



Klaustroan sartzeko Manuel Yáñez doktoregaiaren laudatioa, Jesus M. Ugalde irakasle jaunaren eskutik.

“Poeta batek, zeinaren izena ez dudan oroitzen, oraintxe oroimenetik ihes egin didan bere poemetako batean, badu pasarte bat, zeina ere ezin dudan gogoratu, zeremonia honekin oso bat datorrena”. Hitz horiekin hasi zuen Sir Pelham G. Wodehouse-k bere kontakizun liburu txalotuenetako bateko kontakizun zoragarrietako bat¹. Neuk ere ez ditut gogoan Manuel Yáñez irakasleari gertatutako guztiak, baina ahaleginduko naiz haren istorioa kontatzen. Eta ondo kontatzen asmatzen badut, berehala ohartuko zarete istorio eredugarria dela.

Manuel Yáñez Lugon jaio zen. Hantxe ikasi zuen, eta hantxe igaro zuen bere nerabezaroa, inondik ere idilikoa izan ez zena. Alabaina, Yáñez nerabe hark Lugotik urrun erdietsi beharreko helburu nabarmenak zituen. Kimika ikasi zuen Santiago de Compostelan, eta denbora laburrez Chesteko (Valentzia) Unibertsitate Laboralean irakasle aritu ondoren, bere tesi doktorala aurkeztu zuen Madrilgo Unibertsitate Autonomoan. 1973. urtea zen, eta Doktoregoko Sari Berezia jaso zuen. Hurrengo bi urteak Pennsylvanian igaro zituen, Pittsburgheko Carnegie Mellon Unibertsitatean, John A. Pople 1998ko Kimikako Nobel saridunaren taldean. Han ezagutu zuen Kimika Konputazionalaren gaina eta bikaina, crème de la crème, eta bere burua ere han ezagutarazi zuen. Eta seguru asko -ez baitakit ziurtasun osoz, hasiera-hasieratik ohartarazi baitizuet hala izan zitekeela- hantxe sortu zitzaion ikerketa zientifikoari begirako pasioa, eta ez nabil hitzak puzten, arlo horretan lortu baititu bikaintasun mailarik gorenenak. Askotan saritu izan dute: Madrilgo Unibertsitate Autonomoko Fundazioak, 1993. urtean; Kimikako Espainiako Errege Elkarteak, 2001ean; eta 2003an, Frantziako Gobernuak Betancourt-Perroquet Ikerketa Saria eman zion. Alfontso X.a Jakitunaren Ordena Zibila dauka, Gurutze kategoriaduna. Zientzia komunitateak ere aitortu izan dio bere balioa. Hal nola, *Computational and Theoretical Chemistry*-ren editore nagusia da, bai eta *Mass Spectrometry Reviews*-eko eta *Open Journal of Chemical Physics*-eko Argitalpen Kontseiluko kidea ere. 2009. urtetik 2012. urtera arte, gainera, *Anales de Química* aldizkariaren editore nagusia ere izan da. Bidenabar, Belgikako, Kanadako, Austriako, Txileko eta Australiako Zientzia Fundazioetako kanpo ebaluatzailea da, bai eta World Association of Theoretical and

¹ □“One of the poets, whose name I cannot recall, has a passage, which I am unable to remember, in one of his works, which for the time being has slipped my mind, which hits off admirably this ceremony”. P. G. Wodehouse. (1996). *The Golf Omnibus*. (106. or.). New York: Wings Books.



Computational Chemists elkarteko Kontseiluko kide hautetsia ere. Gainera, *Encyclopedia of Computational Chemistry* entziklopedian parte hartzeko gonbita jaso duen Espainiako kimikari konputazional bakarra da. Ohore hori neuk ere badaukat, baina euskal kimikari konputazional bakarraren kategorian. Parisko Evry Unibertsitatean, Britainiako Rennes Unibertsitatean, Txileko Pontifize Unibertsitate Katolikoan, Halifaxeko (Kanada) Dalhousie Unibestitatean eta Sydney Hegoaldeko Gales Berriko Unibertsitatean irakasle bisitaria izan da. Irakaskuntza lanean duen ardura hain da handia, neuk gehiago ezagutu nuela Sydney astebetean, berak han irakasle igarotako sei hilabeteetan baino. Neuk erakutsi behar izan nizekion, beraz, Sydneyko gune batzuk, artean ez baitzituen ezagutzen.

Sarritan entzun izan dut Manuel Yáñez dela, inolako zalantzarik gabe, nazioartean aitortza eta ospe handiena duen espainiar kimikari teoriko konputazionala. Baieztapen horrek badu arriskua; izan ere, nahiz eta zehatz-mehatz zenbatu daitekeen Beñat Rezusta bergarar pilotari handiak bigarren atzelari onenak baino zenbat tanto gehiago egin dituen, kimikari teoriko konputazional laudatuena nor den erabakitzea, neurri handi batean, gustu kontua izaten da. Nik nahiago izaten dut gailentasunari baino gehiago hain erakargarria ez den haren lehengusu propioari erreparatu: zorrotasunari, hain zuzen. Azken batean, zorrotasuna eta zintzotasuna baitira Yáñez irakaslearen ezaugarri nagusiak.

Zuen baimenarekin, zertzelada txiki batzuk emango dizkizuet, Yáñez irakasleak zientziaren arloan egindako ekarpenak kokatzeko. Zehazki, C. P. Snow-ren² hitzetan, hauxe da zientzia: "**sakontasun intelektual, konplexotasun eta artikulazioagatik** [zientzia] **gizasemeen mentearen lan kolektibo ederrena eta lilluragarriana da**". Bestalde, Etxenike irakasleak, arrazoi osoz, zientzia gizadiaren **artelan** kolektibo ederrena dela, nabarmendu ohi du.

Niri dagokit testuinguruan kokatzea zientziaren zer alorretan egin dituen Yáñez irakasleak ekarpenik nabarmenenak; zer eta nola egin duen, berriz, berak azalduko dizue. Klaustroko kide guztiok ulertu hartu ahal izateko moduan egiten ahaleginduko naiz. Izan ere, ongi hezitako klaustroa da gurea, baina ez ezinbestean espezialista arlo guztietan. Eta ahalegina egiten saiatuko naiz, hain

2

C. P. Snow. (1986). "... in its intellectual depth, complexity and articulation [science] is the most beautiful and wonderful collective work of the mind of man". *The Two Cultures and a Second Look*, (14. or.). New York: Cambridge University Press



justu, guztiok izan dezagun Yáñez irakaslearen lanaren bikaintasuna bere neurrian epaitzeko beharrezkoa den oinarri sendoa.

'Has gaitzen hastapenetatik', esan zion Erregeak Aliziari, Lurralde Miresgarrian³, baina hastapenetan... ez zegoen ezertxo ere. Edo hobeto esanda, ez dakigu zehatz-mehatz zer zegoen, harik eta bat-batean, denbora hasi eta 5.4×10^{-44} segundo igaro ondoren⁴, ohartu ginen arte big banga gertatu zela; hortik aurrera, gertakari guztiak arrapaladan etorri ziren. Ez dut deskribatuko Unibertsoaren historia goiztiar liluragarri osoa. Soil-soilik nabarmenduko dut duela 13.67×10^9 urte gertatu zela hori, eta 380.000 urte igaro behar izan zirela lehenengo nukleoaren existentzia ahalbidetu zuten baldintzak izan arte (gehien bat hidrogenoarena eta helioarena eta litioarena zein berilioarena neurri apalagoan, hain justu). Grabitateak egin zuen gaineratiko gehiena. Grabitateari esker, nukleoak elkartu egin ziren, izarrak sortuz, eta izarretan sortu ziren gainerako elementu guztien nukleosintesia gertatzeko baldintzak, burdinara arte; hots, 92 elementu naturalek eta erreaktore nuklearretan sortutako beste dozena luze elementu osatutako taula periodikoko 26. zenbakira arte. Taula periodikoan burdinatik aurreragoko nukleoaren nukleosintesiak energia gehiago behar zuen, eta energia hori supernoba leherketek eman zioten, unibertso osoan zehar nukleo atomikoen hodei bat, nukleo atomikoen gas bat, barreiatu baitzuten. Horrenbestez, bagenituen nukleoak eta bagenuen nukleoek plasmaren elektroiak konfinatzeko tenperatura egokia (3000 K ingurukoa), atomoak sortzeko baldintza egokiak. Era horretan sintetizatu ziren unibertsoko atomo guztiak⁵. Berriz ere grabitateari esker, oraingoan atomoak elkartu ziren, eta gauza harrigarri bat gertatu zen: konplexutasuna sortu zen. Bata bestearekiko hurbil zeudenean, atomoek erreakzionatu egin zuten, eta molekulak sortu zituzten; horiek, aldi berean, atomoekin eta sortzen zihoazen beste molekulekin erreakzionatzen zuten, eta, hala, lokalki dentsoagoa zen unibertso bat sortzen joan zen, non gas-fasea fase-kondentsatu bilakatu zen, eta, beraz, konplexutasun handiagoa sortu zen. Eta guk, konplexutasuna arintzeko, ingurunea "sortu" genuen. Objektua eta ingurunea bereizi egin genituen; alegia, fenomenoak, erreakzio kimikoa alde batetik eta bestetik hori gertatzen zen ingurunea, bereizi genituen. Grabitateak, erreakzio kimikoen eta denborak oso eraginkor jardun ziren, eta, hala, gas faseko kimika desagertzeaz egon zen. Ia guztia gertatzen zen fase kondentsatuan, unibertsoa lokalki dentsoagoa zen eskualde horietan, non molekulek kimika berri bat sortu

³ "Begin at the beginning, "the King said, very gravely", and go on till you come to the end: then stop." L. Carroll. (1865). *Alice's Adventures in Wonderland*, London: Macmillan

⁴ 5.4×10^{-44} s da fotoi batek Plancken luzera egiteko behar duen denbora, alegia: $l_p = (\hbar G/c^3)^{1/2}$, non G den grabitazio konstantea, \hbar , Planckena, eta c, argiaren abiadura hutsean; Unibertsoaren hasieran ziurgabetasun aldia adierazten du.

⁵ D. Rehder. (2010). *Chemistry in Space*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA.



zuten: kimika supramolekularra⁶. Atomoek zein molekulek ingurune konplexu eta aldakorretan elkarrekin interakzionatzen hasi ziren konplexutasunaren ugalketa areagotuz.

Alabaina, Yáñez irakaslearen espezialitatea ez da kimika supramolekularra, baizik eta gas faseko kimika molekularra. Zergatik nahiko zuen norbaitek gas faseko kimika molekularra aztertu, maila bat goragoko beste zerbait egonda (kimika supramolekularra, alegia)? Badaude horretarako arrazoi on batzuk. Hauek dira, zehazki, arrazoi praktikoak:

(i) Gas faseko kimika molekularra oraindik ere gertatzen ari da unibertsoan, neurri handian gertatu ere, izarrarteko hodeietan. Zaldi Buru nebulosa dugu, hain zuzen, gas faseko faktoria molekular baten adibide kanonikoa.

(ii) Planeten atmosferak euren gasen kimika molekularren araberakoak dira. Zergatik da gorria Jupiterreko orban gorri handia? Galdera kitzikagarria da hori. Eta litekeena da erantzuna ere kitzikagarria izatea.

(iii) Hain urrunekoak ez diren atmosferetan ere gertatzen da; gurean, urrunago joan gabe. Berotze globala, atmosferako gasen berotegi efektua, ozono geruzaren zuloa, etab. Horiek guztiak gas faseko kimika molekularren fenomenoak dira... askori (eta ez guztiak kimikariak) soldata mardulak ematen ari zaizkienak.

(iv) Eta are gertuago. Fullerenoen, esaterako (alegia, futboleko baloien itxura duten karbono molekularak, gas fasean sintetizatu izan zirenak, laser bidezko grafito xaflen ablazio bitartez) karbonoaren barietate alotropiko berri liluragarri bat osatzen dute. Hain da horrela, Sir Harold Kroto 1996ko Kimikako Nobel saridunak honela deitu baitzion C₆₀-ri: "***lurrera erori zen esfera zerutara***"⁷.

(v) Eta askoz-askoz gertuago. Gas faseko kimika molekular ionikoa erreakzio kimikoak aztertzeke erabiltzen da; fase kondentsatuetan izaten diren kimika organikoko erreakzio kimiko prototipikoen berezko propietateak, ingurunearen araberakoak ez direnak, ulertzeke asmoz.

Ohartu arestian kimika supramolekularrera iritsi naizela, eta, orain, gas faseko kimikaren garrantziari buruz hizketan amaitu dudala. Alegia, kimika horrek supramolekularretik duen guztia kentzeko ari naiz eskatzen, berori ulertu ahal

⁶ J.-M. Lehn. (2006). *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA.

⁷ H. Kroto. (1992). C₆₀: *Buckminsterfullerene, The Celestial Sphere that Fell to Earth*, *Angew. Chem. Int.* 31, 111-129.



izateko. Kontraesankorra dirudi, eta, batez ere, erredukzionismo zientifikoaren aldarrikapena dirudi.

Baina ez da hala, eta halaxe frogatzen dute Yáñez irakaslearen ekarpenek. Eta hala dela dirudi, hain zuzen, mekanismo atabiko baten eraginez, natur zientzietan sakon errotuta dagoena; esan nahi baita: errealitate materiala aztertzen, ulertzen eta beraz erreduzitzen ahalegintzea, banaezinak, betierekoak eta kualitatiboki aldaezinak diren oinarrizko entitate (stoicheia) batzuen arabera. Hauxe da oinarrrian dagoen ideia: ***“Guzti-guztia, baita konplexuena ere, oinarrizko entitate horien agregazioek, eta ez beste ezerk, eratutakoa da. Horrenbestez, gaineratikoa bigarren mailako fenomenoak (epifenomenoak) baino ez dira izango, fenomeno nagusiari laguntzen diotenak, baina harengan inolako eraginik ez dutenak; oinarrizko entitateen berezko propietateen bariazio kuantitatibo hutsei darienak, eta, horren ondorioz, gaineratiko horrek aipatutako berezko propietateetatik eta horien konbinazio arauetatik zuzenean eratortzeko modukoa izan behar du”***. Horixe da, hain zuzen, oinarrizko propietate finko batzuen (kualitatiboki eternoak, sekula aldatzen ez direnak) ustearen ganean dagoen paradigma mekanizista. Eta Bohm-en aburuz, horrek esan nahi du ***“lege fisikoak eurak ere erlazio kuantitatibo huts bihur daitezkeela”***⁸. Feynman-ek ere nabarmendu zuen paradigma mekanizista hori, honela idatzi baitzuen bere fisikako irakaspenen hirugarren liburuko 19. kapituluaren amaieran⁹: ***“Schrodinger-en ekuazioa izan da fisikaren garaipen handienetako bat. Egitura atomikoaren oinarrizko makineriaren oinarriak xedatuz, espektro atomikoak, kimika eta materiaren izaera azaldu ditu”***. Zientziaren filosofo ospetsu batzuk bat etorri ziren berekin, modu gartsuan etorri ere. Hauxe idatzi zuen, esaterako, Nagel-ek¹⁰: ***“XIX. mendeko kimikaren ezaugarri asko eta asko (eta beharbada, baita zientzia hau bere osotasunean ere) 1925etik aurrerako fisikara murriz litezke”***.

Alabaina, fisikari ugari eta ia-ia kimikari guztiak ez datoz bat honako ideia honekin: kimika oro, eta baita materiaren izaeraren azalpen koherente bat ere, Schrodinger-en ekuazioan dagoela jasota. Ez eta Dirac-ek¹¹ ideia horren aldarrikapen sendoa egin arren. Yáñez irakaslearen ekarpenek zientifikoak asko lagundu dute irmoki xedatzen kimika (kimika zientzia) bat datorrela mekanika kuantikoaren deskribapen mailan bilduta ez dauden propietateak deskribatzeko

⁸ “... fundamental qualitative changes in the modes of being of the basic entities and in the forms in which the basic laws are to be expressed are not regarded as possible. Thus, the essence of the mechanistic position lies in its assumption of fixed basic qualities, which means that the [physical] laws themselves will finally reduce to purely quantitative relations”. D. Bohm. (1984). *Causality and Chance in Modern Physics*. (131. or.). London: Routledge.

⁹ “The Schrodinger equation has been one of great triumphs of physics. By providing the key to the underlying machinery of atomic structure it has given an explanation for atomic spectra, for chemistry and for the nature of matter.” R. Feynman, R. Leighton, M. Sands. (1965). *The Feynman Lectures on Physics: Quantum Mechanics*. (19-18. or.). Reading MA: Addison-Wesley

¹⁰ “Certain parts of 19th century chemistry (and perhaps the whole of this science) is reducible to post-1925 physics”. E. Nagel. (1961). *The Structure of Science*. (362. or.). New York: Hartcourt, Brace & World

¹¹ P. A. M. Dirac. (1029). *Quantum Mechanics of Many-Electron Systems*. (714. or.). Proc. Roy. Soc. London A123, 714-733



ideiak eta kontzeptuak sortzea eskatzen duen testuinguruarekin. Alegia, kimika ezin dela murriztu mekanika kuantikora, beste gauza bat baita, beste maila batean dagoena. Eta hala da, kimika, berez, biologiaren azalpena ere ez den bezalaxe edo biologia neurologiarena. Philip Ball-ek¹² elokuentzia handiagoz azaldu zuen: **“Ez dut uste gizakiaren zerebroa termino molekularretan sekula azaldu ahal izango dugunik, nola alfabetoak William Shakespeare-ren “Lear Erregea” (The king Lear) azaldu ezin duen”**.

Mundu materiala, euren artean interakzionatzen ari diren, oinarrizko entitate independenteen bidez egituratuta dagoela (izan molekularak, izan beste zerbait) dioen ideiak aurka egiten die mekanika kuantikoaren printzipioei¹³. Zorrotz esanda, mundu materiala “osotasun” bat da, izate independentea duten zatiz eratuta ez dagoen osotasun bat. Esan liteke sistema kuantikoetan ez dagoela azpisistema bereizirik. Ohar bat: ikuspegi operazionatik, bi sistema euren artean bereizita daude, bietako bati esperimendu bat egin eta bestearen egoeran eraginik ez badu. Mekanika klasikoan, sistema baten azpisisitemen banakako egoerek sistema osoaren egoera zehazten dute. Propietate horri **banangarritasuna** esaten zaio. Mekanika klasikoa matematikoki egituratuta dago banangarritasuna kontserba dadin. Bestalde, propietate hori ez duten sistemei **holistikoa** esaten zaie. Mekanika kuantikoa da ezagutzen dugun matematikoki formalizatutako lehenengo teoria holistikoa.

Zeinahi sistemaren deskribapen zientifikoak egoera bat eta horri dagozkion propietateak zehazten ditu; ondoren, propietateen bilakaeren deskribapena gehitu behar da, ekuazio dinamikoen bitartez. Sistemak deskribatzeko hainbat maila daude. Gaur egun, uste da mekanika kuantikoa dela beheko maila, oinarrizkoena. Beste teoria batzuk, berriz (esaterako, termodinamika, mekanika eta elektromagnetismo klasikoak) ez dira hain oinarrizkotzat jotzen; alegia: goragoko mailako deskribapentzat jotzen dira.

Esaterakoan zerbait haren funtsezko zatien arabera deskriba daitekeela, praktikoa izan liteke, baina ez da egiazkoa izango deskribapen kuantikoaren mailan. Dena den, baldintza egokiak izanez gero, sistema material bat (“osotasuna”) behar

¹² “I don’t think it likely that the human mind will ever be explained in molecular terms, any more than “King Lear” is explained by the alphabet”. P. Ball. (2001). *Stories of the Invisible. A guided Tour of Molecules*. (41. or.). New York: Oxford University Press

¹³ G. Jaeger. (2014). *On the Identification of the Parts of Compound Quantum Objects*. *Fund. Phys.* 44, 709-724



bezala deskriba liteke zatien arabera. Baina kontutan eduki behar da, osotasuna zatitan deskonposatzeko modu ez-isomorfiko asko daudela. Deskonposizio ez-isomorfiko horien arabera banaketa desberdinak egiten dira, osotasunaren ikuspegi askotarikoak eta elkarrekiko osagarriak islatzen dituztenak. Horrenbestez, sistema kuantikoetan banaketa ez-baliokide ugari ditugu naturalki, osotasuna zatitan banatzeko deskonposizio ez-isomorfiko desberdinetatik eratorritakoak. Horiek guztiak onargarriak izateaz gainera, beharrezkoak eta bata zein bestea berdin-berdin hautatu daitezkeenak ere badira. Horietako baten aukeraketa ez dago *a priori* finkatuta. Aukeratutako testuinguruaren arabera izango da; izan ere, testuinguru jakin horretan deskonposaezintzat jotako egitura hutsak dira zatiak, esanahi ontologikorik gabeak. Alabaina, zatien arteko bereizketa horri esker, zatiok maila desberdineko deskribapenen bitartez deskriba daitezke; betiere, euren artean konbergentzia etenik gabekoa egongo dela bermatzen bada. Hala, deskribapen maila desberdinak batera erabiliz gero, litekeena da behe mailako deskribapenean (oinarrizkoenean) bildu ezin diren fenomenoek edo propietateen *emergentzia* gertatzea.

Emergentzia, oro har, agregatibitatearen antitesizat jotzen da. Zalantzarik gabe badirela antolamenduak eragindako emergentzia fenomenoak; alegia, oinarrizko entitateen berezko propietateen koordinazio singularraren eragindakoak. Mark Bedau-k sinesgarriki azaldu zuen bezala¹⁴, propietate emergente horiei *emergentzia ahulekoak* esaten zaie. Jaegwon Kim-ek, berriz, *propietate erresultante deitu zien*¹⁵. Baina, badugu beste mota bateko emergentzia ere: *testuinguruaren arabera emergentzia*¹⁶, kimikariek Hans Primas-en¹⁷ lanetan oinarrituta onartu dutena. Horixe dugu, hain zuzen, *egitura molekularraren kasua*, kimika molekularraren kontzeptu nagusia berau, lehenengo printzipio fisikoetatik eratortzen ez dena, eta, horrenbestez, testuinguruaren eta soilik horren arabera dena. Eta hortxe kokatu behar dugu Yañez irakaslearen lana. Daukan garrantzia handia delako, hitz egin dezagun egitura molekularrari buruz.

Kimika molekular guztia dago oinarrituta egitura molekular kontzeptuan; alegia, molekulen forman. Gutxieneko kultura prestakuntza duen pertsona orok eratzun moduko D_{6h} simetriako egitura lau esleituko lioke bentzenoari. Gure kultura

14 M. Bedau. (1997). *Weak emergence*. En J. Tomberlin (Arg.), *Philosophical Perspectives: Mind, Causation and World* (1. liburukia, 375-399. or.). Malden, MA: Blackwell

15 J. Kim. (1999). Making Sense of Emergence. (19-2. or.). *Philo. Stud.* 95, 3-26

16 R. C. Bishop, H. Atmanspacher. (2006). *Contextual Emergence in the Description of Properties*. *Fund. Phys.* 36, 1753-1777

17 H. Primas. (1983). *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*. (335-342. or.). Berlin: Springer.



ondarearen parte da hori. Baina egitura molekularren kontzeptua zertxobait konplexuagoa da. Hala, formula enpiriko bereko molekula guztiek Schrodinger-en ekuazio berbera dute: $\hat{H}\Psi = i\hbar\partial_t\Psi$ (lehenengo printzipioak), non nola hamiltondar operadorea, \hat{H} , hala uhin funtzioa, Ψ , elektroien eta nukleo guztien koordinatuen funtzioak diren. Alegia, elektroien eta nukleoak holistikoki aklopaturik daude, uhin funtzioaren bitartez; eta, horrenbestez, deskribapen maila horretan (lehenengo printzipio kuantikoen deskribapena), molekulen forma ez da ebidentzia bat.

Historikoki, egitura molekular kontzeptua Born-Oppenheimerren hurbilketa bitartez aditzera eman izan da. Alabaina, izendapen hori engainuzkoa izan liteke, funtsezko auzia ez baita hurbilketa bat, baizik eta elektroien eta nukleoaren arteko aklopatamenduaren haustura, paradigma zientifikoa aldatzea eragiten duena: teoria berri bat. Hori hala dela hauteman daiteke Ψ uhin funtzioa, $\mu = (m/M)^{1/4}$ -ren arabera hedatzen denean, μ izanik elektroien eta nukleoaren masen arteko erlazioa. Masa nuklear infinituaren $\mu \rightarrow 0$ limitean, segidak ez du uniformeki konbergitzen. Horrek esan nahi du limitean duen jokamoldea eta limitera hurbildu ahala duen jokamoldea oso desberdinak direla. Izan ere, egiaztatuta dago (i) $\mu \rightarrow 0$ limitea hedapen horren singularitateari dagokiola; (ii) $\mu \rightarrow 0$ limitean, elektroien eta nukleoaren arteko aklopatamendua desegin egiten dela; (iii) Ψ uhin funtzioak deskribatzen dituen nukleoaren bira eta permutazio simetriak ezeztatu egiten direla; eta (iv) nukleoak modu klasikoan deskribatzen badira, orduan $\mu \rightarrow 0$ limiteak, testuinguru berri honetan, Ψ uhin funtzioaren hedapen asintotikoaren egonkortasun baldintza ezartzen duela, nukleoaren eremu elektriko **klasikoan** elektroien duten dinamika **kuantikoaren** arabera, hain justu. Horrenbestez, Born-Oppenheimerren hurbilketa izenekoak deskribapen kuantikoa beste deskribapen (semi-kuantikoa dena) batekin ordezkatzeko du, $\mu \rightarrow 0$ puntu singularreko konbergentziaren erregularizazioak sortua. Bi teoriaren arteko erlazioa ukitze puntuan ($\mu \rightarrow 0$ limitean) singularra bada, esan nahi du bi teoria horien artean ez dela posible inolako erreduziorik. Oro har, teoriaren arteko erlazio asintotikoak singularrak direnean espero genezake "ez-inoren lurralde" horretan fenomeno berriak agertzea, eta horietarako teoria esplikatzaile berriak beharko ditugu. Fenomeno berri horiei propietate emergente esaten zaie.

Egitura molekularra hedapen singularra $\mu \rightarrow 0$ limitean erregularizatzearen testuinguruan sortzen da. Aldagai klasikoak izango ditu, nukleoaren koordinatuak hain justu, zeintzuk sortu diren teorian, teoria kuantikoan, ez duten azalpenik. Esan nahi baita, $\mu \rightarrow 0$ limitean konbergentzia erregularizatzeak dakarrela paradigma teorikoa aldatzea, non egitura molekularren deskribapen zorrotza



deskribapenaren maila kimikoan baino ez den sortzen, behin maila fisikoari testuinguru topologia egokia (nukleoen eremu elektriko klasikoak zehaztutakoa) ezarri eta gero. Trebetasun zientifikoaren parte handi bat, hain zuzen, hierarkia maila horietako zeini beha gauden jakitean datza, eta, horrenbestez, garrantzitsuena zera da, zer bai eta zer ez den bereizten antzematea. Yáñez irakaslea benetako maisua izan da egiteko horietan.

Matematikoki, $\mu \rightarrow 0$ limitearen konbergentzia bat dator egonkortasun irizpidearekin, ingurune nuklear finko batek xedatzen duena, eta horren arabera elektroien dinamika nukleoen dinamikatik banandu egin daiteke era egokian. Honek guztiak, baldintza egokiak finkatzen ditu "osotasuna" zatitan (esan nahi baita, elektroietan eta nukleoetan) deskribatzeko. Dena den, deskribapen maila kuantikoa beharrezkoa denez goiko mailako propietateak (egitura molekularra) deskribatzeko, printzipio kuantikoak ezin izango dira urratu goi mailako ezein deskribapenetan; goi mailako deskribapenak bateragarria izan behar du behe mailako legeekin.

Fisikari dagokionez, molekulak elektroien dinamika kuantikoari esleitutako objektu kuantikoak dira, berau osatzen duten nukleo atomikoen posizio eta karga elektriko klasikoek xedatutako testuinguru semi-kuantiko batean.

Kimikaren ikuspegitik, berriz, esanahi kimikoa duten unitate posible txikienak dira molekulak. Molekulak hitzak bezalakoak dira; atomoak, aldiz, letrak bezalakoak. Hitz gehienak, hain zuzen, ordena jakin batean jarritako hainbat letraren agregazioak dira. Molekuletan, hitzetan nola, osagaiak jartzeko ordena funtsezkoa da, esanahia finkatzen baitu. Honela, molekulen bitartez, eta ez atomoen bitartez, konta ditzakegu esanahia darien istorioak mundu azpimikroskopikoan.

Testuinguru honetan, Yáñez irakaslearen ekarpenak benetan garrantzitsuak izan dira. Gutxi bezala asmatu du mundu molekular azpimikroskopikoko istorio liluragarriak irakurtzen eta kontatzen. Egitura molekularra lotura kimikoen arabera deskribatzearekin erlazioa duten istorioak, eta hortik eratorritako erreaktibitatea aurreikustearekin erlazioa dutenak. Yáñez irakaslearen hitzaldiari aurrea hartu nahirik, aipatuko baino ez ditut egingo nire ustez hark kimika molekularrari egin dizkion ekarpenik garrantzitsuenak direnak.



Lehenik eta behin, nabarmentzekoa da lotura kimiko berrien ezaugarritzea; esaterako, beryllium bonds¹⁸ (berilio loturak), dagoeneko lotura kimiko berrien multzoan sartu direnak.

Hein berean deigarriak izan dira gas faseko kimika ionikoari buruz egin dituen lanak. Izan ere, lan horietako batzuek agerian utzi dute egitura molekular ez-konbentzionalek, ondo egonkortutakotzat genituen lotura kimikoen kontzeptu batzuk ezbaian jarri dituztenek, gas faseko espezie ioniko ugariren egonkortasunean eta erreaktibitatean daukaten egiteko garrantzitsua. Adibide paradigmatico bat dugu, hain zuzen, karbono pentakobalente¹⁹ baten lehen deskribapena, C-Si loturak dituzten konplexuetan. Horrek ekarri izan du antzeko loturak bilatzea Si-ren tokian Ge edo Sn daukaten konplexuetan.

Era berean, harrigarria da planeta sistema molekularren existentzia berretsi izana, non ioia base kimiko baten inguruan ari den orbitatzen²⁰, satelite bat bere planetaren inguruan bezalaxe. Gertakari hori beste ikertzaile batzuek ere aurkituko zuten gerora, beste hainbat sistemetan²¹.

Horretaz gainera, efektu berriak ere aurkitu zituen; esaterako, eskorpioi efektua. Izen hori dauka, hain zuzen, alkilbentzenoen isats alkilikoa eskorpioi baten isatsa bezala tolestean delako, ioi metalikoekin interakzionatzeko. Eta horrek azaltzen du espezie horien basikotasun areagotu ustekabekoa²².

Yáñez irakaslea lehenengoa izan da efektu kooperatiboak ur trimerotan kuantifikatzen (korrelazio elektronikoa kontutan hartuta)²³. Funtsezkoak izan dira,

¹⁸ M. Yanez, P. Sanz, O. Mo, I. Akorta, J. Elguero. (2009). *Beryllium Bonds. Do they Exist?* J. Chem. Theor. Comp. 5, 2763-2771

¹⁹ J. Z. Dávalos, R. Herrero, J. L. M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez. (2007). *How can a carbon atom be covalently bound to five ligands? The case of Si₂(CH₃)₇⁺ or the beauty of symmetry.* Angew. Chem. Int. Ed. 46, 381

²⁰ J. L. M. Abboud, I. Alkorta, J. Z. Dávalos, J. F. Gal, M. Herreros, P. C. Maria, O. Mó, M. T. Molina, R. Notario and M. Yáñez. (2000). *The P_x-Li⁺ Ion in the Gas Phase: A Planetary System.* J. Am. Chem. Soc. 122, 4451

²¹ (i) A. Irigoras, J. M. Mercero, I. Silanes, J. M. Ugalde. (2001). *The Ferrocene-Lithium Cation Complex in the Gas Phase.* J. Am. Chem. Soc. 123, 5040-5043. (ii) A. H. Ilkhechi, J. M. Mercero, I. Silanes, M. Bolte, M. Scheibitz, H. W. Lerner, J. M. Ugalde, M. Wagner. (2005). *A Joint Experimental and Theoretical Study of Cation-π Interactions: Multiple-Decker Sandwich Complexes of Ferrocene with Alkali Metal Ions (Li⁺, Na⁺, K⁺, Rb⁺, Cs⁺).* J. Am. Chem. Soc. 127, 10656-10666.

²² O. Mó, M. Yáñez, J. F. Gal, P. C. Maria, M. Decouzon. (2003). *Enhanced Li⁺ Binding Energies in Alkylbenzene Derivatives: The Scorpion Effect.* Chem. Eur. J. 9, 4330-4338.

²³ O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero. (1982). *Cooperative (nonpairwise) effects in water trimers: an ab initio molecular orbital study.* J. Chem. Phys. 97, 6628



halaber, metanol eta etanol sub-nano klusterrak ezaugarritzeko egin zituen ekarpenak²⁴, bai eta kalkogeno-kalkogeno interakzioen lehen analisi kuantitatiboa ere, hidrogeno loturekin lehiatzeko²⁵.

Yáñez iraslearen beste ezaugarri bikainetako bat, bestalde, bere lankide esperimentalen oinarritzeko galderei zuzen erantzutea da. Kide horiekin lankidetzan jardun izan du maiz, eta halaxe jarraitzen du gaur egun ere. Haren ekarpenak beti izan dira motibagarriak lankide esperimentaltzat. Aipagarria da, hain justu, **dissociative proton attachment** izenez ezagunak diren prozesuei buruz egin zituen azterlanak. Prozesu horiek gertatzen dira protoiarekin interakzionatzen duen zentro basikoa elektronegatibotasun baxuko atomo bat denean, eta disoziazioetik eratorritako zatiak berez egonkorak direnean²⁶.

Ikerlari asko Yáñez irakaslearen bila ibili ohi da, berarekin lankidetzan jarduteko, eta hala dela ikus dezakegu bere argitalpenen zerrendan aipatutako kolaboratzaileei begira. Eta hori gertatzen da, ez soilik proposatutako arazoak ebazteko modurik ulergarriena zein den konturatzeko duen ezohiko senagatik (baita estadio goiztiarretan ere), baizik eta baita berezkoa duen nortasun apal eta adeitsuagatik ere. Modu sotilean eragiten du, gehienok gugan zenbaterainoko eragina izan duen jabetu ere egiten ez garela. Bere nortasunaren baretasunari osagarria zaio Otilia Mó emaztearena, irakaslea berau ere. Haren aipamena **sine qua non** da, Yáñez irakaslearena neurri-neurrian aintzat hartzeko. Otiliaz hitz egitea, Yáñez irakaslea Honoris Causa Doktore izendatzera ekarri duen lan zoragarria burutzeko ezinbestekoa izan den pertsonaz hitz egitea da.

Honoris Causa Doktorea da, hain justu, unibertsitateak erakuts dezakeen estimu handienaren adierazpena. Eta hori ezin liteke eskatu. Unibertsitatearen aburuz bikaintasun maila hori baduten, eta, beraz, ohore berezi hori jasotzea bidezkoa duten pertsona apur batzuentzat baino ez da izaten. Eta hauxe da kasu horietako bat; izan ere, bikaintasuna, zorrozatasuna eta zintzotasuna dira Yáñez irakaslea hobekien deskribatzen duten hitzak, alderdi askotan gainera: irakaskuntzan, ikerkuntzan, eta batez ere, gizaseme bezala.

²⁴ L. González, O. Mó, M. Yáñez. (1999). *Density functional theory study on ethanol dimers and cyclic ethanol trimers*. J. Chem. Phys. 111, 3855.

²⁵ P. Sanz, M. Yáñez, O. Mó. (2002). *The Role of Chalcogen-chalcogen interactions on the intrinsic basicity and acidity of \square chalcogenovinylaldehydes, $HC(=X)-CH=CH-CYH$ ($X=O, S; Y=Se, Te$)*. Chem. Eur. J. 8, 3999.

²⁶ O. Mó, M. Yáñez, J. F. Gal, P. C. Maria, J. C. Guillemin. (2002). *Vinyl- and ethynylsilanes, -germanes and -stannanes. A new case of dissociative proton attachments*. J. Phys. Org. Chem. 15, 509-513.



Yáñez irakasleari buruz kontatzen ari natzaizuen istorioak, oraintxe amaitzera noanak, nahikoa arrazoi biltzen du gure klaustroan Honoris Causa Doktore gisa onar dezagun. Pribilegio bat da niretzat gaur zuei eskatzea gure unibertsitatearen gradurik gorena aitortzea Yáñez irakasleari.