

LINUS PAULING (1901): intuizioaren garaipena

JESUS M^a UGALDE

Kimika-Fisikoko Departamentua. Kimika-Fakultatea
Euskal Herriko Unibertsitatea. P.K.1072. DONOSTIA.

Ez da batere erraza Kimika definitzea luze ihardun gabe. Baina zerbait esan behar bageneza, Kimika lotura kimikoaren zientzia (teoria bakarrik agian) dela esanez gero, askok kimika modernoan mekanika kuantikoaren garrantzia ulertuko lukete. Azken urte hauetan mekanika kuantikoak duen aplikapenak sistema kimikoen ikerketarako erabat ugartu dira; kimika kuantiko izenez izendatzen denari gorputza emanaz. Halaz ere, nahiz kimika kuantikoak lotura kimikoaren explikazio zehatza eman, gaur eguneko kimikariek oraindik, duela berrogei ta hamahiru urte, 1931. urtean alegia, *Linus Pauling*-ek emandakoa erabiltzen dute: "bi atomo edo atomo-multzoen artean lotura kimikoa dagoela esango dugu, haien artean lan egiten duten indarrek atomo edo atomo-multzo horiek agregatu

batean, egonkortasun haina izanik kimikariek konposatu independenteztat har ditzaten, elkartzen dituzte nean". Baina ez da hau, izanik ere, gizon honek emandako ideien artean gaur eguneraino iraun duen bakarra. Honela gaur egun orbital atomikoen hibridazioaren kontzeptua kimika organiko edo inorganikoaren edozein testu-liburutan aurki daiteke. Honek ez du kimika kuantikoa orbitale atomikoen hibridazioarekin bukatzen dela esan nahi (*R. Hoffman*-ek esan zuenez, hor bertan hasten da); kontzeptu hori kimika inorganikoan eta organikoan gertatzen diren arazo gehienei antz emateko oso egokia dela baizik. Goian aipatutakoaren filosofia, positibismo hutsa dela ez dago zalantzarik; baina hala ere ezin dakiok beraren efektibitatea uka. Gainera ikastea, manipulatzea, ikastea, jakitea baino

inportanteagoa denean horrelako jo-
kaerak benetan nagusitu egiten di-
ra; eta beraien defentzaileak, ba-
tzueta, nobel sariarekin hornituak
izaten dira. *Linus Pauling* bera du-
gu esandakoaren adibide nabarmene-
tarikoen bat. Kimika kuantikoan
aritu zen, hau jaio zenetik, beti
ideia trinko bat burutik kentzeke:
lotura kimikoa explikatuz behar ze-
la *momentuko* kimikariek zeukaten
ideei kalte handirik egin gabe.
Esaldi honen bigarren partea izan
zen, hain zuzen, beraren lanen ar-
datza.

Gauza jakina da, kimika kuan-
tikoan, lotura kimikoa explikatzeko
bi teoria desberdin itxuraz, baina
baliokideak izaeraz, proposatu egin
direla. Lehenengoa, gazteena, orbi-
tal molekularren izeneko teoria; *Robert S. Mulliken* eta *Sir John E. Leo-
nard-Jones*-ek 1930. urtean (gutxi go-
ra behera) asmatu zuten, eta be-
raien ikasleek (*C.C.J. Roothaan* eta
J.A. Pople beste fama handikoenen
arteak) hedatu eta formalizatu. Ho-
netan molekular zenbait nukleo eta
elektroiez osatuta daudela da abia-
-puntuatzen hartzen dena, eta elek-
troi bakoitzaren deskripzioa uhin-
-funtzio batez (orbital molekularra,
alegia) egiten da; uhin-funtzio
osoa (molekularena) orbital molek-
ular guztien biderkaketa antisimetriza-
tua izanik, *Pauli*-ren printzipioa
bete dadin. Bigarrena, zaharrena,
Heitler-London-en edota balentzia/
/lotura (Valence-bond ingelesez) iz-
-nekoa da. 1927. urtean, lehenengo
aldiz, bi hidrogeno atomoen arteko
loturari adierazpen kuantitatibo
zehatza (nahiz kuantitatiboki eska-
sa) ematea posible izan zen. *Hei-
tler-London*-en kalkuloak lotura kimi-
koak bi atomoen egoera egonkortzen
zuela frogatu zuten. Honela *Sir Wi-
lliam Ramsey* Londreseko *Chemical
Society*-ren aurrean egindako ihar-
dunaldian (1908. urtean) esandakoari:
"... beraien (elektroiak) ato-
moen arteko lokarria dira", arra-
zoia emanaz. Baina teoria honek
ez zuen baztertzeko kimikak hain

trinko eraiki zuen eredu molek-
ularra: molekular elkarren artean
lotutako atomoak dira. *Heitler* eta
London-entzat hidrogeno-molekula bi
hidrogeno-atomo, elkarren artean
lotuta zen. Baina atomoen indibidua-
litate (nortasuna, eman dezagun)
ez zen inolaz ere galtzen, nahiz
hidrogeno molekula kontsideratzen
aritu izan. Kontura gaitetzen, hauxe
dela, eta ez besterik, kimika orga-
nikoan hain erabilia den molekular
deskripzioa. Hots: azetilenoa zerau
da: $H-C\equiv C-H$, bi karbono-atomo, bi
hidrogeno-atomo eta zenbait lotura
beraien artean (karbonoaren eta
hidrogenoaren ikurrak lotutzen di-
tuen marratxoak, alegia). Bigarren
honen partaide amorratua izan bait
zen *Pauling*, eta teoriari aurrerapen
galanta eman zion. *Pauli*-ren prin-
tzipioa kontutan hartuz, atomoen
lotura edo balentzi elektroiak, egi-
tura askotan banatu zitezkeenetik
abiatuz, erresonantziaren kontzeptu
zehar igaroz, molekularren egitura geo-
metrikoa eta propietate elektroni-
koen arteko erlazioa azpimarratu
zuen, kimika organiko eta inorgani-
ko estrukturalari paregabeko bultz-
kada emanaz. Honela orbital atomi-
ko hibridoak sortu ziren molekula
ioi eta konplexu askoren geometria
explikatzeko. Ez nuke nahi esateke
utzi, beste teoriak, orbital molek-
ularren teoriak guzti hauek ere
explikatu egiten dituela, baina al-
derantzizko prozesu batez; hau da
maila abstrakto batetik maila intui-
tibo batetara igaroz. Askok esan
izan ohi du, *Pauling*-en orbital ato-
mikoen hibridazioaren teoria, ez
dela teoria bat, justifikazio bat bai-
zik; eta agian arrazoia izango du.
Lehenengo molekular geometrikoa
ezagutu behar delako hibridazio-mo-
ta bat edo besteagatik egin deza-
gun alde. Ez dira "a priori" gauzak
esaten "a posteriori" baizik (hona
hemen berriz positibismoa). Baina
hala ere idea hauek ikaragarritzko
hatza utzi izan dute kimikoen pen-
tsamenduan.

Guzti hori ere, asmatu zituen

gure Pauling-ek, zenbait erizpide lotura-elektroiak banatzen diren egitura guztien artean probabilitate handikoan *"a priori"* igertzeko. Hau egiteko atomoen elektronegatibitate ikertu zuen. Honela A-ren elektronegatibitatea B-rena baino handiagoa balitz A^+B^- egiturak A^-B^+ rena baino probabilitate handia gokia izan behar du. Hots, *"elektronegatibitatea atomoek molekuletan elektroiak erakartzeko duten indarra*

da", Pauling-ek esan zuen. Ideia simple hauetaz baliatuz gehien erabiltzen den elektronegatibitateen taula osatu zuen eta duela denbora gutxi arte kimiko teorikoek ikaragarriko lana izan dute taula hori teorikoki (dentsitatearen funtzionalaren teoriaz) esplikatzeko. Berriz ere jaun honen intuizio kimiko handia urteak teoriaren aurretik ibili izan da. Dirudenez benetan ondo merezia zuen jasotako nobel sari hori(*).



Linus Pauling, eskuinekoa, Pakearen saria jasotzen.

(*) Linus Pauling-ek 1954.ean lan hauengatik Kimikazko Nobel Saria jaso zuen. Ondoren 1963.ean Pakearen Nobel Saria jaso zuen desarmarearen aldeko eraman zuen jarrera politikoarengatik.