

FIZIKAI MOLEKULA, KÉMIAI ATOM?

Schiller Róbert

a kémiai tudomány doktora, c. egyetemi tanár,
MTA KFKI Atomenergia Kutatóintézet
schiller@aeki.kfki.hu

„Nem a kémia öregszik, hanem a kémikus” – mondta a hatvanadik éve felé közelítő Jean Baptiste Boussingault úr. A mondás kicsit több mint százötven évvel ezelőtt, 1860. szeptember 3-án hangzott el Karlsruhéban, minden idők legelső nemzetközi tudományos kongresszusán, száznegyven vegyész előtt (Wurtz, 1984). A kongresszus ötlete August Kekulé-től származott.

A vegyészek kísérletező kedve, az egyetemi kémiaoktatás fejlődése és a kialakuló vegyipar a XIX. század közepére meglehetősen kiterjedt tapasztalati anyagot teremtett. Nagy szükség volt arra, hogy az észleleteket lehetőleg egységes modellek és elméletek alapján értelmezzék. A fizikai elméletek intellektuális sikerei természetesen felkeltették a hozzájuk hasonlóan egzakt, matematizálható teóriák iránti igényt. Arra azonban nem minden kémikus hajlott, hogy tapasztalatait alávesse a fizika törvényeinek, hogy a kémiai jelenségekben speciális fizikai folyamatokat lásson. Sokan igyekeztek azon, hogy önálló, a fizikától független kémiai törvényeket fedezzenek fel. A fizikai elmélet inkább csak példakép volt, eredményeit utánozni akarták, nem alkalmazni.

Félig van talán csak igazunk, ha csodálkozunk elődeink önállóskodó gondolkodásán. Ők a mechanika nagy eredményeit ismerhették és csodálhatták, az erők és mozgások tanát.

A kor fizikája még nem sokat tudott az anyagok felépítéséről, szerkezetéről. A tömegvonzás törvényét, az elektrosztatika jelenségeit ismerték, ezeket néha alkalmazni is próbálták a kémiai jelenségekre, bizony nem sok sikerrel. Nyilván jó oka volt annak, hogy Isaac Newton életműve is kettéváljék; a *Principia* hatalmas és csodált épülete mellett titokban maradt, mert a szerző titokban tartotta, szorgos alkimista laborálásának számtalan megfigyelése. Voltak persze, akik már korábban is másképp gondolkodtak. Mihail Vasziljevics Lomonoszov például – idén van születésének háromszázadik évfordulója – , aki tudományom szerint elsőnek határozta meg a fizikai kémia tárgyát (Partington, 1962, 204.): „Ez a tudomány a fizika törvényei és kísérletei alapján megmagyarázza, hogy mi történik kémiai műveletek során az összetett testekben.” De hát Lomonoszovot éppen úgy nem ismerték, mint az alkimista Newtont.

Kekulé célja a kongresszus összehívásával meglehetősen szerénynek látszhatott: el akarta érni, hogy minden vegyész ugyanazt értse az 'atom', a 'molekula', az 'egyenérték' fogalmán, és hogy azok jelölései is, megnevezései is egységesek legyenek. Ez azonban természetesen nem történhetett anélkül, hogy anyagszerkezeti modellek dolgában egyetértésre ne jussanak. A szervezők óvatosak voltak, tudják

– írták –, hogy ezekben a kérdésekben nem lehet minden nézetkülönbséget azonnal ki-küszöbölni, remélik azonban, „hogyan ez a munka kikövezi a nagyon kívánatos, jövőbeni egyetértés útját a vegyészek között”.

Ha pusztán az évszámokat tekintjük, azt hihetnénk, ezek a viták már régen idejüket múlták.¹ Hiszen úgy tanuljuk, a kérdés megoldódott már az 1800-as évek legelején, amikor John Dalton² megteremtette a korszerű, kémiai megfigyeléseken nyugvó atomelméletet. Ő azonban, szövegének tanúsága szerint, nem tekintette magát semmiképpen az atomelmélet megteremtőjének; a kémia egy új rendszeréről beszél, és ennek alapjaként bizonyos tényeket idéz, megfigyeléseket, amelyek „hallgatólagosan elvezettek ahhoz a láthatóan egyetemesen elfogadott nézethez, mely szerint minden érzékelhető kiterjedésű test [...] hallatlan számú, végletesen parányi anyagi részecskéből vagy atomból áll...” Vagyis azt, hogy az anyag atomos szerkezetű, szerinte mindenki tudja.

Thomas Thomson² sem ír mást néhány évvel később: „Az általános vélemény az, hogy a testek atomokból, vagy parányi szilárd részecskéből állnak, melyek tovább nem oszthatók.” A felfogás, amire itt hivatkoznak, persze csak annyiban volt általános, hogy a

makroszkóposan összefüggőnek mutató anyagokat diszkontinuus, korpuszkuláris szerkezetűnek gondolták. Abban azonban, hogy ezek az apró részecskék egymás között egyformák-e, megőrzik-e tulajdonságaikat a különböző átalakulások során, anyagonként eltérő természetűek-e, már egyáltalán nem volt egyetértés.

Thomson rokonszenvesen és kritikusan óvatos is ebben a kérdésben, óvatosabb, mint Dalton. „A testek végső elemeinek természetéből következően nincs semmiféle módunk arra, hogy pontos ismeretekre tegyünk szert.” Majd kifejti a térben kiterjedt atomok hipotézisét, amelyről aztán egy mondattal később ő is azt állítja, hogy az „elismert tény”. Nehéz dolog következetesen szkeptikusnak maradni kedvenc eszméinkkel szemben.

A tények azonban, amelyekre Dalton hivatkozik, rendkívül figyelemreméltóak. Annak a felismeréséről van ugyanis szó, hogy az anyagok (minden anyag?) mindhárom halmazállapotban előfordulhatnak: a víz lehet szilárd, lehet folyékony vagy gáznemű. Ebben a kérdésben a XIX. század elejére, úgy látszik, valóban egyetértés alakult ki. Mi ma egyfelől ezt triviálisan igaznak tartjuk, másfelől tudjuk, hogy gyakran nagyon nem igaz. Senki nem látott légnemű répacukrot. A Robert Boyle előtti kémia – Paracelsusra szoktunk ilyenkor gondolni, pedig az eszmék sokkal tovább fennmaradtak – nagyon másképpen gondolkodott a halmazállapot felől: azt az anyagok megváltoztathatatlan tulajdonságának tekintette. Annyira, hogy a kor felfogása szerint az egyes komponensek halmazállapota, éghetősége (ezt a kettőt tekintették az anyag alapvető sajátosságának) még a kémiai átalakulások során is változatlanul megőrződik. Ha az anyagokat kegyetlen destruktív desztillációnak vetik alá, szét lehet őket bontani külön-

¹ A cikknek Daltonról és kortársairól szóló része egy korábbi, az interneten olvasható közlemény változata: Schiller Róbert: Sejtelem és Ockham borotvája, <http://www.chemonet.hu/menu/index1.htm>

² John Dalton: *A kémia új rendszere* (Részletek) (1808); Joseph Louis Gay-Lussac: *Közlemény gáz alakú anyagok egymással való vegyüléséről* (1809); Amadeo Avogadro: *Tanulmány testek elemi molekulái relatív tömegének egy meghatározási módjáról és az arányokról, amelyekben ezek a molekulák a vegyületeket felépítik* (1811); Thomas Thomson: *A kémiai kombinációk pontos arányainak Dalton-féle elméletéről* (1813) – A négy klasszikus cikk elérhető magyarul Szepesváry Pálné fordításában: <http://www.chemonet.hu/menu/index1.htm>

böző komponensekre, és azok olyan állapotban gyűlnek össze a szedőben, vagy maradnak vissza a retortában, amilyenben az összetett anyagban rejtettek. Az, hogy összetétel és halmazállapot két, egymástól független dolog, valóban újabb keletű, de Dalton idejére már láthatóan meggyökeresedett felfogás.

Azt, hogy légnemű anyag is lehet egy kémiai átalakulás terméke, valószínűleg maga Paracelsus vette észre először. A vadul felszabaduló, pezsgő, fortyogó, kiszámíthatatlanul elszálló fázist a *chaos* névvel illette (Jan Baptist van Helmont ebből formálta a *gáz* szót), vagyis valami nagyon szabálytalan, megjósolhatatlan viselkedésűt látott benne.

Aztán persze megszelídítették a gázokat, azt hiszem, Boyle tette ezen a téren a legtöbbet. Ezért Joseph Louis Gay-Lussac már így írhatott: „...a testek hasonló körülmények között egyszerű, szabályos törvényeknek csak akkor engedelmessé válnak, amikor ez a vonzás [ti. az atomok között ható] megszűnik, mint ahogy ez gázokban be is következik.” Vagyis a gáz éppen nem a legszabálytalanabb, hanem a legszabályosabb állapota az anyagnak. Már bizonyos értelemben.

A gázatomok közti kölcsönhatás leírásában egyébként Gay-Lussac szavai állnak a legközelebb ahhoz, amit ma gondolunk erről. Annyira, hogy el kell csodálkoznunk, honnan tudta ezt Gay-Lussac. Hiszen se az intermolekuláris erők természetéről, se az intermolekuláris távolságokról nem lehetett fogalma. Arra persze, hogy a gázokban nagyon ritkásan vannak a részecskék, a gázok kicsiny sűrűségéből lehetett következtetni. Amennyiben persze az anyagokat diszkrét részecskék építik fel; amit viszont csak onnan tudunk, hogy ez „láthatóan egyetemesen elfogadott nézet”.

Thomson a gázok felépítését tekintve régiebb, úgyszólván szélsőségesebb nézetet

képvisei, mint Gay-Lussac. Szerinte a „gáznak, lévén elasztikus fluidum, olyan atomokból kell állnia, amelyek taszítják egymást”. Ez Newton felfogása, aki a gázok hajlamát a spontán kiterjedésre csak taszító erők hatásaként tudta elképzelni.

Ebben a kérdésben Dalton látszik a legkonzervatívabbnak. Szerinte a gázatom „méltóságát azzal őrzi, hogy a többieket, akik súlyuknál fogva vagy más okból rátelepednének, tisztes távolságban tartja.” Dalton és Gay-Lussac szövegei egy év különbséggel jelentek meg. Ebben a mondatban mintha évszázadok lennének közöttük. Az atom méltóságáról szóló kijelentés mintha a középkort idézné. Daltonnak fel szokták róni, hogy jelöléseiben, kémiai írásmódjában visszanyúlt az alkímista szimbólumokhoz. Meglehetően egyszerűen a grafikai hagyomány tisztelete vezette ebben.

Dalton, miután kifejti az anyagmegmaradás tételét „a kémiai lehetőségek határain belül” (ezt az óvatos megkötést az utódok könnyen semmibe vették), kijelenti, hogy a súly szerinti analízis eredményei alkalmasak arra, hogy az atomok relatív súlyát meghatározzuk. Ehhez persze az kell, hogy tudjuk „az összetett részecskéket felépítő egyszerű elemi részecskék számát”, vagyis a molekulák atomi összetételét, az összegképletet. Erre nézve Daltonnak semmilyen előzetes ismerete nem lehetett. Ezért kénytelen volt végiggondolni, hogy az atomok milyen kombinációkban építhetnek föl molekulákat. Ezt ismerjük mi a többszörös súlyviszonyok törvényeként, és igaznak ismerjük, amennyiben a nitrogén vagy a szén oxidjainak a súlyviszonyaira helyesnek találjuk, ahogy annak találta Dalton is, Thomson is.

Éppen csak azt kell eleve feltennünk a molekulásúlyok Dalton-féle meghatározásá-

hoz, hogy „ha két test között csak egy kombináció lehetséges, azt kettősnek kell tartani, hacsak az ellenkezőjére nincsen okunk”. Ez a mondat megint csak a középkort idézi, pedig úgy tanultuk, ezzel a mondattal kezdődik a modern kémia. „Hiábavaló többhöz folyamodnunk, amikor kevesebbrel is megtehetjük ugyanazt.” Ezt a ferencendi skolasztikus filozófus, William Ockham mondta valamikor a XIV. század első felében (Bertrand Russell (1984) nyomán idézem), és ennek a mondásnak egy apokrif változatát hívták később Ockham borotvájának. Russell magyarázata szerint annyit jelent, hogy nincs értelme feltételezni olyan entitást, amelyre nincsen szükség valamely tudomány eredményeinek magyarázatában. Dalton idézett mondatában Ockham egyébként igen hasznos, de látni valóan veszedelmes eszközével leborotválta a kétféle elemből felépített, háromatomos molekulákat. Valamennyit. Nem látván okot az ellenkezőjére, azt állította, hogy hidrogén és oxigén legegyszerűbb vegyületének az összetétele HO. Szén és oxigén legegyszerűbb vegyületéé CO. Ma tudjuk, az első képlet hibás, a második helyes.

Algebrailag tekintve a dolog persze egyszerű. Egyszerűen reménytelen. Az $A+B=AB$ reakció tömegmérlege az anyagmegmaradás értelmében $m_A + m_B = m_{AB}$. Az atomelmélet szerint pedig $m_A = n_A M_A$, $m_B = n_B M_B$ és $m_{AB} = n_{AB} M_{AB}$, ahol n_A, \dots mólszámokat, M_A, \dots atom- vagy molekulatömegeket jelöl. Az m tömegek mérhetőek, az n számokról viszont azt hiszünk, amit akarunk. Hat ismeretlenünk van és csak négy egyenletünk. Ezt természetesen Dalton is tudta, ezért folyamosított a kombinációkhoz és a létező legegyszerűbb molekulákra vonatkozó feltételezéshez.

A kiút: meg kell határozni a mólok (molekulák) számát. Már a relatív számok is segí-

tenek, pontosabban szólva, csak azok segítenek, hiszen az előbbi algebrai feladatban ez két további egyenletet jelent, és éppen annyira is van szükségünk. Erre a lehetőséget a gázok tanulmányozása adja meg. Azok térfogatai a tapasztalat szerint egyszerű szabályokat követnek a kémiai átalakulások során. Gay-Lussac² „megmutatta, hogy a gázok mindig egyszerű térfogat-arányokban egyesülnek” és ennek nyomán Amadeo Avogadro³ (majd André-Marie Ampère) kijelentette: „Az első, ezzel kapcsolatban felvetődő és szemmel láthatóan az egyetlen elfogadható hipotézis, miszerint a molekulák száma bármely gázban azonos térfogatban mindig azonos és mindig arányos a térfogattal.” Vagyis a V térfogat és az n mólszám arányos egymással, $V_A/V_B = n_A/n_B$ és $V_A/V_{AB} = n_A/n_{AB}$. A reagáló térfogatok viszonyai egyenlőek a mólszámok viszonyaival.

Akkor tehát tudunk mindent? A sztoichiometria alapvető problémái megoldva? Úgy látszik, igen. Hiszen Avogadro ennek az egyszerű feltevésnek az alapján rögtön kijavítja mindazt, amit Dalton tévesen gondolt: az elemi gázok molekuláiról megtudjuk, hogy két atomból állnak, a víz összetételéről, hogy H_2O , az ammóniáéé, hogy NH_3 . Erről ma sem lehet többet vagy helyesebbet tudni. És a klasszikus molekulatömeg-meghatározások, Jean-Baptiste Dumas fontos munkái, mind Gay-Lussac és Avogadro gondolatán alapsznak.

De furcsa, hogy a nagyon világosan gondolkodó kortárs, Thomson nem ismerte föl ennek az eszmének a jelentőségét. Gay-Lussac észleleteiről csak annyit mond, hogy „a szabálygyűjtemény nyilvánvalóan kapcsolódik Dalton elméletéhez. Egyszerű, szép és igen hasznos a gyakorlati kémiában.” Avogadróról pedig mintha nem is hallott volna. Sőt, maga Dalton is elutasította Gay-Lussac tér-

fogati törvényét, erősen megnehezítve saját követőinek a helyzetét.

Úgy látszik, ami nekünk, késői utódoknak világos, mert úgy tudjuk, az atomok, molekulák elmélete koherensen, meggyőzően tudja a kémiai észleleteket leírni, a kortársak és a közvetlen tanítványok előtt még erősen vitatható volt. Ötven évvel Dalton tanulmánya után, Karlsruheban a kor legkiválóbb kémikusai, legtájékozottabb elméi még vitakozhattak felőle, kételkedhettek benne. A vita természetesen a becsületesen használt *hipotézis* szóból fakadt. Éppen a legszigorúbban gondolkodó fizikusok, kémikusok közül kerültek ki azok, akik elutasították azt, ami nincsen szabatosan bizonyítva, ami csak valószínű, ésszerű föltevés.

Faraday, aki nem vett részt a kongresszuson, például korábban (Faraday, 1968 [1844]; Partington, 1964, 101–102.) azt írta, hogy Dalton elmélete nagyon ügyetlen hipotézis, ami a legkevésbé sem volt abban a segítségére, hogy helyes képet alkosson az anyag részecskéiről. „Mindig biztonságos és tudományos, ha különbséget teszünk, amennyire erőnkől telik, tény és elmélet között.” Ő maga „már kinőtte az atom fogalmát”, inkább Ruder Josip Bošković elméletét fogadta el. A horvát fizikus úgy gondolta, a makroszkópos anyagokat nem részecskék, hanem pontszerű erőforrások építik fel. Faradnyt az elektromos vezetők és szigetelők vizsgálata erősítette meg ebben a felfogásban. Tovább is fejlesztette Bošković modelljét: úgy gondolta, egy vegyület keletkezése abban áll, hogy a különálló erőforrások egymásba hatolnak, majd közös erőforrást alkotnak, hasonlóan a különböző sebességekkel haladó, egygátló víz hullámokhoz. Kicsit elcsodálkozik az ember: nem a vegyértékkötés kvantumelméletének első megfogalmazásáról olvasunk itt?

John Herschel ezzel szemben nagyra tartotta Daltont, szemében ő volt Kepler a kémiában, akinek empirikus megállapításai még egy Newton magyarázatára várnak (Brock, 1967). Vagyis szerinte ez csak nagyon az eleje a történetnek.

Karlsruheban voltak, akik komolyan azt javasolták, hogy vissza kellene térni Jöns Jacob Berzelius jelöléseire. (Berzelius akkor már tizenkét éve nem élt.) Ezt a rendszert már Dalton „ijesztőnek”, egy kortársa pedig „undorító képleteknek” nevezte (Partington, 1964, 159.). Állítólag a memorizálást is segítették volna, de rövidítései szinte megjegyezhetetlenek, és még szerzőjük is következtelenül használta őket. Ezt a javaslatot gyorsan elvetették. Kékel a daltoni kép mellett foglalt állást, az atomokból felépített molekula modellje mellett, amely molekulák ugyan nem oszthatatlanok, kémiai reakcióik során azonban tökéletesen oszthatatlan részecskékre hasadhatnak. „Maguk az elemek is, ha szabad állapotban vannak, atomokból felépített molekulákból állnak. Így a szabad klórmolekulát két atom építi fel. Ez a tény pedig eltérő molekuláris és atomi egységekre vezet: 1. fizikai molekulák, 2. kémiai molekulák, 3. atomok. A gázállapotú fizikai molekulákról eddig nem bizonyították be, hogy azonosak a szilárd anyagok és a folyadékok fizikai molekuláival. Ezen felül, a kémiai molekulákról sem bizonyították még be, hogy azonosak a gázok molekuláival. Így tehát 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.”

A termikus jelenségeket leíró, atomi-molekuláris modellen nyugvó kinetikus gázelmélet ekkoriban gyorsan fejlődött. Rudolf Clausius 1857-ben megállapította, hogy a

gáznyomás a részecskék translációs energiájából származik, megalapozta a gázok fajhőjének és diffúziójának a molekuláris elméletét. James Clerk Maxwell 1860-ban kidolgozta a részecskék sebességeloszlásának függvényét, és kimondta az ekvipartíció elvét, azt a tételt, amelynek alapján összefüggést lehet találni a molekulák felépítése és a gázok fajhője között. De még tizenöt évvel később is, egy vegyészeknek tartott, tehát matematikai levezetésekkel takarékosan bánó előadásában (Maxwell, 1875) úgy fogalmazott: „A matematikai vizsgálatok szempontjából nem lényeges feltételeznünk, hogy a molekulák atomokból állnak.” Óvatosnak kell lenni!

Stanislao Cannizzaro, a karlsruhei kongresszusnak bizonyára legnagyobb hatású résztvevője, határozottan azon a véleményen volt, hogy a kémiai és fizikai molekula egy és ugyanaz. Álláspontját nagyon jól ismerjük, mert az összejövetelen szétosztotta egy két évvel korábban írt cikkét (*Sketch on a Course of Chemical Philosophy* [Nye, 1984]), felfedezve így a *preprint* használatát és hasznát is. A cikk címe szerint *A kémiai filozófia előadásainak vázlatja*, és nagyjából azt tartalmazza reagáló tömegekről, térfogatokról, összetételekről, atom- és molekulatömegekről, amit mai ismereteink szerint helyesnek tartunk. Kémiai képletnyelve is azonos a miénkkel. Bizonyításai között azonban van, ami megdöbbentheti az olvasót.

Maxwell óvakodott attól, hogy a gázok fajhőjéből a gázmolekulák szerkezetére következtessen, pedig – mi tudjuk – megtehetné volna. Cannizzaro különösebb magyarázat vagy indoklás nélkül kijelentette, hogy a szilárd állapotú vegyületek mólhője arányos a molekulát felépítő atomok számával. Valóban, az egy atomra jutó mólhőt minden esetben körülbelül akkorának találta, amekkorát az

atomokból felépített szilárd elemekre nézve az akkor már jól ismert Dulong–Petit-törvény megkövetel. Ezt a törvényt Franz Neumann, majd Hermann Franz Moritz Kopp valóban kiterjesztette vegyületekre, azonban elég hamar kiderült, hogy tévedtek (Partington, 1964, 201–202.; Erdy-Grúz – Schay, 1955, 477.). Cannizzaro viszont (anélkül hogy bármelyik szerzőre is hivatkozott volna), elfogadta ezt a kiterjesztést. De ennek a téves következtetésnek az alapján mégis helyesen állapította meg a szilárd állapotú vegyületek összetételét.

A karlsruhei jegyzőkönyv szerint száznegyven résztvevője volt a kongresszusnak, közülük azonban csak kevesen szólaltak meg. A passzív résztvevők között volt például Robert Bunsen (egyébként idén van születésének kétszázadik évfordulója), de őrá mindenki tudta, hogy csöppet sem érdeklődik semmiféle teória (Laidler, 1993, 168.). És ott volt Sir Benjamin Collins Brodie is, az oxfordi professzor, aki már jelentős eredményeket ért el a preparatív kémia területén – ennek a cikknek az írása idején hallottam, hogy ő szintetizált először grafit-oxidot, azt az anyagot, amely az utóbbi néhány évben lett igen fontos a grafén előállításával kapcsolatban.

Brodie egyszer látott egy molekula-modellt, amelyet golyókból és huzalokból kellett felépíteni (Brock, 1967). Ez végleg elundorította Daltontól és az atomizmustól. Véleménye szerint ez az elmélet „teljességgel materialista asztalosmunka”, és csak azt bizonyítja, hogy a kémia letévedt a filozófia útjáról. Helyette kidolgozta a maga elméletét, címe szerint *A kémiai műveletek számítását*. Célja az volt, hogy anyagi modell helyett matematikai műveleteket találjon, amelyeket kémiai szimbólumokra alkalmazva leírják a tapasztalt átalakulásokat. Az alapvető mennyiség,

amelyből a rendszer kiindul, az üres tér egységnyi térfogata. Ha erre alkalmaz valamilyen műveletet, azzal meghatározott fajtájú és súlyú anyagot rendel ehhez a térrészhez. A kémiai átalakulásokat a súlyváltozások mérik; két átalakulást identikusnak tekint, ha mindkettő azonos súlyt eredményez. Beszél „egyszerű” és „összetett” súlyokról – nem értettem egészen, hogy szabad-e ezen elemet és vegyületet érteni – és egy erre a célra kidolgozott algebra műveleti szabályai szerint, amelyeket az egységnyi térfogatra alkalmaz, igyekszik leírni-követni-előre látni az átalakulásokat. Ezt az algebrát, azt hiszem, kár lenne idemácsolni. Két dolog így is világos. Az egyik, hogy Brodie egyetlen információt használ, a tömegváltozásokat. A másik, hogy a folyamatokat teljesen absztrakt módon, az anyagtól elkülönítve igyekszik leírni.

Ez utóbbiban nem konzekvens. Egy előadásában műveleti jeleit úgy értelmezi, hogy azok a csillagokban végbemenő valóságos folyamatokat, elemek keletkezését írják le. Vagyis ami a földön algebrai absztrakció, az a világűrben anyagi folyamat? A dolog a maga idején talán kevésbé tűnt abszurdnak, mint ahogyan manapság cseng. Brodie munkájának évtizedében fedezte fel Norman Lockyer a Nap spektrumában a héliumot, egy olyan elemet, amely ismeretlen volt a Földön. Ami azonban a tömegekre épített algebrát illeti, arról csak addig lehetett egyáltalán beszélni, amíg az izoméria jelenségét fel nem fedezték. Egy vegyület izomérjeinek azonos a kémiai összetételük, tehát egyforma a móltömegük, kémiai természetük azonban nagyon is eltérő lehet – eszerint a tömeg aligha elégséges az anyagok és átalakulásaik jellemzésére.

Faraday zseniálisan elutasító. Kekulé a vegyész elfogultságával, Maxwell a matematikus körültekintésével kétségeskedik a mole-

kula fogalmának kémiai és fizikai meghatározása körül. Cannizzaro néha hibásan érvel. Brodie matematikai szemléletű, elvont képeket és képleteket alkot. . . . aztán mégis, lassan-lassan Dalton és Avogadro elképzelései elfoglalják a helyüket a vegyészek közgondolkodásában. Közvetlen kísérleti bizonyíték még nincsen az anyagok diszkontinuuus, korpuszkuláris felépítésére, nem ismernek semmi mérési módszert, ami feltárná a molekulák atomi szerkezetét. Azokat az elméleteket pedig, amelyek nem kizárólag mérhető, észlelhető mennyiségeket tartalmaznak, a korszak pozitívista gondolkodásmódja szívesen elutasítja. Mégis, ez az atomi golyókkal operáló asztalosmunka egyre sikeresebbé, a szemléletet és gondolkodást határozottan irányító és egységesítő erővé válik. Különösen megerősödik az izoméria tapasztalati anyagának a gazdagodásával. Egy vegyület izomérjeinek a molekuláit úgy lehetett a legkönnyebben elképzelni, hogy ugyanannyi és ugyanolyan fajta atom építi fel valamennyit, de ezeknek az elrendezése más és más – az atomi golyók sorrendje, a belőlük kialakuló térbeli alakzat eltér az egyes izomérekben. Ezt a modellt semmilyen tapasztalat nem cáfolta meg.

A statisztikus mechanika tökéletesedő épülete is összhangban állt ezzel a képpel. A részletes számításokhoz, az egyes anyagok tulajdonságainak, legelőbb is talán fajhójének a kiszámításához elengedhetetlen volt a molekulák szerkezetének az ismerete. Úgy találták, hogy a kémiai tapasztalatnak és a statisztikus fizikai számításnak azonos molekulamodelleken kell nyugodnia. Kekulé tehát választ kapott: a fizikai és a kémiai molekulák azonosak egymással.

A végső bizonyítékokra, az anyag diszkontinuitására, a statisztikus mechanikai törvények prediktív erejére, az atomok kémiai

állandóságára vonatkozóakra azonban még várni kellett. Az atmoszféra fényszórásának Albert Einsteinól származó értelmezése, a fokozatosan kifejlődő tömegspektroszkópia, az elemi töltés létezésének Robert Millikan-féle bizonyítása, a Max von Laue felfedezte röntgendiffrakció, Jean Baptiste Perrin kísérletei a Brown-mozgással kapcsolatban csak a xx. század elejére szolgáltattak már cáfolhatatlan érveket a száz évvel korábbi elképzelések mellett.

Azonban mire mindez ennyire világossá vált, addigra a vegyész magabiztosságának meg kellett inognia. Az atom fogalmát illetően Karlsruhe atomistáinak nem voltak kétségeik, abban biztosak voltak, hogy kémikus és fizikus ugyanarra gondol az *atom* szó halatán. Az elemi anyagnak azt a legkisebb darabját jelöli, amely semmilyen fizikai és semmilyen kémiai folyamat során meg nem változik. Oszthatatlan és átalakíthatatlan. Ami például azt jelenti, hogy a bárium-kloridban és a bárium-szulfátban ugyanolyan báriumatom van. A két molekula sok tulajdonsá-

gában tér el egymástól, a báriumatomok azonban egyformák. Ezért joggal várhatták volna, hogy a rádium-kloridban és a rádium-szulfátban is egyformák a rádiumatomok. Ami viszont (kiderült) csak addig igaz, amíg a rádiumatom át nem alakul radonatommá.

Nagyon hamar jött ez a felismerés, rövid ideig élt a kémia lassan kialakult, harmonikus képe. A xix. század utolsó éveiben, akkor tehát, amikor még az anyag molekuláris szerkezetét bizonyító kísérletek meg se születettek, már felfedezték, tanulmányozták a radioaktivitás jelenségeit. Azóta az atom fogalma elveszítette azt a biztonságát, melyet a kémia jóvoltából élvezett. Ezt a felfedezést ünnepli a Kémia Nemzetközi Éve.

Százötven év óta biztosak vagyunk abban, hogy a molekula ugyanaz a kémiában és fizikában. Száz év óta biztosak vagyunk abban, hogy az atom nem ugyanaz a kémiában és fizikában.

Kulcsszavak: *a Kémia Nemzetközi Éve, kémia-történet, atom, molekula*

IRODALOM

- Brock, William H. (ed.) (1967): *The Atomic Debate – Brodie and the Rejection of the Atomic Theory*. Leicester University Press
- Erdey-Grúz Tibor – Schay Géza (1955): *Elméleti fizikai kémia I*. Tankönyvkiadó, Budapest
- Faraday, Michael (1968 [1844]): A Speculation Touching Electric Conduction and the Nature of Matter. In: Knight, David M. (arranged and introduced): *Classical Scientific Papers – Chemistry*. Mills and Boon, London, magyarul: <http://www.kfki.hu/~cheminfo/hun/olvaso/histchem/mol/faraday.html>
- Laidler, Keith James (1993): *The World of Physical Chemistry*. Oxford University Press, Oxford • <http://books.google.hu/>
- Maxwell, James Clerk (1984 [1875]): On the Dynamical Evidence of the Molecular Constitution of Bodies. In: Nye, Mary Jo: *The Question of the Atom: From the Karlsruhe Congress to the First Solway Conference*

- 1860–1911. Tomash, Los Angeles, második utánnymás, 1986: • <http://books.google.hu>
- Nye, Mary Jo (1984): *The Question of the Atom: From the Karlsruhe Congress to the First Solway Conference 1860–1911*. Tomash, Los Angeles
- Partington, James R. (1962): *A History of Chemistry*. Vol. III, MacMillan, London
- Partington, James R. (1964): *A History of Chemistry*. Vol. IV, MacMillan, London
- Russel, Bertrand (1984): *A nyugati filozófia története* (ford. Kovács Mihály). Göncöl, Budapest
- Wurtz, Charles-Adolphe (1984): Account of the Sessions of the International Congress of Chemists in Karlsruhe, on 3, 4, and 5 September 1860. In: Nye, Mary Jo (1984): *The Question of the Atom: From the Karlsruhe Congress to the First Solway Conference 1860–1911*. Tomash, Los Angeles • <http://web.lemoyne.edu/~giunta/karlsruhe.html>