

Kvantkemi i skolan, möjligt eller omöjligt?

HENRIK KONSCHIN, Kemiska institutionen, laboratoriet för svenskspråkig undervisning, Helsingfors universitet, henrik.konschin@helsinki.fi

“Those who are not shocked when they first come across quantum mechanics cannot possibly have understood it” (Niels Bohr)

“I think it is safe to say that no one understands quantum mechanics” (Richard Feynman)

Kvantmekaniken utgör grunden för en stor del av den beräkningsmässiga kemi som presenterats i de föregående artiklarna i denna serie om molekylmodellering. Hur borde man då i ljuset av ovanstående citat av så framstående forskare som Bohr och Feynman försvara att kvantkemi, d.v.s. kvantmekanikens tillämpning på kemiska system, kunde tas upp redan på skolnivå? Jag skall i denna artikel försöka visa hur man via några, utvalda fundamentalbegrepp kunde närma sig problemet. Jag försöker även föreslå var, och med vad, man då inom kemi-, fysik- och matematikundervisningen kunde samarbeta.

I tidigare artiklar i denna serie har Maija Aksela och Jan Lundell mångsidigt visat hur molekylmodellering kunde användas inom skolans kemiundervisning. Här vill jag reflektera över möjligheten (omöjligheten) att redan i skolkemin introducera kvantkemins fundamentalbegrepp för att klargöra bakgrunden till molekylmodelleringens utmärkta sätt att illustrativt beskriva olika kemiska system och processer. Varför kvantkemi? Därför att skådespelarna (och statisterna) på den kemiska teater-scenen är elektroner och vill man

åskådliggöra elektronrörelse, elektronförflyttningar, uppkomsten av kemisk bindning och kemiska reaktioner, så kan man inte negligera kvantkemins betraktelsesätt. Kvantkemin öppnar dörrarna för en djupare förståelse av materiens struktur och egenskaper.

Utgångspunkter Schrödingers ekvation

En utgångspunkt för att introducera kvantkemin och samtidigt utnyttja fysikundervisningens läroplaner vore att framhäva likheterna i lärostruktur. Kvantmekanikens grundbegrepp kan lika lite som mekanikens eller termodynamikens grundlagar härledas från mer fundamentala principer. Därför är det lämpligt att uppfatta kvantmekaniken som en axiomatisk lärostruktur, vilken stöds av alla experiment som hittills utförts. Det är viktigt att sambandet experiment-teori/modell understryks, ty annars finns det en risk att själva lärostrukturen uppfattas som alldeles för abstrakt.

Bland de centrala experiment som lade grunden för kvantkemin är det fruktbart att välja sådana, som belyser den dualistiska vågpartikelkaraktären hos dels fotoner d.v.s. ljus, dels elektroner, d.v.s. masspartiklar. Här ges också goda möjligheter att integrera fysikundervisningen med kemin. Fysikernas synsätt beträffande ljus och deras behandling av den fotoelektriska effekten kan väl stöda ke-

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ introduktion till kvantteorin. Bakgrunden till denna dualism gavs av de Broglie när han i sin doktorsavhandling föreslog, att sambandet

$$\lambda = h/p \quad (1)$$

gäller för såväl materia (partiklar) som elektromagnetisk strålning (ljus). Vågpartikel-dualismen leder även till Heisenbergs osäkerhetsprincip och gav en av kvantmekanikens förgrundsfigurer, Erwin Schrödinger, uppslaget till hans vågekvation. Schrödingers ekvation kan betraktas som utgångspunkten för kvantkemin. Ekvationen har glädjande nog idag dykt upp i endel av skolans kemiböcker, dock inte i sin allmänaste, tidsberoende form:

$$= H\Psi(x,y,z) \quad (2)$$

utan i den tidsberoende formen som innehåller Hamiltonoperatorn, H (vilken i sin tur innehåller andra derivatorna av lägeskoordinaterna x, y och z) samt totalenergin E för systemet som betraktas:

$$H\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z) \quad (3)$$

Här kan matematiken stöda kemin. Dels genom att visa hur enkla differential-ekvationer bearbetas, dels genom att påpeka hur viktiga de är i alla naturvetenskapliga sammanhang. Eftersom Hamiltonoperatorn H innehåller den kinetiska och den potentiella energin för systemet, kan matematiken även introducera operatorbegreppet t.ex. via operationen

$$\frac{h^2}{8\pi^2} \frac{d^2\Psi}{dx^2}$$

och motsvarande differentiaaloperator. Matematiken kan även beskriva egenfunktioner och egenvärden. I Schrödingerekvationen är totalenergin egenvärdet till H-operatoren, och kan man lösa ekvationen så erhålles denna för systemet fundamentala energi. Den tidsberoende formen (3) beskriver s.k. stationärtillstånd, d.v.s. stabila atomära och molekylära tillstånd, vilket i sista hand tillåter en att beräkna molekylstrukturen för t.ex. myrsyra samt energier för myrsyrans olika konformer (se tidigare delar av artikelserien).

I åtminstone en skolbok i kemi skrivs Schrödingers tidsberoende ekvation i en ytterligare förenklad form som en endimensionell partiell differentialekvation av andra ordningen

$$+V\Psi = E\Psi \quad (4)$$

Hur borde en sådan ekvation introduceras i skolkemin? Enligt min åsikt borde ekvationen presenteras på följande sätt. Schrödingerekvationen kan betraktas som ett slags "rörelseekvation" för elektronens partikelvåg och denna våg beskrives av lösningarna till differentialekvationen, vågfunktionerna eller tillståndsfunktionerna Ψ (psi). Benämningen rörelseekvation syftar naturligtvis till likheter med såväl Galileis som Newtons rörelseekvationer i mekaniken. Men elektronvågens rörelse är inte likadan, därför citationstecknen. Man kan också notera benämningen tillståndsfunktion för Ψ och jämföra med de termodynamiska tillståndsfunktionerna. Om fysikundervisningen behandlat vågrörelse allmänt och speciellt inom optiken så fås ypperligt stöd för kvantkemins betraktelsesätt. I skolundervisningen behöver man

inte påpeka att den allmänna, tidsberoende formen av Schrödingerekvationen egentligen inte är en vågekvation utan en diffusionsekvation, men om diffusion är bekant kan man – också med hjälp av matematiken – diskutera differentialekvationer av andra ordningen i rumskoordinater men av första ordningen i tidskoordinaten. För lärarens del är det kanske helt bra att ha lite utvidgad kunskap.

Vågfunktionen och den fysikaliska tolkningen

Vågfunktionen Ψ kan betraktas som en amplitud analogt med vanlig vågrörelse men då Ψ kan vara komplex bör den inte tillskrivas någon direkt fysikalisk innebörd. I samband med insikten att vågfunktionen kan vara komplex borde begreppet komplexa tal vara bekant och här kan åter matematikundervisningen ge sitt stöd. Det är även viktigt att begreppet komplexkonjugat introduceras, vilket inses av det som följer.

Den fysikaliska tolkningen av Ψ gavs av Born, igen analogt med klassisk vågrörelse, för vilken amplitudens kvadrat mäter vågens intensitet. Born postulerade då, att $|\Psi|^2$ representerar en sannolikhetsdensitet och att

$$\Psi \cdot \Psi^* \cdot dx \quad (5)$$

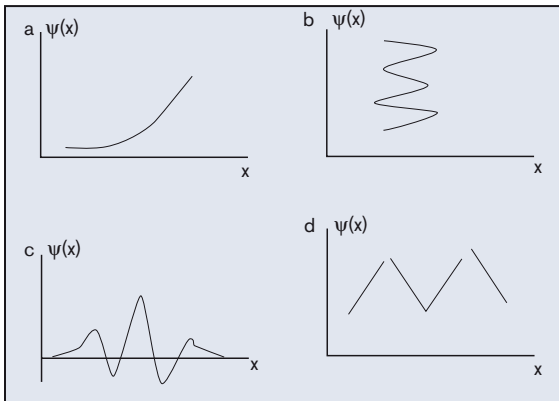
anger sannolikheten att hitta partikeln mellan x och $x+dx$ i rummet. Här är Ψ^* komplexkonjugatformen av Ψ (förutsatt att Ψ är komplex). Emedan partikeln med säkerhet existerar i rummet så bör, om man integrerar sannolikhetsdensiteten (summerar alla sannolikheter) över hela rummet, följande gälla

$$\int \Psi \cdot \Psi^* \cdot d\tau = 1 \quad (6)$$

Då inses omedelbart, att funktionen Ψ bör uppfylla vissa villkor för att vara acceptabel fysikaliskt. Dessa fysikaliska randvillkor är:

Otava 1/3 ilmo, 4-värinen, pysty

→



Figur 1. Olika exempel på vågfunktioner. a) oacceptabel (blir oändlig då x växer), b) oacceptabel (inte entydig), c) acceptabel, d) oacceptabel (diskontinuerlig).

→
Vågfunktionen bör vara kontinuerlig, entydig, ändlig och – som det brukar heta – kvadratisk integrabel. Likaså om man erinrar sig Schrödingerekvationen så inses att den bör kunna deriveras och derivatan skall även den vara kontinuerlig, entydig och ändlig. Därmed har grunden lagts för att diskutera atomära och molekylära system. Om matematikundervisningen berört sannolikhetsbegreppet torde förståelsen för Borns tolkning vara säkrad. Figur 1. visar exempel på olika vågfunktioner.

Kvanttalen och orbitalerna

När man nu löser Schrödingerekvationen för det första kemiska systemet av intresse, d.v.s. väteatomen, en proton med en elektron och endast elektrostatisk potentialenergi $[V$ i ekv. 4 som skrivs $V = -(1/4\pi\epsilon_0) \cdot (1/r)$; attraktion kärna-elektron och representerar en elektrostatisk potential, ett centralfält] samt kinetisk energi för en elektron, leder ovannämnda fysikaliska randvillkor omedelbart till att fysikaliskt godtagbara lösningar Ψ endast kan fås om dessa lösningar karakteriseras av heltalen n , l , och m_l . Vi kallar dessa tal huvudkvanttalet, sidokvanttalet

och Ψ_{nlm} till ekvationen kallas orbital och varje orbital representerar ett möjligt energitillstånd för elektronen i atomen. Några orbitaler för kol, alltså lösningarna till kolatomens Schrödingerekvation för 6 st. elektroner, illustrerades i del 4 av denna artikelserie.

Dessa orbitaler (eller linjärkombinationer av dem) spänner över vårt vanliga fysiska rum och kallas därför ofta rymdorbitaler samt får namnen s -, p -, d -, f -, g -, h -, osv -orbitaler av traditionella skäl då tidiga spektrumstudier visade skarpa (sharp, s), principala (principal, p), diffusa (diffuse, d) och fundamentala (fundamental, f) spektrallinjer – därefter följs alfabetet. Vidare karakteriseras de av huvudkvanttalet n som ns , np , nd osv, och alla orbitaler med samma n bildar ett givet elektronskal eller en huvudenerginivå i systemet. Undernivåerna, själva orbitalerna karakteriseras vidare av kvanttalen l och m_l . I väteatomen och väte-liknande system bestäms energinivåerna endast av huvudkvanttalet n men i flerelektronssystem kommer även sidokvanttalet l att karakterisera energinivåerna p.g.a. den energetiska växelverkan som uppkommer från elektron-elekt-

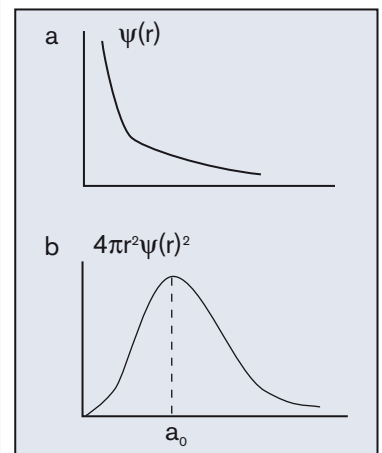
ron repulsionen. Det magnetiska kvanttalet m_l påverkar – som namnet anger – energinivåerna vid närvaro av magnetiska fält.

Lika väl som man i matematikundervisningen lär sig att avbilda funktioner som grafer i ett koordinatsystem, kan man avbilda orbitalerna. Grundtillståndet för väteatomen, som alltså beskrivs av den vågfunktion som har den första tillåtna kombinationen av kvanttal n , l och m_l d.v.s. $\Psi_{1,0,0}$ eller $1s$ -orbitalen, har formen:

$$1s = \Psi_{1,0,0} = (\text{konst}) \cdot e^{-\text{konst} \cdot r} \quad (7)$$

och är således en exponentialfunktion där amplituden Ψ avbildas som en funktion av elektronens avstånd till kärnan, r . Samtidigt ses att denna vågfunktion är reell. På detta sätt har vi möjligheter att avbilda alla möjliga tillstånd för väteatomen. I Figur 2. visas $1s$ -orbitalens utseende samt den radiella delen av orbitalens kvadratform

→ s. 54



Figur 2. a) Den radiella delen av $1s$ -orbitalen i väte, b) elektronens sannolikhetsdistribution radiellt sett i väte, volymelementet dV gäller för en sfär och är $4\pi r^2 dr$ och a_0 anger den s.k. bohr radien ($52,9 \text{ pm}$) som är radien för den första banan (orbit) i Bohrs atommodell. Märk skillnaden mellan benämningen orbit (=bana) och orbital.

(sannolikhetsdensiteten).

Spinnorbitaler och relativitet

Det bör påpekas att det behövs ett fjärde kvanttal för att fullständigt beskriva elektronens tillstånd. Det fjärde kvanttalet är spinnkvanttalet m_s , vilket erhålles precis som n , l och m_l som en följd av fysikaliska randvillkor när mer fullständiga "rörelse"ekvationer än Schrödingerekvationen löses. En sådan är t.ex. den relativistiska Diracekvationen. I den mån fysikkursen i skolan behandlar relativitet ses här en ytterligare kontaktyta. De orbitaler som karaktäriseras av alla fyra kvanttalen kallas spinnorbitaler. Spinnrummet är skilt från det vanliga cartesiska rummet och elektronens spinnkvanttal dessutom ett bråktal. Det kan vara endast $\frac{1}{2}$ (α -spinn) eller $-\frac{1}{2}$ (β -spinn). (Att relativitetsteori och kemi har många beröringspunkter har t.ex. förtjänstfullt visats av bl.a. prof. Pekka Pyykkö med medarbetare vid Kemiska institutionens svenskspråkiga laboratorium. Här kunde man infoga en liten övningsuppgift: Kan du ge exempel på elektroner för vilka en relativistisk behandling vore nödvändig? Och hur påverkas ämnens kemi därvid?).

I diskussionen om elektronens spinn vill jag varna för att i alltför hög grad jämföra elektronspinn med klassisk rotationsrörelse. Om elektronen på något sätt "roterade" runt sin axel skulle enligt Heisenberg en punkt på dess "ekvator" röra sig med en hastighet större än ljushastigheten. Detta vore säkerligen problematiskt att acceptera inom skolkemin och även i övrigt – trots att man begärde hjälp av fysiken. Elektronspinn borde betraktas som en helt intrinsisk, inre, egenskap vilken manifesterar sig som experimenten demonstrerar, d.v.s. så att elektronen

uppvisar ett inre magnetiskt moment. Med en intrinsisk eller inre egenskap menas då nånting som inte påverkar huvudkaraktären, säg liknelsemässigt som t.ex. ögonfärgen hos någon. Endel är blåögd, andra brunögd, utan att det bestämmer exempelvis personens kön.

Ovanstående beskrivning av kvanttalen och hur de erhålles leder till följande slutsatser. Varje elektrontillstånd kan nu fullständigt karaktäriseras med hjälp av fyra kvanttal, n , l , m_l och m_s , och Pauli formulerade den princip som bär hans namn: Två elektroner i ett system kan aldrig ha alla fyra kvanttal lika. Fysikaliskt innebär detta, att högst två elektroner kan placeras på samma rymdorbital eller högst en elektron på varje spinnorbital.

Det som gör begreppet orbital så användbart är, att orbitalbilden kan utsträckas till andra atomer än väte, med andra ord till system med fler än en elektron. Detta skall jag inte gå in på i denna uppsats, men därmed kan grunden för hela det periodiska systemets uppbyggnad läggas. Vidare är i princip grunden även lagd för förklaring av kemisk affinitet samt kemisk reaktivitet. Likaså kan vi börja bygga molekyler, för vilka en analog orbitalbild gäller, nu inom ramen för molekyler, molekylorbitaler. Molekylorbitalerna kan på ett förträffligt sätt beskriva molekylers egenskaper och reaktivitet.

Slutord

Jag har i det föregående försökt diskutera några av kvantkemins fundamentalebegrepp och hur dessa kanske kunde presenteras i skolans kemiundervisning. Samtidigt har jag försökt peka på de samarbetsmöjligheter som därvid erbjuds ämnena kemi, fysik och matema-

tik. Är det då möjligt eller omöjligt med kvantkemi i skolan? Jag tror det är möjligt att ge eleverna en känsla för kvantkemins betraktelsesätt, men det kräver dels stark sakkunskap och samarbete med andra discipliner, dels illustrativ verksamhet.

Den illustrativa delen tillhandahålls på ett utomordentligt sätt av just molekylmodelleringen och därför vore det konstruktivt om man bekantade sig med modellering i skolan. Om det trots allt är omöjligt att lyckas med kvantkemisk undervisning på skolnivå så mister man kanske också modelleringen som ett stöd till kemiundervisningen. Det vore olyckligt. Också om molekylmodellering kan förefalla mer lek än allvar, precis som datorspel, kan det nämligen inte – och får inte – anses lämpligt undervisningsmässigt att använda molekylmodellering som något slags datorspel. Inom naturvetenskaperna är det av primär betydelse att satsa på insikt och förståelse. Modelleringsmetoderna har alla förutsättningar att väcka det intresse som leder till insikt – och visst är vetenskap i hög grad konsten att genom skapande verksamhet (och sådan är lek!) nå banbrytande insikter. Med denna lilla skrivelse har jag strävat att visa hur man måhända kunde fördjupa sin förståelse för kvantkemin och därmed även lusten att använda kvantkemiska modeller. Kanske Bohr och Feynman hade en för pessimistisk syn på tillvaron?