

Status ontologiczny wiązania chemicznego

dr hab. inż. Andrzej Koleżyński

Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH

Współczesna teoria wiązania chemicznego ma swoje początki w 1916 r., w przełomowej pracy G.N. Lewisa¹. Jego koncepcja wiązań chemicznych jako uwspólnionych par elektronowych, rozwinięta później w modelu VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion)², okazała się niezwykle użyteczną zarówno w jakościowej, jak i ilościowej analizie właściwości cząsteczek i ciał stałych i jest nadal używana na co dzień przez chemików. W teorii tej, wiązanie chemiczne traktuje się jak obiekt rzeczywisty, o dobrze określonych właściwościach, pozwalający opisywać i przewidywać geometrię i właściwości cząsteczek.

Kilka lat później, krótko po sformułowaniu mechaniki kwantowej jako teorii mikroświata, podjęto pierwsze próby wykorzystania tej niezwyklej teorii w chemii, wychodząc od różnych pierwotnych założeń, co ostatecznie doprowadziło do powstania dwóch alternatywnych (ale uzupełniających się) rodzin metod, znanych ogólnie jako teorie wiązania walencyjnego (VB) i orbitali molekularnych (MO). W oryginalnej metodzie VB³ wiązanie chemiczne jest tworzone przez oddziałujące ze sobą, dobrze zlokalizowane orbitale atomowe. Aby opisać bardziej skomplikowane układy, w których istnieją różne możliwe układy wiązań, twórca metody, Linus Pauling, wprowadził tak zwane struktury rezonansowe, wprowadzając w ten sposób do teorii „delokalizację” elektronów. Metody M⁴ oparte są na całkowicie odwrotnym założeniu - tutaj wiązanie chemiczne jest tworzone przez orbitale molekularne (w układach periodycznych odpowiednio orbitale krystaliczne), obejmujące przestrzennie całą cząsteczkę (kryształ), a elektrony pierwotnie przypisane do poszczególnych atomów, są tu całkowicie zdelokalizowane i współdzielone przez wszystkie atomy w cząsteczce (kryształ). W praktycznych obliczeniach orbitale molekularne są zwykle tworzone jako kombinacje liniowe orbitali atomowych. W obu podejściach VB i MO, aby osiągnąć wystarczającą dokładność, konieczne jest uwzględnienie w obliczeniach odpowiednio więcej struktur rezonansowych lub orbitali atomowych. W efekcie, w metodach chemii kwantowej, cząsteczka jest traktowana jako układ dodatnio naładowanych rdzeni atomowych, otoczonych silnie zdelokalizowanymi elektronami, a klasyczny obraz wiązania chemicznego zostaje utracony.

Ta niezgodność w obrazie wiązania chemicznego w chemii klasycznej i chemii kwantowej została użyta przez filozofa chemii, Michaela Weisberga⁵ jako argument na rzecz poglądu, że wiązanie chemiczne nie jest rzeczywistym bytem, a tylko użytecznym pojęciem jakościowym, przydatnym w chemii klasycznej narzędziem opisu właściwości układów molekularnych i krystalicznych. Pogląd taki, popularny wśród części filozofów nauki, pomija jednak całkowicie ważne osiągnięcia chemii teoretycznej, oparte na topologicznych właściwościach gęstości elektronowej i jej pochodnych. Kwantowa teoria atomów w cząsteczkach R.F.W. Badera⁶ (Quantum Theory of Atoms in Molecules and Crystals) oraz ELF - funkcja lokalizacji elektronów A.

Savina⁷. (Electron Localization Function) - różne, ale uzupełniające się metody, pozwalają łączyć ścisły matematyczny formalizm mechaniki kwantowej z klasycznym poglądem Lewisa na wiązanie chemiczne, dostarczając nowych ważnych argumentów w dyskusji na temat ontologii wiązania chemicznego.

W referacie pokażę znaczenie tych nowych metod w analizie statusu ontologicznego wiązania chemicznego i spróbuję uzasadnić twierdzenie, iż ontologia wiązania chemicznego pozostaje wciąż złożonym zagadnieniem, a wiązanie chemiczne jest bytem, w przypadku którego na pytanie o jego obiektywne istnienie w niezależnej od umysłu rzeczywistości fizycznej, wciąż brak prostej i jednoznacznej odpowiedzi.

1. Lewis, G. N. J, Am. Chem. Soc., **38** (1916) 762.
2. Gillespie R.J., Nyholm R.S., Quart Rev Chem Soc **11** (1957) 339.
3. Pauling L., *"The Nature of the Chemical Bond."*, Cornell University Press, Ithaca (1948)
4. Condon E.U., Proc Nat Acad Sci **13** (1927) 466
5. Weisberg M., Phil. Science, in print; philsci-archive.pitt.edu/archive/00003297/
6. Bader R.F.W. *"Atoms in Molecules: A Quantum Theory"*. Oxford University Press, Oxford (1990)
7. Silvi B., Savin A., Nature **371** (1994) 683