

# Lotura kimikoaren ikuspegi orokorra



Lan hau Creative Commons-en Nazioarteko 3.0 lizentziaren mendeko Azterketa-Ez komertzial-Partekatu lizentziaren mende dago. Lizentzia horren kopia ikusteko, sartu <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/es/> helbidean.

Salbuespen batzuk badaude ere, gehienetan isolatuta egon beharrea, atomoek elkarrekin eratzen dituzte Naturan. Elkarte hauetako atomen arteko lotura kimikoari buruzko lehen kontzeptu teorikoak XIX.mendean aldarrikatu ziren elektroien ezinbesteko funtzioa onartzearekin batera.

Mekanika kuantikoan oinarritutako teoriak garatu baino lehen landu ziren lotura kimikoaren ereduak egitura-unitate desberdinetan oinarritzen ziren. Hots, modu simple batean honela laburbil daitezke garatutako **eredu klasikoak**: hain zuzen, molekuletako atomoen arteko elkarrekin deskribatzeko garatu ziren lotura kobalentearen ereduak, solido ionikoen ioien artekoa azaltzeko landu zen lotura ionikoaren ereduak eta solido metalikoen katioien artekoa deskribatzeko proposatu zen lotura metalikoaren ereduak.

Planteamendu klasiko honek oso oinarri matematiko sinplea badu ere, biderik aproposena da lotura kimikoari hurbiltzeko. Hots, ikuspuntu klasikotik landutako kontzeptuak barneratuz gero, askoz errezago ulertzen dira mekanika kuantikoaren bidez garatutakoak. Kontzeptu kuantiko hauek bi teoriatan biltzen dira: balentzia-loturaren teoria (BL) eta orbital molekularren teoria (OM), besteak beste.

Kapitulu honetan, lotura kimikoari buruzko egindako proposamen garrantzizkoenak aurkeztu besterik ez ditugu egin behar. Horrela, bidea zabaldua geratuko da hurrengo kapituluetan honetan lehenbiziz aipatzen diren teoretara heltzeko.

## 1. Eredu klasikoak

Lotura azaltzeko eredu klasikoak, materiaren egoerekin dute zerikusia. Materiaren ohiko egoerak hiru dira: gas-egoera, likido-egoera eta solido-egoera, hain zuzen ere. Gas-egoeran atomo isolatuak eta molekulak egon daitezke egitura-unitate gisa. Egitura-unitateen arteko kohesio-indarrak oso ahulak direnez, gasek ez dute forma konstanterik ez eta bolumen konstanterik ere tenperatura eta presio jakin batzuetan. Likido-egoeran molekulen arteko kohesio-indarrak sendagoak dira eta, horren ondorioz, likidoen forma ontziari egokitu arren, bolumena konstantea da tenperatura eta presio jakin batzuetan. Bestalde, molekulak solido egoeran egon daitezke, bolumenak ez ezik, formak ere konstante izan behar du eta, horretarako, kohesio-indarrek askoz sendagoak izan behar dute. Hots, hiru egoera fisikoetan daudenean, molekulen arteko kohesio-indarrak aldatu egiten dira baina molekulen atomoen arteko lotura ez eta hauxe dugu **lotura kobalentea** da. Solido egoeran paketatzen diren egitura-unitateak kontrako zeinuko ioiak izan daitezke. Solido horiek ionikoak dira eta ioien arteko **lotura ionikoa** da. Bestalde, solido metalikoetan paketatzen diren egitura-unitateak katioiak dira eta horien arteko **lotura metalikoa** da. Berrito ere, ideia hauek oso sinplifikatuak daudela azpimarratu behar da.

Solido kobalenteetan ioiak baino atomoak paketatzen dira eta, horregaitik, lotura kobalentearen bidez azal daitezke. Solido hauek molekula infinito modura deskriba daitezke eta elementu bakarreko zein desberdinetako atomoak paketa daitezkeela izan behar da kontuan. Halaber, atomo ez metalikoz osaturiko ioi polinuklearretan, atomoen arteko ere lotura kobalentea da. Zer esanik ez, ioi polinuklear hauek solido ionikoetan har dezakete parte.

Loturaren izaera horrela finkatzean, muturreko kategoriak deskribatzen ari gara. Alabaina, geroago ikusiko dugunez, makina bat espezie daude kategoria hauetan guztiz sartzen ez direnak.

### 1.1. Lotura kobalentea

Lotura kobalentean parte hartzen duten atomoak ez metalikoak dira. Hots, atomo partaideak elektronegatiboak direnez, lotura elektro-bikoteak partekatzean datza. Esan bezala, eratzen diren egitura-

unitateak molekularak zein ioiak izan daitezke, bai elementu bakarreko atomoak eta bai elementu desberdinetako atomoak izan ditzaketenak.

Elektroietan oinarritutako lehen eredu Lewis-ek eta Langmuir-ek proposatu zuten arren, bigarrenaren meritua baztertua izan dela esan beharra dago. 1916. urtearen inguruan, Lewis-ek partekatutako elektroi-bikoteen bidez definitu zuen lotura kobalentea. Halaber, **zortzikotearen araua** proposatzeaz gain, egitura molekularra deskribatzeko ikurrak definitu zituen. Izan ere, gaur egun erabiltzen ditugun lotura bakunarako, bikoitzarako eta hirukoitzarako ikurrak Lewis-ek asmatu zituen.

Eredu hau oso arrakastatsua izan arren, zenbait alderdietan huts egiten zuen. Hain zuzen, zortzikotearen arauak salbuespen asko zituen eta hainbat molekulen eta ioien egitura azaltzeko beste kontzeptu bat definitu behar zen: alegia, **erresonantziaren** kontzeptua. Pauling izan zen kontzeptu hau landu zuena, elektronegatibitatearekin batera.

Lewis-en teoriaren hedapenez, Gillespie-k 1972an balentzia-geruzako elektroi-bikoteen arteko aldarapenaren teoria (BGEBA) garatu zuen, egitura molekularra azaltzeko aurrerapen nabaria izan zena. BGEBA teoriaren arabera, molekula baten geometria determinatzeko, balentzia-elektroien kopurua besterik ez da ezagutu behar. Hain zuzen, elektroi-bikoteak molekularen atomoen inguruan kokatu behar dira atomo zentralerako konfiguraziorik egonkorrena lortuz. Teoria honek kasu askori huts egiten badie ere, oso erabilgarria da makina bat konposatuen geometria azaltzeko.

## 1.2. Lotura ionikoa

Lotura ionikoa atomo metalikoen eta ez-metalikoen artean gauzatzen da. Atomo metalikoek (elektropositiboek) zenbait elektroi transferitzen dizkiete atomo ez-metalikoei (elektronegatiboek) eta horrela suertatutako katioien eta anioien arteko erakarpen-indarrean du oinarri lotura ionikoak. Katioiak eta anioiak egitura-unitate infinitoak eratzen dituzte, **sare ioniko** deritzenak. Egitura-unitate infinitoak esatean, unitate ez-diskretoetaz ari gara. Hots, ioiak espazioko hiru dimentsioetan paketatzen dira kristal solidoak osatuz. Kristalen tamaina aldakorra bada ere, eraturiko txikienetan ere milioika ioi paketatzen dira.

Solido ionikoak ikuspuntu teorikotik deskribatzeko, partikula esferiko kargatutzat jotzen dira ioiak tradizioz. Pentsamolde honen barruan, 1918. eta 1924. urteen bitartean lotura ionikoaren alderdi kuantitatiboak garatu ziren, Born, Landé, Madelung eta Haber zientzilarien lanei esker. Born-ek eta Landé-k **sarearen teoria kristal ionikoetan** garatu zuten. Teoria honen arabera, ioi bakoitzak gainontzeko ioi guztiekin elkarrengaitan du. Horrela, kristal ionikoaren egonkortasuna ioi guztien arteko erakarpen eta aldarapen-indarrek sorrarazitako orekan datza. Bestalde, Madelung-ek sarearen geometriaren araberako konstante bat proposatu zuen sare-energiaren kalkulua hipotesi teorikoen bidez nahitaezkoa dena. Born-ek eta Haber-ek metodo zuzena proposatu zuten sare-energia kalkulatzeko, parametro fisikoen erabileran oinarritua. Metodo honi, **Born-Haber-en ziklo** deritza.

Lehen kontribuzio hauetaz gain, beste geroagoko batzuk ere nabariak izan ziren. Hain zuzen, Kaputinskii-k sare-energia kalkulatu nahian, beste metodo bat proposatu zuen 1956an, erradio ionikoetan oinarritua. Bestalde, Mooser-ek eta Pearson-ek, 1959an, mapa egituralak landu zituzten zeinen bidez egitura ionikoak sistematizatzeko prozedura bat lortu zuten.

Eredu hauen huts egiteak nolabait konpontzeko asmoz, Fajans-ek **polarizazioaren** kontzeptua proposatu zuen 1928an. Kontzeptu honen bidez, Coulson-ek solido ionikoetako kontribuzio kobalentea azaldu zuen 1961ean. Polarizazioarekin zerikusia duen beste kontzeptu bat **polaritate** da. Polaritatearen bidez, esfera kargatuen bidezko deskribapenaren eta solido ioniko errealean arteko diferentzia kuantifika daiteke.

### 1.3. Lotura metalikoa

Lotura metalikoa atomo elektropositiboen artean gauzatzen da. Atomo partaideen balentzia-elektroiak amankomuneko hodei elektronikoa osatzen dute, katioi metalikoak erakartzen dituena. Horrela, atomo partaideak sare metalikoak eratzen dituzte espazioko hiru dimentsioetan paketatuz. Sare ionikoak bezelaxe, metalikoak ere infinitoak dira eta gehienetan sare trinkoak dira non atomoen paketatzeak espazioaren aprobetxamendu maximoa lortzen duen. Metal batzu paketatze-mota desberdinetan kristaliza dezaketenez, horrenbeste solido metalikoak eratzen dira, propietate fisiko desberdinak dituztenak.

Solido metalikoen amankomuneko propietateak oso nabariak dira: hala nola, distira, deformagarritasuna eta eroankortasun termikoa eta elektrikoa. Hala ere, beste propietate fisikoak oso aldakorak dira metal batetik bestera. Hau dela eta, ikuspuntu klasikotik egindako ahaleginak lotura metalikoa azaltzeko ez dute lortu eredu batu egokirik. Dena dela, zenbait zientzilarien lanak aipatu beharra dago. Engel-ek, Brewer-ek eta Griffith-ek lotura-energiatan ihardun zuten eta Pauling-ek propietate magnetikoetan. Bestalde, Altman, Coulson eta Hume-Rothery metalen egiturak sistematizaten saiatu ziren.

Eredu klasikoak lotura ionikoa eta kobalentea ulertzeko baliagarriak badira ere, Newton-en fisika ez da egokia metalen jokabidea deskribatzeko. Hots, solido metalikoetan elektroien portaera Fermi-Dirac-en estatistikaren bidez nahitaez deskribatu behar denez, lotura metalikoari buruzko eredu batua garatu ahal izateko, mekanika kuantikoaren printzipioak kontuan hartzea ezinbestekoa da.

### 1.4. Bestelakoak: koordinazio-konposatuak

Kimika Ezorganikoan oso garrantzi handiko espezieak koordinazio-konposatuak dira zeinetan atomo metaliko baten inguruan zenbait ligando lotuta dauden. Biokimikan ezinbesteko funtzioak betetzen dituzten hainbat espezie koordinazio-konposatuak dira: adibidez, hemoglobina bezalako metaloproteinak. Konposatu hauetako lotura azaltzeko beste eredu batzuk garatu dira zeinak 12.kapituluan azalduko diren.

## 2. Mekanika kuantikoan oinarritutako teoriak

Loturari buruzko eredu batua lortzeko, atomoa ikuspuntu kuantikoa deskribatu behar da nahitaez. Bigarren eta hirugarren kapituluetan ikusi bezala, atomo bateko elektroietaz daukagun informazioa orbital atomikoetan datza (gogoan izan orbital atomikoei asoziatutako probabilitatearen kontseptua).

Interakzio-potentziala definituz gero, Schrödinger-en ekuazioa partikulez osatutako edozein sisteman aplikatu daiteke; beraz, bai eta sistema kimikoetan ere. Hala ere, emaitza zehatzak lortzeko posibilitatea gero eta baxuagoa da sistemaren partikulen kopurua handitzen den heinean. Hots, Hetler-ek eta London-ek 1927ean lehenbiziz  $H_2$  molekula diatomikoaren uhin-funtzioak kalkulatu zituzten eta, horretarako, Born-Oppenheimer-en hurbilketa erabili behar izan zuten. Hurbilketa honen bidez, nukleo atomikoen higidura mezprezatzen da elektroien higidurarekin konparazioz (kontuan izan,  $H_2$  molekulan lau partikula, bi protoi eta bi elektroio, besterik ez daudela).

Esan bezela, molekula konplexuagoak azaltzeko balentzia-loturaren teoria (BL) eta orbital molekularren teoria (OM) garatu ziren mekanika kuantikoaren kontseptuak barneratuz.

## 2.1. Balentzia-loturaren teoria

Balentzia-loturaren teorian, Lewis-en proposamenak moldatzen dira mekanika kuantikoaren printzipioekin bat etor daitezzen. Berriro ere, Pauling daukagu BL teoriaren protagonista nagusia. BL teorian, Lewis-en ereduan bezala, atomo zentrala da molekularren geometria determinatzen duena. Horretarako, atomo zentralak orbital atomikoak hibridatzen ditu **orbital hibridoak** sorterraziz. Elektroi-bikoteetan oinarritzeaz gain, eredu honek erresonantziaren kontzeptua berreskuratzen du deslekupena bihurtuz. Eredu honen bidez lortzen dugun loturaren irudia oso grafikoa eta sinplea da baina ikuspuntu fisikotik ez da oso zehatza.

## 2.2. Orbital molekularren teoria

Orbital molekularren teorian, Hund-ek eta Mulliken-ek garatutakoan, abiapuntua guztiz desberdina da. Hain zuzen, atomo guztien orbital atomikoak konbinatuz orbital molekularrak lortzen dira. Horrela, elektroiak orbital molekularretan kokatzen dira eta, beraz, ez daude atomoei elkartuta molekula osoari baino. Orbital molekularrak (atomikoak bezala) energia eta simetria jakina dituztela azpimarratu behar da. Hau dela eta, elektroien banaketak orbital molekularretan sustantziaren ezaugarriak determinatzen ditu.

Orbital molekularren kontseptuaren ezaugarri nabariena bere izaera batua da. Horrela, lotura polarrak azaltzeko, elementu elektronegatiboen orbital atomikoen partaidetza elektropositiboena baino handiagoa dela jotzen da. Bestalde, solidoak molekula infinitozat jotzen dira, atomoen kopurua milioika baita. Hots,  $n$  orbital atomiko konbinatzen direnean  $n$  orbital molekular lortzen direnez,  $n$  balioa infinitorantz jotzen badu lortutako orbital molekularren energiek elkarrengandik oso hurbil egon behar dute. Orduan, orbital molekularretaz osatutako bandetaz hitz egin behar dugu.

**Banden teoria**, Sommerfield-ek, Bloch-ek eta Brillouin-ek proposatua, solido metalikoetarako garatu zen hasiera batean. Horrela, eredu klasikoaren bidez esplikagaitzak ziren metalen propietate aldakorrak azal bazitezkeen. Banden teoria, ordea, metalak ez ezik, solido kobalenteak deskribatzeko ere eredu aproposa da: izan ere, hain propietate desberdinak dituzten 14. taldeko elementuz eratutako solidoak deskriba daitezke eredu hone bidez.