali prvoj skupini, skupini nomenona. “Po mnijenju je boja, po mnijenju je slatko, po mnijenju je gorko, a uistinu jesu atomi i praznina”, kaže ključni Demokritov fragment,⁵ s time da “po mnijenju” označava osjetilnu, a “uistinu” umnu spoznaju.

Epikur je pak smatrao atome čisto empirijskim česticama, nedjeljivima zato što u prirodi ne postoji ništa što bi ih moglo podijeliti ili, prema drugom tumačenju, atomi su nedjeljivi zato što ne sadrže prazan prostor. No i tako shvaćeni, atomi su paradoksalne čestice jer se na kraju otkiva, kako pokazuje suvremena fizika, da se svaka, pa i najsitnija čestica sastoji ponajviše od praznine.⁶ Ruđer Bošković (1711. – 1787.) je pak doveo atomizam do krajnjih konzekvencija: budući da su atomi posve nedjeljivi (*prorsus*

indivisibilia), oni moraju biti i neprotežni (*inextensa*), što znači da se nalaze u prostoru, ali ga ne zauzimaju.⁷ Time je Bošković atom sveo na matematičko, geometrijsko biće, na točku, kojoj međutim “fizičnost” daje masa i djelovanje na daljinu (hvatište sila). U tom čudnom spoju fizike i matematike ostvarena je sinteza grčkih noumena i fainomena u pojmu materijalne točke (*punctum materiale*).

Suvremena je fizika napravila takvu sintezu u kvantnoj mehanici. Zahvaljujući novim eksperimentalnim metodama i razvoju kvantnomehaničkih modela, atomi i molekule prestale su biti hipotetičke čestice, kao što su bile za kemičara 18. i 19. stoljeća.^{8,9} Kemija je dobila novo lice preobrazivši se u znanost o strukturi molekula, u – da tako kažemo – arhitekturu mikrosvijeta.¹⁰ No unatoč tome, kemija se ne može odvojiti od svojih tisućljetnih temelja koje čini filozofski atomizam, atomizam koji polazi od problema djeljivosti i nedjeljivosti, punine i praznine.

Bohrovo rješenje: atom je čestica definirane veličine

Prvi kvantitativni, a ujedno i prvi kvantnomehanički model atoma⁶ dugujemo danskom fizičaru Nielsu Bohru (1885. – 1962.), koji ga je predložio 1913. godine.¹¹ Bohr je pošao od Rutherfordove predodžbe atoma kao planetarnog sustava. Prema tom modelu elektron kruži oko jezgre kao što planet kruži oko Sunca, no na njega ne djeluje, kao kod planeta, gravitacijska nego elektrostatička sila. Stoga analogno računanju prve kozmičke brzine (brzine kruženja po kružnici oko svemirskog tijela) možemo napisati:

* Dr. sc. Nenad Raos
e-pošta: raos@imi.hr

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Ze^2}{r^2} \right), \quad (1)$$

gdje je m masa, v brzina, a e naboj elektrona; Z je broj protona u jezgri, a ϵ_0 dielektrična konstanta vakuuma. Elektron međutim ne može, prema Bohru, kružiti na bilo kojoj udaljenosti od jezgre kao što satelit može kružiti na bilo kojoj udaljenosti od središta Zemlje. Putanja elektrona je kvantizirana. Točnije rečeno, kvantizirana je njegova kutna količina gibanja:

$$2\pi m v r = n h, \quad (2)$$

gdje je h Planckova konstanta, a n glavni kvantni broj. Rješavanjem sustava jedn. (1) i (2) može se eliminirati nepoznanica v te napisati:

$$r = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{\pi Z e^2 m}. \quad (3)$$

Uvrštavanjem odgovarajućih vrijednosti u jedn. (3) dobiva se za atom vodika ($Z = 1$) u osnovnom stanju ($n = 1$) vrijednost $r = 5,3 \cdot 10^{-11}$ m. Ta je vrijednost poznata kao Bohrov radijus ($a = 53$ pm).

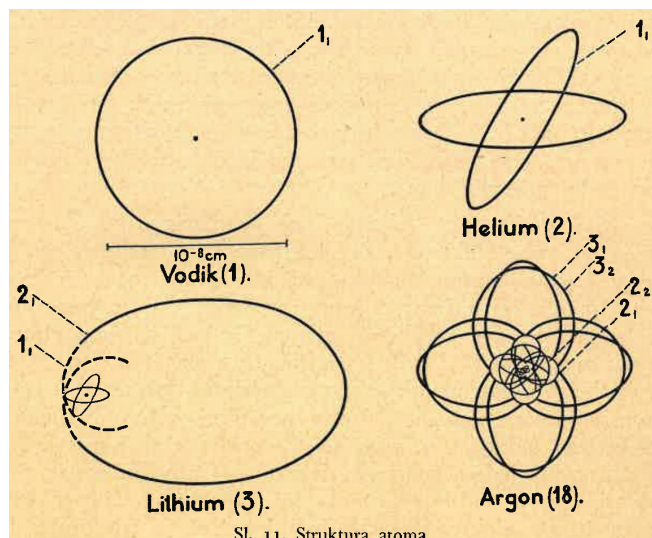
Iz jedn. (3) proizlazi jasan zaključak, a to je da atom ima strogo definirane dimenzije: one su određene promjerom putanje elektrona, $2a = 106$ pm (za vodik u osnovnom stanju).

Problem s Bohrovim modelom, kojeg je i sâm Bohr bio svjestan,* je da je riječ o provizornom (*ad hoc*) rješenju: nema eksperimentalnog dokaza da elektron kruži oko jezgre, to je samo Rutherfordova hipoteza (slika 1). Štoviše, pretpostavka o kruženju elektrona oko jezgre po stacionarnoj putanji ne proizlazi ni iz kojeg prirodnog zakona. Poslije će se pokazati da se Bohrova hipoteza protivi osnovnom zakonu kvantne mehanike, naime Heisenbergovu načelu neodređenosti. Ono kazuje na to da nije moguće istodobno znati točan položaj, x , i brzinu (tj. količinu gibanja, $p = mv$) elementarne čestice: $\Delta p \cdot \Delta x \geq h$. No najviše što govori protiv Bohrova modela je činjenica da je njime danski fizičar mogao riješiti samo spektar atoma vodika te spektar ioniziranog helija (He^+), dakle modelirati sustave sa samo jednim elektronom. (Bohrov model je poslije pokušavao unaprijediti Arnold Sommerfeld (1868. – 1951.) uvodeći eliptične putanje za elektrone, no bez većeg uspjeha.¹²)

Schrödingerovo rješenje: atom – čestica bez granice

Temelj suvremene atomske teorije nije pojam atomske orbite, kružne putanje elektrona oko jezgre, nego pojam

* "The preliminary and hypothetical character of the above considerations needs not to be emphasized. The intention, however, has been to show that the sketched generalization of the theory of the stationary states possibly may afford a simple basis of representing a number of experimental facts which cannot be explained by help of the ordinary electrodynamics, and that the assumptions used do not seem to be inconsistent with experiments on phenomena for which a satisfactory explanation has been given by the classical dynamics and the wave theory of light." (ref. 11).



Sl. 11. Struktura atoma

Slika 1 – Prikaz strukture atoma kao planetarnog sustava (Bohrov i Sommerfeldov model). "Elementarne atome shvaćamo danas kao neke mikroplanetarne sisteme, u kojima se oko pozitivno nabijene jezgre atomâ kao oko vanredno malenog Sunca okreću u jedan ili više krugova ili elipsa najmanje čestice negativne elektricitete, koje zovemo u fizici elektronima... ali moramo posebno naglasiti, da to nije tek neka spekulacija, nego naučna teorija nikla iz čitavog niza eksperimentalnih rezultata" (ref. 29).

Fig. 1 – Atomic structure as a planetary system (Bohr and Sommerfeld model). "Today we understand elementary atoms as some kind of microplanetary systems, in which around positively charged atomic nucleus move in one or more circles or ellipses the smallest particles of negative electricity, that we call electrons... but it must be strongly stressed that this is not a mere speculation, but scientific theory stemmed from a long series of experimental results" (Ref. 29).

atomske orbitale.¹³ Taj je pojam uveo njemački fizičar Werner Karl Heisenberg (1901. – 1976.) da bi dao do znanja da elektron ne kruži, po orbiti, oko jezgre, no kako se giba u atomu to se iz riječi "orbitala" ne može zaključiti. (*Orbitala* je deminutiv od latinske riječi *orbita*, dakle "putanjica").** Pravi smisao pojmu orbitale dao je međutim 1926. godine austrijski fizičar Erwin Schrödinger (1887. – 1961.) svojom čuvenom jednadžbom:

$$H \Psi = E \Psi, \quad (4)$$

gdje je H operator ukupne energije (hamiltonijan), a E energija sustava. Varijabla Ψ je valna funkcija. Ona nema fizičko značenje (ne može je se izravno povezati s mjerljivim svojstvima), no – važno je napomenuti – takvo znače-

** Ima mišljenja da je riječ "orbitala" neprikladna jer prikriva fundamentalnu razliku značenja od riječi "orbita", no takve riječi nisu neobične u kemijskoj, pa ni u drugoj stručnoj terminologiji. (Još je nespretnija riječ "podljuska" kojom se u našoj starijoj literaturi prevodi riječ orbitala.) Orbitalu bismo mogli definirati kao prostor u kojem se nalazi elektron određene energije – kad taj prostor ne bi bio, zbog Heisenbergova načela neodređenosti, beskonačan. Lijep zadatak u tom smislu bilo bi izračunati vjerojatnost nalaženja elektrona iz 1s orbitale atoma vodika 100 pm, 1 nm i 1 μ m od jezgre, jedn. (5) i (6).

nje ima njezin kvadrat ili pak umnožak funkcije i njezine konjugirane funkcije ako je funkcija kompleksna ($\Psi^*\Psi$). On je mjera vjerojatnosti nalaženja čestice u nekom dijelu prostora.

Valna funkcija, Ψ , je eksponencijalna funkcija, pa je i njezin kvadrat, $\Psi^*\Psi$, eksponencijalna funkcija. Za najjednostavniji slučaj, slučaj atoma vodika, radialna gustoća vjerojatnosti nalaženja elektrona u zavisnosti od udaljenosti od jezgre, r , iznosi:

$$D = 4 \pi r^2 R_{n,l}^2, \quad (5)$$

gdje je $R_{n,l}$ radialna funkcija. Za vrijednosti kvantnih brojeva $n = 1, l = 0$, što odgovara orbitali 1s atoma vodika, $R_{n,l}$ ima oblik:

$$R_{1,0} = 2 e^{-\rho/a^{3/2}}, \quad (6)$$

gdje je a Bohrov radijus, a ρ udaljenost elektrona od jezgre izražena u jedinicama Bohrova radijusa, $\rho = r/a$.

Iz eksponencijalne naravi izraza (6) jasno je da će funkcija (5) imati ekstrem (maksimum) pri vrijednosti $\rho = 1$, a to znači za $r = a$. Stoga bi putanja kojom elektron kruži oko jezgre u Bohrovu modelu bila, u Schrödingerovu modelu, mjesto najvjerojatnijeg nalaženja elektrona.

Iz toga bi međutim bilo pogrešno zaključiti da i u Schrödingerovu modelu atom vodika ima promjer $2a = 106$ pm. Veličina a znači ono što znači, udaljenost od atomske jezgre na kojoj se s najvećom vjerojatnošću nalazi elektron, pa joj ne smijemo davati, radi lakšeg predočavanja, značenje koje nema niti može imati. Atomi nisu nedjeljive i apsolutno homogene čestice – kako ih je zamišljao Demokrit – nego kvantni elektrodinamički sustavi elektrona i protona (atomske jezgre). Stoga veličinu atoma nije moguće definirati. Točnije rečeno, atom je velik onoliko koliko se dogovorimo da bude. Obično se, konvencionalno, oblik i veličina atoma definira njegovim orbitalama, a one opet kao prostor oko jezgre u kojem postoji određena vjerojatnost (recimo, $p = 95\%$ ili $p = 98\%$) nalaženja elektrona. Za vodikovu 1s orbitalu taj se prostor definira kuglom radijusa $r = x$ izračunatim integriranjem funkcije (5):

$$\int_0^x D dr = p. \quad (7)$$

Zbog eksponencijalnog oblika valne funkcije njezina vrijednost nikada ne može biti jednaka nuli. To znači da se elektron može nalaziti na bilo kojoj udaljenosti od atomske jezgre.

Kako definirati kovalentni radijus?

Kovalentni radijus je veličina koja se lako definira. Kovalentni radijus atoma A, $r(A)$, izračunava se iz duljine veze između atoma A i B, $R(A-B)$ i kovalentnog radijusa atoma B, $r(B)$:

$$r(A) = R(A-B) - r(B). \quad (8)$$

Problem je međutim što vrijednost $R(A-B)$ ovisi o strukturi molekule.^{14,15} Usto jedn. (8) vrijedi samo aproksimativno (tablica 1). Bolji se rezultati postižu ako se napravi empirijska korekcija koja uzima u obzir razliku elektronegativnosti (χ) atoma koji sudjeluju u vezi ("parcijalni ionski karakter kovalentne veze"):

$$R(A-B) = r(A) + r(B) - c |\chi(A) - \chi(B)|^n, \quad (9)$$

gdje eksponent može poprimiti vrijednost $n = 1^{16}$ ili, bolje, $n = 1,4$.¹⁷

Tablica 1 – Tipična duljina kovalentne veze, R (ref. 14) i njezina procjena izračunata iz kovalentnih radijusa, r (ref. 32) atoma koji je sačinjavaju (jedn. (8))

Table 1 – Typical bond lengths, R (Ref. 14) and their estimation from covalent radii, r (Ref. 32) of the constituting atoms (Eq. (8))

X	$R(X-H)/\text{pm}$	$r(X) + r(H)/\text{pm}$	$R(X-C)/\text{pm}$	$r(X) + r(C)/\text{pm}$
B	121	115	156	161
C	109	108	154	154
N	100	102	147	148
O	96	97	143	143
F	92	88	138	134
Si	148	142	184	188
P	142	138	187	184
S	134	136	181	182
Cl	127	133	176	179
Br	141	151	194	197
I	161	170	214	215

Drugi, fundamentalniji problem s kovalentnim radijusom izvire iz kvantnomehaničke naravi molekula. Duljina kovalentne veze zapravo je udaljenost između jezgara atoma koje je čine, a za atomske jezgre, baš kao i za elektrone, vrijede zakoni kvantne mehanike. Iako se kemičari poglavito bave rješenjima Schrödingerove jednadžbe za elektrone, puna valna jednadžba mora uključivati i atomske jezgre:

$$[T_c + T_n + V(\mathbf{x}, \mathbf{R})] \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{R}) = E \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{R}), \quad (10)$$

gdje je T operator kinetičke, a V operator potencijalne energije, dok je E energija sustava. Indeks e odnosi se na elektrone, a indeks n na atomske jezgre; vektor \mathbf{x} označava pak koordinate elektronâ, a vektor \mathbf{R} , koordinate jezgara. Budući da se jezgre gibaju mnogo sporije od elektrona, Schrödingerova jednadžba za elektrone može se riješiti za niz fiksnih položaja jezgara (jezgre miruju). S druge pak strane elektroni se miču tako brzo da jezgre osjećaju djelovanje samo njihova zajedničkog potencijala. Zahvaljujući tome, može se odvojiti valna funkcija za elektrone od valne funkcije za jezgre (Born-Oppenheimerova aproksimacija) te ih zasebno izračunavati. Stoga se uz valnu jednadžbu

za elektrone može napisati i valna jednadžba koja opisuje stanja atomskih jezgri:

$$[T_n + E_e(\mathbf{R})] \Psi_n(\mathbf{R}) = E_n \Psi_n(\mathbf{R}). \quad (11)$$

U toj jednadžbi energija sustava, E_n , ovisi samo o koordinatama jezgri, \mathbf{R} , no u njoj se – kao operator potencijalne energije – pojavljuje energija elektrona, E_e (jezgre se kreću u električnom polju elektronâ).

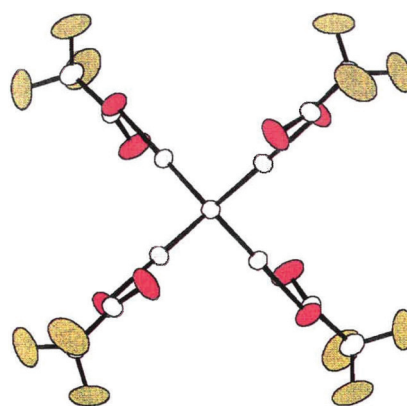
Kvantna narav gibanja atomskih jezgara u molekuli ima dalekosežne posljedice. Budući da i za njih vrijedi Heisenbergovo načelo neodređenosti, jezgre se ne nalaze na točno određenom mjestu, nego se s nekom vjerojatnošću nalaze u prostoru molekule. Posljedica toga je da se udaljenost jezgri, pa stoga i duljina veze, može definirati na više načina.¹⁸

Kako jezgra mijenja položaj uslijed vibracija, duljina veze se može smatrati srednjom udaljenošću jezgara za vibracijsko stanje v , r_v ; ako je riječ o osnovnom vibracijskom stanju udaljenost se označava s r_z . Iz mjerenja kutne količine gibanja molekule mikrovalnom spektroskopijom proizlaze pak veličine r_0 i r_e , gdje se r_0 odnosi na osnovno vibracijsko stanje, a r_e ($e = equilibrium$) na hipotetsko stanje bez vibracija. Treća vrsta parametara, r_g , izračunava se iz termičkog gibanja molekule; r_g se pri termičkoj ravnoteži označava s r_α . Za harmonički oscilator vrijedi $r_g = r_e$. Najtočnijom se mjerom udaljenosti smatra Kraitichmanova koordinata, r_s ($s = substitution$): $r_s \approx (r_0 + r_e)/2$.^{19,20} Ona se određuje izotopskom zamjenom atoma koji čine vezu. Iako se tako definirane udaljenosti međusobno malo razlikuju ($< 0,1$ pm), treba imati na umu da se različitim eksperimentalnim metodama dobivaju različite vrste udaljenosti, pa stoga i različite vrijednosti duljina kovalentnih veza. U kontekstu ovoga članka važno je međutim uočiti da duljina veze, ma kako bila mjerena i definirana, u sebi nosi neodređenost koja proizlazi iz kvantnomehaničke naravi sustava.

Primjer neodređenosti položaja jezgara daje i prikaz njihovih položaja pomoću rotacijskih elipsoida, koji se pokatkad primjenjuje u predočavanju struktura molekula riješenih rendgenskom difrakcijskom analizom (slika 2). U tom prikazu prikazuje se položaj jezgara s 30 ili 50 posto vjerojatnosti nalaženja – što je ponajviše uzrokovano njihovim vibracijama.

Van der Waalsov radijus

Imajući u vidu neodređenost atomskog radijusa, koja proizlazi iz prirode kvantnofizičkih modela, postavlja se pitanje je li ga moguće eksperimentalno odrediti.²¹ Odgovor na pitanje je potvrđan: najizravnija i najjednostavnija metoda izračunavanja atomskog (ili molekulskog) volumena, a iz njega izvedenog neveznog (van der Waalsovog) radijusa atoma temelji se na jednadžbi realnog plina. Jednadžba koju je izveo nizozemski fizičar Heike Kamerlingh Onnes (1853. – 1926.) pretpostavlja, za razliku od jednadžbe idealnog plina, da molekule plina imaju volumen. Stoga u plinsku jednadžbu ulazi i volumen molekula, V_m , zajedno s tlakom, P , temperaturom, T , i volumenom plina, V :²²



Slika 2 – Posljedica gibanja jezgri u molekuli: položaj jezgara predočen je termalnim elipsoidom, geometrijskim tijelom u kojem se nalazi atomska jezgra s vjerojatnošću od 50 %. Slika prikazuje molekularnu strukturu organoživinog spoja $C(HgOOCF_3)_4$ što su je rendgenskom difrakcijskom analizom riješili naši kemičari iz Zavoda za opću i anorgansku kemiju zagrebačkog Prirodoslovno-matematičkog fakulteta (ref. 30). Atomi žive nacrtani su u sivoj, atomi kisika u crvenoj, atomi fluora zelenoj, a atomi ugljika u bijeloj boji. Struktura je prikazana na znanstveno-popularnoj izložbi "Ljepota molekulskih struktura" u Zagrebu 1996. godine (ref. 31).

Fig. 2 – The consequence of movement of nuclei in molecule: the place of nucleus is depicted by thermal ellipsoid, a solid in which nuclei should be found with 50 % probability. The picture shows X-ray structure of organomercury compound $C(HgOOCF_3)_4$, solved by Croatian chemists from Faculty of Science, Zagreb (Ref. 30). The mercury atoms in the picture are drawn in grey, oxygen atoms in red, fluorine atoms in green, and carbon atoms in white. The picture was presented at the popular-science exhibition "The Beauty of Molecular Structure", Zagreb, 1996 (Ref. 31).

$$PV = RT \left[1 - \frac{B(T)}{V_m} + \frac{C(T)}{V_m^2} + \frac{D(T)}{V_m^3} + \dots \right], \quad (12)$$

gdje je R plinska konstanta, a B , C i D prvi, drugi i treći o temperaturi ovisan virijalni koeficijent. Nizozemski fizičar Johannes Diderick van der Waals (1837. – 1923.) uspio je pak 1873. iz jednadžbe realnog plina izvesti izraz za radijus atoma. Može se naime smatrati da je prvi virijalni koeficijent, B , jednak volumenu jednog mola jednoatomskih molekula, aproksimiranih kuglicama radijusa r_{vw} :

$$B = N_A \frac{4}{3} \pi (r_{vw})^3, \quad (13)$$

gdje je N_A Avogadrova konstanta.

Iz takve predodžbe atoma, kao kuglice definiranog volumena, pa stoga i radijusa, proizašao je model tvrdih kugala (engl. *hard sphere model*). On je pronašao primjenu ne samo u kristalografiji (izračunavanje ionskih radijusa)²³ nego i u drugim granama teorijske kemije.²⁴ Taj model, privlačan zbog svoje zornosti, ne govori međutim ništa o privlačnim silama među atomima (A i B). Odbojna pak sila može poprimiti samo dvije vrijednosti, 0 i ∞ , ovisno o

tome je li $r > r_{\text{vW}}(A) + r_{\text{vW}}(B)$ ili $r < r_{\text{vW}}(A) + r_{\text{vW}}(B)$; van der Waalsov radijus čini neprobojnu barijeru odbojnog potencijala. (Molekula se međutim može modelirati kuglicama radijusa r_{vW} koje prodiru jedna u drugu i tako izračunati prazni i puni prostor u molekuli.²⁴)

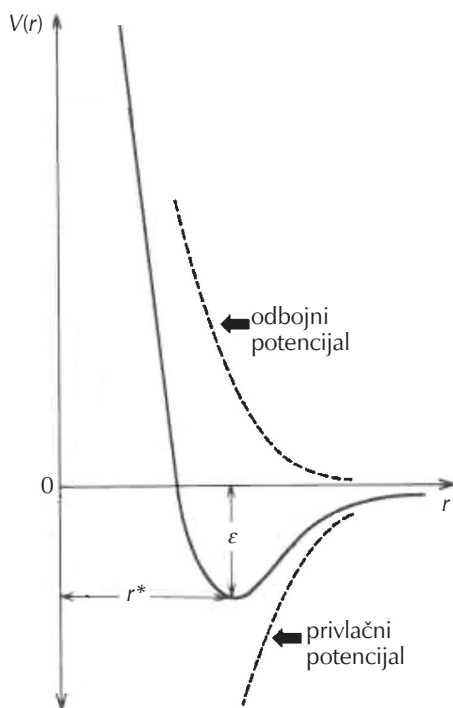
To dakako ne odgovara stvarnosti. Među atomima koji ne tvore kovalentnu vezu djeluje privlačni ($V < 0$) i odbojni potencijal ($V > 0$). Oni se, zbrojeni, mogu prikazati dvjema funkcijama (slika 3). Prva funkcija je **Buckinghamov potencijal**:

$$V_B(r) = A e^{-Br} - \frac{C}{r^6}, \quad (14)$$

a druga mnogo poznatiji **Lennard-Jonesov potencijal**:

$$V_{\text{LJ}}(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{C}{r^6}, \quad (15)$$

gdje je r udaljenost atoma, a A , B i C su empirijski parametri. Eksponent n u članu za odbojni potencijal, jedn. (15), iznosi $n = 12$ ili $n = 9$.



Slika 3 – Kvalitativni graf Lennard-Jonesova potencijala
Fig. 3 – Qualitative plot of Lennard-Jones potential

Obje funkcije, (14) i (15), kontinuirane su funkcije s minimumom ϵ , koji odgovara ravnotežnoj udaljenosti, r^* : $\epsilon = V(r^*)$. To omogućuje da se Lennard-Jonesov potencijal napiše kao funkcija te dvije veličine, ϵ i r^* :

$$V_{\text{LJ}} = \epsilon \left(\frac{r^*}{r} \right)^{12} - 2\epsilon \left(\frac{r^*}{r} \right)^6, \quad (16)$$

pa bi se iz toga moglo zaključiti da se Lennard-Jonesov model može svesti na model tvrdih kugli. No nije tako. Prvo, "kugle" Lennard-Jonesova potencijala nisu krute, nego elastične, a drugo, još važnije, izraz $r_{\text{vW}}(A) + r_{\text{vW}}(B) = r^*$ vrijedi samo aproksimativno, $r_{\text{vW}}(A) + r_{\text{vW}}(B) \approx r^*$. Drugim riječima, van der Waalsov radijus atoma A ovisi o atomu B. Štoviše, atom A može istodobno imati više van der Waalsovih radijusa, jer se u molekuli nalazi blizu atomima B, C, D... Stoga bi i u ovom slučaju, kao i u slučaju duljina kovalentnih veza, bilo naivno smatrati atome nekom vrstom kuglica.

Zaključak

Proces učenja temelji se na povezivanju nepoznatog s poznatim. No kako povezati pojmove koji nam dolaze iz kvantne fizike – "vibracijske" udaljenosti atomskih jezgri, atomske orbitale i sl. – sa svijetom u kojem živimo? U učenju kemije mnogo pomaže to što stvari imaju osjetilne kvalitete (boju, miris, okus, tvrdoću, čvrstoću) koje se onda mogu povezati sa strukturom molekula. No kada se počne govoriti o kvantnomehničkim veličinama, ništa se opipljivo ne može ponuditi: umjesto zbiljskog kemijskog pokusa, kojim nastavnik uvodi učenika u svijet kemijskih promjena, mora se poslužiti misaonim eksperimentom kojem je svrha pokazati i dokazati da se čestica istodobno nalazi i ne nalazi na nekom mjestu, da elektron kruži i ne kruži oko atomske jezgre, da se sve u mikrosvijetu temelji na valnim funkcijama o kojima međutim ne možemo stvoriti nikakvu zornu predodžbu – jer čestica kvantne teorije nije ekvivalent "klasičnoj" čestici. "Sve u svemu, je li uopće otupljena oštrica Einsteinove kritike, kako ju je razvijao posljednjih desetljeća svoga života, razumijemo li mi danas kvantnu teoriju išta bolje negoli osnivači dvadesetih godina prošloga stoljeća, razumijemo li odakle kvanti?", pita se Marko Grba komentirajući Einsteinovu kritiku kvantne teorije, pa odgovara: "S pouzdanošću koja nadilazi pouzdanost bilo koje prethodne pretpostavke ili argumenta možemo se odvažiti i uskliknuti – s jezom ili oduševljenjem – da ne razumijemo! Jednostavno, ne razumijemo."²⁵ Pa kada to ne razumiju fizičari, pa ni sâm Einstein, kako će onda razumjeti učenici?

Kao što pomorci moraju ploviti, pa makar i po cijenu života – jer "Navigare necesse, vivere non necesse" – tako i učenici moraju učiti, pa i pod cijenu da im od onoga što su naučili nakon završetka školovanja u glavi ništa ne ostane. Nastavni program, samo se po sebi razumije, ne smije (mnogo) zaostajati za znanošću, pa bi bilo posve neprimjereno da učenici ništa ne čuju o kvantnomehničkim modelima u kemiji, modelima kojima se znanost izvanredno uspješno služi već čitavo stoljeće. No kako, da se vratimo na temeljno pitanje, prikazati atome i molekule kad se njihov svijet toliko razlikuje od našega? Kako ćemo prikazati atome, "vibracijske organizme",²⁶ kako ih je shvaćao engleski matematičar i filozof Albert North Whitehead (1861. – 1947.), jer "ono nevidljivo ili izvorno što je prodrlo do nas makroskopskim učincima, ne da se prikazati kao stanovito tijelo ili fluid u prostoru i vremenu"²⁷ Atomi suvremene fizike više sličie Aristotelovoj tvari (ἔλη) nego atomima njegovih suvremenika, iako Aristotel opovrgava mogućnost njihova postojanja, a i zakoni kvantne fizike dolaze u koliziju s Ari-

stotelovom logikom (načelom istovjetnosti, proturječnosti i načelom isključenja trećeg).

Rješenje nude molekularni modeli, što jednostavniji to bolji. Atomi se predočuju kuglicama, a veze među njima štapićima. Takvi su modeli pogodni za stvaranje predodžbe o strukturi molekula, posebice pri učenje stereokemije,²⁸ no ako ih shvate odviše realistično, učenici mogu steći krive predodžbe. No to nije najgore. Prije ili kasnije postat će svjesni fiktivne naravi takvih modela, no neće ih imati čime zamijeniti. Stoga će umjesto penjanja prema sve višim razinama znanja, na kraju svoje “znanje” kemije svesti na zbrku nejasnih i nepovezanih pojmova. Iz toga će pak proizaći animozitet prema kemiji koji će se prenositi s generaciju na generaciju.

Zbog toga smatram da bi unatoč svojoj težini i “nerazumljivosti” više pozornosti trebalo posvetiti kvantnim modelima u kemiji već na početku učenja kemije. Ne treba dakako ići u tehničke, posebice matematičke detalje, ali svakako treba shvatiti i prihvatiti da u svijetu atoma i molekula vrijede drugi fizički zakoni negoli u svijetu svakodnevnog iskustva.* Nadam se da će osvješćivanju te činjenice pridonijeti i ovaj članak.

* Razumijevanju naravi atoma mogu pridonijeti i prikladne usporedbe. Može se primjerice postaviti pitanje koliko je velik roj pčela, na koje se načine može definirati njegova veličina i o čemu ona sve ovisi. Što mislite o prikazivanju pčelinjeg roja kuglom? Što nam takav prikaz otkriva, a što skriva? Kojoj subatomskoj čestici odgovara matica, a kojoj pčela radilica?

Literatura References

1. N. Raos, Demokrit u nastavi kemije, *Kem. Ind.* **66** (5-6) (2017) 287–290, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2015.042>.
2. N. Raos, Atomism in Greek philosophy, *Kem. Ind.* **51** (9) (2002) 385–392.
3. N. Raos, Pojam materije u grčkoj filozofiji (II): atomizam, Nove Slike iz kemije (ur. N. Raos), Školska knjiga i Hrvatsko kemijsko društvo, Zagreb, 2004., str. 25–36.
4. D. Grdenić, Povijest kemije, Školska Knjiga i Novi Liber, Zagreb, 2001., str. 125–148.
5. H. Diels, Predsokratovci. Fragmenti. II. svezak, Naprijed, Zagreb. 1983., fr. B9 (Demokrit), str. 165.
6. M. Grba, Modeli atoma u 20. i 21. stoljeću, *Kem. Ind.* **68** (5-6) (2019) 209–216, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2019.003>.
7. R. Bošković, Teorija prirodne filozofije, prijevod i reprint, Sveučilišna naklada Liber, Zagreb, 1974., str. 4. (R. P. Boscovich, *Theoria philosophiae naturalis*, Venetis, 1763.)
8. W. B. Jensen, Four centuries of atomic theory. An Overview, *Atoms in Chemistry: From Dalton's Predecessors to Complex Atoms and Beyond* (C. Giunta, Ed.), ASF Symposium Series, American Chemical Society, Washington, DC, 2010, str. 8–19, doi: <https://doi.org/10.1021/bk-2010-1044.ch002>.
9. N. Raos, Razvoj ideje atomizma, *Prirodoslovlje* **5** (1) (2005) 45–63.
10. N. Raos, Sukob stare i nove kemije u Hrvatskoj, *Kem. Ind.* **70** (3-4) (2021) 163–170, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2020.039>.
11. N. Bohr, I. On the constitution of atoms and molecules, *Phil. Mag.* **26** (1913) 1–25, doi: <https://doi.org/10.1080/14786441308634955>.
12. M. Eckert, How Sommerfeld extended Bohr's model of the atom (1913–1916), *Eur. Phys. J. H* **39** (2014) 141–156, doi: <https://doi.org/10.1140/epjh/e2013-40052-4>.
13. M. Grba, Što je atomska orbitala?, *Kem. Ind.* **67** (9-10) (2018) 421–426, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2018.035>.
14. CALCULLA – Table of bond lengths in chemical molecules, url: https://cullu.com/bond_lengths.
15. J. Michl, Organic chemical systems, *Theory, Encyclopedia of Physical Science and Technology* (3rd Ed.), 2003., str. 435–457, doi: <https://doi.org/10.1016/B0-12-227410-5/00539-1>.
16. V. Schomaker, D. P. Stevenson, Some revisions of the covalent radii and the additivity rule for the lengths of partially ionic single covalent bonds, *J. Amer. Chem. Soc.* **63** (1941) 37–40, doi: <https://doi.org/10.1021/ja01846a007>.
17. R. Blom, A. Haaland, A modification of the Schomaker—Stevenson rule for prediction of single bond distances, *J. Mol. Struct.* **128** (1-3) (1985) 21–27, doi: [https://doi.org/10.1016/0022-2860\(85\)85036-5](https://doi.org/10.1016/0022-2860(85)85036-5).
18. J. Demaison, Accurate structures of non-rigid molecules by microwave spectroscopy, *J. Laane, M. Dakkouri, B. van der Veken, H. Oberhammer* (Eds.), *Structures and Conformations of Non-Rigid Molecules. NATO ASI Series (Series C: Mathematical and Physical Sciences)*, vol. 410, 1993., Springer, Dordrecht, str. 239–256, doi: https://doi.org/10.1007/978-94-011-2074-6_12.
19. J. Kraitchman, Determination of molecular structure from microwave spectroscopic data, *Am. J. Phys.* **21** (1953) 17–24, doi: <https://aapt.scitation.org/doi/10.1119/1.1933338>.
20. H. D. Rudolph, Extending Kraitchman's equations, *J. Mol. Spectr.* **89** (1981) 430–439, doi: [https://doi.org/10.1016/0022-2852\(81\)90036-9](https://doi.org/10.1016/0022-2852(81)90036-9).
21. N. Judaš, Brojenje malih stvari – iliti koliko su mali atomi i molekule, Nove Slike iz kemije (ur. N. Raos), Školska knjiga i Hrvatsko kemijsko društvo, Zagreb, 2004., str. 49–62.
22. J. Wisniak, Heike Kamerlingh – The Virial Equation of State, *Ind. J. Chem. Technol.* **10** (5) (2003) 564–572, url: <https://www.researchgate.net/publication/236233782>.
23. M. Sikirica, Kako steći predodžbu o veličini atoma i iona, *Kem. Ind.* **70** (1-2) (2021) 57–64, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2020.055>.
24. N. Raos, Molekularno modeliranje praznine, *Kem. Ind.* **48** (11) (1999) 385–390.
25. M. Grba, Fizika nakon čuda 1905. Nove teorije, neočekivani obrati i fantastični eksperimenti suvremene fizike, Alfa, Zagreb, 2016., str. 141.
26. A. N. Whitehead, *Science and the Modern World*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1953 (A. N. Vajthed, *Nauka i moderni svet*, Nolit, Beograd, 1976.).
27. I. Supek, *Filozofija, znanost i humanizam*, II. izmijenjeno i popunjeno izdanje, Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti i Školska knjiga, Zagreb, 1995., str. 197.
28. P. Kalinović, Molekularni modeli: izrada modela s magnetima, *Kem. Ind.* **64** (7-8) (2015) 399–402, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2015.023>.

29. *F. Bubanović*, Iz moderne kemije, Matica hrvatska, Zagreb, 1924., str. 61.
30. *D. Grdenić, B. Kamenar, B. Korpar-Čolig, M. Sikirica, G. Jovanovski*, Tetrakis(trifluoroacetoxymcuri)methane and tetrakis(acetoxymcuri)methane as the reaction products of Hofmann's base with the corresponding acid: X-ray crystallographic evidence, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* (1974) 646–647, doi: <https://doi.org/10.1039/C39740000646>.
31. Ljepota molekulskih struktura/The Beauty of Molecular Structure, katalog/catalogue, Tehnički muzej, Zagreb, 1996., str. 43.
32. Periodni sustav elemenata (ur. *T. Portada, K. Kovač*), Tinta Media Lab d. o. o., www.periodac.hr.

SUMMARY

How to Define the Size of an Atom

Nenad Raos

Despite the fact that atomic, *i.e.* Van der Waals, ionic, and covalent radii are commonplace in chemical textbooks, their real, quantum-mechanical nature is blurred by simplified scholar definitions. The size of an atom may be defined, and calculated, in many ways (from atomic orbital density, bond lengths, microwave spectra, virial coefficient, Lennard-Jones potential), but whatever is calculated, or defined, the obtained value cannot be properly compared to the size of a macroscopic object. This paper stresses the need that students understand the real nature of quantum-chemical models, and not confuse various representations of molecular structure (molecular models) with the real atoms and molecules.

Keywords

Teaching chemistry, quantum chemistry, atomic models, covalent radius, Van der Waals radius, bond length

*Institute for Medical Research
and Occupational Health
Ksaverska c. 2
10 000 Zagreb, Croatia*

*Professional paper
Received April 6, 2021
Accepted May 17, 2021*