

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE FILOSOFÍA
Departamento de Filosofía I



**CIENCIA, REALIDAD Y MÉTODO EN EL OBRA
DE LINUS PAULING.**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR

Francisco Javier Serrano Bosquet

Bajo la dirección del doctor

José Luis González Recio

Madrid, 2009

- ISBN: 978-84-692-8584-8

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE FILOSOFÍA

Departamento de Filosofía I



**CIENCIA, REALIDAD Y MÉTODO EN LA OBRA DE LINUS
PAULING**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR

PRESENTADA POR

Francisco Javier Serrano Bosquet

Bajo la dirección del Doctor:

José Luis González Recio

Madrid, 2.008

Ciencia, realidad y método en la obra de Linus Pauling

Tesis presentada por

D. Francisco Javier Serrano Bosquet

y dirigida por el Doctor

D. JL. González Recio

Profesor titular de la Universidad
Complutense de Madrid

2.008

Departamento de Filosofía I
Facultad de Filosofía
Universidad Complutense de Madrid

*A mis padres,
por darme la oportunidad de estar aquí.*

*“...I think of myself as a multi-faceted crystal
with many dimensions.”*
Linus Pauling

INDICE

AGRADECIMIENTOS	11
INTRODUCCIÓN GENERAL	15
CAPITULO I. CONTEXTO PERSONAL, CIENTÍFICO Y FILOSÓFICO.....	22
1.1. BIOGRAFÍA PERSONAL Y CIENTÍFICA.	23
1.2. OBRAS CIENTÍFICAS Y ESTUDIOS DE Y SOBRE PAULING	54
INTRODUCCIÓN	55
1.2.1. SELECCIÓN DE LIBROS DE LINUS PAULING	56
1.2.2. SELECCIÓN DE ARTÍCULOS DE LINUS PAULING.....	56
1.2.3. SELECCIÓN DE LIBROS Y ARTÍCULOS SOBRE LINUS PAULING	65
1.2.3.1. Estudios monográficos sobre Linus Pauling	65
1.2.3.2. Artículos y capítulos sobre Pauling.....	66
1.2.3.3. Breve selección comentada de libros sobre Linus Pauling.....	67
1.2.4. REFERENCIAS ELECTRÓNICAS	72
1.3. CONTEXTO E INFLUENCIAS CIENTÍFICAS.....	79
1.3.1. QUÍMICA	82
1.3.1.1. La química estructural.....	82
<i>La nueva química estructural (1.919).....</i>	<i>82</i>
A. Una breve imagen de la historia de la química desde una perspectiva estructuralista	82
B. El papel de la organización espacial en la química estructural.....	88
1.3.1.2. La química física.....	92
<i>De la química física a la física química.....</i>	<i>92</i>
<i>El Caltech</i> ⁹⁴	
A. Arthur Noyes, del MIT al Caltech	95
B. Arthur Noyes, construcción de una utopía llamada Caltech.....	97
C. La química en el Caltech	100
1.3.1.3. La cristalografía.....	103
<i>Cristalografía Química.....</i>	<i>105</i>
<i>Cristalografía Estructural</i>	<i>108</i>
A. Historia.....	109
B. La teoría estructural.....	111
C. El método Bragg.....	113
<i>La cristalografía en el Caltech</i>	<i>118</i>

1.3.1.4. La naturaleza del enlace químico	120
La teoría electrónica del enlace químico	124
A. 1.916, Gilbert Newton Lewis	124
<i>Valence and the Structure of Atoms and Molecules</i>	126
1.3.2. FÍSICA	131
INTRODUCCIÓN	131
1.3.2.1. El encuentro con la mecánica cuántica	134
La vieja física cuántica	134
A. Planck y la catástrofe del ultravioleta: origen de la física cuántica.....	134
B. Einstein y la segunda discontinuidad cuántica	137
C. Bohr y la estabilidad del átomo.....	140
D. El modelo de Bohr	142
E. Sommerfeld y el problema de la estructura fina del átomo de hidrógeno.	145
La nueva mecánica cuántica	150
F. La mecánica matricial de Heisenberg.....	150
G. La mecánica ondulatoria de Shrodinger	154
Hacia la interpretación de la química como un fenómeno cuántico	158
1.3.3 LAS CIENCIAS DE LA VIDA: BIOLOGÍA Y MEDICINA	162
INTRODUCCIÓN	162
1.3.1.1 BIOLOGÍA	164
La investigación biológica a mediados del siglo XIX y principios del XX 165	
Fundamentos de la Bioquímica moderna	167
Hacia un nuevo tipo de acercamiento entre la física y la química: la genética	169
Bajo la sombra del neodarwinismo	172
Thomas H. Morgan	175
A. Morgan y su periodo en Columbia (1.910-1.928).....	175
B. La era de Morgan como director de la División de Biología del Caltech (1.928-1.942).....	178
C. La División de Biología del Caltech bajo la dirección de G. W. Beadles (1.946 – 1.961).....	179
Génesis de la biología molecular	181
A. La “versión proteica del Dogma Central”	183
B. La “versión del ADN del Dogma Central”	184
Las aportaciones de la física y la química al nacimiento de la Biología Molecular	187
A. El Phage Group	187
B. Los físicos y los químicos ante la nueva biología	188

1.3.3.2. MEDICINA	192
<i>Los orígenes de la medicina molecular</i>	192
A. <i>El papel de las proteínas en la génesis de la nueva medicina molecular</i>	193
<i>Hematología</i>	195
<i>Inmunología</i>	198
<i>Medicina ortomolecular</i>	207
1.4. CONTEXTO E INFLUENCIAS FILOSÓFICAS	210
INTRODUCCIÓN	211
1.4.1. ENTRE FÍSICA Y FILOSOFÍA	214
1.4.1.1. “Los caballeros del continuo”	217
<i>El estatus cognoscitivo de las teorías científicas: realismo versus instrumentalismo</i>	218
<i>El estatus ontológico de las entidades teóricas básicas de la física atómica como los electrones, los fotones y los átomos con independencia de los seres humanos y de sus observaciones</i>	222
<i>La interpretación física de la nueva mecánica cuántica (posibilidad de seguir haciendo representaciones pictóricas, espacio-temporales)</i>	225
<i>La vigencia de la noción de causa</i>	229
1.4.1.2. La “Interpretación de Copenhague”	232
<i>La vigencia de la noción de causa</i>	232
<i>Interpretación física de la mecánica cuántica (Interpretación de Copenhague)</i>	236
<i>El estatus ontológico de las entidades teóricas básicas de la física atómica como los electrones, los fotones y los átomos con independencia de los seres humanos y de sus observaciones.</i>	242
<i>El estatus cognoscitivo de las teorías científicas: realismo versus instrumentalismo en la Interpretación de Copenhague</i>	245
1.4.2. FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA	248
INTRODUCCIÓN	248
1.4.2.1. Química, elemento químico y estructura	249
<i>Definición de Química</i>	249
<i>Definición de elemento</i>	251
A. <i>Los elementos como sustancias inobservables</i>	252
B. <i>Elementos como entidades básicas de la química o clases naturales de la química.</i>	254
1.4.2.2. Concepción de la química como ciencia	258
1.4.2.3. De los límites del conocimiento químico al método científico de las aproximaciones	262
<i>El problema de las aproximaciones en ciencia</i>	264
<i>Las aproximaciones en química</i>	266
<i>Orbitales moleculares</i>	269
A. <i>La observabilidad y orbitales</i>	270

B. <i>El estatus ontológico de los orbitales</i>	274
<i>El valor epistemológico de las aproximaciones</i>	275
1.4.2.4. Forma y estructura molecular	277
<i>El estatus ontológico de los modelos moleculares</i>	279
1.4.2.5. El concepto de resonancia	284
<i>Críticas al concepto de resonancia: Coulson</i>	286
1.4.3. ATENEA FRENTE A ASCLEPIO	289
1.4.3.1. Filosofía de la biología	289
<i>Fisicismo. La agonía de una materia viva</i>	290
<i>La contraargumentación vitalista</i>	291
<i>El organicismo como un mecanicismo no reduccionista</i>	292
<i>La biología como disciplina científica</i>	293
<i>De provincia a imperio</i>	293
<i>El problema del reduccionismo</i>	295
1.4.3.2. Las huellas del Centauro Quirón	298
<i>Medicina positivista</i>	299
<i>La crisis de la razón médica positivista</i>	300
CAPITULO II. QUÍMICA ESTRUCTURAL MODERNA	303
INTRODUCCIÓN	304
2.1 PRIMEROS INTENTOS DE APLICACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA A LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS QUÍMICOS	305
2.2 LAS REGLAS DE PAULING	312
2.2.1 “THE PRINCIPLES DETERMINING THE STRUCTURE OF COMPLEX IONIC CRYSTALS” (1.929).....	314
2.3 LA ESTRUCTURA TETRAÉDRICA DEL CÁRBONO	325
2.4 THE NATURE OF THE CHEMICAL BOND	329
2.4.1 ANTECEDENTES AL ARTÍCULO DE 1.931.....	330
2.4.1.1 <i>La naturaleza del enlace químico (artículo de 1.931)</i>	332
<i>Naturaleza y características de los orbitales s y p</i>	335
<i>Transición desde el enlace de Valencia al enlace iónico. El enlace de hidrógeno.</i>	337
<i>El átomo de carbono tetraedral</i>	339
<i>Rotación libre o restringida</i>	339
<i>Los ángulos entre los enlaces</i>	340
2.4.1.2 Polémica con Slater	341
2.4.1.3 <i>The Nature of Chemical Bond (1.931-1.939)</i>	342

CAPITULO III. CIENCIAS DE LA VIDA 346

INTRODUCCIÓN.....	347
3.1. BIOLOGÍA MOLECULAR.....	349
3.1.1. PRIMEROS TRABAJOS SOBRE LA HEMOGLOBINA.....	350
3.1.2. LA ESTRUCTURA DE LAS PROTEÍNAS.....	353
3.1.2.1. El proceso de desnaturalización de las proteínas.....	353
3.1.2.2. La estructura de la hélice alfa.....	356
3.1.3. LA CARRERA HACIA LA ESTRUCTURA DEL ADN.....	360
3.2. MEDICINA.....	366
3.2.1. INMUNOLOGÍA.....	367
3.2.2. EL NACIMIENTO DE LA MEDICINA MOLECULAR. LA ANEMIA FALCIFORME.....	371
3.3. MEDICINA ORTOMOLECULAR.....	378
INTRODUCCIÓN.....	379
3.3.1. LA SENDA HACIA LA CURA DE ENFERMEDADES MENTALES.....	379
3.3.2. MEDICINA ORTOMOLECULAR SOMÁTICA.....	383
3.3.3. FRENTES ABIERTOS EN TORNO A LA VITAMINA C.....	384
3.3.3.1. Vitamina C y resfriado común.....	384
3.3.3.2. Vitamina C y enfermedades cardiovasculares.....	387
3.3.3.3. Vitamina C y Cáncer.....	388

CAPÍTULO IV. RUPTURAS Y CONTINUIDADES EN LA OBRA DE LINUS PAULING..... 391

4.1 PERSPECTIVAS EPISTEMOLÓGICAS, ONTOLÓGICAS Y METODOLÓGICAS.....	395
4.1.1 EL DEBATE EPISTEMOLÓGICO Y ONTOLÓGICO DE LA MECÁNICA CUÁNTICA EN LA NUEVA QUÍMICA.....	396
4.1.1.1 La concepción pitagórica de la ciencia en Linus Pauling.....	397
4.1.1.2 El paradigma positivista en la obra de Linus Pauling.....	400
4.1.1.3 El método científico.....	403
<i>El uso de las aproximaciones sucesivas.....</i>	<i>406</i>
<i>Metodologías indirectas. La construcción de modelos.....</i>	<i>407</i>
4.1.1.4 Estatus cognoscitivo y ontológico de las entidades teóricas.....	408
4.1.2 EPISTEMOLOGÍA, ONTOLOGÍA Y METODOLOGÍA EN LA BIOLOGÍA Y MEDICINA DE LINUS PAULING.....	412
4.1.2.1 La biología de Linus Pauling.....	412
<i>Fisicalismo y reduccionismo en las ciencias de la vida.....</i>	<i>412</i>
<i>La utilización del “método indirecto” en biología.....</i>	<i>414</i>

4.1.2.2	Medicina y Linus Pauling	415
4.2	CONCLUSIONES FINALES	419
ANEXOS		424
ADICIONES		425
A.1	Un episodio desafortunado: Linus Pauling Vs Dorothy Wrinch	425
A.2	Cambios en la cuantización de los orbitales de enlace	429
TEXTOS		434
	Carta de Pauling a Sommerfeld (1.925)	434
	Carta de Goudsmit a Pauling (1.927).....	435
	Carta de Noyes a Pauling (1.927)	437
	Carta de Pauling a Goudsmit (1.927)	438
	Invitación de Harvard (1.929)	442
	Nota manuscrita de Pauling del tetraedro de carbono (1.930).....	444
	Carta de Pauling a Warren Weaven (1.935)	446
	The significance of Structural Chemistry (1.937).....	447
	Carta de Pauling a Bush (11-1-1.945)	448
	Carta a Watson y Crick (27-3-1.953)	450
	Un mundo en el que cada ser humano pueda vivir una buena vida	451
BIBLIOGRAFÍA		453
	OBRAS FUENTE	454
	ESTUDIOS, MONOGRAFÍAS Y OBRAS DE CARÁCTER GENERAL:	458
	RECURSOS ELECTRÓNICOS	466

AGRADECIMIENTOS

Cuando la meta comienza a vislumbrarse al final de este largo camino que es la elaboración de una tesis doctoral. Cuando las últimas palabras parecen agolparse en los dedos de quien escribe, como queriéndole hacer saber que ellas también quieren estar presentes, formar parte de una obra a la que tanto ha dedicado, es entonces, insistimos cuando más se agolpan en la mente del tesista decenas de imágenes y recuerdos. Reflexiones y sentimientos que en algunas ocasiones se pierden un poco en el tiempo, porque el ciclo personal y académico que finaliza con la presentación de una tesis doctoral se hunde más allá de los 4 ó 5 años que dura su elaboración. Incluso, suelen rebasar los años previos de cursos e investigación del programa de doctorado. Es, sobre todo entonces, cuando las emociones de él por momentos se apoderan. Entre todas, sobresale una que se torna en convicción: se hace consciente como nunca de las vicisitudes, de las horas de sueño y soledad por las que ha tenido que pasar, del coste emocional, familiar y social que ha tenido que soportar, pero también de que su trabajo no hubiera sido posible sin la ayuda de quienes han estado a su lado. Al igual que muchos otros que ya han realizado un trabajo como este, el doctorando cobra conciencia de que esa ayuda recibida ha venido desde muchos lados; desde el ámbito académico y profesional, pero sobre todo desde el familiar, el apoyo brindado difícilmente podrá ser recompensado. Por ello, este trabajo no puede ver la luz sin hacer presente que cada una de las líneas que el lector ojea, de las reflexiones que el investigador encuentra, les pertenece también a quienes durante todo este tiempo han ayudado. La injusticia, y sobre todo el llegar a convertirse en una persona injusta, ha sido desde siempre una de las obsesiones personales que ha atormentado a quien ahora escribe. De ahí, que estas líneas dedicadas a reconocer y agradecer a quienes me han apoyado durante los últimos años constituyan una de las secciones más comprometidas desde el punto de vista personal. No ser lo suficientemente claro, explícito y coherente en mi reconocimiento con unos, omitir a otros, es una de mis mayores preocupaciones. Por ello, de antemano, pido disculpas a quienes no se vean justamente reconocidos.

En primer lugar quiero dar las gracias a todos mis compañeros de licenciatura y doctorado, porque sin ellos mi carrera académica hubiera estado en muchos sentidos vacía. El compartir clases, apuntes y reflexiones, pero sobre tiempo, cariño y amistad ha sido clave en la formación de mi criterio personal e intelectual. Su paciencia, sobre todo la de mis compañeros

de doctorado David E. González y César A. Reza, así como la de todos mis amigos a un lado y otro del Atlántico, ha sido infinita. Espero de verdad que podamos recuperar –si de alguna forma se puede– el tiempo perdido.

Lo mismo he de hacer con mis profesores de la Facultad de Filosofía de la UCM. A todos ellos, que me ayudaron a conocer, entender y amar la Filosofía, y que con ello me mostraron una puerta detrás de la cual he encontrado un proyecto de vida que ni siquiera había podido imaginar, mi agradecimiento más respetuoso. Quiero destacar que mi deuda más profunda está con Manuel Maceiras, Juan B. Fuentes, Ana Rioja y Andrés Rivadulla. Durante los cinco años de carrera sus clases y la relación personal que mantuve con ellos los convirtió en ejemplo a seguir. Su recuerdo, sobre todo en el caso de Ana Rioja, durante el año que estuve fuera de la Facultad fungió como acicate para emprender la aventura del doctorado. Pero mi agradecimiento más entrañable es para Ismael Martínez Liébana quien me enseñó no sólo filosofía académica, sino sobre todo a ver el mundo de otra manera. Los cerca de cinco años que compartimos marcarán el resto de mi vida. La distancia, el día a día y la inexperiencia han hecho marchitar una relación –que nunca debió perderse– que necesitaba ser regada con mayor regularidad.

Mi exilio mexicano me ha dado la oportunidad de madurar personal, intelectual y profesionalmente. Por ello, mi agradecimiento a México y al ITESM, ya que confiaron en mí y me dieron la oportunidad que no he encontrado en mi tierra. La nueva vida que aquí emprendí hace ya unos años hubiera sido imposible sin cada una de las personas que he ido conociendo desde entonces. Sin Martha Cassarini, Laura Campuzano e Inés Saénz la aventura no hubiera podido siquiera empezar. Pero sin el cariño, la amistad y el apoyo de Susana Patiño, sin mi compañero y amigo José Antonio Cervera a quien no podré recompensar todo lo que he aprendido junto a él estos años, sin la confianza y complicidad de Rafael de Gasperin así como del resto de compañeros del Dpto. de Formación Ética del ITESM, esta andanza habría terminado al poco de arrancar. Pero no puedo olvidar a mis alumnos, por quienes más me he esforzado y de quienes más he aprendido en estos años. Las reflexiones éticas y filosóficas en torno a la ciencia y la sociedad han encontrado su reflejo en algunas secciones de este trabajo. A mis becarios, entre los que cabe destacar Dámaris C. Cronteras, a Ingrid Arriaga, Adriana

Berumen y Manuel García Jurado mi más afectuoso agradecimiento. Revisores voluntarios de la versión final de esta tesis, sus comentarios y sugerencias han encontrado hueco en este trabajo.

Aunque pudiera parecer extraño quiero dedicar unas líneas a dar las gracias al programa de doctorado *Entre Ciencia y Cultura* de la UCM que, con el presente trabajo, ahora culmino. La etapa de elaboración de la tesis final ha sido dura, el coste emocional mucho más alto de lo que hubiera podido imaginar, pero gracias a este programa he tenido la oportunidad de conocer a tres de las personas más importantes actualmente en mi vida. En primer lugar me guió hacia José Luis González Recio, director de esta tesis a quien me ha unido desde entonces un cariño más cercano al que se da entre padre e hijo que entre profesor y alumno. La relación forjada durante estos años tan sólo puede ser descrita bajo la concepción aristotélica de *amistad basada en el bien*. Permanente y extraña, porque extraño es encontrar personas virtuosas, *khat-autó*¹, la amistad que desde el principio nos unió fue fruto de su excelencia. Pendiente siempre de que tomara las decisiones correctas –tanto personales como académicas– José Luis representa y siempre representará el *maestro* que todos hemos soñado tener y la persona que hemos querido ser. Gracias a su empeño vio la luz Bionomos, un pequeño grupo de jóvenes y entusiastas investigadores destinados a hacer algo grande en el ámbito de la historia y la filosofía de la Biología. A mis queridos Dolores Escarpa, Miguel Huineman, Ruth García, Ruy J. Henríquez, Laura Nuño de la Rosa, Sonia Cabello, Alfredo Pérez y Pedro Sarmiento gracias por ser como sois y hacer posible esta experiencia bionómica.

El segundo año de doctorado me puso en el camino de Mireya García, que me ha dado siempre lo mejor de sí, y de Erika M. Bermúdez, desde entonces el centro de mi corazón. A quien por su infinita paciencia, por permanecer a mi lado durante estos años y apoyarme cuando parecía que todo se hundía, por escucharme y ayudarme a corregir las primeras versiones de cada capítulo, sección o frase, por abrirme las puertas a nuevos mundos y sensaciones, por ser mi compañera de vida y por todo lo que nos queda por vivir juntos, sólo puedo decirle que aunque nunca conseguiré agradecerle y recompensarle como merece, jamás dejaré de intentarlo.

Dejo para el final a quien más debo en esta vida: a mi familia. A mis abuelos (*in memoriam*), a mis tíos y primos, pero sobre todo a mis padres y a mis hermanas. Porque si he

¹ Buenas en sí mismas.

sido capaz de hacer una carrera universitaria, viajar y emprender una nueva vida en otro continente, llegar a ser profesor universitario –uno de mis sueños más profundos–, superar los obstáculos que la vida y los hombres me han puesto en el camino, si he conseguido llegar hasta aquí, a escribir estas líneas que lector tiene delante, ha sido gracias a ellos cuatro. A ellos, para quienes nunca tendré forma de agradecer todo lo que han hecho por mí, va dedicado este trabajo y cuanto éxito tenga en la vida.

Cuando las palabras parecen insuficientes para expresar todo lo que uno siente y quisiera compartir, la brevedad y la cordura se han de imponer. Por ello, simplemente, GRACIAS a todos.

Monterrey, 23 de Enero de 2.008

Javier Serrano

INTRODUCCIÓN GENERAL

Es difícil pensar en nuestro mundo sin tener presente el desarrollo científico y tecnológico en el que nos vemos inmersos. Y es que, debemos reconocer, la sociedad y la cultura de inicios del siglo XXI se encuentran determinadas en buena medida por los complejos procesos de construcción de la ciencia y la tecnología contemporáneos. Fruto por consiguiente del esfuerzo llevado a cabo por cientos de científicos e investigadores, la reflexión sobre nuestro presente y nuestro futuro exige echar una mirada atrás, revisar la historia y el trabajo de aquellos hombres que dedicaron su vida al progreso de la ciencia. Sin embargo, la literatura y la memoria histórica son en la mayoría de las ocasiones injustas cuando de recordar, reconocer y agradecer se trata. A nuestros oídos tan sólo llegan por lo general ecos que nos recuerdan el nombre de unos pocos y, en el mejor de los casos, breves referencias a sus vidas y obras. En la mayoría de las ocasiones, los nombres de anónimos u olvidados científicos permanecen mudos a la espera de ser escuchados. No se trata ciertamente del caso de Linus Pauling. Ganador en dos ocasiones del premio Nobel, es uno de esos pocos casos en los que su nombre sigue vivo, presente en la memoria de científicos e historiadores de la ciencia. Después de casi tres lustros desde su fallecimiento, el número de libros, artículos y reuniones en torno a la figura del químico de Pórtland sigue aumentando. Sin embargo, al igual que ocurre con muchos otros “afortunados” científicos, el tributo que se le rinde sigue siendo muy local y débil, un rumor que alcanza a oír en este caso tan sólo parte del público estadounidense y químico. Para el resto del mundo, incluido el hispanohablante, el conocimiento de la figura e importancia de Linus Pauling, así como las implicaciones de su trabajo científico y de su lucha social en la conformación de nuestro actual modo y grado de calidad de vida, es muy limitado.

La vida y obra de Linus Pauling, una de las figuras más importantes e influyentes del siglo XX, constituye una excelente ventana desde la que aproximarse a los últimos ciento cincuenta años de la historia estadounidense y, en gran medida, del mundo occidental. Acercarse a su vida significa emprender un viaje que nos lleva desde un mundo inundado por el sonido de aquellas caravanas de pioneros que, chirriantes y traqueteantes cruzaban el nuevo mundo en busca de nuevas tierras y posibilidades, hasta el inicio de la reciente guerra del Golfo. El contexto histórico y social de extraordinaria transformación en el que vivió, se reflejó en su

obra y en la forma en la que entendía la vida. Una concepción fuertemente marcada por los valores y principios de aquellos colonizadores que, como sus abuelos y bisabuelos, habían cruzado la gran llanura americana hasta alcanzar las costas noroccidentales de los EEUU. Esa búsqueda de los límites, el afán por rebasar las fronteras de lo conocido e ir un paso más allá de donde habían ido otros, marcó su vida y obra. Ejemplo de ello son sus continuos saltos de un campo a otro, de un problema a otro, la utilización de cuantos recursos tenía a mano y un gran empeño por ser el primero en llegar a la meta propuesta. En sus primeros estudios cristalográficos, en química cuántica y sobre la naturaleza del enlace químico vemos ya un investigador inquieto, necesitado constantemente de nuevos y diferentes retos. Capaz de moverse fácilmente en los intersticios existentes entre las fronteras de distintos campos, Pauling fue intuitivo y brillante pero “incapaz” de detenerse por mucho tiempo ante un problema. El mayor ejemplo de estos saltos y rupturas disciplinarias lo encontramos en la década de 1.930 cuando dejó a un lado sus investigaciones en torno a la estructura de cristales y comenzó a estudiar la estructura de proteínas. Esta diversidad investigadora que en muchos otros científicos fue reflejo de debilidad y flaqueza, constituyó en el caso de Pauling el mayor ejemplo de su talento y resolución. Su extraordinario esfuerzo por la construcción de una nueva química estructural basada en la mecánica cuántica y su ahínco porque fuera comprensible por el resto de químicos ya habrían bastado para que ocupara un lugar especial dentro de la historia de la química. Sin embargo, sus posteriores investigadores en los ámbitos de la biología y la medicina hicieron de él uno de los científicos más importantes de la historia. Sus primeros trabajos con la hemoglobina y luego con otras sustancias biológicas constituyeron algunos de los trabajos más importantes en la constitución y fundación de la biología y la medicina molecular. Su descubrimiento del proceso de desnaturalización de las proteínas y su estructura alfa, de las causas moleculares de la anemia falciforme y el sistema inmunológico, así como sus avances en la cura de enfermedades mentales y su lucha contra las instituciones médicas y farmacéuticas en torno a la medicina ortomolecular somática, hacen de Pauling uno de los autores más importantes en el ámbito de las ciencias biomédicas del siglo XX.

Fruto de todo ello el número de libros, artículos, reportajes y documentales que sobre su figura, vida y obra han visto la luz, tanto en el ámbito de las ciencias biomédicas como la química, es ingente. Ya antes de su fallecimiento la suma de trabajos superaba el centenar. Tras su desaparición en 1.994 –sobre todo con la celebración del centenario de su nacimiento en el

año 2.001– la cantidad de libros, artículos, congresos, reuniones científicas y sociales, así como de páginas y foros en Internet en torno a Linus Pauling no ha hecho más que crecer. No obstante, un examen atento de los trabajos más serios, profundos y divulgados nos permite clasificarlos en tres modalidades. La primera de ellas la conforman aquellos trabajos interesados por su obra científica. Estos trabajos tienen por protagonista el conocimiento proporcionado, los avances y errores de las propuestas e investigaciones de Pauling en los campos de la química, la biología, la medicina (molecular y ortomolecular), la psiquiatría y la nutrición. Encontramos también numerosos libros, artículos y enlaces de Internet que nos presentan la cara más humanista de Pauling. Son trabajos dedicados a sus esfuerzos por la paz, su activismo político y social que le proporcionaron la obtención de su segundo premio Nobel. La tercera modalidad de trabajos lo constituyen las numerosas biografías que sobre Pauling se han escrito. Unas más centradas en sus trabajos científicos, otras en sus esfuerzos sociales o el contexto más personal y familiar, son trabajos que centran su atención nuevamente en los dos perfiles señalados previamente.

Sin embargo, entre todo el material analizado no hemos encontrado ningún trabajo dedicado exclusiva o principalmente a mostrar las dimensiones epistemológicas, ontológicas y metodológicas sobre las que construyó su obra. Ciertamente es que podemos localizar algunas reflexiones y comentarios filosóficos aislados, como ocurre en la biografía de Serafini², pero no trabajos completos y profundos sobre dichas cuestiones³. La novedad que presenta este trabajo es precisamente la de constituir el primer estudio monográfico dedicado a investigar si, tras las continuas rupturas, los continuos saltos que encontramos en la obra del químico estadounidense –de la cristalografía a una nueva química estructural fundamentada en la mecánica cuántica, de ésta a la biología y medicina molecular y de ambas a la medicina ortomolecular– hay una continuidad, un hilo conductor ontológico, epistemológico y metodológico constante, siempre presente bajo toda la obra científica de Linus Pauling que le dé unidad. No podemos obviar aquellas declaraciones en las que el mismo Pauling hizo saber su poca afición por la filosofía⁴, sin embargo eso no excluye que podamos encontrar en su obra una posición epistemológica y

² Serafini, A. (1.989)

³ Debido al extraordinario número e importancia de textos científicos de Pauling así como de los trabajos existentes sobre los mismos, se ha incluido en el primer capítulo una sección dedicada exclusivamente a señalar e inventariar aquellos trabajos *de* y *sobre* Pauling más significativos, la importancia y novedades que introduce este trabajo, ampliando lo hasta ahora expuesto.

⁴ Marinacci, Barbara (1.995), p. 86.

ontológica, una preocupación por la finalidad de la ciencia y el tipo de conocimiento que obtenemos a través de ella, así como algún interés por el análisis del método científico. Queremos señalar también como una característica importante de este trabajo que se trata del primer estudio de Linus Pauling en español. Como tendremos la oportunidad de ver más detenidamente⁵ existe una pequeña biografía⁶, pero se trata de un texto perteneciente a una colección de divulgación destinada a dar a conocer la ciencia a niños y jóvenes. El escaso conocimiento que del “*mayor químico del mundo*” –como dijera de él F. Crick– que encontramos en el público no especializado en el ámbito hispanohablante puede ser fruto, entre otras razones, de la escasa traducción de su obra y a la inexistencia de estudios sobre la misma en nuestra lengua. Por ello, consideramos que este primer trabajo monográfico sobre Pauling en español puede ayudar en alguna medida a paliar tal carencia e impulsar un interés por la vida y obra del químico estadounidense.

Para ello, a partir del examen de sus textos científicos y divulgativos, entrevistas concedidas, el análisis de los trabajos sobre él ya realizados y la exploración de su contexto científico y filosófico, la presente disertación se va a dividir en cuatro capítulos. El primero de ellos –titulado “Contexto personal, científico y filosófico”– estará dedicado al análisis y exposición del contexto científico y filosófico bajo el cual Linus Pauling desarrolló su obra. Precedido por una breve biografía personal y científica, así como de un estudio sobre aquellos trabajos *de y sobre* Pauling más significativos, el primer capítulo tendrá por objeto la exposición de una panorámica general del contexto e influencias científicas y filosóficas que, de forma más notoria, condicionaron el desarrollo de su obra científica. El fin que se perseguirá será el de presentar aquellos elementos más importantes de las tradiciones científicas y cuestiones filosóficas que entonces estaban en juego y de las que, en mayor o menor medida, se tuvo que hacer cargo. Para ello, la sección dedicada al contexto científico comenzará con una revisión del estatus y las cuestiones más importantes que la química de finales del siglo XIX y principios del XX debía resolver. Prestaremos igualmente atención a cómo comenzó entonces a percibirse en el ámbito de la química la necesidad de dirigir la mirada a la nueva física cuántica en la búsqueda de sus fundamentos últimos. Ello nos deberá llevar a revisar aquellos elementos más significativos de la nueva mecánica cuántica que influirán en el desarrollo de una nueva

⁵ En la sección “Breve selección comentada de libros sobre Linus Pauling”.

⁶ Chamizo, José Antonio (1.994)

química, principalmente aquellos elementos que el mismo Pauling encontró durante su primera estancia en Europa y que le llevaron a interpretar los fenómenos químicos como fenómenos cuánticos. Influido por la creación de la división de biología en el *Instituto Tecnológico de California* (a partir de ahora *Caltech*) donde trabajaba, el dinero de la *Fundación Rockefeller* que le llegaba a través de Warren Weaver y su relación con Kart Landsteiner, el interés de Pauling empezó a migrar hacia las ciencias biomédicas. Heredera de la investigación biológica de mediados del siglo XIX y XX, la bioquímica moderna y la recuperación del pensamiento darwinista, la genética aparecía como el lugar idóneo desde el que Pauling podía acercarse a la realidad viva a partir de sus conocimientos físicos y químicos. Por esa razón, dedicaremos unas páginas a revisar el estatus de la biología y la medicina durante el cambio de siglo con el fin de poder señalar posteriormente el papel que Linus Pauling jugó en el nacimiento y posterior desarrollo de la biología y la medicina molecular. La última sección de este primer capítulo estará dedicada a revisar el contexto filosófico, aquellas cuestiones epistemológicas, ontológicas y metodológicas más importantes que estaban entonces en juego en los ámbitos de la física, la química y las ciencias de la vida.

El segundo capítulo de la presente investigación, al que hemos dado por título “Química estructural moderna”, estará dedicado al análisis de los trabajos llevados a cabo por Linus Pauling en el ámbito de la química. Desde sus primeros intentos en la aplicación de la mecánica cuántica a la resolución de problemas químicos, hasta la publicación de uno de los trabajos más importantes en la historia de la ciencia –*The Nature of Chemical Bond*–, trataremos de dar cuenta de la obra y la trayectoria científica de Linus Pauling entre 1.927 y 1.939. Fue precisamente en este periodo –como veremos– cuando se forjó la imagen internacional del “más importante químico del siglo XX”: desde su contribución al nacimiento y la fundamentación de la química cuántica, la formulación de las famosas “reglas de Pauling” para la determinación de la estructura de complejos cristales –incluida la estructura tetraédrica del carbono–, hasta la explicación de la naturaleza del enlace (covalente) químico.

El tercer capítulo, que llevará por título “Ciencias de la vida”, estará dedicado al estudio de sus trabajos en el ámbito de las ciencias biológicas. Para ello distinguiremos tres secciones. En la primera de ellas, que comenzará con la revisión de sus primeros estudios sobre la hemoglobina, se llevará a cabo un repaso de sus investigaciones en torno a la estructura de las

proteínas; que contribuyeron al nacimiento de la biología molecular. La segunda parte estará dedicada a sus trabajos más ortodoxos en el ámbito de la medicina. Se trataron de indagaciones que ayudaron en la comprensión molecular del comportamiento y la naturaleza de los anticuerpos y que permitieron explicar por primera vez una enfermedad –la anemia falciforme– como consecuencia de una alteración en la estructura de una molécula. Criticados y condenados por muchos de los principales actores implicados en la investigación médica, los trabajos de Linus Pauling en el ámbito de la medicina ortomolecular constituyen la tercera parte del capítulo dedicado a las ciencias biomédicas. Fueron trabajos que si bien hoy en día pueden resultarnos susceptibles de poca controversia⁷, la suscitaron durante la década de 1.960. Veremos entonces cómo las luchas libradas por Pauling en la defensa de que muchas enfermedades mentales y somáticas tienen su raíz en un desequilibrio químico, así como los múltiples frentes abiertos en torno a la vitamina C, ocuparon sus últimos años de investigación y le llevaron a mantener fuertes enfrentamientos en el ámbito de la política social sanitaria que tienen hoy en día su continuidad desde el *Instituto de Linus Pauling*⁸.

Tras el estudio de la vida, el contexto científico y filosófico bajo el cual trabajó Pauling, así como de su obra química y biomédica, el cuarto y último capítulo que lleva por título “Rupturas y continuidades en la obra de Linus Pauling” estará dedicado a responder a las cuestiones principales que intenta plantear este trabajo y ya sugeridas anteriormente: ¿Podemos encontrar una posición epistemológica, ontológica y metodológica constante que fundamente y de sentido unitario a toda la obra científica de Linus Pauling? ¿Hay un hilo conductor que, a pesar de las constantes rupturas y continuidades que observamos en su trabajo le de coherencia interna bajo una determinada concepción de la Naturaleza, del papel de la ciencia y del método científico? De ser así, ¿cuál sería esta posición epistemológica, ontológica y metodológica que subyace bajo las aportaciones de Pauling en los ámbitos de la química y las ciencias biomédicas? ¿Cuál sería entonces la respuesta de Pauling ante las cuestiones clásicas que la filosofía de la ciencia suele plantearse en torno a la naturaleza y fin de la ciencia y el tipo de

⁷ La mayoría de ellos pero no todos, ya que otros siguen siéndolo en la actualidad sobre todo por razones no epistemológicas sino económicas y políticas.

⁸ Un examen a fondo de este episodio de la vida personal y científica de Linus Pauling exigiría una investigación que caería dentro del ámbito de los llamados “estudios sociales o culturales de la ciencia”. El presente trabajo, por estar centrado en las dimensiones epistemológicas y ontológicas, no puede hacerse cargo de esta perspectiva de análisis de forma completa, pero nos permitimos reconocer que su desarrollo es decisivo en el estudio de la obra científica de Linus Pauling y el impacto que esta tuvo para el desarrollo de la ciencia y nuestra sociedad.

conocimiento que nos brinda ésta? ¿Cómo entendería el químico de Pórtland la realidad y el tipo de acceso que tenemos a la misma a través de la ciencia? ¿Cuál sería entonces el método que ha de seguir el científico y cuáles serían sus limitaciones? Tras dar cuenta de tales cuestiones, el cuarto capítulo –y la tesis propiamente dicha– terminarán con unas conclusiones finales que, a modo de recapitulación, den respuesta a estas cuestiones prestando especial atención a la existencia o no de ese hilo conductor subyacente que de unidad a toda su obra.

Incluiremos un capítulo de anexos en donde el lector podrá encontrar en la sección *Adiciones* algunos textos que hemos elaborado con la intención de aclarar o desarrollar más exhaustivamente elementos o ideas importantes de la obra científica de Linus Pauling, pero que, por su excesiva extensión o especificidad, podrían distraer innecesariamente del cuerpo principal de la tesis la atención del lector. Se incluyen asimismo en la sección *textos* copias de algunos escritos –sobre todo cartas personales– que pueden apoyar algunas ideas expuestas a lo largo del trabajo.

La vida y obra de un personaje como Linus Pauling no nos permite concluir sin mostrar, aunque sea sucintamente, algo de su personalidad, de sus esperanzas y de su imagen del ser humano y de la ciencia. Por ello, concluimos este trabajo presentando ante el lector hispanohablante la primera traducción al español de su texto *Un mundo en el que cada ser humano pueda vivir una buena vida*.

CAPITULO I. CONTEXTO PERSONAL, CIENTÍFICO Y FILOSÓFICO

1.1. BIOGRAFÍA PERSONAL Y CIENTÍFICA.

LINUS PAULING, EL HOMBRE Y EL CIENTÍFICO

Descendiente de una familia de pioneros, los valores de la frontera oeste marcaron la vida y obra de un científico autosuficiente, enérgico, amante de la naturaleza, inquisitivo y trabajador duro. El origen fronterizo de Linus Pauling quedó perfectamente reflejado en un impulso por mirar siempre un poco más allá, por encima de los límites de lo hasta entonces conocido. Pauling gustó de trabajar en las fronteras del conocimiento, rebasar la seguridad que los límites del campo conocido le brindaban. Ejemplo de ello son muchos de sus más importantes descubrimientos llevados a cabo en los intersticios existentes entre distintas disciplinas; entre la química y la física, entre la química y la biología, entre la química y la medicina se desarrollaron gran parte de sus trabajos más sobresalientes. Cuando Pauling nació, la química era una disciplina dominada por los alemanes, cuando murió los estadounidenses tenían la hegemonía, algo en lo que Pauling tuvo mucho que ver.

Pauling mostró desde muy pequeño un gran interés por la lectura, la historia y las ciencias naturales. Pero su infancia y su posterior vida quedaron marcadas muy pronto por la repentina muerte de su padre⁹ como consecuencia de una úlcera estomacal agravada por una desatendida peritonitis. El pequeño Linus buscó consuelo en los libros y en la colección de insectos. Pauling no se dedicó exclusivamente a capturar y mirar insectos, también leía sobre ellos. Además, “una persona que colecciona insectos necesita determinados productos químicos; 10 gramos de cianuro potásico y quizás 50 grs. de yeso blanco”. Sin embargo, pronto la entomología dejó de interesarle y empezó, a los 12 años, a inquietarse por las rocas y los minerales. Su afición por la colección primero de insectos y luego de rocas marcaría –como él mismo reconocería muchos años más tarde– su posterior desarrollo científico¹⁰. Especial interés levantó en él el granito, que desmenuzaba para observar detenidamente. En la roca podía percibir y distinguir tres tipos de granos de cristal: granos blancos o transparentes, granos rosas y granos negros. Gracias a sus lecturas ya sabía entonces que los granos blancos o transparentes eran de cuarzo, los rosas de feldespato y los negros de mica. Aunque su mayor interés y

⁹ Fallecimiento que tuvo lugar el 11 de junio de 1.910 cuando Pauling tan sólo tenía 9 años.

¹⁰ Ejemplo de ello lo encontramos en el libro de Marinacci, Barbara (ed., 1.995) *¿Por qué llegó a ser científico?* Probablemente porque había sido un niño muy curioso. En sus últimos años de vida Pauling se recordaba con diez, once y doce años preguntando “*¿Qué es esto? ¿Por qué puedo ahora ver ese fenómeno particular? Me gustaría poder entender eso*”. Como él mismo reconoce, es posible que todos los niños hagan eso, pero parece que en su caso la curiosidad fue especialmente fuerte, al igual que en casi todos los científicos, a lo que debemos añadirle la extraordinaria memoria que poseía.

curiosidad estaban centrados en el granito y en otras rocas, estimó que para poder comprender las rocas necesitaba entender antes los minerales; *si era capaz de comprender la naturaleza del cuarzo, de la mica y del feldespato, de su estructura y propiedades, podría tener posteriormente una mejor comprensión de la naturaleza de las rocas*. Fruto de esta convicción, Pauling estuvo alrededor de un año leyendo sobre minerales e intentando desarrollar una comprensión personal de su naturaleza. Fue entonces cuando los minerales empezaron a interesarle más que las rocas. Algo que aprendió de sus lecturas sobre minerales era que éstos tenían una composición química definida. Por ejemplo, que el cuarzo era descrito como dióxido de silicio, con un átomo de silicio combinado con dos de oxígeno. La química empezaba a atraerle y a convencerle de que necesitaba aprender mucho más sobre elementos y compuestos; básicamente qué son, dónde se encuentran, cómo se unen. A los 13 años se produjo la conversión definitiva. Linus Pauling quedó hechizado ante los experimentos químicos que Lloyd Alexander Jeffress –su mejor amigo de la infancia– le mostró en su casa. Las sensaciones que entonces vivió, provocadas por las flamas, humos, olores y la visión de misteriosos cambios en las soluciones y polvos, le acompañaron el resto de su vida. Hasta ese momento –como el mismo Pauling señalaría¹¹ tiempo después– no había pensado en el hecho de que unas sustancias podían convertirse en otras, como ocurre cuando quemamos leña. Fue entonces cuando decidió que sería químico¹².

En el período de primavera de 1.916 Pauling tomó su primer semestre de Química en la Escuela Superior Washington, donde no pasó desapercibido¹³, y el 6 de octubre de 1.917 empezó la carrera de ingeniería química en la *Universidad Agrícola de Oregon* (OAC). Muy pronto demostró que sabía más química que muchos de sus profesores. Por aquel entonces Pauling estaba encantado con las matemáticas, algo que se reflejó en el hecho de que eligiera, durante su primer año, prácticamente todos los cursos que de esta disciplina se impartían¹⁴. El libro de química que siguió durante su primer año era el de Alexander Smith *General Chemistry*. En el mismo encontró por primera vez la palabra “*estocástico*”, un método de investigación y descubrimiento científico que aplicó más tarde en su propia metodología. En otoño de 1.919 en el departamento de ingeniería de la *OAC* se supo de las dificultades

¹¹ Marinacci, Barbara (1.995), p. 31

¹² Linus Pauling: «“I am going to be a chemist!” I decided right at that time» en Marinacci, Barbara (1.995), p. 31

¹³ Su profesor de química, Mr. William Greene supo reconocer en él su talento dedicándole un especial seguimiento

¹⁴ Tal y como tendremos la oportunidad de ver a lo largo de la tesis, esta disposición hacia las matemáticas fue decisiva para su trabajo.

económicas por las que Linus Pauling estaba pasando desde el fallecimiento de su padre y de su posible abandono de la carrera. Conscientes de su gran valor le ofrecieron un puesto como profesor del curso de análisis químico cuantitativo del segundo año. Su trabajo en el almacén, mezclando los químicos para los estudiantes, resultó una excelente oportunidad para que el joven Pauling cogiera soltura y confianza en clase –llegó ya entonces a ser considerado un gran profesor conociéndosele como “Boy professor”– y tuviera acceso a las más recientes revistas de química¹⁵. Fue en 1.919 cuando gracias a la lectura de los últimos números del *Journal of the American Chemical Society* desarrolló por primera vez un serio interés por la naturaleza del enlace químico. Aquel año la revista incluía varios artículos de Irving Langmuir sobre la teoría electrónica del enlace químico basados en un trabajo de Gilbert Newton Lewis de 1.916 –el gran químico decano del Colegio de Química de la Universidad de California en Berkeley–. Para ambos científicos el enlace químico consistía en el compartimiento por parte de los dos átomos que formaban un enlace de un par de electrones. Por aquel entonces Pauling ya tenía grandes conocimientos de química descriptiva, lo que le permitía ver qué fuerzas estaban presentes en la unión. De ese modo comprendió cómo empezaba a hacerse posible, a partir de unas pocas teorías empíricas, la construcción de una nueva ciencia sistemática y estructural. Entusiasmado por estas ideas de Lewis y Langmuir se matriculó en su primer seminario científico sobre la naturaleza del enlace químico¹⁶.

Pauling pudo así pasar gran parte de sus últimos tres años en la OAC leyendo sobre la nueva química estructural y reflexionando sobre algunas propiedades y características de los cristales y minerales; su dureza, la transparencia y el color. Además intentó explicar la estructura de varios cristales como el cuarzo, la mica o el feldespato del granito que había coleccionado de niño. Sabía que algunos elementos como el carbono y el cobre, al igual que muchos compuestos, como el hielo, la sal, se presentaban en sus formas más puras como

¹⁵ Su despacho como instructor se localizaba en la biblioteca de química, de tal manera que tenía fácil acceso a todas las nuevas revistas de química que llegaban.

¹⁶ A pesar de ello Pauling siguió explicando durante sus primeros años como profesor de química elemental para estudiantes universitarios el enlace químico como resultado de la interacción de átomos bajo la forma gráfica estándar que los químicos, y no los físicos, utilizaban. Con un propósito de simplificación aquellos acostumbraban a recomendar a sus alumnos que pensarán en el enlace químico como resultado de la interacción de un “corchete” (“gancho y ojal”). Así, solían decir por ejemplo que los átomos alcalinos (sodio, potasio) tenían un ojal, un orificio, mientras que los elementos halógenos (cloro, flúor) tenían un gancho. El enlace químico consistía entonces en el hecho de que el gancho de un halógeno se sujetaba en el ojo de alcalino. Como el mismo Pauling reconoce, este era realmente una imagen primitiva del enlace químico, pero era el estado del arte, era la manera de comprender, por entonces, el enlace químico.

cristales. Mirándolos debería verse una basta variedad de estructuras en una molécula gigante. Poco a poco era atraído por un realismo y un gran deseo por entender las propiedades físicas y químicas de las sustancias en relación con la estructura de los átomos y de las moléculas que las componen. Este deseo condicionó fuertemente el curso de su trabajo durante más de 50 años¹⁷.

Durante su último año de ingeniería empezó a plantearse la posibilidad de hacer un postgrado. La ingeniería química ya no le parecía lo suficientemente atrayente para dedicarse profesionalmente a ella. Cada vez estaba más convencido de que le atraían más las ideas, las teorías: descubrir y comprobar cosas, para luego poder aplicarlas al “mundo real”. Pero, *¿Dónde debía ir?* Tras la lectura de los textos de Iving Langmuir de 1.919 y de asistir al seminario sobre la estructura molecular y la naturaleza del enlace químico (Corvallis), Pauling había empezado a interesarse por una de las cuestiones más importantes de la química: *¿cómo se unen los átomos para formar moléculas?* Rápidamente comprendió que para encontrar la respuesta debía dar el salto de la ingeniería química a la teoría química. Por ese motivo escribió a Arthur Amos Noyes¹⁸ –director entonces del programa de doctorado en química del Instituto Tecnológico de California (Caltech) – haciéndole saber que estaba interesado en seguir sus estudios con ellos. Noyes le propuso que hiciera el postgrado y su trabajo de investigación (tesis doctoral) sobre la determinación de la estructura de cristales bajo la supervisión de Roscoe Gilkey Dickinson. Pauling escribió de nuevo a Noyes aceptando su propuesta¹⁹.

1.922 fue un año decisivo en la vida de Linus Pauling. Como instructor del curso “Química para el mejoramiento de la economía domestica (Chemistry for Home Economics Majors)”²⁰ conoció a Ava Helen Millar, quien poco tiempo después se convirtió en su esposa. En otoño, tras haberse titulado como Licenciado en Ingeniería Química en la Universidad Agrícola del Estado de Oregón, empezó su doctorado en el Caltech. Pronto se dio cuenta que se

¹⁷ Por aquel entonces –tal y como nos lo cuenta el propio Pauling (Marinacci, Barbara (ed., 1.995), p. 38)– estaba convencido de que sus deseos eran el resultado de una curiosidad puramente intelectual, que no tenía ninguna base teológica ni filosófica. Era escéptico en cuanto al dogmatismo religioso, puesto que ya había superado aquel periodo en el éste había sido una causa de preocupación. Solamente estaba interesado en los fenómenos científicos, por aquellas las reacciones en las que unas sustancias desaparecían y otras nuevas aparecían. Tan sólo esperaba aprender más y más acerca de estos aspectos del mundo.

¹⁸ La primera vez había sido para solicitar un año de intercambio en el Instituto Tecnológico de California. A. Noyes le había hecho saber de la imposibilidad de compaginar estudios y trabajo en su institución.

¹⁹ En los últimos años de vida Pauling reconoció una u otra vez que varios años después de terminar su doctorado, se dio cuenta que no había lugar alguno en el mundo en 1.922 que pudiera haberle preparado mejor para su carrera como científico.

²⁰ Un curso de química introductoria para jóvenes novatas que, en su mayoría, estudiaban economía doméstica.

trataba de una institución en la que se esperaba que los estudiantes graduados aprendieran no sólo durante sus clases, sino también en el laboratorio. Bajo la supervisión de profesores veteranos que les guiaban en su labor investigadora, se entrenaban en la manipulación de los instrumentos y equipos del laboratorio así como en el diseño de experimentos que contestaran a cuestiones importantes. El profesor-tutor de Pauling fue Roscoe Dickinson²¹, un joven profesor que trabajaba como experto residente en el Caltech en una nueva y excitante técnica –que vendría a convertirse muy pronto en la herramienta científica más importante de Pauling– llamada cristalografía²². Aprendida la técnica, Pauling y Dickinson pudieron resolver en un mes la estructura atómica de la *molibdenita*, la primera sustancia en ser descrita en la que seis átomos de un no metal –sulfuro– conformaba un prisma hexagonal de caras idénticas alrededor de un átomo metálico; *molibdeno*²³. El análisis de la estructura del *Nolybdenite* abrió las puertas al descubrimiento de la estructura atómica de cuatro cristales en los dos siguientes años, toda una hazaña para un estudiante de doctorado. A pesar de que el trabajo de laboratorio no era por entonces la gran pasión de Pauling –la lentitud, meticulosidad y repetitividad experimental que requería para una mente tan impaciente como la suya que amaba la búsqueda constante de nuevas ideas, de nuevos retos–, cada una de las estructuras determinadas proporcionó valiosa información sobre los enlaces químicos y ofreció importantes conocimientos sobre la relación

²¹ Dickinson, que tan sólo dos años antes había obtenido su grado de doctor –la primera persona en hacerlo en el Caltech– había desarrollado su trabajo bajo la técnica de la cristalografía (a la que haremos referencia más adelante) desarrollada por Bragg e importada al nuevo continente por Noyes desde Inglaterra.

²² *X-Ray Crystallography*. Por entonces ya se sabía que casi todos los sólidos existen en forma cristalina, es decir, sus átomos están ordenados formando estructuras tridimensionales repetidas. Pero así como encontramos en la naturaleza cristales muy grandes –tal y como los que se forman en las rocas de sal o el cuarzo– también hay muchos otros tan pequeños, que su examen a simple vista se hace imposible. Sin embargo, la fortuna de los químicos cambió cuando en 1.912 un físico alemán descubrió que por medio de los rayos X era posible dar cuenta de la estructura de cristales simples, la distancia y ángulos existentes entre los átomos que lo componen. Esto parecía en principio increíble, aun cuando esta técnica sólo podía ser utilizada –como decíamos– para estructuras cristalinas simples: aquellas con más de seis u ocho átomos distintos formadas a partir de estructuras repetitivas más simples, daban lugar a patrones de difracción demasiado complicados para analizarse. Pero incluso así, la cristalografía constituyó un cambio radical, el inicio de un nuevo modo de estudiar química, algo así a lo que el descubrimiento del telescopio por parte de Galileo supuso para la astronomía. La estructura de las moléculas, la forma en que los átomos se unen, había sido objeto de preocupación e investigación por décadas, pero la ausencia de una forma de verificar las cuestiones subyacentes había hecho que los estudios estructurales demandaran una gran cantidad de tiempo por parte de muchos químicos. A partir de la técnica de difracción empezaba a hacerse posible determinar la estructura de cristales gracias al registro y la medición del desvío de la luz de los rayos X –por ejemplo– en cristales irradiados. Sin embargo, para llevar a cabo esta tarea, determinar cómo los átomos del cristal están ordenados, descubrir la longitud de los enlaces entre los átomos y las magnitudes de los ángulos entre enlaces, era necesario actuar con persistencia, llevar a cabo grandes cálculos y a veces, contar algo de fortuna.

²³ Pauling se mostró entonces eufórico ante su primer triunfo en el laboratorio, su primer descubrimiento real. Años más tarde diría refiriéndose a ese momento “Estaba encantado de aprender que las cuestiones acerca de la naturaleza del mundo podían ser contestadas por medio de experimentos cuidadosamente planeados y ejecutados” [Cita extraída de Hager, Thomas (1.998), p. 33.].

entre la estructura y las propiedades de las sustancias, la distribución de los enlaces en un cristal tal como el cuarzo, y obtener, adicionalmente, información acerca de la longitud de los enlaces y los ángulos que estos forman entre sí. Estos trabajos le proporcionaron una puerta de entrada a la estructura de los cristales y algunas significativas claves para sus posteriores trabajos sobre el átomo y el enlace molecular.

De especial importancia fue también –como él mismo Pauling se encargara de señalar tiempo después –el aprendizaje de métodos de trabajo y la afinación del pensamiento durante la investigación²⁴ que obtuvo junto a Dickinson. Pero quizá, como el mismo Pauling señaló²⁵, lo más importante que le enseñó su joven profesor-tutor fue a evaluar la fiabilidad de sus propias conclusiones. Le acostumbró a que se preguntara cada vez que alcanzara alguna conclusión: “¿hago alguna suposición al alcanzar esta conclusión? ¿Cuál es esa suposición? ¿Existe la posibilidad de que esa suposición sea errónea? ¿Cómo fiarme de la conclusión?” Pauling recordó en muchas ocasiones las palabras de Dickinson: “Si tienes una idea original, es posible hacerse ilusiones pensando que hay observaciones que apoyan la idea. O es posible que aunque tú pienses que tu idea ha sido desarrollada sobre la base de un argumento racional, en algún sitio has llevado a cabo una suposición injustificada. Este procedimiento de revisión fue muy importante para mi investigación”²⁶. Fruto de esta colaboración entre profesor y alumno vio la luz en 1.923 el primer artículo de Pauling en el *Journal of the American Chemical Society* sobre la estructura de la molibdenita.

Crucial fue también la figura de Richard Chance Tolman, el principal responsable del desarrollo del Caltech como un instituto importante de enseñanza e investigación²⁷ en química-física²⁸. Tolman, quien había llegado a Pasadena en 1.921, tenía un conocimiento preciso de los nuevos desarrollos en física y la convicción de que los problemas químicos podían ser resueltos

²⁴ El proceso de determinación de una estructura implica tener que llevar a cabo una gran sucesión de argumentos lógicos cuyas formas le fueron presentadas por Dickinson de una forma meticulosa, enfática y rigurosa. Dickinson fue una cabeza especialmente clara y un científico atento, un fuerte crítico con las negligencias, los descuidos y las superficialidades. Pauling se mostró agradecido con él por haberle enseñado qué cuestiones acerca de la naturaleza del mundo podrían ser respondidas a través de experimentos cuidadosamente planificados y ejecutados.

²⁵ Marinacci, Barbara, ed. (1.995), p. 69

²⁶ Cita original extraída de la contribución de Linus Pauling a “Looking Back on Books and Other Guides” en *Physics Today* 34, no. 11 (1.981), 559.

²⁷ El Caltech era por entonces pequeño, a pesar de lo cual cumplió admirablemente con su función de dar una gran formación a sus jóvenes científicos que debían sacar adelante sus trabajos de investigación.

²⁸ Marinacci, Barbara, ed. (1.995), p. 70.

a través de la aplicación de métodos físicos. En su curso de 1.922 “Introduction to Mathematical Physics” hizo especial énfasis en los principios básicos de la física matemática y su aplicación cuantitativa a problemas moderadamente simples y especialmente valiosos. Su curso sobre termodinámica avanzada y mecánica estadística aplicada a problemas físicos y químicos fue muy destacable por su claridad y minuciosidad. Pero su gran contribución a la formación de los jóvenes químico-físicos en Pasadena vino –según Pauling– a través del curso “Seminar in Physical Chemistry...”²⁹. Este curso ayudó a Pauling a superar su escaso conocimiento de física y matemáticas³⁰.

Dentro de este contexto se iba abriendo ante Pauling un ancho mundo de retos y desafíos científicos. Si bien el químico de Portland se mostró muy interesado ante casi todos los nuevos ámbitos de investigación que se abrían ante él, una cuestión empezaba a destacar por encima del resto: las relaciones existentes que se daban entre la estructura de las moléculas –las distancias y los ángulos entre los átomos que las componen– y su comportamiento, su punto de fusión y ebullición, la energía requerida para descomponerlas en sus partes y reformarse. Para Pauling, estas dos características –estructura molecular y comportamiento– estaban íntimamente relacionadas, razón por la cual pensaba que una comprensión completa de la estructura molecular podría explicar en gran medida –si no todo– el comportamiento químico. Era necesario, por consiguiente, una nueva forma de comprender la estructura molecular desde su nivel más bajo, desde las leyes básicas de la naturaleza, que permitiera dar cuenta de cuestiones como: ¿qué determina la estructura de una molécula?; ¿qué dicta por qué los átomos se ordenan a sí mismos de cierta forma y no de otra?; ¿qué hace que los enlaces de algunos átomos sean fuertes y otros débiles? Convencido de que estas leyes subyacentes debían determinar las propiedades que observamos en la materia, Pauling había leído los artículos de G. N. Lewis e I. Langmuir sobre el enlace químico. Pero había algo que aún se le escapaba: en sus clases de física en el Caltech se dio cuenta que a fin de desenmarañar el secreto de la estructura molecular debía alcanzar previamente una comprensión de la naturaleza de los átomos que forman las

²⁹ También hay que destacar en ese sentido las conferencias sobre investigación química promovidas e impulsadas por el mismo Tolman, quien siempre se mostró interesado en hacer todo lo posible para que los jóvenes investigadores extendieran sus conocimientos.

³⁰ Aunque Pauling se había sentido muy atraído por las matemáticas, especialmente durante su primer año en OAC, lo cierto es que tiempo después comprobó que su preparación matemática no era especialmente fuerte.

moléculas³¹. Convencido ya de que era imprescindible sumergirse en la nueva física, en la nueva comprensión de la estructura atómica que al otro lado del océano se estaba produciendo³², A. Noyes le hacía una inesperada oferta: visitar los centros más importantes de Europa y conocer de primera mano la revolución que la física estaba viviendo. Gracias a su intervención Pauling consiguió una beca Guggenheim³³ que le permitió viajar y permanecer en Europa durante un año. Ansioso por ponerse a trabajar, nada más llegar e instalarse en Múnich se dirigió directamente al pequeño y frugalmente equipado laboratorio de Sommerfeld. Junto a él Pauling fue testigo del desarrollo y evolución que estaba viviendo la mecánica cuántica, así como los conflictos y problemas internos que arrastraba o iban apareciendo. Pero así como el tiempo que pasó en el *Instituto de Física teórica de Sommerfeld* fue clave para su comprensión de la naturaleza de la mecánica cuántica –algo que muy pronto tuvo su reflejo en el avance del desarrollo de nuevos modelos de enlace químico como tendremos la oportunidad de ver– también lo fueron las visitas y estancias cortas que pudo disfrutar –gracias a los arreglos concertados por Noyes– en Copenhague y Zúrich visitando otros centros de investigación en física moderna.

Fue así como el joven Pauling tuvo la extraordinaria fortuna de vivir y aprender directamente del ambiente en el que se estaba gestando la nueva física y en el que trabajaban sus mismos exploradores: Niels Bohr, Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Wolfgang Pauli y

³¹ Tal y como el arquitecto que quiere construir, ha de tener un gran conocimiento de la fuerza y capacidades de las vigas, ladrillos y tablonos.

³² Casi semanalmente, como resultado de los nuevos hallazgos que se producían en Europa, la física estaba viviendo una auténtica revolución fruto del esfuerzo de un pequeño grupo de jóvenes teóricos que habían declarado la guerra a la idea de los átomos como sistemas solares en miniatura. Modelo éste que, con los electrones girando alrededor de los núcleos, dejaba muchas cuestiones sin explicar, como el hecho de que los electrones cargados negativamente no perdieran energía y se precipitaran –tal y como predecían las leyes más elementales de la física– hacia el núcleo cargado positivamente. Era un debate atravesado de cuestiones matemáticas extraordinariamente difíciles ante las que Pauling tuvo que ponerse a trabajar duro.

³³ Esta ayuda económica fue decisiva no solo para el resto del viaje sino de para futuro profesional dentro del Caltech, aunque él mismo no fuera consciente de ello por entonces. De hecho, no fue hasta 20 años más tarde que Pauling comprendió todo lo que había estado jugándose por entonces y lo que la concesión de esta beca representaba: cómo él se había convertido en objeto de deseo y disputa entre dos de los más importantes químicos estadounidenses del momento y las instituciones que representaban. El primero de ellos, Noyes, estaba enormemente preocupado ante la posibilidad de que Pauling se pudiera ir a Berkeley. Su miedo no era infundado, ya que el mismo Gilbert Newton Lewis había realizado una visita a Pasadena durante las fechas en las que Pauling había alcanzado su grado de Doctor. Años más tarde, Pauling supo que Gilbert había ido a ofrecerle un puesto en Berkeley a través de Noyes quien, desde ese momento, hizo todo lo posible para mantenerlo alejado de Berkeley y Lewis, a la vez que le brindaba la posibilidad de seguir formándose y adquiriendo la suficiente experiencia como para poder ofrecerle posteriormente un interesante puesto en el departamento de química del Caltech: la estrategia ideada por Noyes fue este viaje a Europa y la búsqueda de financiamiento a través de la concesión de la beca Guggenheim. Lejos de reprochárselo, Pauling demostró en varios de sus escritos su agradecimiento por ello.

Arnold Sommerfeld³⁴. Poco tiempo después de la llegada de Pauling a Múnich, el físico austriaco Erwin Schrödinger presentó su –en apariencia– nuevo modelo. En poco tiempo la disputa entre la teoría Schrödinger y Heisenberg se convirtió en el tema principal de discusión. Pauling tuvo la oportunidad de asistir a algunos de los ásperos debates que se produjeron entre los partidarios de las matrices de Heisenberg y las ondas de Schrödinger, así como a la primera presentación que realizó el físico austríaco de su modelo ondulatorio en Múnich³⁵. Pronto se vio que las ideas de Schrödinger y de Heisenberg no hacían referencia a dos tipos de realidades diferentes, sino que se trataba de dos métodos matemáticos distintos que permitían llegar a la misma realidad atómica. En última instancia, era el investigador quien debía elegir qué método utilizar en función de la facilidad que mostrase en su manejo ante el problema particular al que se enfrentaba. Muy pronto Pauling se mostró especialmente interesado por la obra de Schrödinger. En una carta escrita entonces a un amigo desde Múnich³⁶, le hizo saber de su preferencia por el modelo de Schrödinger al que consideraba un método mucho más simple que el cálculo matricial. Además –señalaba– sus ideas permitían en mayor grado el desarrollo de una imagen física y permitían dar nueva luz sobre aquellas preguntas que llevaba planteándose desde que era estudiante de ingeniería: *¿qué fuerzas hacen que los átomos se mantengan juntos formando moléculas?; ¿cómo esas fuerzas hacen que las moléculas posean esas formas y calidades particulares?* Frente al acercamiento puramente matemático de Heisenberg³⁷, la nueva propuesta de Schrödinger se hacía más atractiva. En el modelo del austriaco se sustituían

³⁴ El Instituto Sommerfeld en la Universidad de Múnich, se había convertido en el centro neurológico en el que se daban cita todas las nuevas ideas sobre la estructura atómica. Capaz de atraer la atención de las mejores mentes del momento, Sommerfeld consiguió que los físicos más importantes del momento visitaran la institución haciendo de las clases que allí se impartían un espacio privilegiado en el que se mostraba y desarrollaba el conocimiento más puntero. Cuando Pauling llegó en 1.926 a Múnich, el Instituto Sommerfeld era un hervidero de noticias radicalmente nuevas que giraban alrededor del nuevo modelo atómico de Werner Heisenberg, uno de los ex-estudiantes de Sommerfeld. Tal y como tendremos la oportunidad de constatar más detenidamente en el capítulo dedicado al contexto científico, el acercamiento de Heisenberg se caracterizó, principalmente, por ser un intento de sustitución de los modelos físicos del átomo por un acercamiento mucho más matemático. Este trabajo no pasó desapercibido, muy al contrario, ya que causó una gran exaltación, principalmente entre los físicos más conservadores, quienes consideraban absurdo construir una teoría sin contar por detrás del apoyo de un fuerte modelo físico.

³⁵ La cual tuvo lugar en el verano de 1.926.

³⁶ Hager, Thomas (1.998), p. 37.

³⁷ El acercamiento puramente matemático de Heisenberg a la estructura del átomo –basado en un complejo sistema matricial– permitía a los nuevos físicos hacerse cargo del gran arsenal de datos con los que contaban provenientes de observaciones llevadas a cabo sobre átomos simples. Sin embargo, para un químico como era Pauling, entrenado para ver los átomos y las moléculas como cosas verdaderas, con tamaños y formas particulares, las matemáticas puras eran inadecuadas. Había que reconocer que el viejo modelo de electrones circundando el núcleo atómico como pequeños planetas no se correspondía con los datos que los físicos obtenían, pero el modelo de Heisenberg era poco intuitivo y muy complicado matemáticamente.

las órbitas de los electrones alrededor del núcleo por ondas también circundantes. A partir de las matemáticas existentes Schrödinger fue capaz de crear unas ecuaciones en las que se emparejaban las características de átomos simples. Por esta razón y la “presencia” aún de un rastro físico detrás de las matemáticas, Pauling se decidió por la teoría de Schrödinger³⁸. Por ello fue de extraordinaria importancia, tal y como el mismo Pauling reconoció, que al poco de su llegada a Múnich Schrödinger empezara a publicar sus artículos sobre mecánica ondulatoria y que Sommerfeld organizara aquellas extraordinarias conferencias –las primeras que se deban en el mundo– en torno a la nueva física³⁹.

Pero Pauling quería llevar las ideas de Schrödinger un paso más allá. Si los electrones actuaban como ondas, ¿qué ocurre entonces cuando dos átomos se unen? ¿Las ondas se combinan completamente y rodean a ambos núcleos a la vez? ¿O simplemente las ondas se solapan un poco? Pauling pasó muchas noches en Múnich trabajando sobre este problema, intentando dominar la ecuación de Schrödinger y explicar a partir de la misma cómo se produce el enlace atómico. De crucial importancia fue la atención que le prestó Sommerfeld, quien le enseñó las matemáticas necesarias para poder trabajar con las ecuaciones de Schrödinger. Muy pronto Pauling comenzó a aplicar este método con éxito a algunos de los problemas planteados. Este avance se hizo patente cuando fue capaz de aplicar la mecánica cuántica a la explicación de algunas de las propiedades básicas, como el tamaño de algunos átomos grandes con varios electrones. Esto le permitió ganarse la admiración de Sommerfeld y publicar en la prestigiosa revista inglesa *Proceedings of the Royal Society of London*⁴⁰. Pauling estaba impaciente por poder aplicar la nueva mecánica ondulatoria al cálculo de las propiedades de átomos con varios electrones por medio de la ecuación de función de onda de Schrödinger y de las investigaciones empíricas ya llevadas a cabo. En esa misma línea Pauling publicó en 1.927 un artículo en la revista *Zeitschrift für Physik* sobre un trabajo de Gregor Wentzel de inicios de 1.926. En dicho texto Wentzel había presentado una interesante combinación entre la vieja teoría cuántica y la nueva mecánica ondulatoria. Para tal fin intentó combinar el método de la vieja teoría cuántica de Sommerfeld de sistemas periódicos condicionalmente cuantificados con el modelo atómico

³⁸ En los capítulos dedicados al contexto científico y filosófico tendremos la oportunidad de profundizar más en ambos aspectos respectivamente.

³⁹ Muchos de los seminarios de física que en el Instituto Sommerfeld se impartían empezaron a dedicarse a los más recientes artículos publicados sobre mecánica ondulatoria y otros aspectos de la mecánica cuántica.

⁴⁰ Artículo supervisado por el propio Sommerfeld.

desarrollado en 1.920 por Schrödinger. Si bien los valores que Wentzel había obtenido teóricamente de los dobletes discrepaban con los que arrojaban los experimentos llevados a cabo a través de los rayos x, en el artículo de 1.927 Pauling señaló que una oportuna corrección del método utilizado podría arrojar nuevos datos con una gran correlación experimental⁴¹. Por esa razón continuó investigando sobre este método y aplicándolo al cálculo de valores teóricos de la polaridad eléctrica, susceptibilidad diamagnética, la extensión en el espacio del átomo e iones con varios electrones y también en la evaluación de un conjunto de los radios de los iones de cristales.

Aunque se habían producido avances notorios en el terreno de la aplicación de la nueva mecánica, no lo era tanto en la dirección que le interesaba a Pauling: la del enlace químico. La aplicación de las matemáticas de Schrödinger a complejos de más de un átomo simplemente parecía no funcionar y Sommerfeld no era capaz de ayudarlo. Por ello, en febrero de 1.927, Pauling y Ava Helen partieron de Múnich rumbo Copenhague donde les esperaba el físico danés Niels Bohr. Posteriormente se dirigieron a Zúrich, pero Pauling no tuvo la misma suerte, ya que no pudo trabajar con Schrödinger. Además fue durante esta breve estancia cuando se enteró que él no había sido la primera persona en aplicar la mecánica cuántica al enlace químico. Dos jóvenes alemanes, Walter Heitler y Fritz London –cuyo trabajo tendremos la oportunidad de estudiar más detenidamente en el capítulo dedicado al contexto científico– lo habían hecho antes⁴². Linus Pauling tuvo la oportunidad de estudiar los resultados de Heitler y London mientras estuvo en Zúrich, así como de hablar a menudo con ellos⁴³. El químico estadounidense quedó convencido de que los resultados eran correctos y reconoció que sus

⁴¹ Según manifiesta Pauling, esta fue la primera aplicación de la mecánica cuántica a átomos e iones que contenían varios electrones

⁴² Trabajando de cerca con Schrödinger, habían encontrado una forma para usar la ecuación de onda que permitiera el desarrollo de un modelo matemático de un enlace químico simple. Tal modelo estaba basado en la aplicación del intercambio de energía de Heisenberg. Según esta teoría cuando dos átomos se aproximan el electrón –por tener una carga eléctrica negativa– se veía atraído por el núcleo del otro átomo –que tiene una carga positiva– y viceversa. De esa forma los dos electrones se encuentran en cierto sentido saltando de un átomo a otro entre los dos núcleos, creándose un intercambio de electrones de varios billones de veces por segundo [Hager, Thomas (1.998), p. 42.]. Combinando esta idea con la ecuación de onda de Schrödinger, Heitler y London calcularon que esta fuerza de atracción entre los electrones y núcleos respectivos se vería compensada en un punto por la fuerza de repulsión que se debía dar entre los dos núcleos. De esa forma se crearía un enlace químico con una distancia y una fuerza definida. Este modelo fue aplicado y probado en el enlace que se produce entre dos átomos de hidrógeno. Se trataba evidentemente de un gran triunfo, la primera extensión de la mecánica ondulatoria de Schrödinger al nivel de las moléculas y la primera vez que la nueva física era utilizada exitosamente para explicar la naturaleza del enlace químico.

⁴³ Hager, Thomas (1.998), p. 42-3.

esfuerzos habían fallado porque no había utilizado la idea esencial del intercambio de electrones. Sin embargo, no se dio por vencido, pronto vio y reconoció que faltaban aún muchas cosas por hacer. Heitler y London habían dado el primer paso, habían trabajado con la molécula más simple –el átomo de hidrógeno–, pero a él lo que le interesaba era la estructura y las propiedades de átomos e iones con varios electrones y de moléculas más complejas. Habían muchos más problemas que debían ser resueltos y había decidido que él sería uno de los protagonistas.

En septiembre de 1.927 Linus Pauling y Ava Helen tenían que regresar a Pasadena, ya que el químico había sido nombrado profesor asistente de química teórica en el Caltech. Con su llegada a California Pauling comenzaba una etapa de doce años en la que daría forma a un nuevo tipo de estudio de la química y establecería algunas de las bases sobre las que se construiría la futura biología y medicina molecular. Período éste que culminaría con la publicación en 1.939 de *La naturaleza del enlace Químico* –uno de los libros de química más importantes en la historia de la ciencia–. Sus esfuerzos se vieron recompensados tiempo después con la concesión en 1.954 del premio Nóbel de química. Pero antes de que todo ello ocurriera Pauling tenía que preparar su primer curso como profesor: "An Introduction to Wave Mechanics with Chemical Applications". Para ello preparó un manuscrito de cerca de 250 páginas, en las que tiempo después se apoyaría para escribir un libro que llevaría el mismo título⁴⁴.

En las páginas anteriores hemos centrado nuestra atención en la relación que Pauling mantuvo durante su viaje a Europa con la mecánica cuántica, pero no debemos olvidar que el motivo principal –desde el punto de vista científico y formativo⁴⁵– por el que fue enviado al viejo continente estaba relacionado con la necesidad de que profundizara en el estudio de las estructuras cristalinas. En ese sentido, durante su estancia europea Linus Pauling conoció a Goudsmit, un joven físico holandés que le había hecho saber de su interés en publicar su tesis doctoral en inglés. A su regreso a los EEUU Pauling le escribió una carta⁴⁶ explicándole que él mismo podría ayudarlo en la traducción y ampliación de su tesis con vistas a su posterior publicación. El tándem de jóvenes científicos funcionó y en 1.930, bajo el título *The Structure*

⁴⁴ Pauling, L., Wilson, E. B. (1.935), "Introduction to quantum mechanics with Applications to Chemistry".

⁴⁵ Recordemos que una de las intenciones de A. Noyes era tener alejado a Pauling de Berkeley.

⁴⁶ Con fecha 16 de noviembre de 1.927. Ver copia de la misma en anexos.

*of Line Spectra*⁴⁷, se publicó este trabajo⁴⁸. Se trató de un libro prácticamente de física pura que terminó por convencer a Pauling –tal y como se constata en una carta que envió a su colega⁴⁹– de la necesidad de desarrollar un nuevo tipo de química basada en la nueva mecánica cuántica. Fruto de esta nueva perspectiva –tal y como adelantamos– fue el nacimiento de una nueva química y una nueva comprensión del vínculo químico a la que dedicará –como veremos más detalladamente en el capítulo dos –doce años de su vida y una de sus obras más importantes: *La Naturaleza del Enlace Químico*.

Ya antes de la publicación mencionada con Goudsmit, vieron la luz entre 1.928 y 1.929⁵⁰ una serie de artículos con los que intentó introducir a los químicos estadounidenses en la propuesta de Heitler y London sobre el enlace químico, a la vez que desarrollaba una serie de ideas, de reglas –llamadas posteriormente “Reglas de Pauling”– que hicieron que su reputación creciera de manera gigantesca⁵¹. El texto de 1.928⁵² introducía un nuevo concepto que –si bien a la postre se hizo familiar para cualquier estudiante de química de grado superior– en su momento creó gran polémica⁵³: se trataba del concepto de *hibridación orbital*. La solución de Pauling fue ingeniosa⁵⁴. Usando conceptos tomados de la mecánica cuántica, postuló que era posible pensar en una estructura resonante en donde los dos tipos de enlaces presentes en la observación podían hibridarse o “promediarse” en un solo tipo de enlace, ajustándose así a lo que demandaba la teoría⁵⁵.

Junto a su joven ayudante Verter Schomaker y otros colaboradores, Pauling trabajó en la estructura de más de doscientas sustancias basándose en la nueva técnica. Los frutos de tal esfuerzo no tardaron en aparecer: la publicación de un número considerable de artículos –entre

⁴⁷ Pauling, L. and Goudsmit, S. (1.930).

⁴⁸ Hay que hacer notar, no obstante, las dificultades bajo las cuales se llevó a cabo tal colaboración –que el mismo Pauling reconoce en una carta enviada a Slater, tal y como recoge Serafini en su biografía (1.989, p. 56)– y la polémica surgida en torno al verdadero papel que jugó Pauling para que dicha publicación viera la luz.

⁴⁹ “Estoy seguro que no me desviaré de la física teórica”

⁵⁰ Ver en bibliografía y anexos Pauling, Linus (1.928a, b, c y 1.929)

⁵¹ Estas “Reglas de Pauling” serán tratadas de forma más desarrollada en el capítulo dos dedicado a la obra química de Pauling.

⁵² Pauling, L. (1.928a)

⁵³ Serafini, A. (1.989), 53

⁵⁴ Y su éxito notorio. En aquel momento ciertos aspectos del átomo de carbono había desconcertado muchísimo a los investigadores. Considerados, juzgados desde los métodos observacionales como la espectroscopia, los investigadores se veían forzados a concluir que los cuatro enlaces del átomo tetraédrico de carbono eran de dos tipos. Sin embargo, la teoría química demandaba que los enlaces del átomo de carbono fueran de un solo tipo.

⁵⁵ Veremos cómo, entre otras cosas, en su famoso artículo de 1.931 extendería estas ideas y resultados.

los que hay que destacar la serie de trabajos que vieron la luz bajo el título *The Nature of the Chemical Bond*⁵⁶, uno de los libros más importantes de la ciencia del siglo XX⁵⁷– y la obtención de una considerable reputación mundial. Sus habilidades científicas y docentes fueron rápidamente reconocidas a través de promociones –profesor asociado en 1.929 y profesor titular en 1.931–, su elección en la Academia Nacional de las Ciencias (National Academy of Sciences) en 1.933 y su participación en numerosas conferencias, destacando entre éstas últimas especialmente las llamadas *Baker Lectureship at Cornell* en 1.937-38⁵⁸. Gracias a su arduo y excelente trabajo, sus escritos y conferencias, Pauling se terminó convirtiendo en el fundador y maestro de una nueva manera de mirar las moléculas y los cristales⁵⁹, una nueva química reconocida por muchos autores como la *nueva química estructural*.

Pero sus éxitos y un comportamiento que llegó a rozar por momentos la soberbia fueron ingredientes suficientes para que se ganara la antipatía de algunos de los profesores más veteranos. El problema “anti-Pauling” –como se llegó a decir– se agravó e hizo más patente en la primavera de 1.936 cuando, tras confirmarse que Noyes padecía cáncer, apareció la cuestión de su sucesión. El “Rey Arturo” –como era conocido Arthur Noyes– creía que a la hora de elegir al líder de un grupo de investigación había que hacerlo basándose más en su potencial científico que su antigüedad o jerarquía. Y creía que, de todos los profesores que conformaban la facultad, tan sólo Pauling tenía la chispa creativa para abrir nuevos campos de investigación, el talento para atraer nuevos fondos y la energía suficiente para continuar llevando al departamento del Caltech a la vanguardia de la ciencia estadounidense. Los profesores más veteranos se opusieron a tal nombramiento y sólo gracias a la intervención de Warren Weaver⁶⁰,

⁵⁶ Como tendremos la oportunidad de ver en 1.931 Linus Pauling publicó un primer artículo con este título [Pauling, Linus (1.931a)] al que le siguieron durante los siguientes años seis artículos más con el mismo título [“The Nature of Chemical Bond (II-VII)]. Podemos adelantar que se trataron de artículos que, sin la rigurosidad matemática del primero, permitieron a Pauling comunicar sus resultados en torno a la naturaleza del enlace químico basados en la nueva física cuántica a químicos no entrenados en las nuevas matemáticas y mecánica.

⁵⁷ Pauling, L. (1.939)

⁵⁸ De las que hablaremos algo más detenidamente en próximas páginas

⁵⁹ Jack Dunitz, p. 81.

⁶⁰ W. Weaver era el director de la división de ciencias naturales de la Fundación Rockefeller. Llamado por algún historiador como “el principal banquero de la ciencia estadounidense” [Hager, Thomas (1.998), p. 58], el dinero de la Rockefeller construía universidades y establecía carreras. Especialmente importante fue su participación durante la Gran Depresión al mantener muchos programas a flote, incluyendo algunos del Caltech. Como decíamos, Weaver fue quien rompió el punto muerto en el que se encontraba la división de Química del Caltech ya que tenía un especial interés en Pauling. Reconocía en el joven químico unas habilidades que le podrían ayudar a alcanzar una meta que apreciaba como un tesoro: aplicar exitosamente las técnicas de la química y la física al campo de la biología. Weaver creía que la vieja biología había expirado, siendo preciso –pensaba– introducir un nuevo rigor

uno de los hombres más poderosos en ciencia, Pauling llegó a ocupar el sillón de director de la división de química⁶¹.

En otoño de 1.937 Pauling fue invitado a participar en las Conferencias *George Fisher Baker*⁶². Las conferencias dadas sobre el enlace químico fueron un gran éxito. Tras su regreso al Caltech a principios de 1.938 pasó varios meses corrigiendo y desarrollando sus notas. Fruto de este trabajo en 1.939 apareció en prensa el libro *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry* que sería, a la postre, la más importante publicación de las *Lecturas Baker* y uno de los textos científicos más citados en toda la historia⁶³. Este texto vino a cambiar el curso de la química.

A finales de los años 20 los consejeros del Caltech decidieron que había llegado el momento de que la institución se extendiera hacia el campo de la biología. Para tal fin se hicieron con los servicios de grandes científicos como Thomas Hunt Morgan⁶⁴, Alfred Sturdevant, Calvin Bridges y Theodosius Dobzhansky⁶⁵, siendo el primero de ellos nombrado director de la nueva división de biología. Pauling tuvo así la posibilidad de entablar

intelectual y nuevas técnicas experimentales que se enfocaran en el funcionamiento molecular de los cuerpos. Si las moléculas y reacciones que hacen posible la vida podían ser descritas y controladas, sería posible crear una raza humana superior más racional, más inteligente. De hecho fue el quien en 1.938 acuñó el término *biología molecular* y describió el campo que intentaba fundar como “visión molecular de la vida” [Claros, Gonzalo (2.003), p. 170].

⁶¹ Bajo el liderazgo de Pauling, una gran era química comenzaba en el Caltech. Holmes Sturdivant, su estudiante graduado, se convirtió en su mano derecha, un eficiente y gran apoyo para los asuntos más rutinarios. Pauling se forjó una gran imagen, viajó, dio conferencias, recabó fondos y supervisó la dirección general en la que se desarrollaban todas las investigaciones. Sin embargo, las decisiones más importantes para la división se tomaron por medio de votaciones, asegurándose de esa manera que las alegadas “tendencias dictatoriales” de Pauling no dieran lugar a graves problemas. Su amistad con Weaver aseguró que las ayudas económicas de la Fundación Rockefeller siguieran fluyendo y estudiantes de todas partes acudían en gran número a Pasadena emocionados ante la posibilidad de poder trabajar con el hombre que había hecho de sí uno de los más famosos químicos del mundo. A pesar de las quejas de muchos profesores, la habilidad de Pauling para atraer dinero y su estilo de administración permitió a la división seguir creciendo sin problemas y cada vez más rápidamente. Además, continuó haciendo brillantes descubrimientos, ya fuera en solitario, con alguno de sus estudiantes graduados o sus ayudantes posdoctorales.

⁶² Este prestigioso nombramiento suponía dar una serie de conferencias sobre un determinado tema que posteriormente serían publicadas dando lugar a un volumen en la serie de *Lecturas Baker*.

⁶³ Hager, Thomas (1.998), p. 61.

⁶⁴ Morgan y sus estudiantes habían descubierto –como tendremos la oportunidad de forma más desarrollada en el capítulo dedicado al contexto científico– el gen y habían puesto las bases de la moderna biología a través de sus trabajos sobre la mosca de la fruta (*Drosophila melanogaster*). Por ello, cuando Morgan fue a Pasadena llevándose consigo a sus más destacados jóvenes investigadores, hicieron en muy poco tiempo del Caltech un líder mundial en genética. De hecho, la nueva división se convirtió en una seria competencia para la de química e ingeniería química en cuanto a grandeza e influencia mundial.

⁶⁵ Serafini, A. (1.989), p. 67

conversación en los pasillos, en los despachos y en las salas del Caltech con los mejores biólogos del momento. De ellos aprendió y con ellos surgió un interés que le atraparía ya para siempre. Cómo el mismo Pauling reconoció tiempo después, desde muy pronto sintió un profundo interés por el trabajo que estos biólogos estaban llevando a cabo:

Yo había empezado a estudiar algo sobre biología en 1.929, cuando Thomas Hunt Morgan vino al Instituto Tecnológico de California... Mis ideas acerca de las bases estructurales de la especificidad biológica fueron desarrollándose durante los años 1.936 a 1.939... Había pensado acerca de varias explicaciones posibles a partir de las observaciones realizadas en el erizo de mar que Morgan había estado estudiando.⁶⁶

De todas aquellas conversaciones fueron especialmente significativas las que mantuvo con Morgan, Alfred Sturtevant, Calvin Bridges, Sterling Emerson y Albert Tyler. Muy pronto Pauling advirtió que cada uno de los biólogos estaba trabajando sobre algunos aspectos de un fenómeno general llamado *especificidad biológica*⁶⁷. El conocimiento de este fenómeno y su importancia le llevó a Pauling a plantearse que la entera comprensión de la especificidad biológica podría dar lugar a un entendimiento completo de la naturaleza de la vida.

Si bien estos primeros acercamientos fueron muy importantes posteriormente para sus trabajos en el ámbito de las ciencias biomédicas –de ahí que reservemos en el capítulo dedicado al contexto científico una sección a describir el trabajo que llevaron a cabo estos científicos–, como el mismo Pauling reconoció, su verdadero interés⁶⁸ empezó alrededor de 1.935. Fue entonces cuando comenzó a interesarse por la hemoglobina –una molécula larga presente en la sangre que contiene cerca de diez mil átomos– y a llevar a cabo estudios experimentales en torno a la interacción de las moléculas con un campo magnético. Mas, ¿qué fue lo que llevó a Linus Pauling a interesarse por las nuevas y grandes cuestiones de las ciencias biológicas? ¿Por qué se empezó a interesar por el estudio de la hemoglobina? Las razones son varias, pero una de las más importantes fue –tal y como se mencionó páginas atrás– el papel que entonces jugó

⁶⁶ Cita extraída de Serafini, Anthony (1.989), p. 62. Original en Pauling, Linus (1.970), “Fifty Years of Progress in Structural Chemistry and Molecular Biology”.

⁶⁷ El mismo Pauling explicaría tiempo después qué entendía entonces por *especificidad biológica*, algo que desarrollaremos en el capítulo 3 dedicado al estudio de su obra científica.

⁶⁸ Pauling, Linus (1.970). Extraído de Serafini, A. (1.989), p. 62

Warren Weaver⁶⁹. El mismo Pauling reconoció con una inusual franqueza que uno de los factores que le llevó a acercarse al estudio de sustancias vinculadas con la biología fue el dinero:

La Fundación Rockefeller había empezado a apoyar mi trabajo alrededor de 1.932... Y de forma bastante clara hizo saber que si trabajábamos en sustancias biológicas ellos podrían estar más interesados. Esta era en gran medida una idea de Warren Weaver, para quien en ese momento había que llevar a cabo un ataque más básico en los campos de biología y medicina ante el problema de la vida. Pusieron una gran cantidad de dinero para nuestro trabajo en Pasadena, varios millones de dólares durante varios años.⁷⁰

Los resultados no tardaron en llegar. Profundamente inmersos en su investigación sobre la hemoglobina, Pauling y Charles Coryell –por entonces estudiante graduado–, describieron en 1.936 algunas de las más diminutas y finas características estructurales de la hemoglobina, entre ellas la forma en la que se combinaba con el oxígeno. Este trabajo de investigación dio lugar a un artículo⁷¹. Sumamente emocionado por los resultados obtenidos, Pauling sentía aumentar su atracción y fascinación por el estudio de proteínas cada vez más grandes y complejas. A este trabajo se sumarían poco a poco otros, entre los que cabe destacar "On The Structure of Native, Denatured, and Coagulated Proteins"⁷², que constituyó un paso decisivo en su estudio del fenómeno de la depuración de las proteínas⁷³.

A raíz de estos estudios Pauling fue invitado en 1.936 al “Grand Rounds” en el *Rockefeller Institute for Medical Research*. Dentro de dicho evento explicó su descubrimiento de la naturaleza de la hemoglobina. Una de las personas que estaban allí presentes era el Dr.

⁶⁹ Pero si Pauling necesitaba –además del interés personal nacido ya años atrás y el factor económico– alguna razón más para continuar sus investigaciones con la hemoglobina, paradójicamente la mala fortuna se la proveyó. En el otoño de 1.935 una explosión destrozó su laboratorio hiriendo a varios de los investigadores que estaban realizando estudios de difracción de electrones sobre la estructura de varios gases. Pauling se sintió afectado, extremadamente afectado ante lo ocurrido. Era auténticamente cuidadoso con sus colaboradores y siempre había tomado los mayores cuidados para evitar cualquier problema, por pequeño que fuera. A pesar de ser imposible eliminar completamente todo peligro en un laboratorio de química, Pauling estuvo deprimido durante mucho tiempo. En una carta enviada a Noyes el 3 de noviembre de ese mismo año podemos leer “Hemos interpretado finalmente las imágenes obtenidas por medio de difracción de electrones de NO₃F tanto como nos ha sido posible. Pero es bastante pobre, tanto como la sustancia explotada en el aparato. Dan más información, pero no permite decidirse entre la estructura NOF y la estructura tetraedral. Desde que dos de nuestros hombres han sido heridos en las explosiones... nosotros no queremos continuar el trabajo” [Carta de Pauling a Noyes fechada el 3 de noviembre de 1.935. Cita extraída de Serafini, A. (1.989), p. 70].

⁷⁰ Pauling, Linus (1.970). Cita extraída de Serafini, A. (1.989), p. 68

⁷¹ Pauling, L. y Coryell, Ch. (1.936)

⁷² A. E. Mirsky y Linus Pauling (1.936). Obra a la que dedicaremos especial atención en el capítulo dedicado al estudio de su obra.

⁷³ Desarrollaremos el concepto de *depuración de proteínas* en la sección dedicada al estudio de su obra.

Kart Landsteiner⁷⁴ –de quien tendremos que hablar más detenidamente en el capítulo dedicado al contexto médico bajo el cual Pauling desarrolló su obra– quien le invitó a visitar su laboratorio para mostrarle los experimentos que había llevado a cabo en el campo de la química inmunológica. Por entonces la inmunología se caracterizaba por su especificidad biológica, de igual forma que la biología. Pero ¿qué se quería decir con especificidad en medicina? La inmunidad ante una enfermedad, como el sarampión, no otorga a la persona inmunidad contra otras enfermedades, tal como la fiebre tifoidea. Aunque Pauling conocía este hecho y la observación directa, personal le había mostrado la importancia que la especificidad tenía tanto en el campo de la biología como de la inmunología, la conversación con Landsteiner corroboraba su intuición en torno al gran valor de la especificidad a la hora de dar cuenta del secreto de la vida. Ante el poco interés que al principio el químico parecía mostrar –reflejo sólo de la extraordinaria complejidad que veía en tal asunto– Landsteiner hizo todo lo posible para mostrarle más experimentos que había llevado a cabo. En los mismos se veía cómo una simple sustancia química como el ácido benzoico, una proteína inyectada a un conejo, había hecho que éste desarrollara anticuerpos que podían combinarse con otras sustancias simples similares, tales como el ácido toluénico⁷⁵. Tras la exposición de sus hallazgos y experimentos, Landsteiner preguntó a Pauling si le podía contar con detalle las observaciones llevadas a cabo basándose en su conocimiento de la estructura molecular y del enlace químico. Dos años después Landsteiner fue a la Universidad de Cornell con un solo propósito: Pauling iba a dar una conferencia y quería reunirse nuevamente con él para seguir hablando de este problema. Pauling pronto desarrolló todo un programa de investigación que debería, con el tiempo, permitir una comprensión de la especificidad biológica y quizás, incluso, de la naturaleza de la vida.

En mayo de 1.937 Astbury visitó Pasadena, habló con Pauling y le mostró sus nuevas fotografías de la keratina. Influido por esta visita Pauling decidió llevar a cabo un asalto a la estructura de la keratina pero de forma diferente a como lo estaban haciendo Bernal y el mismo Astbury. Frente al uso directo de la cristalografía para la elucidación de la estructura de la keratina, Pauling prefirió seguir con el método estocástico que tan buenos resultados le había dado en el estudio de los minerales silicatos: aprender todo lo posible acerca del tamaño y forma

⁷⁴ K. Landsteiner había descubierto en 1.901 los grupos sanguíneos y que, por ese motivo, había recibido en 1.929 el Premio Nóbel.

⁷⁵ Ácido isomérico derivado del ácido del tolueno

de las partes que lo componen, hacer asunciones acerca de los enlaces que los mantienen juntos y usar toda esa información para construir un modelo. Una vez creado éste entonces se debía comparar el modelo con los datos obtenidos por medio de la cristalografía. Clave fue en ese momento Robert Corey⁷⁶ quien hizo asombrosos progresos en el estudio de la estructura de aminoácidos durante la ausencia de Pauling del Caltech en su visita a las *Baker Lectureship at Cornell*.

Si las grandes cuestiones de la química relacionadas con el enlace químico, la mecánica cuántica y la estructura cristalina no parecían ya tener grandes secretos para Pauling, había aún una gran excepción: la cadena polipeptídica. Pauling y Corey habían dedicado buena parte de 1.936 –así como el verano de 1.939 –a trabajar sobre su arquitectura, particularmente sobre la arquitectura de la keratina. Pauling se sentía incapaz de desarrollar un modelo matemático a partir de los datos obtenidos de las imágenes tomadas y las interpretaciones que sobre las mismas Astbury había llevado a cabo. Pero el gran prestigio del que por entonces disfrutaba el bioquímico británico era, si bien no el único, sí uno de los grandes obstáculos con que Pauling se tenía que enfrentar cuando propuso su modelo de la cadena proteínica⁷⁷. La otra gran oposición que tenía que salvar era el modelo “cyclol” de Dorothy Wrinch⁷⁸. El tiempo terminó dando la razón a Linus Pauling.

A raíz de los acontecimientos que en Europa se estaban produciendo como consecuencia del ataque relámpago con el que el ejército de A. Hitler había barrido gran parte de Europa en 1.940, Pauling quedó convencido del papel que la ciencia y el científico debía jugar en el debate público. Para el químico de Portland era necesario que los científicos pusieran todo su empeño y energía en la resolución de los problemas del mundo. Consciente de esta responsabilidad social y con una ideología política muy enraizada Pauling se mostró dispuesto a hacer lo que fuera oportuno en la lucha contra el fascismo. Su gran contribución fue el desarrollo de un analizador

⁷⁶ Linus Pauling y Robert Corey formaron una de las parejas científicas más apegadas y fructíferas, tal vez gracias a la forma en la que se complementaban: el primero de ellos teórico e impulsivo, analítico, paciente y preciso el segundo.

⁷⁷ Modelos que desarrollaremos en el capítulo tres.

⁷⁸ Como tendremos la oportunidad de ver, finalmente terminó triunfando el modelo de Linus Pauling. Sin embargo, la importancia netamente científica, social y personal de este capítulo fue tal, nos ha llevado a incluir en la sección *Anexos* un pequeño capítulo donde damos cuenta de este desafortunado episodio en la vida Pauling.

de la precisión del nivel de oxígeno en los submarinos⁷⁹, imprescindible para garantizar la seguridad y la eficiencia durante las grandes inmersiones. Pero poco después, en 1.941⁸⁰ a Pauling se le diagnosticó que sus riñones parecían estar afectados por una dolencia conocida como *enfermedad de Bright*⁸¹, una enfermedad que producía una progresiva disminución en la habilidad del cuerpo para filtrar la sangre. Pauling contactó entonces con Thomas Addis, director de la *Clinic for Renal Diseases* de la *Stanford University*, el mayor especialista renal en la costa oeste del país. Addis era uno de los pocos especialistas en el mundo que creían que la enfermedad de Bright podía ser tratada⁸². El descanso, la reducción del ritmo de trabajo y principalmente el seguimiento de una estricta dieta extremadamente baja en proteínas y sin sal hicieron que Pauling se recuperara de forma casi milagrosa.

Después del verano de 1.945 –con la Segunda Guerra Mundial prácticamente acabada– Pauling empezó a apoyar la idea de incrementar masivamente los fondos de investigación médica a escala nacional. La forma en la que lo hizo reflejaba perfectamente sus ideas sociales y políticas, muy influidas por Ava Helen –siempre más radical– quien en los años 40 se había movido hacia posiciones marxistas. En 1.946, tras la guerra, los científicos volvían a sus proyectos, ocupaciones e intentaban reestablecer sus contratos previos a la guerra. Pauling pudo dedicarle entonces muy poco tiempo a la investigación científica; su presencia en múltiples congresos, simpósiums y conferencias con la intención de restablecer alianzas y contactos, así como sus continuas recaídas –la debilidad de sus riñones le seguía pasando

⁷⁹ Conocido como *Pauling Oxygen Analyzer*.

⁸⁰ Justo cuando se le acabada de otorgar el galardón *William H. Nichols Gold Medal* en la sede de Nueva York de la *American Chemical Society*.

⁸¹ Este episodio de la vida de Pauling fue de suma importancia por varios motivos. El primero, desde luego, desde el punto de vista personal ya que su vida estuvo en serio peligro. Pero también lo fue desde el punto de vista científico. Además de que constituye uno de los mejores ejemplos de que Pauling era científico las 24 horas del día en cualquier contexto y situación, sobre lo que ocurrió y aprendió en esas semanas construiría años más tarde su futura medicina ortomolecular.

⁸² Thomas Addis tenía una teoría basada en la idea de que la enfermedad dependía de un balance de tejido destruido y restaurado. El truco estaba entonces –según Addis– en dejar a los riñones descansar lo máximo posible. El mayor trabajo de estos consistía en la eliminación de la concentración de urea del cuerpo y si la urea era producida por el metabolismo de las proteínas, entonces lo que había que hacer era bajar el nivel de proteínas en sangre para que los riñones de Pauling tuvieran que procesar menos urea. Pauling conocía las controversias que se habían levantado en la comunidad médica en torno a las ideas de Addis. Algunos expertos señalaban que las proteínas eran necesarias para la restauración de los tejidos dañados, otros daban por perdidos a los pacientes de Bright. Sin embargo Pauling, impresionado con la forma en la que Bright se aproximaba a la enfermedad y su fe en la medición científica como base para el diagnóstico, apostó por él. Durante las dos semanas que Pauling estuvo internado las conversaciones sobre el metabolismo de las proteínas y política sellaron una buena amistad entre ambos. Las pruebas realizadas mostraban que el estado de Pauling podría mejorar si permanecía durante un tiempo en cama, reducía su ritmo de trabajo y seguía una estricta dieta extremadamente baja en proteínas y sin sal.

factura– se lo impedían. Otro de los compromisos que le tuvo entretenido durante 1.947 fue la complicada correspondencia que mantuvo con el químico Kasmir Fajans. El químico y físico polaco señalaba que las conclusiones finales del libro de Pauling *The Nature of Chemical Bond* eran más un conjunto de propuestas metafísicas que de conclusiones basadas en observaciones científicas. En una entrevista dada a Fritz Ephraim para *Inorganic Chemistry*, Fajans decía:

No se nos dice la forma en la que Pauling obtuvo para una ecuación con dos incógnitas los valores $X=0.15$ y $Y=0.24$. Probablemente estuvo basada en una intuición adicional exigida como necesaria de la misma manera que había hecho con muchas otras conclusiones cuantitativas de la teoría de la resonancia. Sin embargo, puesto que ningunas de estas formas resonantes son reales, no hay mucha diferencia.⁸³

El 13 de abril de ese mismo año Pauling le contestaba a Fajans⁸⁴. La polémica e intercambio de cartas que se dio entre Fajans y Pauling continuó por un tiempo, sin que ninguno quedara satisfecho con las respuestas del otro. Así el 19 de junio Fajans reforzó su opinión:

...en el caso del H_2O , podemos ver en la p. 71 del libro de Pauling una descripción basada en la resonancia más detallada que la que pudiera hacerse de cualquier otra forma. Mi duda a este respecto está basado en el hecho de que Pauling admite un uso arbitrario del concepto de resonancia y es de la opinión (p. 12) que ello es de poca importancia. Me cuesta estar de acuerdo con esta actitud.⁸⁵

Como sostiene Serafini, en la actualidad muchos químicos aceptan el punto de vista de Fajans, para quien las formas resonantes son ficciones meramente convenientes que permiten a los científicos explicar propiedades físicas de varias sustancias inexplicables de otra manera. En ese sentido, es correcta la descripción “no realista” de Fajans. Ahora bien, Fajans asume una metafísica algo ingenua, manteniendo que cualquier cosa que no se pueda detectar inmediatamente con los cinco sentidos no tiene “ninguna realidad”. Es verdad que no podemos ver una “forma resonante” o un “enlace nuclear”, pero también lo es que los científicos hablan todo el tiempo de cosas que no “existen” en el sentido usual. Ahora bien, ¿estaba Pauling postulando simplemente la existencia de “formas resonantes” como un constructo teórico tal y

⁸³ Cita extraída de Serafini, A. (1.989), 127.

⁸⁴ Copia de la primera página de la carta en anexos.

⁸⁵ Cita extraída de Serafini, A. (1.989), 127.

como propone Serafini⁸⁶? Pues bien, esta es una de las cuestiones a las que intentaremos dar cuenta a lo largo de este trabajo. De momento tan sólo quedémonos con que este intercambio de cartas supuso otro de los grandes compromisos que le impidieron a Pauling volver a la investigación científica inmediatamente después de la finalización de la Segunda Guerra Mundial y pone de manifiesto como, a pesar de las negativas de Pauling, las implicaciones epistemológicas, ontológicas y metodológicas de su trabajo no le fueron ajenas e indiferentes.

Pero la vuelta de Pauling a la investigación tampoco podía demorarse en exceso. Tres fueron las circunstancias bajo las cuales se dio este retorno. En 1.947 Pauling y G.W. Beadle recibieron \$300.000 para un programa de investigación de cinco años sobre la estructura de las proteínas, a lo que ayudó la vuelta de M. Delbruck al Caltech como profesor de biología. Este retorno de Delbruck pareció devolver a Pauling la inspiración y el estímulo necesario para atacar nuevamente el problema de la estructura de las proteínas tras la desgracia que se cebó con R.G. Dickinson: con tan sólo 51 años el químico y profesor de Pauling moría como consecuencia de un cáncer de colon⁸⁷. Con apenas tiempo para recuperarse Pauling viajó a Oxford, donde pasó el semestre de primavera como profesor visitante. Muy sensible aún a los cambios de clima, su maltrecha salud se resintió y tuvo que pasar varios días en cama. Como veremos más detenidamente en el capítulo dedicado a sus trabajos sobre la estructura de la proteína, este convalecimiento fue clave para el descubrimiento teórico de uno de los mayores secretos de la vida: la estructura alfa de las proteínas. A su regreso a California y tras más de un año de trabajo con Corey, publicaron un artículo en el que mostraban la forma helicoidal como la configuración básica de las proteínas de muchas formas vivas.

Lamentablemente la defensa y aceptación científica de este modelo no fue fácil. No sólo por la reticencia de los investigadores británicos, si no también por problemas políticos. La primera defensa pública de esta tesis debía tener lugar en un congreso que se iba a celebrar en Londres. Como el mismo Pauling diría años más tarde, la *Royal Society of London* le había invitado a presentar y discutir su modelo sobre la estructura de las proteínas en un encuentro que se llevaría a cabo a finales de abril (1.952). Lamentablemente, Pauling no pudo asistir. La razón de ello fue la aplicación de la ley de Seguridad Interna o más conocida como the

⁸⁶ Serafini, A. (1.989), p. 127.

⁸⁷ La muerte de Dickinson conmocionó a Pauling en tal grado, que determinó y estimuló en gran medida los posteriores trabajos de Pauling sobre la vitamina C.

McCarrant Act de 1.950, por medio de la cual se intentaba restringir los viajes al extranjero de cualquier estadounidense con simpatías políticas sospechosas⁸⁸ y que pudiera pasar secretos a agentes enemigos. La aplicación de esta ley y consiguiente denegación del pasaporte a Pauling sentaron un precedente extremadamente peligroso⁸⁹. La cara más optimista de este episodio es que sirvió como acicate en el nacimiento de una nueva conciencia social entre muchos científicos. Esta nueva responsabilidad política que muchos científicos reconocieron se reflejó rápidamente en el intercambio de cartas y de escritos a favor de Pauling dirigidas a distintas autoridades estadounidenses así como en las pruebas de solidaridad que el químico de Pórtland recibió. El objetivo era constatar el malestar que el caso había producido en el mundo científico y la exigencia de la entrega del pasaporte a Pauling.

Mientras los problemas políticos continuaban, Pauling organizó su propio seminario en Pasadena con la intención de mostrar y defender personalmente su modelo. Sin embargo, para cuando la reunión tuvo lugar muchas de las cabezas más importantes e influyentes ya estaban convencidas de la validez del modelo. El congreso cumplió, por consiguiente, otros tres cometidos; en primer lugar fue un gesto de apoyo de la comunidad científica internacional a Pauling; se confirmó el modelo de la estructura de la hélice alfa presentado por Pauling y Corey; se vio claramente que había terminado una carrera –la de la estructura de las proteínas– y que los investigadores debían empezar a dirigir sus miradas hacia el inicio de una nueva odisea: la que debía conducir al descubrimiento de la estructura del ADN.

En 1.951 Pauling comenzó a leer con profundidad algunos textos y discursos de otros autores acerca de la estructura del *ácido desoxirribonucleico* (ADN), la forma más común de los ácidos nucleicos de los cromosomas. Estos ácidos estaban compuestos por cuatro subunidades llamadas *nucleótidos* que parecían estar presentes en todos los animales y se presentaban de

⁸⁸ Louis Budenz, un rabino excomunista había identificado a Pauling el 29 de junio de 1.950 como militante comunista ante el *House Select Committee*, comité que tenía como fin investigar organizaciones libres de impuesto. Haría lo mismo otra vez el 23 de diciembre de 1.952. En 1.970 el testimonio de Budenz fue rechazado y tachado como de un “simple rumor”, tal y como Richard Ichard, director del *Committee on International Security*, informó a un desconocido investigador de Missouri. Lamentablemente esta rectificación vino muy tarde para que Pauling fuera al congreso.

⁸⁹ Este episodio constituye además uno de los mejores ejemplos de la situación tan absurda por la que pasó Pauling: tanto para los EEUU como para la URSS Pauling fue un enemigo a vigilar. Para Estados Unidos por sus tendencias de izquierda, para la Unión Soviética por su teoría de la resonancia. La teoría de la resonancia chocaba con la ideología soviética desde el momento en el que estaba basada en la mecánica cuántica, la cual introducía un elemento de indeterminismo en el universo. Para la teoría marxista el universo era 100% predecible.

forma muy proporcionada. Cada nucleótido consistía en un azúcar, un grupo fosfato y una de las cuatro estructuras carbón-nitrógeno llamadas bases: *adenina*, *guanina*, *timina* y *citocina*. La clave del ADN parecía ser la forma en cómo cada base se unía a un azúcar y un fosfato para hacer un nucleótido, y luego cómo los nucleótidos se unían entre sí para formar cadenas. Comparado con la estructura de las proteínas –Pauling pensó– su estudio se presentaba *a priori* relativamente fácil. Al principio, el químico estadounidense no se mostró muy interesado en su estudio, no era entonces una prioridad para él sobre todo porque aún pensaba que “el secreto de la vida” estaba en las proteínas, no en el ADN. Le animó no obstante el hecho de que las mejores pistas para el esclarecimiento de su estructura parecieran venir de la cristalografía, la técnica que había usado para las proteínas. Pero rápidamente constató que trabajar con el ADN era un proceso mucho más dificultoso. Clave fue, como tendremos la oportunidad de ver más detenidamente, el trabajo de Oswald Avery. Aunque su trabajo no tuvo al principio una importante acogida, fue imprescindible para el cambio de perspectiva que poco a poco se fue generando en torno al papel del ADN en la herencia. Convencido ya de la extraordinaria labor que ejercían, los ácidos nucleicos en muchas de las actividades biológicas, Pauling y Corey publicaron en 1.953 un artículo en el que presentaban su modelo de tres hélices del ADN. No obstante, pronto se vio –como constataremos en el capítulo III– que el artículo presentaba importantes errores y, a pesar de sus reticencias, Pauling y Corey tenían que ver cómo F. Crick y J. Watson ganaban la carrera⁹⁰.

⁹⁰ Pero, ¿por qué Pauling no ganó en esta ocasión? Para muchos autores lo que marcó claramente la diferencia en esta carrera fue que Watson y Crick pudieran ver los nuevos patrones del ADN de Rosalind Franklind. Las nuevas imágenes obtenidas eran mucho más agudas y claras que aquellas con las que Pauling había contado. A partir de dichos patrones podía interpretarse –apoyados en un razonamiento indirecto– que la hélice del ADN tenía dos hebras, no tres como Pauling había supuesto a partir de los datos que él disponía. Lamentablemente, las nuevas imágenes y los más recientes datos obtenidos a partir de los estudios llevados a cabo en varios laboratorios –claves finalmente para el descubrimiento de la estructura del ADN– fueron presentados durante la conferencia celebrada en Londres en 1.952 que vimos anteriormente y a la que Pauling no pudo asistir por la negativa del *U.S. State Department* a renovar su pasaporte. El químico de Portland comentó en alguna ocasión que si hubiera visto las nuevas imágenes, seguramente hubiera revisado su razonamiento y podría haber encontrado la estructura correcta ¿Por qué Pauling no pudo asistir a esta importante cita a la que estaba invitado? En una ocasión su esposa le preguntó con respecto al descubrimiento de la estructura del ADN “If that was such an important problem, why didn’t you work harder at it?” el no pudo contestarla, por lo que fue ella misma quien le dio la respuesta: “The most important of all activities is that of keeping the World from being destroyed in a nuclear war”. Como pudimos constatar, desde la finalización de la Segunda Guerra Mundial Linus Pauling dedicó buena parte de su tiempo, de su intelecto y de su energía a intentar impedir una guerra nuclear que por entonces algunos veían muy próxima. Las actividades de Pauling cambiaron completamente su vida personal y su imagen pública, ya que le empujaron al activismo social y a una nueva forma de investigar y resolver problemas: en el proceso del científico debía haber –sostenía Pauling– un notable humanismo.

A pesar de esta derrota la figura de Linus Pauling seguía estando en lo más alto del escalafón científico internacional. Ejemplo de ello fue la concesión del premio Nobel en 1.954, un año después de que Watson y Crick anunciaran su descubrimiento de la estructura del ADN. Algunos autores vieron por ello en este galardón una consolación por su falla en la determinación de la estructura del ADN, otros señalan que se trató por encima de todo de un reconocimiento a toda su investigación. Pero hay quienes señalan que por encima de todo – como volvería ocurrir años más tarde– fue un gesto de rechazo a la política estadounidense, una contestación dirigida principalmente al *State Department*⁹¹.

Tras la concesión del Premio Nobel, Pauling fue aumentando gradualmente su actividad y presencia política. Como muchos otros galardonados con este premio, tal recibimiento supuso un antes y un después en su vida. Sin embargo, y a pesar de la notoria bajada en la brillantez y productividad con respecto a la de años anteriores –tal y como reconocieron muchos de sus viejos amigos y colegas–, no podemos hablar del fin de su vida científica e intelectual. Debemos hablar por el contrario, eso sí, de una nueva actividad investigadora compaginada siempre con un fuerte compromiso social y político. Durante esta última etapa Pauling centró su atención – desde el punto de vista científico– en la constitución y desarrollo de una nueva rama de la medicina a la que se denominó *medicina ortomolecular*⁹². Esta nueva etapa de investigación se vio entorpecida inicialmente –luego vendrían otras dificultades– por el agravamiento de dos serias dificultades dentro del Caltech. Una de ellas de carácter político e ideológico y otra más relacionada con la vida en el laboratorio. La primera de ellas estaba tenía que ver con su política pacifista, una posición que creaba gran malestar entre la directiva de la institución, la segunda

⁹¹ Fuera por una razón u otra (o una mezcla de las tres) lo cierto es que la entrega de los premios Nobel de 1.954 fue un acontecimiento no sólo científico sino también político. La situación de Pauling era desde hacía tiempo un asunto que rebasaba lo personal y lo científico. En diciembre de 1.953, tras la publicación de su famoso libro *No More War!*, Pauling se disponía a acudir al *Indian Science Congress* con la intención de conocer a muchos de los mejores científicos del país. Pero nuevamente se le denegó el trámite de su pasaporte. Cuando el 3 de noviembre de 1.953 se le comunicó a Pauling que había sido galardonado con el Premio Nobel de Química, su problema con el pasaporte seguía presente. Sin embargo, quien vio su situación complicarse mucho más fue el mismo *State Department*; por un lado, negárselo nuevamente podría dar lugar a una importante controversia internacional; por otro lado, habían voces internas que veían en el galardón una clara ingerencia extranjera, se oponían a que un grupo de personas en algún país extranjero –en clara alusión a los académicos que le habían concedido el premio– determinaran qué estadounidenses debían tener pasaporte. Finalmente la opinión pública fue más fuerte, el 27 de noviembre llegaban los papeles, el 9 de diciembre los Pauling eran recibidos en Estocolmo y el día 10, a las 16:30 comenzaba la ceremonia.

⁹² Como tendremos la oportunidad de ver deben distinguirse dentro de esta nueva etapa dos periodos. La primera de ellas estuvo marcada por las investigaciones llevadas a cabo en torno a enfermedades mentales, la segunda a enfermedades somáticas.

con una cuestión de espacios. Pauling actuaba como si el *Church Lab* y el *Gates Lab* fueran sus laboratorios privados de investigación, produciéndose una fuerte tensión con otros investigadores. La gran incomodidad producida por ambas dificultades llevó a Pauling a renunciar a su puesto en el Caltech. A finales de Octubre de 1.963 Pauling abandonaba la institución que le había visto crecer intelectualmente y convertirse en uno de los científicos más importantes del mundo para empezar una nueva aventura en el *Study of Democratic Institutions* en Santa Barbara, California. Su etapa como profesor investigador en esta institución fue muy corta, ya que en 1.967 aceptó un puesto como profesor de Química en la Universidad de California en San Diego (UCSD). Fue entonces, junto a Arthur B. Robinson y otros colaboradores, cuando pudo empezar a desarrollar –como tendremos la oportunidad de ver de forma más desarrollada en el capítulo III– de forma rigurosa y sistemática la nueva medicina ortomolecular. Muy pronto Pauling se convirtió en uno de sus principales apóstoles, sobre todo de la vitamina C. Su confianza en este ácido fue tal que condicionó algunas de sus más importantes decisiones –tanto científicas como personales– y le hizo ganarse poderosos enemigos en la comunidad médica, política y, sobre todo, farmacéutica.

A pesar de las buenas expectativas iniciales, su estancia en esta Universidad fue breve, ya que en 1.969 Pauling trasladó toda su actividad investigadora a la Universidad de Stanford, en el área de la Bahía de San Francisco. Sin embargo, el contexto político conservador que se vivía en el Estado de California –donde el gobernador era entonces Ronald Reagan– impregnaba de tal modo el espíritu y el sistema universitario público que Pauling llegó a decir públicamente que prefería volver a las instituciones privadas, donde había encontrado un mayor nivel de conocimientos e investigación. Pero ¿a dónde ir? ¿Cómo reorientar su vida científica y docente? La decisión geográfica tomada entonces fue todo un acierto: *Santa Clara Valley*, conocida como *Silicon Valley*⁹³. Los Pauling compraron y fijaron su residencia en *Portola Valley*, cerca de Stanford, comenzando el último gran periodo de investigación y enseñanza de Linus Pauling.

⁹³ Este valle de los EEUU podía presumir de contar con el mayor desarrollo e innovación biotecnológica y computacional del mundo, así como de ser uno de los lugares en donde la creatividad científica más se apoyaba gracias a una filosofía de fuerte inversión en investigación. Si el gobierno no quería subvencionar sus proyectos, Pauling podía tener el apoyo de la industria que veía en su trabajo un gran potencial en el desarrollo de patentes.

Pero su lucha contra los médicos y las farmacéuticas no fue la única, tenía además otro importante frente de acción, de lucha abierto. Fiel a la sentencia aristotélica “los hombres maduros deben ser políticos, matemáticos los hombres jóvenes”⁹⁴, Pauling dedicó sus últimos treinta años no sólo a la ciencia, sino también a la política, sobre todo a uno de los principales problemas sociales que asolan a la humanidad: la guerra⁹⁵. El 15 de mayo de 1.957 Linus Pauling dio una conferencia en la Universidad de Washington que resultó trascendental en muchos sentidos. En la misma volvía a defender la idea de que ningún ser humano debería ser sacrificado para perfeccionar el programa nuclear de ningún país, pero la respuesta del público fue entonces especial. Animado por el entusiasmo de los estudiantes Pauling decidió componer una solicitud en la que se pedía el fin de las pruebas nucleares. Dicha petición fue firmada sin demora por un centenar de miembros del departamento de ciencias de la Universidad de Washington y muy pronto empezó a circular y ser conocida. Fruto del entusiasmo de mucha gente, el 15 de enero de 1.958 Linus y Ava Helen Pauling pudieron presentar ante la Organización de las Naciones una solicitud firmada por más de 11.000 científicos en la que se pedía la suspensión de las pruebas nucleares. La tesis y esperanza de Pauling se hacía realidad: la presión de la fuerte opinión pública de aquellos años hizo posible la firma de una moratoria de las pruebas nucleares en superficie, la cual fue seguida por el tratado de *Prohibición Parcial*

⁹⁴ Pauling, Linus (1.937). Volveremos a hacer referencia a esta cita durante las conclusiones, ya que esta sentencia refleja muy bien la idea de ciencia que Pauling manejó durante toda su vida.

⁹⁵ Acabada la Segunda Guerra Mundial la capacidad comunicadora de Pauling y sus excelentes conferencias sobre química eran muy conocidas, lo que le valió para ser invitado a dar discursos en varias ocasiones sobre ese nuevo y “enorme” explosivo que había revolucionado el mundo militar: la bomba atómica. Sus presentaciones eran esencialmente científicas y giraban sobre todo en torno a la estructura de los núcleos atómicos, la naturaleza del proceso de fisión nuclear, la ecuación de Einstein en donde se relacionaba la masa y la energía y, sobre todo, intentaba mostrar porqué una bomba atómica era mucho más potente que una detonación de TNT. Pero poco a poco fue introduciendo en sus discursos reflexiones en torno a los cambios que se habían producido en la política militar como consecuencia de la aparición de la bomba atómica. Cada vez era más consciente de la importancia e implicaciones que el desarrollo de este nuevo tipo de armamento tenía incluso para el mundo civil. Empezó entonces a tener contacto con Albert Einstein –muy convencido y activo ya desde hacia tiempo–, políticos y estudiantes de relaciones internacionales. Por más de cuatro décadas, el químico de Portland dedicó la mitad de su tiempo a estudiar nociones básicas de relaciones, leyes y tratados internacionales, historia, movimientos pacifistas y otros temas relacionados con la paz y las distintas formas de acabar con la guerra. Su sueño era que los medios e instrumentos científicos y tecnológicos alcanzados fueran usados para el beneficio de la humanidad y no para los preparativos de muerte y destrucción. Desde entonces, Pauling dio cientos de ponencias sobre las armas nucleares, la necesidad de la paz mundial y, desde 1.957, del daño que se estaba produciendo al plasma germinal humano y a la salud como consecuencia de las pruebas nucleares. Aunque la situación que se estaba viviendo era terrible, se hacía necesario no sucumbir al desconsuelo, “la decisión acerca del futuro no ha sido tomada y nosotros, la gente, podemos por medio de la presión de nuestras opiniones determinarlo” [Pauling, Linus “The ultimate decision”. Cita extraída de Mead, Clifford y Thomas Hager (2.001, eds.), p. 1.97]. Pauling siempre estuvo convencido y defendió que la palabra la última la tiene la gente y que ésta tiene la obligación de hacer oír su voz.

de *Pruebas Nucleares (PTBT)*, en inglés) el 5 de agosto de 1.963⁹⁶. Pero lo más importante era que, entre los firmantes, estaban los Estados Unidos⁹⁷ y la Unión Soviética⁹⁸.

Pero su lucha contra la proliferación de las armas nucleares –y sobre todo el incremento de la participación de Ava Helen en la *Women's International League for Peace and Freedom*, un grupo con tendencias de izquierda que apuntaba secretamente a la realización de un mundo socialista– tuvo un precio. En la década de 1.960 a Pauling se imputaron serios cargos como simpatizante comunista y tener amistades cuestionables. Para defenderse de tales ataques y seguir con su compromiso de la búsqueda de la paz y la construcción de un mundo más justo y sin armas nucleares, el químico decidió recurrir a posturas ofensivas más radicales e innovadoras, inspirándose para ello en otros grupos pacifistas. Así, y con la ayuda de su esposa y amigos de todo el mundo, empezó una campaña pacifista a nivel mundial que tuvo como primer gran icono la organización de una conferencia de Paz el 2 de mayo de 1.961 en Oslo, Noruega. Pero no sería ésta la última noticia que procedente de Noruega relacionara a Linus Pauling con la lucha por la Paz. El 10 de octubre de 1.963 el Comité del Premio Nobel de la Paz del Parlamento Noruego anunciaba que el Premio Nobel de la Paz 1.962⁹⁹ era para Linus Pauling "en reconocimiento por sus esfuerzos por buscar un tratado de proscripción de pruebas nucleares"¹⁰⁰.

En 1.973 Pauling estaba preparado para llevar a cabo otro cambio. Desde que había llegado a Stanford en 1.969 había sentido que debía haber tenido un mejor trato. Como doble ganador del Premio Nobel y reconocido investigador internacional creía que merecía un laboratorio acorde a sus ambiciones en investigación ortomolecular. Vista la imposibilidad de que se cumplieran sus expectativas, él y Robinson empezaron a planificar una salida exitosa de la academia. La solución era la creación de sus propias instalaciones de investigación biomédica con la esperanza de que algún día alcanzara la acreditación necesaria para ofrecer titulaciones en

⁹⁶ Dicho tratado fue firmado por 113 países.

⁹⁷ Representados por John F. Kennedy

⁹⁸ Representada por Nikita Jrushchov

⁹⁹ Como podemos observar a Pauling se le concedió el premio de 1.962 en 1.963. La razón de ello es muy sencilla: se quiso reservar premio de 1.962 para que el anuncio del galardón coincidiera con la fecha de entrada en vigor del *PTBT*. La reacción de los medios en EEUU fue muy negativa, ya que desde los mismos se consideraba tal concesión “un extraño insulto de Noruega”. Ni siquiera el Departamento de Química del Caltech se molestó en felicitar a Pauling. La relación entonces entre Pauling y los directivos del Caltech era muy tensa fruto de lo cual – como vimos en su momento– Pauling decidió dejar el Instituto Tecnológico de California.

¹⁰⁰ Descripción del Premio, por el Comité Nobel Noruego

grados avanzados. En Mayo de 1.973 Pauling, Robinson, Keene Dimick y otros investigadores constituyeron el consejo de dirección de una corporación sin ánimo de lucro con el Estado de California y el estatus de exención fiscal con el *Internal Revenue Service*. El primer nombre elegido para la asociación *Institute of Orthomolecular Molecular* sería cambiado el siguiente año por el de *Linus Pauling Institute of Science and Medicine* (LPI). Pauling estaba convencido que era necesario dedicar mucho tiempo a deliberar sobre los problemas de salud de la humanidad y estudiar detenidamente reportajes y datos proveniente de los estudios de otros investigadores, mientras continuaba diseñando experimentos que sus colegas interpretaban bajo su guía. Más allá de los descubrimientos y terapias desarrolladas, el estudio del día a día del LPI, el cariz de sus proyectos y la forma bajo la que Pauling se dedicó a la medicina ortomolecular, ponen claramente de manifiesto su firme creencia en el deber del científico de contribuir con la sociedad y, a ser posible, llevarlo a cabo de varias y significativas formas.

Toda la fuerza que Pauling había mostrado durante los últimos años en sus luchas científicas y políticas con el fin de construir un mundo mejor para todos, se vino abajo en 1.976. Pauling veía como su conocimiento científico –y sobre todo su lucha por defender las propiedades terapéuticas de la vitamina C– resultaba inútil para la salvar la vida de su propia esposa, quien tenía un gran tumor estomacal. A pesar de los esfuerzos de Pauling y Cameron – figura muy importante en la vida de Pauling durante esa época tal y como veremos en el capítulo dedicado a la medicina ortomolecular– el 7 de diciembre de 1.981 Ava Helen fallecía tras varias hemorragias provocadas por el cáncer.

Pauling dedicó sus últimos doce años de vida a un sueño: hacer todo lo posible para construir *Un mundo donde cada ser humano pueda tener una buena vida*¹⁰¹. Para ello, creía el químico estadounidense, eran necesarias la ciencia y la ética. Fiel a sí mismo Pauling siguió muy atento la vida social, principalmente la política internacional y todo cuanto tuviera que ver con la guerra. Desde el punto de vista científico continuó su campaña personal por la vitamina C –junto a otros importantes científicos como Ewan Cameron y Matthias Rath– frente al estatus médico establecido y las multinacionales farmacéuticas. Durante esos años siguió publicando artículos, libros y concediendo entrevistas en donde trataba de mostrar las propiedades

¹⁰¹ Este es precisamente el título de un pequeño texto de Pauling que refleja muy bien su pensamiento ético. Debido a su belleza estilística y humana, hemos creído pertinente traducirlo enteramente e incluirlo en los anexos.

terapéuticas de la vitamina C para el tratamiento y prevención del resfriado común, las enfermedades cardiovasculares y el cáncer. Paradójicamente, en diciembre de 1.991 a Pauling se le diagnóstica cáncer rectal y de próstata. Pauling se sometió a dos cirugías para tratar el cáncer, pero la toma de megadosis de la vitamina C constituyó la terapia primaria. El 19 de agosto de 1.994, Pauling falleció en *Deer Flat Ranch*, Big Sur, California.

1.2. OBRAS CIENTÍFICAS Y ESTUDIOS *DE Y* *SOBRE PAULING*

INTRODUCCIÓN

Desde que R. Dickinson le enseñara a trabajar, a desenvolverse en el laboratorio y diseñar experimentos, Pauling pasó gran parte de su vida científica en este medio. Sin embargo, su fama no vendría sólo de sus descubrimientos empíricos, sino también de sus trabajos teóricos y de divulgación. Prueba de ello son los cerca de 1.100 artículos y dieciséis libros que publicó en el curso de su vida. Su obra no fue sólo cuantitativamente grande, sino cualitativamente importante ya que algunos de sus libros y artículos constituyeron la génesis de varias disciplinas que revolucionaron el mundo científico y académico. Ejemplo de ello lo encontramos en su artículo de 1.931 *La naturaleza del enlace químico*, para muchos químicos el primer trabajo en el que se exponía claramente la relación existente entre su disciplina y la mecánica cuántica; el libro de 1.939 que llevara el mismo título se convirtió pronto en libro de referencia en muchas universidades y en uno de los textos de ciencia más leídos en la historia; su famoso libro de texto *Química General* revolucionó el mundo editorial y pedagógico. Como consecuencia de ello el número de estudios que se han hecho sobre su vida y obra es extraordinario. A los muchos trabajos que vieron la luz durante su vida se vinieron a sumar los que aparecieron tras su fallecimiento en 1.994, sobre todo, con la celebración del centenario de su nacimiento. Por ello, hemos considerado que un estudio sobre la obra científica de Linus Pauling requería de una sección especial –la que ahora nos ocupa– dedicada a señalar aquellos trabajos *de y sobre* Pauling más significativos. Para tal fin el presente capítulo se ha dividido en cuatro apartados. Los dos primeros dedicados a mostrar los títulos de los libros y artículos de Pauling que hemos considerado particularmente significativos. Para su elaboración nos hemos basado tanto en selecciones y recopilaciones ya existentes¹⁰² como en criterios personales. La tercera parte está constituida por una selección de libros y otra de artículos sobre la vida y obra de Linus Pauling, estando dedicada la cuarta a comentar brevemente nueve libros sobre Pauling que consideramos especialmente significativos.

Estimamos que el trabajo del investigador se ha visto en cierto modo facilitado en los últimos años con la aparición de las nuevas posibilidades que el mundo digital ofrece. El acceso

¹⁰² Nos hemos basado principalmente en las selecciones llevadas a cabo por Gustav Albrecht [en Rich, Alexander y Norman Davidson (eds. 1.968)], Robert Paradowski [en Mead, Clifford (2.001)] y [Serafini, A. (1.989)].

y consulta de bases de datos, archivos, catálogos y revistas de investigación en línea se han convertido en indispensable. Por ello, la cuarta y última sección de este capítulo lo dedicamos a comentar algunas páginas electrónicas que consideramos importantes para el estudio de la vida y obra del químico de Pórtland.

1.2.1. SELECCIÓN DE LIBROS DE LINUS PAULING

- 1.930; *The Structure of Line Spectra*; New York; McGraw-Hill.
- 1.935; *Introduction to Quantum Mechanics*; New York; McGraw-Hill.
- 1.939; *The Nature of the Chemical Bond*; Ithaca; New York; Cornell University Press.
- 1.947; *General Chemistry*; San Francisco; WH. Freeman and Company.
- 1.950; *College Chemistry*; San Francisco; WH. Freeman and Company.
- 1.958; *No More War!*; London; Victor Gollancz Ltd.
- 1.964; *The Architecture of Molecules*; San Francisco; WH. Freeman and Company.
- 1.967; *The Chemical Bond*; Ithaca; New York; Cornell University Press.
- 1.970; *Vitamin C and the Common Cold*; San Francisco; WH. Freeman and Company.
- 1.973; *Orthomolecular Psychiatry*; San Francisco; WH. Freeman and Company.
- 1.974; *Chemistry*; San Francisco; WH. Freeman and Company.
- 1.976; *Vitamin C; the Common Cold; and the Flu* San Francisco; WH. Freeman and Company.
- 1.985; *How to Live Longer and Feel Better*; New York; WH. Freeman and Company.

1.2.2. SELECCIÓN DE ARTÍCULOS DE LINUS PAULING

- June 1.920; "The Manufacture of Cement in Oregon" en *The Student Engineer* (The Associated Engineers of Oregon Agricultural College; Corvallis; Oregon) **12**: 3-5.
- 1.923; "The Crystal Structure of Molybdenite" en *Journal of the American Chemical Society* **45**: 1466-1471. [Roscoe G.Dickinson y Linus Pauling].
- 1.925; "The Inter-Ionic Attraction Theory of Ionized Solutes. IV The Influence of Variation

- of Dielectric Constant on the Limiting Law for Small Concentrations” en *Journal of the American Chemical Society* **47**: 2129-2134. [P. Debye y Linus Pauling].
- 1.925; “The Entropy of Supercooled Liquids at the Absolute Zero” en *Journal of The American Chemical Society* **47**: 2148-2156. [Linus Pauling y Richard C. Tolman].
 - 1.926; "The Prediction of the Relative Stabilities of Isosteric Isomeric Ions and Molecules" en *Journal of the American Chemical Society* **48**: 641-651. [Linus Pauling y Sterling B. Hendricks].
 - 1.926; "Die Abschirmungskonstanten Der Relativistischen Oder Magnetischen Rontgenstrahlendoublets" [German:The Screening Constant of Relativistic Or Magnetic X-Ray Doublets] en *Zeitschrift Fur Physik* **40**: 344-350.
 - 1.927; "The Theoretical Prediction of the Physical Properties of Many-Electron Atoms and Ions. Mole Refraction; Diamagnetic Susceptibility; and Extension in Space" en *Proceedings of The Royal Society: A (London)* **114**:181-211.
 - 1.928; "The Shared-Electron Chemical Bond" en *Proceedings of the National Academy of Science* **14**: 359-362.
 - 1.928; "The Coordination Theory of the Structure of Ionic Crystals" en *Festschrift Zum 60. Geburtstag Arnold Sommerfelds*; Verlag Von S. Hirzel; Leipzig: 11-17.
 - 1.931, "The Nature of the Chemical Bond. Application of Results Obtained from the Quantum Mechanics and from a Theory of Paramagnetic Susceptibility to the Structure of Molecules" en *Journal of the American Chemical Society* **53**: 1367-1400.
 - 1.931, "The Nature of the Chemical Bond. II. The One-Electron Bond and The Three-Electron Bond;" en *Journal of the American Chemical Society* **53**: pp. 3225-3237.
 - 1.932, "The Nature of the Chemical Bond. III. The Transition from One Extreme Bond Type to Another" en *Journal of the American Chemical Society* **54**: pp. 988-1003.
 - 1.933, "The Nature of the Chemical Bond. V. The Quantum-Mechanical Calculation of The Resonance Energy of Benzene And Naphthalene And The Hydrocarbon Free Radicals" en *Journal of Chemical Physics* **1**: pp. 362-374 [Pauling; Linus y G.W. Wheland (1.933)]
 - 1.933, "The Nature of the Chemical Bond. VI. The Calculation from Thermochemical Data of the Energy of Resonance of Molecules among Several Electronic Structures" en *Journal of Chemical Physics* **1**: pp. 606-617 [Pauling; Linus y J. Sherman (1.933)]
 - 1.933, "The Nature of the Chemical Bond. VII. The Calculation of Resonance Energy in

Conjugated Systems;" en *Journal of Chemical Physics* **1**: pp. 679-686. [Pauling; Linus y J. Sherman (1.933)]

- 1.934, "Covalent Radii of Atoms and Interatomic Distances in Crystals Containing Electron- Pair Bonds" en *Zeitschrift Fur Kristallographie A* **87**: 205-238. [Linus Pauling and M. L. Huggins (1.934)].
- 1.934, "The Structure of the Carboxyl Group. I. The Investigation of Formic Acid by the Diffraction of Electrons" en *Proceedings of the National Academy of Science* **20**: 336-340. [Linus Pauling and L. O. Brockway (1.934)].
- 1.935, "The Oxygen Equilibrium of Hemoglobin and Its Structural Interpretation" en *Proceedings of the National Academy Of Science* **21**: 186-191.
- 1.935, "The Structure and Entropy of Ice and of Other Crystals with Some Randomness of Atomic Arrangement" en *Journal of the American Chemical Society* **57**: 2680-2684.
- 1.936, "On The Structure of Native; Denatured; and Coagulated Proteins" en *Proceedings of the National Academy Of Science* **22**: 439-447. [A. E. Mirsky and Linus Pauling (1.936)].
- 1.936, "The Structure of the Pentaborane B₅H₉" en *Journal of the American Chemical Society* **58**: 2403-2407. [S. H. Bauer and Linus Pauling (1.936)].
- 1.938, "The Nature of the Interatomic Forces in Metal" en *Physical Review* **54**: 899-904.
- 1.939, "The Structure of Proteins" en *Journal of the American Chemical Society* **61**: 1860-1867. [Linus Pauling and Carl Niemann (1.939)].
- 1.939, "A Theory of the Color of Dyes" en *Proceedings of the National Academy of Science* **25**: 577-582.
- 1.940, "A Theory of the Structure and Process of Formation of Antibodies" en *Journal of the American Chemical Society* **62**: 2643-2657.
- 1.940, "The Nature of the Intermolecular Forces Operative in Biological Processes" en *Science* **92**: 77-79. [Linus Pauling and Max Delbrück].
- 1.941, "Serological Reactions with Simple Substances containing two or More Haptenic Groups" en *Proceedings of the National Academy of Science* **27**: 125-128. [Linus Pauling, Dan H. Campbell y David Pressman].
- 1.942, "The Manufacture of Antibodies In Vitro" en *Journal of Experimental Medicine* **76**: 211-220. [Linus Pauling and Dan H. Campbell].

- 1.942, "The Serological Properties of Simple Substances. I. Precipitation Reactions between Antibodies and Substances Containing two or More Haptenic Groups" en *Journal of the American Chemical Society* **64**: 2994-3003. [Linus Pauling, David Pressman, Dan H. Campbell, Carol Ikeda y Miyoshi Ikawa].
- 1.942, "The Serological Properties of Simple Substances. II. The Effects of Changed Conditions and of Added Haptens on Precipitation Reactions of Polyhaptenic Simple Substances" en *Journal of the American Chemical Society* **64**: 3003-3009. [Linus Pauling, David Pressman, Dan H. Campbell y Carol Ikeda].
- 1.942, "The Serological Properties of Simple Substances. III. The Composition of Precipitates of Antibodies and Polyhaptenic Simple Substances; the Valence of Antibodies" en *Journal of the American Chemical Society* **64**: 3010-3014.
- 1.942, "The Serological Properties of Simple Substances. IV. Hapten Inhibition of Precipitation of Antibodies and Polyhaptenic Simple Substances" en *Journal of the American Chemical Society* **64**: 3015-3020. [David Pressman, David H. Brown y Linus Pauling].
- 1.943, "The Serological Properties of Simple Substances. V. The Precipitation of Polyhaptenic Simple Substances and Antiserum Homologous to the P-(P-Azophenylazo)-Phenylarsonic Acid Group and Its Inhibition by Haptens" en *Journal of the American Chemical Society* **65**: 728-732. [David Pressman, John T. Maynard, Allan L. Grossberg y Linus Pauling].
- 1.944, "The Serological Properties of Simple Substances. VI. The Precipitation of a Mixture of Two Specific Antisera by a Dihaptenic Substance Containing the two Corresponding Haptenic Groups; Evidence for the Framework Theory of Serological Precipitation" en *Journal of the American Chemical Society* **66**: 330-336. [Linus Pauling, David Pressman y Dan H. Campbell].
- 1.944, "The Serological Properties of Simple Substances. VII. A Quantitative Theory of the Inhibition by Haptens of the Precipitation of Heterogeneous Antisera with Antigens; and Comparison with Experimental Results for Polyhaptenic Simple Substances and for Azoproteins" en *Journal of the American Chemical Society* **66**: 784-792. [Linus Pauling, David Pressman y Allan L. Grossberg].
- 1.944, "The Serological Properties of Simple Substances. VIII. The Reactions of Antiserum

- Homologous to the P-Azobenzoic Acid Group" en *Journal of the American Chemical Society* **66**: 1731-1738. [David Pressman, Stanley M. Swingle, Allan L. Grossberg y Linus Pauling].
- 1.945, "The Serological Properties of Simple Substances. IX. Hapten Inhibition of Precipitation of Antisera Homologous to the O-; M-; And P-Azophenylarsonic Acid Groups" en *Journal of the American Chemical Society* **67**: 1003-1012. [Linus Pauling y David Pressman].
 - 1.945, "The Serological Properties of Simple Substances. X. A Hapten Inhibition Experiment Substantiating the Intrinsic Molecular Asymmetry of Antibodies" en *Journal of the American Chemical Society* **67**: 1219-1222. [David Pressman, John H. Bryden y Linus Pauling].
 - 1.945, "The Serological Properties of Simple Substances. XI. The Reactions of Antisera Homologous to Various Azophenylarsonic Acid Groups and the P-Azophenylmethylarsinic Acid Group with some Heterologous Haptens" en *Journal of the American Chemical Society* **67**: 1602-1606. [David Pressman, Arthur B. Pardee y Linus Pauling].
 - 1.946, "The Use of Punched Cards in Molecular Structure Determinations. I. Crystal Structure Calculations" en *Journal of Chemical Physics* **14**: 648-658. [P.A. Shaffer Jr., Verner Schomaker y Linus Pauling].
 - 1.946, "The Use of Punched Cards in Molecular Structure Determinations. II. Electron Diffraction Calculations" en *Journal of Chemical Physics* **14**: 659-664. [P.A. Shaffer Jr., Verner Schomaker y Linus Pauling].
 - 1.946, "An Instrument for Determining the Partial Pressure of Oxygen in a Gas" en *Journal of the American Chemical Society* **68**: 795-798. [Linus Pauling, Reuben E. Wood y H. Sturdivant].
 - 1.947, "Atomic Radii and Interatomic Distances in Metals" en *Journal of the American Chemical Society* **69**: 542-553.
 - 1.948, "The Metallic State" en *Nature* **161**: 1019.
 - 1.948 (28 de mayo), "Molecular Architecture and the Processes of Life" en *21st Sir Jesse Boot Foundation Lecture*, Nottingham, England, Sir Jesse Boot Foundation: 1-13.
 - 1.949, "The Resonating-Valence-Bond Theory of Metals" en *Physica* **15**: 23-28.
 - 1.949, "Sickle Cell Anemia; a Molecular Disease" en *Science* **109**: 443. [Linus Pauling,

Harvey A. Itano, S.J. Singer e Ibert C. Wells].

- 1.950, "Two Hydrogen-Bonded Spiral Configurations of the Polypeptide Chain" en *Journal of the American Chemical Society* **72**: 21. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.950 (Mayo), "The Ultimate Decision" en *Southwest Retort* **2**, 8: 14-17.
- 1.951, "The Structure of Proteins: Two Hydrogen-Bonded Helical Configurations of the Polypeptide Chain" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37**: 205-210. [Linus Pauling, Robert B. Corey y H. R. Branson].
- 1.951, "Atomic Coordinates and Structure Factors for Two Helical Configurations of Polypeptide Chains" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37**: 3235-3240. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.951, "The Structure of Synthetic Polypeptides" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37**: 241-250. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.951, "The Pleated Sheet; a New Layer Configuration of Polypeptide Chains" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37**: 251-256. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.951, "The Structure of Feather Rachis Keratin" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37**: 256-261. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.951, "The Structure of Hair; Muscle; and Related Proteins" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37**: 261-271. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.951, "The Structure of Fibrous Proteins of the Collagen-Gelatin Group" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37**: 272-281. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.951, "The Polypeptide-Chain Configuration in Hemoglobin and Other Globular Proteins" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37**: 282-285. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.953, "Stable Configurations of Polypeptide Chains" en *Proceedings of the Royal Society (London)* **141**: 21-33. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.953, "A Proposed Structure for the Nucleic Acids" en *Proceedings of the National Academy of Science* **39**: 84-97. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
- 1.953, "A Theory of Ferromagnetism" en *Proceedings of the National Academy of Science* **39**: 551-560.
- 1.955, "An Investigation of the Structure of Silk Fibroin" en *Biochimica Et Biophysica Acta*

- 16:** 1-34. [Richard E. Marsh, Robert B. Corey y Linus Pauling].
- 1.955, "The Structure of Tussah Silk Fibroin (With a Note on the Structure of -Poly-L-Alanine)" en *Acta Crystalllographica* **8**: 710-715. [Richard E. Marsh, Robert B. Corey y Linus Pauling].
 - 1.956, "Specific Hydrogen-Bond Formation between Pyrimidines and Purines in Deoxyribonucleic Acids" en *Archives of Biochemistry and Biophysics* **65**, Linderstrom-Lang Festschrift: 164-181. [Linus Pauling y Robert B. Corey].
 - 1.958, "Genetic and Somatic Effects of Carbon-14" en *Science* **128**: 1183-1186.
 - 1.960 (febrero), "Fallout: Today's Seven-Year Plague" [a partir de una conferencia dada en el otoño de 1.959 en Carnegie Hall, New York City, en el *Meeting Sponsored by the National Committee For A Sane Nuclear Policy*] en *Mainstream* **13** (2): 1-20.
 - 1.961, "A Molecular Theory of General Anesthesia" en *Science* **134**: 15-21.
 - 1.962, "Molecular Disease; Evolution; and Genie Heterogeneity" en *Horizons In Biochemistry* en Michael Kasha y Bernard Pullman (Eds.), *Szent-Gyorgyi Dedicatory Volume*, Academic Press; New York: Pp. 189-225. [Emile Zuckerkandl y Linus Pauling].
 - 1.964, "The Electroneutrality Principle [sic] and the Structure of Molecules" en *Anales de La Real Sociedad Española de Física y Química*, Madrid **B 60** (2-3): 87-90.
 - 1.964, "The Nature of the Iron-Oxygen Bond in Oxyhemoglobin" en *Nature* **203**: 182-183.
 - 1.965, "Evolutionary Divergence and Convergence in Proteins" en Vernon Bryson y Henry J. Vogel (Eds.), *Evolving Genes And Proteins*, Academic Press, New York: 97-166. [Emile Zuckerkandl y Linus Pauling].
 - 1.965, "The Close-Packed-Spheron Model of Atomic Nuclei and Its Relation to the Shell Model" en *Proceedings of the National Academy of Science* **54**: 989-994.
 - 1.968, "The Resonating-Valence-Bond Theory of Superconductivity: Crest Superconductors and Trough Superconductors" en *Proceedings of the National Academy of Science* **60**: 59-65.
 - 1.968, "Orthomolecular Psychiatry: Varying the Concentrations of Substances Normally Present in the Human Body may Control Mental Disease" en *Science* **160**: 265-271.
 - 1.970, "Evolution and the Need for Ascorbic Acid" en *Proceedings of the National Academy of Science* **67**: 1643-1648.
 - 1.970 (otoño), "Fifty Years of Progress in Structural Chemistry and Molecular Biology" en

Daedalus **99** (4): 988-1014.

- 1.973, "Orthomolecular Psychiatry" en David Hawkins y Linus Pauling (eds.), *Orthomolecular Psychiatry: Treatment of Schizophrenia*, W H. Freeman, San Francisco: 1-17.
- 1.973, "Results of A Loading Test of Ascorbic Acid; Niacinamide; and Pyridoxine in Schizophrenic Subjects and Controls" en David Hawkins y Linus Pauling (eds.), *Orthomolecular Psychiatry: Treatment of Schizophrenia*, W H. Freeman, San Francisco: 18-34. [Linus Pauling, Arthur B. Robinson, Susanna S. Oxley, Maida Bergeson, Andrew Harris, Paul Gary, John Blethen y IanT. Keavenyl]
- 1.973, "Quantitative Chromatographic Analysis in Orthomolecular Medicine;" en David Hawkins y Linus Pauling (eds.), *Orthomolecular Psychiatry: Treatment of Schizophrenia*, W H. Freeman, San Francisco: 35-53. [Arthur B. Robinson y Linus Pauling].
- 1.973, "Ascorbic Acid and the Glycosaminoglycans: An Orthomolecular Approach to Cancer and Other Diseases" en *Oncology* **27**: 181-192. [Ewan Cameron y Linus Pauling].
- 1.975, "Valence-Bond Theory of Compounds of Transition Metals" en *Proceedings of the National Academy of Science* **723**: 4200-4202.
- 1.979, "Supplemental Ascorbate in the Supportive Treatment of Cancer: Prolongation of Survival Times in Terminal Human Cancer" en *Proceedings of the National Academy of Science* **73**: 3685- 3689. [Ewan Cameron y Linus Pauling].
- 1.979, "Ascorbic Acid and Cancer: A Review" en *Cancer Research* **39**: 663-681. [Ewan Cameron, Linus Pauling y Brian Leibovitz].
- 1.985, "Apparent Icosahedral Symmetry is Due to Directed Multiple Twinning of Cubic Crystals" en *Nature* **317**: 512-514.
- 1.986, "The Future of Orthomolecular Medicine" en Richard P. Huemer (ed.), *The Roots of Molecular Medicine: A Tribute to Linus Pauling*, New York, W. H. Freeman: 249-253.
- 1.986, "The Nature of the Chemical Bond Fifty Years Later: The Relative Electronegativity of Atoms Seen in Perspective" en Joel F. Liebman y Arthur Greenberg (eds.), *Molecular Structure and Energetics* (Vol. 1), Deerfield Beach, FL:VCH Publishers: 1-15. [Linus Pauling y Zelek S. Herman].
- 1.987, "So-Called Icosahedral and Decagonal Quasicrystals are Twins of an 820-Atom Cubic Crystal" en *Physical Review Letters* **58**: 365-368.

- 1.987, "Evidence From X-Ray and Neutron Powder Diffraction Patterns that the So-Called Icosahedral And Decagonal Quasicrystals of MnAl₆ and Other Alloys are Twinned Cubic Crystals" en *Proceedings of the National Academy of Science* **84**: 3951-3953.
- 1.988 (enero), "The So-Called Icosahedral Quasicrystals of Manganese-Aluminum and Other Alloys" en *Quimica Nova* **11** (1): 76-9.
- 1.988, "High-Resolution Transmission Electron-Micrograph Evidence that Rapidly Quenched MnAl₆ and Other Alloys are Icosatwins of a Cubic Crystal" en *Comptes Rendus De L'Academie Des Sciences Parts* **306**; Serie II; No. 16: 1147-1151. [Linus Pauling, Zelek S. Herman y Peter J. Pauling].
- 1.988, "Icosahedral Quasicrystals as Twins of Cubic Crystals Containing Large Icosahedral Clusters of Atoms: The 1012-Atom Primitive Cubic Structure of Al₆CuLi₃ The C- Phase Al₃₇Cu₃Li₂₁Mg₃; and GaMg₂Zn₃" en *Proceedings of the National Academy of Science* **85**: 3666-3669.
- 1.988, "Unified Structure Theory of Icosahedral Quasicrystals: Evidence from Neutron Powder Diffraction Patterns that AlCrFeMnSi; AlCuLiMg; and TiNiFeSi Icosahedral Quasicrystals are Twins of Cubic Crystals Containing about 820 or 1012 Atoms in a Primitive Unit Cube" en *Proceedings of the National Academy of Science* **85**: 8376-8380.
- 1.990 (septiembre), "The Discovery of the Structure of the Clay Minerals" en *CMS News* (publicación de The Clay Minerals Society): 25-27.
- 1.991, "Case Report: Lysine/Ascorbate-Related Amelioration of Angina Pectoris" en *Journal of Orthomolecular Medicine* **6** (3/4): 144-146.
- 1.992, "X-Ray Crystallography and the Nature of The Chemical Bond" en Ahmed Zewail (ed.), *The Chemical Bond: Structure and Dynamics*, New York, Academic Press: pp. 3-16.
- 1.992, "How I Became Interested in the Chemical Bond: A Reminiscence" en Ahmed Zewail (ed.), *The Chemical Bond: Structure and Dynamics*, New York, Academic Press: 99-109.
- 1.993, "How My Interest in Proteins Developed" en *Protein Science* **2** (6): 1060-1063 (1.993).
- 1.993, "Analysis of the Ground-State Band and a Closely Related Intercalated Band of 235/92U by the Two-Revolving-Cluster Model with Consideration of Symmetric and Antisymmetric Resonance of the Two Dissimilar Clusters" en *Proceedings of the National*

- Academy of Science* **90**: 5901-5903. [Linus Pauling y Barclay Kamb].
- 1.993, "Hardin-Jones Biostatistical Analysis of Mortality Data for a Second Set of Cohorts of Cancer Patients with a Large Fraction Surviving at the Termination of the Study and a Comparison of Survival Times of Cancer Patients Receiving Large Regular Oral Doses of Vitamin C and Other Nutrients with Similar Patients Not Receiving These Doses" en *Journal of Orthomolecular Medicine* **8** (3): 157-167. [A. Hoffer y Linus Pauling].
 - 1.994, "Analysis of A Hyperdeformed Band of Dy on The Basis of a Structure with Two Revolving Clusters, Each with a Previously Unrecognized Two-Tiered Structure" en *Proceedings of the National Academy of Science* **91**: 897-899.

1.2.3. SELECCIÓN DE LIBROS Y ARTÍCULOS SOBRE LINUS PAULING

1.2.3.1. Estudios monográficos sobre Linus Pauling

- **Bouguerra, Mohamed Larbi** (2.002), *Pauling : l'Einstein de la chimie*, Paris, Belin
- **Hager, Thomas** (1.995), *Force of nature: the life of Linus Pauling*, New York, Simon & Schuster Inc.
- **Hager, Thomas** (1.998), *Linus Pauling and the Chemistry of Life*, New York, Oxford University Press.
- **Huemer; Richard P.** (ed.; 1.986), *The Roots of Molecular Medicine*, New York, W.H. Freeman and Company.
- **Maksic, Zvonimir B. y Mirjana Eckert-Maksic** (eds.; 1.991); *Molecules in Natural Science and Medicine: An encomium for Linus Pauling*, New York, Ellis Horwood Limited.
- **Maksic, Zvonimir B. y WJ. Orville-Thomas** (eds., 1.999); *Pauling's Legacy: Modern Modelling of the Chemical Bond*, Amsterdam, Elsevier.
- **Marinacci, Barbara** (ed., 1.995), *Linus Pauling in his Own Words. Selections from his Writings, Speeches and Interviews*, Simon & Schuster International, New York.
- **Marinacci, Barbara y Ramesh Krishnamurthy** (1.998); *Linus Pauling on Peace*. Los Altos, California, Rising Star Press.

- **Mead, Clifford S.** (ed. 1.991) y Janet Wallace (editor asociado), *The Pauling catalogue : Ava Helen and Linus Pauling papers at Oregon State University : catalogue of preliminary holdings*, con "The publications of Professor Linus Pauling from 1.920 to 1.990", Oregon, Z.S. Herman and D.B. Munro, Oregon State University
- **Mead, Clifford y Thomas Hager** (2.001, eds.), *Linus Pauling: Scientist and Peacemaker*, Oregon, Oregon State University Press
- **Newton, David E.** (1.994), *Linus Pauling: Scientist and Advocate*, New York, Facts on File.
- **Nye, Mary Jo** (1.993), *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry*; Berkeley; University of California Press.
- **Rich, Alexander y Norman Davidson** (eds. 1.968), *Structural chemistry and molecular biology: a volume dedicated to Linus Pauling by his students, colleagues, and friends*, San Francisco, Londres, W.H. Freeman.
- **Rich, Alexander y Norman Davidson** (eds., 1.968), *Structural Chemistry and Molecular Biology*, San Francisco, WH. Freeman.
- **Richards, Evelleen** (1.991), *Vitamin C and Cancer: Medicine or Politics?* Londres, MacMillan Professional and Academic Ltd.
- **Serafini, Anthony** (1.989), *Linus Pauling. A man and his Science*, Lincoln (NE), toExcel.
- **White, Florence Meiman** (1.980), *Linus Pauling: Scientist and Crusader*, New York, Walker and Company.

1.2.3.2. Artículos y capítulos sobre Pauling

- **Brian, Denis** (1.995); "Linus Pauling" en *Genius Talk: Conversations with Nobel Scientists and Other Luminaries*, New York, Plenum Press: pp. 1-34.
- **Crick; Francis** (1.992), "The Impact of Linus Pauling on Molecular Biology: A Reminiscence" en *The Chemical Bond: Structure and Dynamics*; Ahmed Zewail; ed.; New York; Academic Press. pp. 87-98.

- **Goertzel, Ted; Mildred Goertzel y Victor Goertzel** (1.980); "Linus Pauling: The Scientist as Crusader;" en *The Antioch Review* **38** (3) (Summer 1.980): pp. 371-382.
- **Goertzel, Ted y Ben Goertzel** (1.995); *Linus Pauling: A Life in Science and Politics*; New York; Basic Books; 1.995.
- **Goodstein, Judith** (1.984); "Atoms; Molecules; and Linus Pauling;" en *Social Research* **51** (3) (autumn 1.984): pp. 691-708.
- **Strurdivant, J.H.** (1.968) "The Scientific Work of Linus Pauling" en Rich, Alexander and Norman Davidson (eds. 1.968).
- **Servos, J. W.** (1.990), *Physical Chemistry in America from Ostwald to Pauling*, Princeton, New Jersey, Princeton University Press.

1.2.3.3. Breve selección comentada de libros sobre Linus Pauling

- **Robert J. Paradowski** (1.972), *The structural chemistry of Linus Pauling*, Thesis (Ph.D), University of Wisconsin. Photocopy. Ann Arbor, Mich., University Microfilms International, 1.985. 21 cm.

Este trabajo constiye la primera –y por lo que hemos podido averiguar– única tesis doctoral sobre la obra científica de Linus Pauling. En este trabajo Paradowski lleva a cabo un exhaustivo examen de la obra química de Linus Pauling desde una perspectiva exclusivamente científica¹⁰³.

¹⁰³ Desafortunadamente no hemos podido revisar directamente esta obra ya que, a pesar de los distintos intentos que, gracias a la biblioteca del ITESM (Campus Monterrey), hemos intentado hacer con la biblioteca de la *University Microfilms International*, nos ha sido imposible conseguir una copia. Por ello, nuestro conocimiento de esta obra ha sido siempre de forma indirecta, a través de los muchos comentarios y referencias que, en otros trabajos, hemos encontrado. Para futuros investigadores que tengan la posibilidad de acercarse hasta dicha institución, la ficha de la obra señalada es:

Author: Paradowski, Robert John, 1.940-

Title: The structural chemistry of Linus Pauling // by Robert J. Paradowski.

Publisher: 1.972.

Description: ix, 567 leaves : port.

Notes: Photocopy. Ann Arbor, Mich. : University Microfilms International, 1.985. 21 cm.

Bibliography Note: Bibliography: leaves 556-567.

Dissertation Note: Thesis (Ph.D)--University of Wisconsin, 1.972.

Subject: Pauling, Linus, 1.901-1.994

- **Chamizo, José Antonio (1.994), *El científico de la sonrisa contagiosa. Linus Pauling*, México, Pangea.**

Se trata hasta la fecha del único libro escrito en español sobre Linus Pauling. El autor acerca en esta obra divulgativa dirigida a niños y jóvenes de forma muy amena –e incluso divertida– la figura y obra del químico estadounidense. Para tal fin, el Dr. Chamizo presenta una breve biografía de Linus Pauling relacionando aquellos episodios más interesantes de su vida con los hitos históricos, sociales y científicos más relevantes del siglo XX. En la segunda parte del libro se presentan fragmentos traducidos de cuatro textos de Pauling; Química General, Conferencia dictada al recibir el premio Nobel de química 1.954; Vitamina C, resfriado común y gripe; Conferencia dictada al recibir el premio Nobel de la Paz 1.962. Se incluye al final un oportuno índice analítico y glosario.

- **Hager, Thomas (1.995), *Force of nature: the life of Linus Pauling*, New York, Simon & Schster Inc.**

Puede ser considerada una de las biografías más completas y documentadas de Linus Pauling. Con un excelente estilo el autor pone ante nuestros ojos la vida y obra del químico de Pórtland sobre el telón de fondo de la historia estadounidense de los últimos 150 años. Desde la llegada de sus bisabuelos como pioneros alemanes en búsqueda del sueño del lejano oeste hasta la caída del muro de Berlín, la historia de Pauling es, en buena medida, la historia de EEUU. Libro obligatorio de referencia para quien quiera estudiar a fondo a Pauling, también se recomienda para quienes quieran acercarse al desarrollo de la química, la biología, la medicina y el nacimiento de la política científica durante la guerra fría.

- **Hager, Thomas (1.998), *Linus Pauling and the Chemistry of Life*, New York, Oxford University Press.**

Con el mismo estilo que la obra anterior, esta biografía podría ser considerada un buen resumen de la primera. Sin embargo, su principal riqueza se encuentra en el estudio que se hace – más profundo que en el texto anterior– de los trabajos y años que Linus Pauling dedicó a las ciencias de la vida. Nuevamente con el trasfondo histórico y político como co-protagonista, Thomas¹⁰⁴ Hager acerca al lector algunos elementos claves de la revolución que las ciencias biomédicas –principalmente biológicas– vivieron durante el siglo XX. Compuesto por siete capítulos se recomiendan principalmente los capítulos cuatro y cinco dedicados a la biología molecular, la cronología y las lecturas adicionales.

- **Marinacci, Barbara (ed., 1.995), *Linus Pauling in his Own Words. Selections from his Writings; Speeches and Interviews*, Simon & Schuster International, New York.**

En este libro, Barbara Marinacci es capaz de ensamblar las distintas piezas de la vida de Pauling como si de un mosaico se tratara. A partir de las palabras del mismo Pauling tomadas de sus artículos, conferencias, entrevistas... y, sobre todo, de su cercanía, Marinacci nos acerca la cara más personal del químico. Una vida y una personalidad marcadas por un amor y una confianza absoluta en la ciencia, en su esposa y en la humanidad. Con una introducción del mismo Pauling, el libro nos muestra los primeros y difíciles años de Pauling, aquella época en la que nació un extraordinario interés –y que le acompañará a lo largo de toda su vida– por la estructura de la materia (tanto orgánica como inorgánica), su lucha por la paz, el cese de las pruebas nucleares y el desarrollo de un nuevo tipo de medicina. Al igual que todos los libros anteriores comentados, este trabajo incluye una breve cronología de la vida de Pauling.

¹⁰⁴ Es oportuno señalar que el nombre de este autor lo podemos encontrar escrito en numerosos textos de dos formas: Thomas y Tom. Hemos considerado prudente utilizar sólo una de esas formas a lo largo de todo el trabajo con el fin de no confundir al lector.

- **Mead, Clifford y Thomas Hager (eds., 2.001), *Linus Pauling: Scientist and Peacemaker*, Oregon, Oregon State University Press.**

Como ejemplo de los muchos de los trabajos que vieron la luz con motivo de la celebración del nacimiento de Linus Pauling. En un único volumen en el que se recogen algunos textos del mismo químico estadounidense, amigos, colegas, alumnos y enemigos, el lector puede hacerse una buena imagen de su obra y personalidad. El libro consta de cuatro capítulos que nos acercan al hombre, a su trabajo científico, su lucha por la paz terminando y, de forma muy entrañable, a algunas de sus facetas más personales. El libro concluye con una excelente selección bibliográfica –en la que nos hemos basado en parte en la elaboración de este capítulo– de obras de y sobre Pauling.

- **Pauling, Linus y Barclay Kamb (ed. 2.001), *Linus Pauling. Selected Scientific Papers*, River Edge, N.J., World Scientific.**

Linus Pauling escribió y publicó cerca de 800 artículos científicos que abarcaron los campos de la química, la biología y la medicina. En un excelente trabajo de recopilación, comentario, ilustración (contiene un gran número de fotografías del químico de Portland) y edición, Linus Pauling, Barclay Kamb, Linda Pauling Kamb, Peter Jeffress Pauling, Alexander Kamb y Linus Pauling Jr. presentan en dos volúmenes una imagen muy completa del trabajo científico de Pauling. El primero de los libros está dedicado a la recopilación y comentario de algunos de los textos más importantes de Pauling en torno a la naturaleza del enlace químico, los cristales así como su estructura y propiedades moleculares. Por su parte, en el segundo volumen se recogen algunos de los trabajos de Linus Pauling en el ámbito de las ciencias de la vida, desde sus primeros estudios sobre la estructura de la hemoglobina en la década de 1.930 hasta sus últimos trabajos en el ámbito de la salud. El repaso de estos textos nos permiten percibir la convicción de Pauling de que los complejos procesos de la vida pueden ser mejor entendidos como consecuencia de fuerzas y estructuras químicas. Por ello, su conocimiento se convierte en algo fundamental para poder comprender las estructuras y características de las macromoléculas biológicas.

- **Petersen, Chris y Cliff Mead** (2.006), *The Pauling Catalogue*, Valley Library Special Collections, Oregon State University Libraries, Corvallis.

En 1.986 Linus Pauling donó sus artículos y los de su esposa a la *Universidad del Estado de Oregon*. Con más de 500.000 ítems entre artículos, cartas, borradores, libros se trataba de uno de los más grandes archivos personales en el Mundo. Tras veinte años de trabajo de registro y catalogación, salió a luz un inventario completo de esta extraordinaria colección. Primero como catálogo de la biblioteca de la Universidad estatal de Oregon –que puede consultarse a través de Internet como tendremos luego la posibilidad de ver– y desde el año 2.006 en forma de publicación, el investigador tiene posibilidad de acercarse a la vida y obra de un químico que revolucionó la ciencia del siglo XX. Con cerca de 1.800 páginas y más de 1.200 ilustraciones –acompañadas éstas de amplios comentarios–, cada uno de los seis volúmenes que lo conforman tiene introducciones escritas por importantes autores, historiadores de la ciencia y miembros de la familia de Pauling.

- **Rich, Alexander y Norman Davidson** (eds. 1.968), *Structural chemistry and molecular biology: a volume dedicated to Linus Pauling by his students, colleagues, and friends*, San Francisco, Londres, W.H. Freeman.

Excelente trabajo de tributo a Linus Pauling que a finales de los años 60 pone ya de manifiesto el lugar que el químico ocuparía en la historia de la ciencia¹⁰⁵. Compañeros, estudiantes y amigos participan en esta obra, en la que también aparecen textos de Pauling, con el fin de mostrar la contribución que el trabajo del químico había producido en diversas disciplinas. Además, esta obra facilita al lector una excelente imagen de cuál era el estatus de cada una de estos campos; *el estudio de la estructura de las proteínas; la química de las proteínas; anticuerpos; biología molecular; ácidos nucleicos; el enlace de hidrógeno, la química y la estructura de moléculas pequeñas; metales y minerales; teoría química*. El trabajo

¹⁰⁵ Ciertamente es que su obra más importante –desde el punto de vista de la ciencia ortodoxa– ya estaba hecha, pero aún quedaban muchos trabajos por venir.

concluye con una excelente selección de las publicaciones científicas de Linus Pauling elaborada por Gustav Albrecht¹⁰⁶.

- **Serafini, Anthony** (1.989), *Linus Pauling. A man and his Science*, Lincoln (NE), toExcel.

Extraordinario trabajo en el que Serafini, a partir de la correspondencia, documentos y entrevistas con contemporáneos de Linus Pauling, nos muestra de forma espléndida muchas de las facetas de la vida y obra del químico. Encontramos algunas reflexiones metodológicas¹⁰⁷ en torno a la obra de Pauling, sin embargo se tratan de apuntes sueltos sin una posterior continuidad. Aunque más centrado en los contenidos científicos que los libros anteriores, este trabajo pone de manifiesto la estrecha relación existente entre su trabajo científico, su vida personal, sus convicciones políticas y el contexto social y político que le tocó vivir. Encontramos asimismo un énfasis especial por las relaciones personales que Pauling mantuvo con otros científicos, especialmente las más conflictivas como las que tuvo con Slater, Dorothy Wrinch, Herman J. Muller, Arthur Robinson y, sobre todo, con grandes instituciones; principalmente el Gobierno de los EEUU y el sistema médico y farmacéutico establecido.

1.2.4. REFERENCIAS ELECTRÓNICAS

La revolución digital vivida en los últimos años obliga al investigador a salirse de los archivos y bibliotecas tradicionales para sumergirse en espacios virtuales, sobre todo en Internet. La proliferación de artículos, libros, estudios digitales y bases de datos en línea nos exigen llevar a cabo una descripción de algunas páginas que entendemos son de interés. En las próximas páginas vamos a comentar brevemente cuatro Web en las que podemos encontrar artículos, monografías, referencias, textos, imágenes y videos de Pauling. Se tratan de las páginas oficiales de instituciones con las que Linus Pauling mantuvo una estrecha relación y en las que, tras un esfuerzo considerable, han llevado a cabo toda una labor de registro,

¹⁰⁶ En la cual nos hemos apoyado mucho durante la realización de este trabajo.

¹⁰⁷ Serafini, A. (1.989), p. 58-9.

documentación y digitalización de documentos originales de gran valor para el investigador. Se trata de las páginas de la *Universidad Estatal de Oregon*, la *Biblioteca Nacional de Medicina* de EEUU, el *Instituto Linus Pauling* y el *Instituto Tecnológico de California*. Entendemos que el acceso a estos espacios virtuales es una excelente alternativa para conseguir información y documentos si el investigador no puede viajar hasta dichos centros. Antes de ver las páginas mencionadas estimamos que se hace oportuno señalar la ayuda que prestan en nuestros días las actuales bases de datos como *JSTOR*, *Blackwell-Synergy-Full Collection*, *LexisNexis Academic*, *ProQuest* entre otras –al hacer posible un acceso fácil a una gran cantidad de documentos dispersos–, buscadores como *Google Scholar*, *Scirus*, enciclopedias electrónicas que encontramos en la red como *Encyclopaedia Britannica Internet Guide*, *Oxford Reference Online*, *Wikipedia*, etc. y diccionarios en línea.

1. OSU LIBRARIES; SPECIAL COLLECTIONS.

La biblioteca de la Universidad Estatal de Oregon lleva a cabo desde varios años algunos proyectos de registro, documentación y difusión de gran importancia y nivel. La mayoría de estos trabajos, recogidos dentro del proyecto *Colecciones Especiales*, giran en torno a la vida y obra de algunos de sus más ilustres profesores e investigadores. Cuatro de estos proyectos tienen como objetivo principal dar a conocer y facilitar el acceso a la información y documentos que tienen sobre Linus Pauling. Se trata de los proyectos “Ava Helen y Linus Pauling Papers”, “Linus Pauling and the Nature of the Chemical Bond: A documentary History”, “Linus Pauling and the Race for DNA” y “Linus Pauling. Research Notebooks”

▪ AVA HELEN AND LINUS PAULING PAPERS

<http://osulibrary.oregonstate.edu/specialcollections/coll/pauling/index.html>

En la sección de *Colecciones Especiales* de la biblioteca de la *Universidad Estatal de Oregón* se encuentran la biblioteca y los papeles personales de Linus Pauling en donde podemos encontrar perfectamente archivados y catalogados los documentos personales del químico

estadounidense y su esposa Ava Helen atendiendo a dieciséis categorías: *Correspondencia personal de Linus Pauling entre 1.919 y 2.000; Publicaciones de Pauling entre 1.920-1.998; Textos manuscritos y mecanografiados de artículos; 1.923-1.995; Textos manuscritos y mecanografiados de Conferencias; 1.921-1.994; Textos manuscritos y mecanografiados de libros; 1.930-1.992; Cuadernos de investigación; 1.919-1.994; En esta sección se encuentran los cuarenta y siete cuadernos originales de investigación de Linus Pauling. El contenido de cada cuaderno ha sido catalogado con gran detalle; Artículos de periódicos; revistas científicas y magazines; 1.910-2.002; Honores; concesiones; citas; diplomas y otros reconocimientos; 1.914-2.001; fotografías e imágenes; 1.873-1.995; Audio / Visual; 1.946-1.997; Ciencia (notas originales de las investigaciones llevadas a cabo); Paz (textos manuscritos y mecanografiados); Biografía (material relacionado con aspectos de su vida personal); Ava Helen Pauling (documentos de y sobre la vida y trabajo de Ava Helen); ámbito personal; biblioteca personal de Pauling.*

Si bien el acceso a dichos documentos no es posible a través de la red –hay que ir a la Biblioteca y solicitar allí el acceso a dichos documentos– resulta de gran interés consultar cada una de estas secciones. De especial interés es el acceso a la sección de la biblioteca personal de Pauling ya que permite no sólo conocer qué libros tenían él y su esposa, sino también cuales leyeron, ya que se indica cuales de ellos tienen anotaciones a mano y de quien.

- **LINUS PAULING AND THE NATURE OF THE CHEMICAL BOND: A DOCUMENTARY HISTORY**

<http://osulibrary.oregonstate.edu/specialcollections/coll/pauling/bond/index.html>

A partir de la digitalización de cerca de 800 documentos esta página permite al visitante acercarse a la vida científica (desde 1.925 hasta 1.954) de Linus Pauling. Centrado en las investigaciones llevadas a cabo en torno a la naturaleza del enlace químico, el visitante cuenta con tres opciones de búsqueda. Con la primera de ellas se accede a una narración que muestra la evolución científica del químico a lo largo de seis etapas; inicios, 1.925-1.927; 1.928-1.930; 1.931-1.933; 1.934-1.939; 1.954. Junto al texto el visitante puede encontrar importantes documentos y curiosas imágenes representativas. La segunda opción permite la entrada a una

zona donde se encuentran todos los documentos digitalizados; correspondencia; fotografías de personajes claves; artículos publicados; imágenes e ilustraciones; notas; archivos de audio y video. La tercera opción presenta un calendario que permite al visitante saber qué hizo Pauling cada día durante 24 años (desde 1.930 hasta 1.954). Al seleccionar una fecha concreta se muestra un documento digitalizado y se ofrece más información sobre la actividad realizada ese día, haciéndose posible así la reconstrucción de la vida científica de Pauling durante dicho periodo.

- **LINUS PAULING AND THE RACE FOR DNA: A DOCUMENTARY HISTORY**

<http://osulibrary.oregonstate.edu/specialcollections/coll/pauling/dna/index.html>

Al igual que el proyecto anterior, a partir de la digitalización de cerca de 800 documentos esta página permite al visitante acercarse a la carrera –nunca reconocida por Linus Pauling pero sí por parte de otros protagonistas- en la búsqueda de la estructura del ADN. Se puede acceder a un importante número de artículos muy importantes, algunos de ellos nunca antes mostrados. Se recomienda la visita a esta página tanto a expertos como principiantes en la historia de la biología molecular. De forma paralela al proyecto previamente visto, se distinguen tres secciones. La primera de ellas es igualmente una exposición histórica de los hitos más importantes que se dieron, en esta ocasión, entre 1.951 y 1.953. Las otras dos permiten igualmente acceder a un gran número de documentos digitalizados¹⁰⁸. La tercera opción (*Linus Pauling Day-By-Day*) permite acceder a un calendario que permite conocer al visitante qué hizo Pauling y qué eventos importantes se produjeron día a día desde el 1 de enero de 1.952 hasta el 31 de diciembre de 1.953.

Se incluye una sección llamada *Introducción* en donde se describe la página y cada una de las tres secciones. Se incluye además una lista cronológica de documentos, una bibliografía selecta, direcciones de otras páginas de Internet sobre ADN e información sobre la misma página.

¹⁰⁸ Correspondencia; fotografías de personajes claves; artículos publicados; imágenes e ilustraciones; notas; archivos de audio y video. Se incluye una lista cronológica que facilita la búsqueda.

- **IT'S IN THE BLOOD! A DOCUMENTARY OF LINUS PAULING,
HEMOGLOBIN, AND SICKLE CELL ANEMIA**

<http://osulibrary.oregonstate.edu/specialcollections/coll/pauling/blood/index.html>

Esta página está dedicada a los trabajos de Pauling en el ámbito de la hematología, la inmunología, genética, evolución y salud humana. Al igual que las dos secciones previas, una de las primeras opciones nos ofrece una introducción en la que se explica las tres partes que componen la página. En la primera de ellas encontramos una exposición histórica a través de la cual nos acercamos a los trabajos de Linus Pauling en torno a las ciencias de vida. Desde sus primeros trabajos con la hemoglobina y sobre la anemia falciforme hasta sus últimas investigaciones en el ámbito de la medicina ortomolecular, nos ofrece una excelente panorámica de la obra de Pauling en esta área. En la sección de documentos y media, encontramos parte de su correspondencia, artículos publicados, imágenes e ilustraciones científicas, retratos de personajes claves, manuscritos, notas, archivos de audio y video así como una clara lista cronológica. La tercera opción la vuelve a constituir un calendario en el que se permite al visitante acercarse al día a día de Linus Pauling desde 1.940 hasta 1.954.

- **LINUS PAULING. RESEARCH NOTEBOOKS**

<http://osulibrary.orst.edu/specialcollections/rnb/index.html>

Linus Pauling, al igual que muchos otros científicos, utilizó cuadernos en donde anotaba cuidadosamente los detalles de sus investigaciones. Anotaciones que contienen datos provenientes de los cálculos y detalles experimentales obtenidos en el laboratorio. Provenientes de diversos campos, las investigaciones y conclusiones científicas expuestas, así como las ideas de futuras investigaciones proyectadas se ven acompañadas en numerosas ocasiones por reflexiones autobiográficas. En esta página encontramos digitalizadas estas notas que comprenden la investigación que Pauling llevó a cabo desde 1.922 hasta 1.986.

2. NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE. PROFILES IN SCIENCE; *LINUS PAULING PAPERS*

<http://profiles.nlm.nih.gov/MM/>

Además de un buen resumen y una sencilla cronología de la vida de Linus Pauling encontramos en esta página un gran número de textos y documentos originales *de y sobre* el químico de Pórtland. La búsqueda de estos documentos puede realizarse de dos formas. La primera opción nos permite acceder a los documentos a través de seis ejes temáticos; *información biográfica; biología molecular; anticuerpos y enzimas; medicina molecular; sus dos premios novel; vitamina C*. La segunda opción nos permite hacer la búsqueda atendiendo al tipo de documento que buscamos; *resúmenes; artículos; una mención; correspondencia; anteproyectos; ensayos; extractos; entrevistas; discursos; listados; monografías; relatos; artículos de periódicos; notas; peticiones; fotografías; retratos; comunicados de prensa; progresos; propuestas; reportajes; estudios; conferencias; transcripciones y videos*.

3. LINUS PAULING INSTITUTE. MICRONUTRIENT RESEARCH FOR OPTIMUM HEALTH

<http://lpi.oregonstate.edu/lpbio/lpbio2.html>

Ligado a la Universidad Estatal de Oregon desde 1.996, el *Instituto Linus Pauling* tiene como objetivo principal investigar el papel y la función de los alimentos en la preservación y mejora de la salud humana. De ahí que lo que haga especialmente interesante la visita a esta Institución y de esta página sea la atención que pone en los últimos trabajos científicos de Linus Pauling en torno a la medicina ortomolecular. Los fundamentos y espíritu de la institución están claramente inspirados en esos últimos trabajos y convicciones de Linus Pauling. De esa manera, el visitante no sólo tiene la posibilidad de acceder a contenidos de interés científico, sino conocer el espíritu y convicciones que guiaron a Linus Pauling durante las dos últimas décadas¹⁰⁹ y que de algún modo continúan presentes en el trabajo de esta institución.

¹⁰⁹ Desde 1.973, año en el que Pauling, Robinson, Keene Dimick y otros investigadores crearon la asociación *Institute of Orthomolecular Molecular* que cambiaría de nombre al siguiente año por el de *Linus Pauling Institute of Science and Medicine* (LPI).

4. CALIFORNIA INSTITUTE OF TECHNOLOGY

<http://www.caltech.edu/>

La institución educativa en la que Linus Pauling se desarrolló académica y científicamente alberga importantes documentos sobre la vida y el trabajo científico del químico. A través de la página del *Instituto Tecnológico de California* pueden accederse a muchos de los artículos, publicaciones y entrevistas que se encuentran sus archivos. Deben destacarse dentro de la sección de Archivos (*The Caltech Institute Archives*) la base de datos online *Caltech Archives PhotoNet* y el *Oral History Project*. La base de datos contiene miles de imágenes de material visual sobre la institución y sus más importantes profesores. Encontramos en la misma 168 documentos sonoros, audiovisuales y fotográficos así como importante información sobre cada uno de ellos¹¹⁰. El proyecto histórico, que tiene como fin recuperar la memoria histórica de la institución desde 1.978 destacando a sus profesores e investigadores más importantes, cuenta con la entrevista que el 10 de mayo de 1.984 Pauling concedió a John L. Greenberg. La institución permite el acceso completo a través de la red tanto a este documento –tan valioso para conocer algunos rasgos importantes de la personalidad de Pauling– como a la tesis doctoral del químico: *The determination with x-rays of the structures of crystals* (1.925)¹¹¹.

¹¹⁰ Si bien no es posible acceder al contenido de los videos y audios, la información que se da sobre los mismos posee un gran valor.

¹¹¹ La liga a través de la cual se puede acceder de forma abierta a este documento es la siguiente: http://etd.caltech.edu/etd/available/etd-05142003-141307/unrestricted/Pauling_L_1925.pdf

1.3. CONTEXTO E INFLUENCIAS CIENTÍFICAS

INTRODUCCIÓN AL CONTEXTO E INFLUENCIAS CIENTÍFICAS.

La presente sección tiene por objeto la exposición ante el lector de una panorámica general del contexto e influencias científicas que, de forma más notoria, condicionaron el desarrollo de la obra de Linus Pauling. El fin de la misma es, al igual que toda esta primera parte, facilitar la presentación que se llevará a cabo durante las dos siguientes secciones dedicadas al análisis de su obra científica. Para tal fin, junto al contexto científico inmediato en el que propiamente se desarrolló, se presentarán algunos elementos importantes de las tradiciones que heredó y de las que, en mayor o menor medida, se hizo cargo.

La pluralidad de ámbitos a los que Pauling dedicó su esfuerzo intelectual y científico nos obliga a llevar a cabo nuestra tarea discerniendo claramente las distintas esferas y disciplinas bajo las cuales se desarrolló. Si bien Pauling se caracterizó por ser un investigador inquieto, que saltaba de un problema a otro, de una disciplina a otra, podemos distinguir dos etapas claramente diferenciadas dentro de su biografía científica. La primera de ellas se corresponde con sus estudios en torno a la estructura de la materia inorgánica, centrada principalmente en el estudio de la estructura cristalina de sustancias simples y la naturaleza del enlace químico. La segunda etapa coincide con sus investigaciones en el ámbito de las ciencias vivas. Esta época centrada en el estudio de estructuras biológicas cada vez más complejas fue fundamental para el nacimiento y posterior desarrollo de la biología y la medicina molecular. Pero debemos incluir un apartado más. Los últimos años de su vida Pauling los dedicó al desarrollo e intento de consolidación de un nuevo tipo de medicina; la medicina ortomolecular, a la que dedicaremos también atención.

Tanto en el primer periodo como en el segundo, la historia y la situación contemporánea de la química fueron obviamente determinantes, al igual que lo fue el de la física – concretamente la física cuántica–, cuya gran reconstrucción interna fue clave en el cambio de la estructura, la lógica y la constitución del resto de disciplinas científicas, incluidas por supuesto, la química y la biología.

Por todo ello, para dar cuenta del contexto científico, de las influencias que se encuentran presentes en la obra de Linus Pauling y las tradiciones que éste recogió y de las cuales se hace cargo, durante la presente sección vamos a distinguir tres grandes partes que se

van a corresponder con tres grandes esferas del conocimiento científico: la química, la física y las ciencias de la vida. En este último caso, por las razones que someramente hemos visto ya, y por otras que se expondrán posteriormente con la extensión y la profundidad oportuna, estará centrado en los ámbitos de la biología y la medicina molecular.

1.3.1. QUÍMICA

Como hemos señalado anteriormente y volveremos a ver a lo largo de todo el presente trabajo, la obra científica de Linus Pauling estuvo marcada por una idea: las propiedades físicas y químicas de las sustancias están relacionadas directamente con la estructura de los átomos y de las moléculas que las componen. De ahí –pensaba el químico estadounidense– que fuera necesario encontrar un modelo que permitiera dar cuenta simultáneamente de la estructura y el comportamiento químico –incluido el enlace químico–, de cualquier molécula. Este modelo tendría, por consiguiente –al menos–, una triple herencia: aquella que vendría de los estudios llevados a cabo en torno a la estructura atómica¹¹², aquellos centrados en estructura molecular y, finalmente, aquellos realizados sobre la naturaleza del enlace químico. Para poder dar cuenta de la influencia que tuvieron los dos últimos ámbitos, hemos distinguido en la presente sección, dedicada al contexto químico bajo el cual se desarrolló el trabajo de Pauling, cuatro secciones: una dedicada a la química estructural, otra en el de la química física¹¹³, una tercera en la cristalografía y una cuarta, en la naturaleza del enlace químico.

1.3.1.1. La química estructural

La nueva química estructural (1.919)

A. Una breve imagen de la historia de la química desde una perspectiva estructuralista

Como el mismo Pauling señalara¹¹⁴, la primera vez que encontramos el término *átomo* es en la obra de Demócrito (460-370 a.C.), quien estableció a partir de las ideas de los primeros filósofos, que el universo estaba compuesto de vacío y átomos. Estos últimos fueron considerados entonces como seres eternos e indivisibles, absolutamente pequeños. El pensador

¹¹² Que veremos en la siguiente sección, ya que su estudio pertenece a la física y no a la química.

¹¹³ Debido a la extraordinaria importancia que la personalidad y protección que A. Noyes tuvieron en la formación –tanto personal como científica– de L. Pauling, en esta sección tendremos la oportunidad de señalar algunos hitos importantes en la vida de este químico, así como prestar atención a su esfuerzo titánico por hacer de la división de química del Caltech, uno de los centros de investigación más vanguardistas de los EEUU.

¹¹⁴ Pauling, Linus (1.947), p. 21 y Barbara Marinacci (1.995), pps. 51-54.

de Abdera estimó que los átomos de las distintas sustancias, tales como el agua y el hierro, eran fundamentalmente iguales, si bien las únicas diferencias se encontraban en sus superficies; los átomos de agua eran lisos y redondos, pudiendo ser sustituidos unos por otros, mientras que los átomos de hierro, rugosos y dentados, podían aferrarse entre sí y formar un cuerpo sólido. Sin embargo –tal y como el mismo Pauling reconoció–, la teoría atómica de Demócrito era fruto de la pura especulación, pues ofrecía más una visión general que útil. Hubo que esperar hasta principios del siglo XIX para que apareciera una hipótesis que explicara muchos de los hechos de un modo simple y razonable. Fue concretamente en 1.805 cuando el físico y químico inglés John Dalton (1.766–1.844) estableció la hipótesis según la cual, *todas las sustancias están compuestas de pequeñas partículas de materia*. A estas partículas las denominó átomos. A partir de esta hipótesis, se hacía posible dar una explicación o descripción sencilla a las relaciones ponderales que se producían durante las reacciones químicas. El camino abierto por Dalton fue determinante en el futuro de la ciencia, ya que tras la verificación de esta hipótesis por medio de posteriores trabajos, fue posible llegar a la teoría atómica.

Tendríamos que esperar no obstante hasta 1.861, para que Butlerow propusiera por primera vez el término “Química estructural” y señalara de forma clara, que todas las propiedades de una sustancia podían ser determinadas a partir de su estructura molecular. Asimismo, sostuvo que a partir del estudio de los caminos que hacen posible la sintetización de una molécula, era posible encontrar su fórmula estructural correcta. Ésta debía ser una fórmula simple, capaz de expresar la estructura de la sustancia y mostrar cómo cada átomo estaba unido a otro en las moléculas de las sustancias. Fue entonces, tal y como Pauling señaló en sus escritos, cuando dos ideas condicionaron todo el posterior desarrollo de la química: *la idea de valencia y la idea de enlace químico*¹¹⁵. A partir de estas teorías, fue posible durante la década de 1.860 que los químicos alemanes, ingleses y franceses, señalaran cómo las diversas sustancias podían ser descritas a partir de la formación de los enlaces que los átomos establecen entre sí. Para ello, resultó de suma importancia descubrir que el átomo de hidrógeno podía formar un enlace, el átomo de oxígeno podía formar dos y, tanto los átomos de carbono como de silicio, podían formar cuatro.

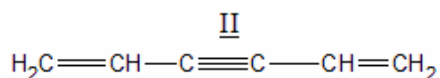
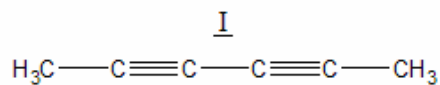
¹¹⁵ Estas ideas serán desarrolladas más extensamente en el próximo apartado de este capítulo.

Durante los siguientes cincuenta años, los químicos llevaron a cabo un gran avance en la comprensión de las propiedades de las sustancias. Esto fue posible gracias a los estudios realizados para intentar comprender la forma –o formas– bajo la cual se produce el enlace químico, pero también gracias a la constatación de la extraordinaria importancia y el estudio de la disposición que los átomos tienen dentro de una molécula. La gran responsable de esta segunda rama de investigación fue la química estructural de Kekulé. Aunque años más tarde, influido principalmente por la concepción dinámica de Williamson, Kekulé dudara de que en algún momento se pudiera llegar a conocer la constitución absoluta de las moléculas orgánicas, su propuesta de la estructura del benceno constituyó uno de los signos más claros del triunfo de la teoría estructural¹¹⁶.

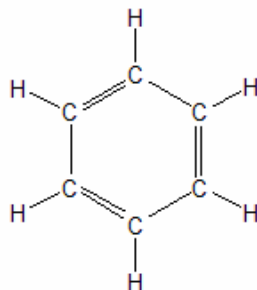
Aunque el benceno se conocía desde 1.825 y sus propiedades físicas y químicas eran conocidas mejor que la de cualquier otro compuesto orgánico, su estructura no pudo ser determinada definitivamente hasta 1.931. El principal problema no se encontraba tanto en su complejidad, sino en el limitado desarrollo que hasta entonces se tenía de la teoría estructural. Como venimos diciendo, Kekulé fue uno de los pioneros en el desarrollo de esta teoría. Ciertamente que antes de que este químico entrara en escena ya se conocía la fórmula molecular (C₆H₆) del Benceno, pero no el modo en el que se disponían los átomos en la molécula. En 1.858 Kekulé propuso que los átomos de carbono se podían encontrar unidos entre sí formando cadenas y en 1.865 que estas cadenas carbonadas podían formar, en algunas ocasiones, anillos cerrados. Para representar la estructura del benceno propuso¹¹⁷:

¹¹⁶ Aunque la estructura real del benceno no es ninguna de las de Kekulé propuso, sino la del híbrido de resonancia que se representa con un hexágono y un círculo en su interior, en la actualidad se sigue haciendo uso en muchas ocasiones de las estructuras de Kekulé para tener una mejor comprensión de su comportamiento y poder explicar algunos sus mecanismos de reacción. El planteamiento de resonancia por deslocalización desarrollado durante el siglo XX, fue tan sólo posible tras el desarrollo de la teoría de la resonancia de Pauling y la química cuántica, en la que el químico estadounidense fue, nuevamente, uno de los protagonistas principales. A pesar de que esta nueva teoría nos permite en la actualidad explicar mucho mejor la mayoría de las propiedades del benceno y sus derivados en función de la estructura, es heredera directa del trabajo y la teoría estructural de Kekulé.

¹¹⁷ Pero cuidado, tal y como veremos líneas más abajo, esta representación gráfica no fue propuesta por Kekulé, sino que se trata de una reconstrucción posterior.



III
Kekulé



De este modo era posible dar una explicación sencilla y elegante del isomerismo. La idea de la cadena del carbono y la extraordinaria capacidad del hexágono para explicar la síntesis de los compuestos orgánicos (tanto observados como predecibles), se convirtieron desde ese momento en dos de las ideas más importantes de la nueva teoría estructural. Ya en 1.857, Kekulé apoyándose en la facultad mecánica del carbono para combinarse con cuatro átomos o grupos y el oxígeno y azufre con dos, había sido capaz de llevar a cabo el desarrollo de un método de clasificación de las sustancias orgánicas: “El carbono es, como puede fácilmente demostrarse y explicaré más adelante en detalle, tetrabásico o tetratónico, es decir, un átomo de carbono = C = 12 es equivalente a cuatro átomos de hidrógeno.”¹¹⁸

En 1.864, tras reconocer la pertinente desaprobación que un lector del *Chemical News* hacía ante el tremendo desacuerdo que por entonces había entre los químicos sobre la fórmula de una sustancia tan simple como el agua, Kekulé reprodujo en el *Lehrbuch* las veinte fórmulas diferentes que se habían publicado del ácido acético. Con este trabajo no sólo pretendía evidenciar el aparente desconcierto que la química parecía vivir, sino mostrar también cómo los planteamientos estructurales podrían llegar a constituirse en la herramienta más eficaz a la hora de clasificar las sustancias. De ese modo, hacía patente cómo la química estructural podría

¹¹⁸ Kekulé, F. A. (1.857); William Brock (1.992), p. 222.

ayudar a los químicos a reducir a una sola el hasta entonces bastísimo número de posibilidades de fórmulas del ácido acético.

Pero más importante fue aún, clave podríamos decir para el futuro de la química, la alusión que en 1.868 hizo Kekulé a las atomicidades o basicidades de los elementos, en vez de hacerlo como venía siendo lo normal, a los radicales. Tal alusión era fruto de una mayor atención a la noción de concatenación o enlace de los átomos de carbono en una cadena. Es importante, tal y como señala Brock– y de quien obtenemos la siguiente cita –reproducir las palabras que el mismo Kekulé formulara diez años atrás y en las que muestra claramente cómo el interés originario por la clasificación se desplazó hacia la constitución y la estructura de las sustancias:

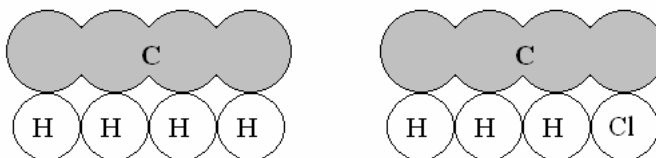
Quando se consideran los compuestos más simples [de carbono] (gas de los pantanos, cloruro de metilo, cloruro de carbono, ácido carbónico, fosgeno, sulfuro de carbono, ácido cianhídrico, etc.), se observa que la cantidad de carbono que los químicos han reconocido como la más pequeña posible, es decir, como un átomo, siempre se une con cuatro átomos de un elemento monoatómico o con dos átomos de un elemento diatómico; también se observa que, por lo general, la suma de las unidades químicas de los elementos unidos con un átomo de carbono es igual a cuatro. Esto nos lleva a considerar que el carbono es tetratómico o tetrabásico.

En los casos de sustancias que contienen varios átomos de carbono, debe suponerse que al menos algunos de los átomos se mantienen de la misma manera en el compuesto por la afinidad del carbono, y que los átomos de carbono se adhieren unos a otros, por lo que una parte de la afinidad de uno está naturalmente comprometida con una parte equivalente de la afinidad del otro. El caso más sencillo, y por consiguiente más probable, de una asociación de este tipo de los átomos de carbono es aquel en que una unidad de afinidad de una está unida con una unidad del otro. De las 2 x 4 unidades de afinidad de los dos átomos de carbono, dos se utilizan por completo para mantener juntos los átomos, y quedan seis que pueden ligarse con átomos de otros elementos. En otras palabras, un grupo de dos átomos de carbono, C₂, será sexatómico, y formará un compuesto con seis átomos de elementos monoatómicos o, por lo general, con tantos átomos como sean necesarios para que la suma de las unidades químicas de estos sea igual a seis.¹¹⁹

Pero la importancia de la química estructural no quedó sólo ahí, sino que fue también capital para el desarrollo de las fórmulas gráficas. Ciertamente es que el mismo Kekulé empleó sólo de manera ocasional estas fórmulas, teniéndose que destacar la utilización que hizo de las “fórmulas salchicha” durante algunas de las clases que impartió entre 1.857 y 1.858 en la

¹¹⁹ Kekulé, F. A. (1.858); William Brock (1.992), pp. 222-1.

Universidad de Heidelberg. A través de estas fórmulas gráficas intentaba representar el “gas de los pantanos” (metano):

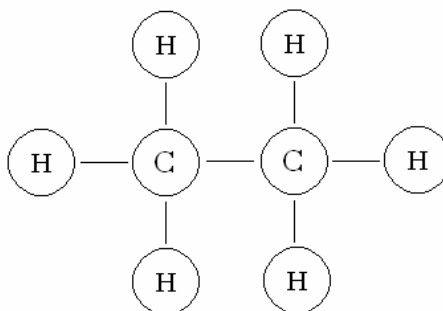


Sin embargo, dejó que fueran otros los que supusieran que las fórmulas basadas en la tetravalencia del carbono, representaban la ordenación real de los átomos en la molécula¹²⁰. No fue hasta la década de 1.870 cuando empezó a compartir esta idea, de la cual fueron sus primeros partícipes Adolph Wurtz, Archivald Scout Couper y Aleksandr Butlerov. Aunque Couper había sido el primero en utilizar el término *estructura* para referirse al orden y disposición de los átomos, quien hizo popular la expresión “estructura química” fue Butlerov. Con este término quería hacer referencia a la constitución y llamar la atención sobre el hecho de que la disposición concreta de los átomos dentro de una molécula, era la *causa* de sus propiedades físicas y químicas. El empleo de esta expresión no se hizo esperar, convirtiéndose en un término habitual a partir de 1.861: “Sólo es posible una fórmula racional para cada compuesto y, cuando se hayan desarrollado las leyes generales que rigen la dependencia de las propiedades químicas de la estructura química, está fórmula expresará todas las propiedades.”¹²¹

Pero tampoco las representaciones gráficas se quedaron atrás en su proliferación. Prueba de ello es que las podemos encontrar ya en la tesis doctoral de Alexander Crum Brown (1.861) y tan sólo tres años más tarde, de una forma muy extendida y recuperando la manera en la que Dalton representaba los átomos; los símbolos en el interior de una esfera:

¹²⁰ Esta idea recogida por Pauling fue fundamental, como tendremos la oportunidad de ver, en su concepción de la naturaleza y finalidad de la ciencia.

¹²¹ Butlerov, Aleksandr (1.861); William Brock (1.992), p. 227.



Tras la utilización de estas fórmulas en Gran Bretaña por Hofmann y Frankland, y por Erlenmeyer en Alemania, las fórmulas gráficas se convirtieron en un componente esencial de la teoría estructural. Si bien Dalton había mostrado un pensamiento geométrico al llevar a cabo la construcción de modelos de madera para ilustrar las combinaciones entre los átomos, lo cierto es que la cristalografía fue la que proyectó la química al espacio. Sin embargo, debemos señalar algunos antecedentes que fueron preparando el camino. En 1.812 Wollaston llevó a cabo, a partir de los dibujos de Haüy, la construcción de diversos modelos con los cuales pretendía mostrar cómo podían ordenarse pilas de partículas esféricas de tal manera que se obtuvieran las mismas formas externas que se habían observado en los cristales. J.B. Biot, en 1.815, señaló cómo algunos líquidos orgánicos –tales como los cristales de espató– podían hacer rotar la polarización de un haz de luz previamente polarizado, proyectado a través de ellos. Ya en la década de 1.860, Hofmann y Frankland –siguiendo las indicaciones de Crum Brown– utilizaron en sus clases bolas de madera coloreadas. Estos ejemplos tenían algo en común: en todos los modelos las moléculas estaban dispuestas linealmente y los ángulos entre unos átomos y otros eran de 90°. Fue en 1.867, cuando James Dejar –por entonces alumno de Kekulé– diseñó con alambres modelos de figuras geométricas del carbono tetraédrico.

B. El papel de la organización espacial en la química estructural

Si bien Jacobus van't Hoff no fue la primera persona en disponer los enlaces covalentes tetraédricamente, sí que fue uno de los químicos más influyentes en el desarrollo y confirmación de la extraordinaria importancia de la organización espacial de los átomos en las moléculas. En septiembre de 1.874, el químico alemán publicó un pequeño panfleto de apenas doce páginas,

titulado “Propuesta para la proyección en el espacio de las fórmulas ahora en uso de la química, junto con una nota anexa sobre la relación entre el poder de rotación óptico y la constitución química de los compuestos orgánicos”, y un año más tarde la monografía, bastante más extensa, *La chimie dans l'espace*. Van't Hoff reconoció que para su trabajo se había inspirado en Johannes Wislicenus, quien en 1.860 bautizó con el término “isomerismo geométrico” a aquellos casos de isomerismo en los que se presentaban propiedades físicas y químicas diferentes, sin necesidad de mostrar actividad óptica. Wislicenus propuso que estos casos podían explicarse a partir de las diferentes posiciones de los átomos en el espacio:

Aquí se da el primer caso definitivamente demostrado en el que el número de isómeros supera al número de estructuras posibles. Hechos como este nos impulsan a explicar moléculas isoméricas distintas con la misma fórmula estructural, mediante diferentes posiciones de sus átomos en el espacio, y a buscar sus representaciones exactas.¹²²

Van't Hoff supo recoger lo mejor de la propuesta de Wislicenus, señalando que si efectivamente se suponían las cuatro valencias del carbono formando ángulos rectos, se predecirían muchos más isómeros de los que se habían encontrado en los derivados del metano. Sin embargo –continuaba la argumentación de van't Hoff–, si se dirigían las valencias hacia los ángulos de un tetraedro, entonces se podría encontrar una perfecta coincidencia en los isómeros predicados y los preparados experimentalmente. A partir de los trabajos de Van't Hoff y de otros químicos que siguieron su senda, la teoría estructural hizo mucho más fácil la química orgánica. Permitió resolver el complicado problema de la clasificación de compuestos orgánicos, permitió proyectar y predecir sobre el papel y la pizarra, así cómo verificar de forma rutinaria lo que antes hubiera necesitado años de investigación empírica.

La nueva química estructural abrió las puertas a enigmas hasta entonces desconocidos para los químicos –como el reordenamiento interno y el tautomerismo– a los que se entregaron entusiasmados. Tras la resolución por parte de Kekulé de uno de los enigmas más importantes en 1.865¹²³ –como ya vimos–, a finales de esa década casi todos los jóvenes químicos de renombre eran ya estructuralistas. Ejemplo del reconocimiento e influencia que el trabajo de

¹²² Cita extraída de William Brock (1.992), p. 230.

¹²³ La estructura del benceno

Kekulé disfrutó entre los químicos, lo encontramos en las palabras que Francis Jaap pronunciara en 1.898 –poco después de la muerte de Kekulé– en la *London Chemical Society* al afirmar que la teoría del benceno del químico alemán constituía: “La pieza más brillante de la producción científica que puede encontrarse en toda la química orgánica. Tres cuartas partes de la química orgánica moderna son directa o indirectamente producto de esta teoría.”¹²⁴

La constatación de que las propiedades químicas de las moléculas tenían su origen en la estructura interna de las mismas, hizo que desde ese momento, tanto la química en general como la industria dependieran del ritmo y desarrollo de la química estructural. Al mismo tiempo, hizo que la química se familiarizara más con la física, que pretendía ofrecer una mejor comprensión de las capacidades de los átomos. Para saber cómo estas ideas llegaron hasta el siglo XX y, concretamente, hasta el ambiente académico y científico en el que Pauling trabajó, podemos acercarnos a una de sus obras más importantes: *General Chemistry*. En una de sus primeras páginas, Pauling define la Química¹²⁵ como “aquella ciencia que estudia las sustancias: su estructura, sus propiedades y las reacciones que las transforman en otras sustancias”¹²⁶. ¿Por dónde empezar el estudio de las sustancias¹²⁷? Pauling, recogiendo el guante del estructuralismo, lo tiene muy claro –por su estructura– cuando afirma:

Las propiedades de la materia se conocen y comprenden más fácil y claramente cuando se relacionan con su estructura, en función de las moléculas, átomos y partículas todavía más pequeñas. Por estructura hay que entender la disposición de los átomos que constituyen toda la materia y que, mediante las interacciones de unos con otros, dan individualidad y variedad a la misma.¹²⁸

¹²⁴ Cita extraída de William Brock (1.992), p. 237

¹²⁵ Aunque debemos señalar que él mismo, líneas más abajo, reconoce ésta como una definición “demasiado limitada y demasiado amplia”.

¹²⁶ Pauling, L. (1.947), p. 3

¹²⁷ Pero, ¿qué debe entender por sustancia? El universo, señala el químico estadounidense, está formado por sustancias (formas de materia) y energía radiante (luz, rayos X, ondas electromagnéticas). Ahora bien, la sustancia ha de ser entendida como una especie de materia homogénea, de composición química definida. El mismo autor pone los ejemplos de la sal, el azúcar, el hierro, el cobre, el agua que, en estado de pureza, son representativos de las sustancias. Por consiguiente, sustancia equivale químicamente a sustancia pura, a una sustancia que tiene una composición química definida (aunque esto no es siempre completamente cierto, ya que las sustancias que mueve el químico presentan un pequeño margen de variación en su composición química).

¹²⁸ Pauling, L. (1.947), p. 3

Pero Pauling no heredó de la química estructural sólo la idea de que el problema estructural era el primordial de su disciplina¹²⁹. Llegaron a él muchas otras ideas que marcaron no sólo la trayectoria científica e intelectual del químico estadounidense, sino el desarrollo de toda la química del siglo XX. Entre otras ideas hay que destacar dos: por un lado la constatación de que la mayoría de las sustancias en los organismos vivos están compuestas de carbono y, relacionada con ésta, la necesidad de estudiar su naturaleza y qué era lo que hacía que el carbono fuera capaz de formar cuatro enlaces dirigidos espacialmente a las esquinas de un tetraedro más o menos regular. Éste se convirtió pronto en uno de los problemas principales de la química –y una de las mayores obsesiones de Pauling–, ya que su resolución podía permitir –como de hecho se constató gracias precisamente a los trabajos de Linus Pauling– explicar de forma razonable algunas de las propiedades más notables de ciertos compuestos orgánicos. Además, la estructura tetraédrica del carbono permitió asignar fórmulas estructurales a las moléculas de muchos compuestos orgánicos, mostrando el átomo como círculos o símbolos conectados por líneas que representaban el enlace químico. Los químicos, especialmente los orgánicos, hicieron gran uso de estas fórmulas químicas en la planificación e interpretación de sus experimentos, lo que dio lugar a un rápido progreso de la disciplina. Sin embargo, no debemos perder de vista que en 1.915 –tal y como señala Pauling en *College Chemistry*¹³⁰– la existencia de los átomos no era aún aceptada como un hecho. Ejemplo de ello lo encontramos al ver que a principios del siglo XX en muchos libros de texto se definían los átomos como “esas unidades imaginarias que, agrupadas, constituyen los cuerpos”. Asimismo, en la 11ª edición de la Enciclopedia Británica, publicada en 1.910, la entrada *átomo* terminaba con estas palabras:

La teoría atómica ha sido de un incalculable valor para los químicos, pero ha ocurrido en la historia de la ciencia más de una vez que una hipótesis, después de haber sido útil en el descubrimiento y coordinación de conocimiento, ha sido abandonada y reemplazada por otro pensamiento pudiendo este destino estar esperando a la teoría atómica ... Sin embargo, recientes descubrimientos en radioactividad se muestran a favor de la existencia del átomo, si bien permiten creer que éste no es tan eterno e inmutable como Dalton y sus antecesores habían imaginado.¹³¹

¹²⁹ Recordemos nuevamente que el problema de Pauling es la cuestión de la estructura de la materia.

¹³⁰ Cap. 24 y 25

¹³¹ Cita extraída de Barbara Marinacci (1.995), p. 52.

Poco a poco el conocimiento preciso de la estructura y propiedades de los átomos y moléculas, hizo posible un giro radical en la apreciación de la realidad y el papel que el átomo debía jugar en la química¹³². El origen de este cambio se dio en primer lugar, en el ámbito de la química física y, posteriormente, en la física cuántica. Por esa razón –tal y como antes se había anunciado– se dedicarán las próximas páginas al desarrollo de la química física –clave en la etapa formativa de Pauling– y, posteriormente, a la física y la química cuántica.

1.3.1.2. La química física

*De la química física a la física química*¹³³

La química física de posguerra¹³⁴ fue, en todos los sentidos, mucho más rica que la del periodo anterior. Sin embargo, eso no significa que estuviera exenta de muy serios problemas. Las relaciones que mantuvo con otras disciplinas, si bien en numerosas ocasiones fueron una buena oportunidad para su crecimiento y expansión, también dieron lugar a diversos conflictos. Cuando los geólogos, los ingenieros químicos, los metalúrgicos y bioquímicos profundizaron en el estudio de la química-física, lo hicieron llevando consigo sus preocupaciones y cuestionamientos. Los geólogos y metalúrgicos se interesaron sobre todo en las reglas de fase y sus aplicaciones, los bioquímicos en las largas y complejas sustancias de las células. La tensión entre unos y otros era inevitable, sobre todo cuando entre los químico-físicos y sus homólogos no sólo se daban diferencias respecto a sus intereses, sino también respecto a sus valores.

Desafortunadamente los conflictos no quedaron en la estrecha franja de contacto entre la química-física y otras disciplinas, sino que también se produjeron, a pesar de un prometedor inicio, dentro de la misma. Si nos acercamos en primer lugar a los inicios de la física-química, podremos apreciar cómo durante varios años la fuerte presión de la especialización y la fragmentación que se vivió en el ámbito de las ciencias y la tecnología, se convirtió en una gran oportunidad, en una excelente ocasión para que se multiplicaran las oportunidades de trabajo de

¹³² Fundamental, como veremos en la concepción realista de Pauling.

¹³³ Todo este capítulo se ha desarrollado principalmente a partir del texto de John W. Servos, Cap. 6 “From Physical Chemistry to Chemical Physics”, pp. 251-298.

¹³⁴ De la Primera Guerra Mundial

los físico-químicos. Mientras las fronteras entre la química y la física no eran aún muy fuertes, los químico-físicos gozaron de excelente fama como hábiles y mañosos. Ejemplo de ello es el bajo número de estudiantes de Ostwald que se limitaron a un sólo tema de investigación. Muchos de los químico-físicos escribieron y trabajaron sobre aspectos de muy distintos campos. Su versatilidad les proveyó de una importante ventaja –incluso llegando a ser en muchas ocasiones considerados necesarios, casi imprescindibles– en los trabajos indiferenciados de la década de 1.880. De alguna forma esta imagen se conservó durante los inicios del siglo XX, como lo podría atestiguar la aparición de algunos químico-físicos con un interés muy similar en la década de 1.920: Harold C. Urey y Linus Pauling. Sin embargo se debe reconocer que para mediados de la década de 1.920, aunque los estudiantes de análisis de rayos X, termodinámica química y química coloidal debían identificarse como químico-físicos, ya tenían muy poco en común. Lo cierto es que la química-física nunca había tenido una entidad fija muy fuerte. Sus raíces habían sido demasiado diversas y sus ambiciones demasiado grandes. La emoción causada por el trabajo de van't Hoff y Arrhenius sobre soluciones, el predominio de la escuela de investigación de Ostwald en Leipzig y la necesidad de presentar un frente común a un cada vez más fuerte escepticismo, había dotado a la disciplina de una cierta unidad en la década de 1.890. Pero esta fue una unidad que el tiempo no respetó. Llegados a la década de 1.920, las ideas simples de van't Hoff y Arrhenius se habían vuelto demasiado complejas. Ostwald hacía mucho tiempo que se había jubilado y el escepticismo había ganado terreno.

Aquellas múltiples posibilidades empezaron a convertirse en el peor enemigo de la física-química. Al diversificarse las posibilidades de trabajo para los físico-químicos, las fuerzas centrífugas que habían estado desarrollándose amenazaron con fracturar la disciplina en un montón de nuevas especialidades. No sería lícito decir que la especialización trajo una crisis de identidad a todos los químico-físicos, ya que algunos de ellos aceptaron el proceso de cambio con calma. Se limitaron a dar sus clases, escribir libros de texto, presentar sus comunicaciones con algunas dificultades y todo ello, como si ese fuera el precio que debía pagarse a cambio del progreso. Sin embargo, muchos de los científicos que se encontraban en la vanguardia de las distintas especialidades, encontraron el proceso alarmante. Esta fase de especialización habría las puertas a otros cambios, más importantes si cabe, entre los que habría que señalar una polarización en torno al papel que debían jugar las matemáticas y la física en la química. La química-física clásica había nacido gracias al esfuerzo de aplicar los nuevos conceptos y

herramientas de la física a la química. Aquella –la física– no había permanecido estática durante esas décadas, sino que había ido cambiando. Por ello, al igual que había ocurrido entonces, los nuevos conceptos y herramientas de la física presentaban nuevas oportunidades y se mostraban esenciales para el desarrollo de muchas ramas de la química-física. A su vez, la física también reclamaba un nuevo tipo de químico-físico: éste debía poseer un gran conocimiento de las nuevas ideas, los nuevos instrumentos y las nuevas matemáticas que la física llevaba consigo y que no habían tenido ningún papel en la química-física de sus profesores.

Consecuencia de todo ello, tal y como veremos más detenidamente en posteriores capítulos, en la década de 1.930 surgió una nueva química gracias en gran medida al trabajo de Linus Pauling: la química cuántica. Ésta fue acogida por muchos químico-físicos con cierta desesperación e impaciencia, debido a su gran complejidad. De hecho, muchos de aquellos que no pudieron adaptarse al cambio, regurgitaron la nueva ciencia y en la medida de lo posible, intentaron continuar desarrollando su disciplina como si no hubiera terminado el siglo XIX.

Para nuestros fines, contextualizar el trabajo de Pauling y poder entender mejor a qué cuestiones, a qué problemas tuvo que dar respuesta, se hace necesario conocer estos momentos de cambio que la química-física vivió. Para acercarnos aún más a su contexto, a aquellos aspectos que influyeron más en su trabajo, veamos cómo fueron los inicios del Caltech en ámbito de la química-física, la institución dentro de la cual se formó y trabajó durante décadas.

El Caltech

Aunque el *Throop Technical Institute*¹³⁵ fue fundado en 1.891 en Pasadena (California), podemos decir que el Caltech fue el gran invento del astrónomo George Ellery Hale y de Arthur Noyes. Contratado a principios del siglo XX para llevar a cabo la construcción de un observatorio telescópico en la cima del cercano *Mount Wilson*, Hale se obstinó en convertir el *Throop Institute* en una especie de campamento base para su observatorio. El resultado de su esfuerzo fue la extraordinaria acumulación de talento científico en Pasadena. Su idea era muy

¹³⁵ Como veremos más tarde, *Throop Institute* fue el primer nombre de lo que hoy conocemos como el *California Institute of Technology* (Caltech).

sencilla: la investigación astrofísica podría ser mucho más sobresaliente si contaba con la cooperación del trabajo terrestre. Los físicos y los químicos, por ejemplo, podían ayudar asistiendo a los astrofísicos en sus tareas de interpretación de los datos de los espectros y mejorando los tintes de las fotografías. Si bien en 1.919, cuando empezaron a llegar los primeros científicos al *Throop Institute*, el único interés científico que podía suscitar una visita a Pasadena era el telescopio de Hale; diez años más tarde, y aunque el telescopio seguía ejerciendo algún atractivo, el mayor atractivo se encontraba en los laboratorios y el grupo de científicos del Caltech. Efectivamente, en 1.929 el Caltech se situó claramente entre los laboratorios de investigación física y química más importantes de los Estados Unidos. Su personal docente contaba con científicos de gran reputación como Millikan y Noyes, así como con un gran número de prometedores jóvenes instructores, entre ellos J. Robert Oppenheimer, Carl Anderson y Linus Pauling. El campo de la física atrajo más *National Research Fellows* que ninguna otra universidad y el de la química siguió desde muy cerca a los grandes departamentos de Berkeley y Harvard. ¿Cómo fue posible alcanzar estas cotas y desarrollos en tan poco tiempo? Una de las figuras claves fue la de Arthur Noyes, a quien dedicaremos las próximas páginas, quien fue clave tal y como tendremos la oportunidad de comprobar en la vida y obra de Linus Pauling.

A. Arthur Noyes, del MIT al Caltech

Muchos historiadores de la ciencia sitúan el comienzo de una nueva era de la química en la desgarradora elección personal que Noyes tuvo que llevar a cabo: permanecer en el MIT¹³⁶ o seguir el ejemplo de sus amigos Hale, Lewis y Bray, de emigrar a California. La decisión fue, probablemente, una de las más duras que tuvo que realizar en su vida. Con una personalidad muy reticente a los cambios, unos hábitos y costumbres tan arraigados, ese cambio se presentaba desolador. Boston había sido su casa, y el ambiente de trabajo conseguido en el *Research Laboratory of Physical Chemistry* era excelente. Por ello, ni siquiera el traslado del MIT desde Boston hasta Cambridge había modificado excesivamente su modo de vida, ya que no lo obligó a mudarse de casa. Sin embargo, los cambios que se produjeron en el país, en su

¹³⁶ Massachusetts Institute of Technology.

disciplina y sobre todo en el MIT durante los primeros años de la década del siglo XX, hicieron que se tambalearan sus relaciones con la institución. La integración de la ciencia y la tecnología industrial llevó a laurear a los ingenieros y la educación en ingeniería, lo que incitó de alguna manera al MIT a intentar convertirse en el líder de algo para lo que aún no estaba completamente preparado. Mientras tanto, las relaciones entre la química-física y otras disciplinas aumentaban, y Noyes daba la bienvenida a nuevos estudiantes, lo que trajo consigo nuevos y grandes conflictos. Éstos se “resolvieron” en 1.919, precisamente el año en que finalizó la Primera Guerra Mundial, cuando se terminó por romper una relación de décadas entre el MIT y Noyes. Éste abandonó su laboratorio y emigró a Pasadena donde comenzó la construcción de una nueva utopía científica.

La decisión de Noyes, aunque complicada, fue oportuna. Había estudiado detenidamente su situación en el MIT y la de su disciplina. El *Research Laboratory of Physical Chemistry* nunca volvería a ser el mismo que había sido con Lewis, Bray, Tolman y Krauss, y en California se presentaba la oportunidad de construir una gran fundación. Noyes supo hacer buen uso de esta posibilidad, hasta el punto que la nueva escuela de investigación formó tan importantes químico-físicos durante las décadas de 1.920 y 1.930, como el *Research Laboratory of Physical Chemistry* lo había hecho durante las décadas de 1.900 y 1.910. El campo de la estructura molecular, reconocido con indecisión por el MIT, fue abordado con tal fuerza, que la transformación producida en química-física llevó a algunos científicos a pedir que se rebautizara como física-química.

Es importante entender cómo Noyes llevó a cabo la construcción de su nueva escuela – donde Pauling hizo su doctorado y trabajó durante décadas– y ver cómo esta institución –a partir del uso de nuevos recursos materiales y conceptuales– continuó una trayectoria de trabajo que había comenzado en el MIT¹³⁷, hecho que marcaría definitivamente el posterior desarrollo científico y administrativo de Pauling.

¹³⁷ Es sumamente interesante explorar las circunstancias bajo las cuales Noyes rompió con sus hábitos de vida y decidió trasladarse a California. Sobre todo porque la nueva era de la química-física que se inauguró, ofrecía tanto a Noyes como a otros químico-físicos nuevas oportunidades y ventajas, aunque no exentas de riesgos. Mientras el éxito de Noyes en la construcción de la escuela de investigación refleja la parte positiva, esperanzadora, los acontecimientos que se estaban produciendo en su departamento del MIT reflejan muchos de los riesgos. Sin

B. Arthur Noyes, construcción de una utopía llamada Caltech

Cuando Noyes llegó a Pasadena ya conocía, gracias a su paso por el MIT, muchos de los problemas y dificultades que se presentan cuando se emprende un proyecto como el que tenía entre manos: formar una nueva plantilla de profesores, atraer a estudiantes graduados y estimular la investigación. Aunque muchos de los amigos de Noyes se mostraron muy escépticos respecto a su nueva empresa, lo cierto es que el químico contaba con grandes ventajas; ya no era un joven inexperto, sino un científico maduro, contaba con una extraordinaria experiencia; pero sobre todo, su verdadero as bajo la manga, fue la concesión de una donación de \$200.000 –gracias a Hale– para la construcción de su nuevo laboratorio. La tercera, e importantísima ventaja con la que contó fue la cercana relación que cultivó con las fundaciones filantrópicas del Este del país. Noyes estaba seguro del firme apoyo del consejo administrativo del *Throop Institute*. Hale y James A. B. Scherer –presidente de *Throop Institute*– le garantizaron una total libertad para modelar tanto el programa de química como el currículo universitario. Arthur Fleming, un viejo magnate y director de la mesa administrativa del *Throop Institute*, fue quien finalmente le otorgó el fondo de \$200.000 para la investigación química.

Noyes puso todas sus energías en la construcción de la escuela. Su política fue en gran parte, producto de un análisis de los defectos del MIT que tan bien conocía. Para Noyes, el MIT había crecido en exceso, había sacrificado la excelencia por el número, y los ingenieros habían acaparado excesivo poder. La institución comprometía su futuro contratando estos nuevos ingenieros-gestores y dando facilidades a las compañías privadas. El excesivo trabajo escolar y su mal pago, hicieron que los científicos descuidaran la parte educativa y que la investigación se volviera algo donde primaban más los intereses personales que las preocupaciones de la comunidad. Esta experiencia llevó a Noyes a utilizar sus importantes influencias para intentar evitar que en Pasadena ocurriera lo mismo. Para él, el *Throop Institute* debía permanecer pequeño y sus ingenieros debían subordinarse a los científicos. De esa manera se podía reflejar la verdadera relación intelectual que, según Noyes, debía darse entre la tecnología y la ciencia. Otra de las condiciones de Noyes era que los científicos del nuevo instituto no pudieran

embargo, vamos a dejar este interesante análisis para otro momento, y nos centramos en su trabajo en el Caltech, clave para la formación y obra de Linus Pauling.

desdoblarse y convertirse además en consultores industriales. El Instituto, desde el punto de vista de Noyes, debía centrarse en hacer bien pequeñas cosas. Grandes salarios y generosos apoyos para la investigación podrían atraer a destacados profesores; generosas becas podían atraer a capaces estudiantes graduados. Si la reputación del *Throops* crecía, las solicitudes seguramente se incrementarían y con ello la posibilidad de hacer una gran selección durante las admisiones. En muchos sentidos, la propuesta parecía ser excelente: “apostar por el liderazgo científico y no tanto por la masificación educativa”. El *Throops* debía convertirse en lo que el MIT nunca llegó a ser: una gran versión de la utopía científica que el mismo Noyes tuvo cuando era joven y que había sido realizada a pequeña escala durante su dirección en el *Research Laboratory of Physical Chemistry*. Durante el resto de su vida, Noyes dedicó gran parte de sus energías a esta misión.

Gracias a su sugerencia, el *Throop Institute* adoptó en 1.920 un nuevo nombre mucho más apropiado a sus ambiciones: el *California Institute of Technology* (Caltech). También a partir de una sugerencia suya, comenzó un nuevo programa de becas con el que fue posible llamar la atención, atraer a importantes estudiantes. Juntos, Noyes y Hale seleccionaron y reclutaron el nuevo equipo docente del Caltech, hecho sumamente importante para obtener éxito en la nueva empresa proyectada. La estrategia que siguieron para conseguir su fin, fue exactamente la misma que Hale había utilizado con Noyes: la promesa de un laboratorio y completa libertad para investigar. Altos sueldos y la confirmación por parte de la institución de un interés centrado en la ciencia y en el alumno –proyección de los intereses del mismo Noyes–, completaban la oferta.

Sin embargo, Millikan, Hale y Noyes tenían que enfrentar grandes problemas para la obtención de recursos. A pesar de ello, supieron llevar a cabo perfectamente su trabajo. Los tres científicos estaban convencidos de la fuerza que tenía la ciencia básica y de los enlaces directos que mantenía con la tecnología, razón por la cual no tuvieron muchos problemas para hacer ver a algunos hombres de negocios, que la ciencia básica era un camino seguro para la solución de problemas prácticos urgentes. Incluso, cuando se encontraron ante audiencias excesivamente obtusas como para entender que el camino más corto entre dos puntos no es siempre la línea recta, acertaron a valerse del exacerbado orgullo regional, “tan intenso en los Ángeles como la

luz del Sol”¹³⁸. Millikan se mostró como un maestro consumado al hacer mostrar a sus oyentes que a través de la ciencia básica y las fundaciones científicas no sólo se podría hacer más grande a los EEUU, sino que además se constataba la superioridad de la civilización occidental. Gracias a este tipo de ardidés, fue posible la obtención de grandes fondos, tanto públicos como de fundaciones privadas¹³⁹. Sin embargo, estas concesiones no fueron del todo gratuitas, ya que obligaban de alguna manera a que los tres científicos se pusieran de acuerdo en torno a cuál sería el objeto principal de estudio. Finalmente, acordaron, todas las investigaciones tendrían en común la búsqueda de la constitución de la materia. Millikan resolvió concentrarse en la estructura del átomo y en los procesos de transformación nuclear. Tenía la esperanza de poder usar técnicas espectroscópicas para probar el modelo de Bohr de la estructura electrónica de los átomos y la liberación de energía eléctrica de la desintegración del núcleo. Asimismo, tenía el propósito de estudiar la radiación penetrante que él más tarde bautizó como “rayos cósmicos”; una radiación que, esperaba, podría revelar cómo los grandes átomos estaban contruidos a partir de pequeños, un proceso complementario a la desintegración nuclear de descomposición radioactiva. Por su parte, Noyes propuso centrar la investigación de su laboratorio en la estructura de las moléculas y en la valencia electrónica, que parecía ser la responsable de las propiedades químicas. Para ello planeó utilizar los rayos X con el fin de estudiar la estructura de sustancias cristalinas y explorar los efectos del calor y otras formas de radiación sobre las reacciones químicas. El equipo de Hale en lo alto del *Mount Wilson*, diseñado para el estudio de *cosmic crucibles* del *basto laboratorio de la naturaleza*, podría aportar a los físicos y químicos del *Caltech*, la información obtenida de los estudios llevados a cabo sobre la materia a temperaturas y presiones inalcanzables en la tierra.

Impresionados por las credenciales de los tres científicos, los recursos humanos que habían movlizado, y el alcance de sus planes; las ayudas, becas y donaciones se multiplicaron. De ese modo, el *Caltech* pudo triunfar ahí donde el MIT había fallado; sus fundadores habían encontrado un camino seguro para la obtención de los fondos requeridos en la construcción de una institución científica y tecnológica, sin hipotecar sus laboratorios.

¹³⁸ Frase popular.

¹³⁹ Aunque un estudio más exhaustivo del contexto de financiación, político y sociológico que rodeó la investigación científica en el *Caltech*, y en toda la zona californiana durante las primeras décadas del siglo XX, podría ser de sumo interés, la perspectiva y orientación del estudio que se está llevando a cabo no lo requiere.

Aunque la distinción tradicional de disciplinas se preservó en la organización del Caltech –estaban separadas las divisiones, los laboratorios y los presupuestos para los físicos y los químicos–, Hale, Noyes y Millikan no creyeron oportuno que la división administrativa y educativa tuviera que modelar la vida intelectual del Instituto, lo cual encajaba perfectamente con la actitud personal y científica que encontramos a lo largo de toda la vida de Linus Pauling. El convencimiento que de antemano mostraron los tres sobre la importancia del trabajo en las fronteras interdisciplinarias, se había visto constatado por la eficacia que durante la Primera Guerra Mundial mostró la colaboración e investigación multidisciplinar. La cooperación era más que un eslogan en el Caltech; sus líderes científicos entendieron que la naturaleza no sigue las categorías hechas por el hombre.

C. La química en el Caltech

A pesar de su interés en la Institución como un todo, Noyes no olvidó su compromiso con la química. En el *Gates Chemical Laboratory*¹⁴⁰ practicó la política que él mismo había predicado ante el *Executive Council*: poner énfasis tanto en la investigación, como en la educación de los no graduados y en la de los graduados; haciendo más hincapié en la ciencia básica que en la aplicada; y en la persecución de la excelencia en unas pequeñas áreas en vez de ser simplemente competente en muchas. Con ese claro deseo, cuando Noyes llegó a Pasadena, centró sus esfuerzos en conseguir la excelencia en el terreno de la química-física. Se trataba del campo que Noyes dominaba mejor y el que consideraba el tronco principal sobre el cual otras ramas de la química debían basarse. A pesar de ello, el tipo de desarrollo que proponía del mismo, debía ser tal que ofreciera las mayores oportunidades posibles, para que coincidiera con los trabajos que Hale y Millikan estaban llevando a cabo.

El éxito de Noyes fue el fruto del extraordinario del grupo de profesores que reunió y la influencia que sobre todos ellos y la institución misma ejerció. Pero al hablar de su influencia hay que ser cautos. El *Gates Laboratory* llegó a tener una envergadura superior al *Research Laboratory of Physical Chemistry*, por lo que poco a poco la influencia personal de Noyes fue

¹⁴⁰ Más tarde llamado *C. W. and P. G. Gates*.

inevitablemente diluyéndose. Más importante que el tamaño de la institución, fue el hecho de que el mismo Noyes ya no se encontraba puesto al día en la investigación de la química-física. Hacía ya mucho tiempo que su interés se centraba en cuestiones teóricas, especialmente aquellas relacionadas con soluciones. No realizaba ningún trabajo experimental y no estaba preparado para seguir a los jóvenes científicos que, a inicios de la década de 1.920, estaban abriendo nuevos caminos en la investigación. Consciente de ello, supo ver que su nuevo laboratorio necesitaba un químico con inclinación teórica y que, al igual que Lewis había hecho en el MIT, pudiera mantener contacto con el mundo de la física teórica. Noyes encontró a ese hombre en 1.921: su viejo amigo Richard Chace Tolman, quien durante la década de 1.920, se convirtió en la principal “bestia de carga” en la enseñanza postgradual del departamento.

Tolman fue el último nombramiento que Noyes hizo de entre quienes habían formado parte de su círculo de confianza de químico-físicos del MIT. A partir de ese momento, comenzó a hacer sus designaciones dentro del cada vez más nutrido cuerpo de estudiantes graduados. Entre éstos, ingresaron en la plantilla de profesores Richard M. Badger, Linus Pauling y Don Yost, tras doctorarse en 1.924, 1.925 y 1.926 respectivamente. Elegidos personalmente por Noyes durante el tiempo que permanecieron en la institución como estudiantes graduados, se les dio unas bases educativas en física, química y matemáticas, disfrutando asimismo de una beca postgradual. Y es que, tal y cómo había hecho en el MIT, Noyes creó puestos de investigadores para quienes estaban destinados a obtener su doctorado en breve en la institución. Badger sacó provecho durante cinco años de esa beca, antes de recibir su grado; Yost y Pauling disfrutaron de igual privilegio por tres años. De esta manera se intentaba asegurar que jóvenes científicos tuvieran el tiempo y la oportunidad de desarrollar toda su potencialidad. Del mismo modo que ocurría en la mayoría de las grandes universidades estadounidenses, aquellos alumnos que mostraron señales de inusual originalidad, fueron tratados en el *Gates Laboratory* con paciencia y excepcional generosidad.

Como ya hemos comentado anteriormente, aunque el *Gates Laboratory* del Caltech era mucho más grande de lo que había sido el *Research Laboratory of Physical Chemistry* del MIT bajo la dirección de Noyes, y aunque en cierto modo su influencia pudo diluirse algo, esta se tradujo en la capacidad del científico para darle continuidad a su estilo de gestión. Igualmente, Noyes pudo implantar –aunque ciertamente con gran esfuerzo– una continuidad en la

investigación. El estudio del comportamiento de las soluciones, así como de otras investigaciones en las que había estado trabajando desde la década de 1.890 en el MIT, fue continuado en el Caltech. Ejemplo de ello fue la contratación de Dickinson y del ya mencionado Richard Tolman –a la postre importantes mentores de Pauling–, ambos graduados en el MIT, para formar parte del profesorado del Caltech. El primero gracias a su profundo conocimiento de los cristales y sus estructuras; el segundo, merced a su acentuada comprensión de la mecánica estadística, y su capacidad para introducirle en el mundo de la relatividad y de la mecánica cuántica¹⁴¹.

A pesar de los intentos de Noyes, durante aquellos primeros años la física gozó de un mayor reconocimiento y un número más alto de atractivos que la química. La visita a sus seminarios de figuras como Ehrenfest, Sommerfeld y Longevin, entre otros, lo atestiguan. Asimismo lo hace el hecho de que los cursos de graduados a los que Pauling acudía fueron, exceptuando el de termodinámica de Noyes, cursos de física. Sin embargo, todo empezó a cambiar –si atendemos al contexto en el que se movía Pauling– cuando éste comenzó a trabajar en el laboratorio bajo la supervisión de Dickinson, en la estructura del mineral molibdenita (disulfuro de molibdeno Mo S_2). Como fruto de este trabajo, en 1.923 apareció su primer artículo científico publicado. En el mismo se mostraba que el metal molibdeno estaba rodeado por seis átomos de azufre, y no por ocho –tal y como se creía– en una estructura de prisma trigonal. Pero lo más importante de su investigación eran los datos arrojados por los cálculos de los radios atómicos del molibdeno y el azufre, ya que éstos no concordaban con los que Bragg había publicado en 1.920. La consecuencia más importante fue que, con el fin de explicar estas discrepancias, Pauling llevó a cabo un exhaustivo estudio de las distancias interatómicas que incluyó en su tesis doctoral. Asimismo, durante los siguientes diez años estudió cerca de 70 minerales, completando la determinación estructural de treinta de ellos. Si bien no es éste el momento de profundizar en los trabajos de Pauling y sus discrepancias con Bragg¹⁴², es importante hacer una breve mención a los mismos, ya que nos permiten hacernos una idea de la importancia que la cristalografía y la mecánica cuántica tuvieron no sólo en el trabajo y obra de Linus Pauling –que es lo que más nos interesa–, sino también en la constitución de ésta técnica

¹⁴¹ Esta capacidad de Tolman para atraer la atención de Pauling hacia la mecánica cuántica fue tal, que Pauling estuvo a punto de pasarse durante ese tiempo a la Física.

¹⁴² Tendremos la oportunidad de hacerlo en el Módulo II.

–la cristalografía– como la línea más importante de trabajo que se desarrolló en el Caltech. Recordemos que la gran mayoría de las publicaciones que salieron del *Gates Laboratory* desde los inicios de la década de 1.920 hasta pasada la mitad del siglo XX, eran estudios sobre la estructura de los cristales. Durante tres décadas, el Caltech fue reconocido como el centro estadounidense más importante en el estudio cristalográfico. De hecho, durante un periodo de tiempo bastante significativo, fue el único centro importante de EEUU donde se llevaron a cabo estos estudios.

Debido a la extraordinaria importancia de la cristalografía, tanto para el desarrollo de la química como del Caltech, pero sobre todo para el trabajo y obra de Linus Pauling, se hace necesario dedicar un pequeño capítulo a la misma. Por ello, vamos a destinar las próximas páginas a describir aquellas notas más importantes de los orígenes y desarrollo de la cristalografía, para volver posteriormente al Caltech, y señalar cómo esta técnica se desarrolló en la institución californiana. Y es que, cuando Pauling llegó al Caltech en 1.922, la cristalografía era ya una de las áreas más importantes y avanzadas. Estando aún en el MIT, Noyes había captado la gran importancia que esta técnica tendría para el futuro desarrollo de la química. Por esa razón envió a Roscoe Wilkinson a estudiar a Inglaterra con Braga, las técnicas de cristalografía con rayos-x.

1.3.1.3. La cristalografía

La cristalografía –Κρύσταλλος (Krystallos) y γράφο (grafo)¹⁴³– es, en términos de A.K. Boldyrev¹⁴⁴, *la ciencia que se encarga de estudiar la materia cristalina*. A finales del siglo XIX, ya se sabía que la mayoría de las sustancias sólidas que hay sobre la Tierra están formadas por materia cristalina: todas las rocas de las montañas, la arena de las playas, ríos y lagos. La mayoría de los materiales de la corteza terrestre se componen de aglomeraciones de partículas cristalinas; de ahí la importancia que fue adquiriendo poco a poco su estudio y desarrollo. Al

¹⁴³ Etimológicamente *descripción de los cristales*.

¹⁴⁴ A. K Boldyrev (1.930)

hablar del objeto de estudio de esta disciplina, podemos decir –casi al igual que prácticamente de toda otra ciencia– que deben distinguirse tres grupos de problemas o cuestiones de estudio¹⁴⁵:

- Realizar una descripción de los cristales, distinguiéndose el estudio de cada una de las propiedades de la materia cristalina.
- Llevar a cabo una generalización, bajo la formulación de leyes, del conjunto de hechos observados independientemente.
- El análisis de las teorías de toda clase que se han ido formulando con el fin de poder coordinar los hechos observados y las leyes empíricas generadas.

Atendiendo al primero de los objetos de estudio de la cristalografía, la descripción de los cristales, debemos empezar por definirlos. Los cristales han sido descritos como aquellos cuerpos que, en virtud de los procesos íntimos de carácter físicoquímico que han influido en su formación, están limitados por caras planas. La materia de la cuál están formados es la llamada materia cristalina, misma que presenta tres cualidades fundamentales en las que es pertinente reparar:

1. *Homogeneidad*: se manifiesta de tal modo que dos partes cualesquiera, que tengan la misma forma e idéntica orientación en el espacio, son absolutamente iguales en todas sus propiedades.
2. *Anisotropía*: ciertas propiedades son diferentes según la orientación espacial que se considere.
3. *Facultad de tomar caras por sí misma*: un fragmento cualquiera de un cuerpo cristalino, depositado en una solución concentrada del mismo, llega a producir un cristal limitado por caras planas.

¹⁴⁵ Son muchas las obras generales que nos pueden ayudar a profundizar algo más en la cristalografía. Se puede recomendar, a parte de las utilizadas para en la preparación de este trabajo, Amorós, José Luis (1.978), *La gran aventura del cristal: naturaleza y evolución de la ciencia de cristales*, Madrid, Edit. de la Universidad Complutense; Asensio Amor, Isidoro (1.953), *Cristalografía*, Barcelona, Mucleo; Ruiz Cruz, María Dolores (2.002), *Cristalografía elemental: (para químicos)*, Málaga, Ágora. Para la elaboración de este capítulo nos hemos basado principalmente en las obras de A. K Boldyrev y Johg, W. F. (1.967).

La cristalografía como disciplina no forma un todo homogéneo, sino que en función de las propiedades de los cristales a las que se atiende, pueden discernirse tal y como indica Boldyrev¹⁴⁶, la cristalografía geométrica, la cristalografía física y la cristalografía química. W.F. de Jong¹⁴⁷, por su parte, distinguió un cuarto tipo de cristalografía: la estructural. Vamos a centrar nuestra atención brevemente en dos de esos tipos, la química y la estructural. Ahora bien, teniendo en cuenta que éstas no pueden desligarse completamente de las otras dos, vamos a definir, aunque ciertamente de una manera muy breve, la cristalografía geométrica. Dedicaremos además, antes de pasar a las dos anteriormente señaladas, unas líneas a la física.

La *cristalografía geométrica* se ocupa de la descripción, cálculo, proyección y dibujo de la forma externa de los cristales que se han desarrollado libremente. Estas formas son poliedros convexos con caras planas y aristas rectas. Este tipo de cristalografía está condicionado por las leyes de Stenon, de Haüy (la ley más importante, fundamental) y la ley de simetría.

Por su parte, *la cristalografía física* es mucho más compleja. Según Boldyrev¹⁴⁸, habría que considerar tantos capítulos dentro de este tipo de cristalografía, como partes tiene la física; si bien es cierto que no todas éstas tendrían la misma importancia. Las propiedades físicas de los cristales están en estrecha relación con su simetría, pero no se determinan solamente por la forma geométrica, sino por el conjunto de todas las propiedades del cristal. Para el conocimiento profundo de estas relaciones, es necesario hacer un estudio completo de la simetría de los cristales, comprender su cristalografía o cristalografía física. Pasemos por ello ahora, a ver la cristalografía química y la estructural.

Cristalografía Química

Es en el ámbito de la cristalografía química donde se producen las relaciones más estrechas entre el estudio y la descripción de los cristales y la química física. Podemos considerar este contexto como uno de los escenarios científicos más importantes e influyentes en la obra de Pauling, ya que bajo el marco teórico del mismo, se desarrolló gran parte de sus

¹⁴⁶ *O.c.*, p. 4.

¹⁴⁷ Johg, W. F. (1.967), introducción.

¹⁴⁸ Boldyrev, A. K. (1.930), p. 187.

primeros trabajos científicos. Por ello, a lo largo de las próximas páginas vamos a llevar a cabo un breve análisis de la *relación entre la composición química de la materia y la forma cristalina*¹⁴⁹, el cual finalizará con la formulación de la ley cristalográfica de Shubnikov.




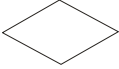

La constatación y teorización de la relación existente entre la composición química de la materia y su forma cristalina, era algo en lo que desde décadas atrás se venía trabajando. Sin embargo no fue hasta 1.921¹⁵⁰, cuando Groth dictó una ley desde la cual era posible fundamentar gran parte de los trabajos de investigación que se estaban llevando a cabo. Esta ley –de Groth– puede formularse así: *Cuanto más sencilla es la composición química de una sustancia, tanto más elevada será su simetría*. A partir de esta idea, lo primero que debía hacerse era indagar acerca de las sustancias más sencillas, atendiendo a su composición; los elementos químicos. Cada uno de ellos cristaliza según una determinada simonía y poseen una determinada estructura.

¹⁴⁹ De sumo interés puede ser también la enumeración de los distintos métodos que permiten la determinación de la composición química de la materia. Lo importante, por ahora, no sería tanto entrar en cada uno de estos métodos, sino el constatar cómo la cristalografía se convirtió en un excelente aliado de los químicos –no sólo para determinar la estructura de los cristales, tal y como constataremos próximamente– a la hora de determinar la composición química de los mismos. Sin embargo, con el fin de no romper el hilo argumental que estamos siguiendo, hemos creído que era más pertinente llevar a cabo esa exposición, aunque sea de forma muy esquemática, en la presente nota. Aclaramos que esta enumeración ha sido extraída de la obra de A. K Boldyrev (1.930), p. 415, recomendamos la consulta del cap. XIX de este texto para adentrarse en cada uno de los métodos.

Según Boldyrev, hay 4 tipos de métodos de diagnosis de la materia fundados en la Cristalografía:

- *El primer tipo fue el constituido por los métodos cristalomorfológicos; el análisis cristalográfico de Federov; diagnosis cristalográfica.*
- *El segundo tipo estaba formado por los métodos llamanos cristalópticos. Dentro del mismo encontramos el método teodolítico de Federov; el método conoscópico; el método de inmersión.*
- *El tercer tipo lo conformaban los métodos Röntgenométricos; los métodos basados en la comparación de los röntgenogramas de una sustancia conocida con los de la sustancia que se investiga; análisis de los espectros de rayos Röntgen obtenidos experimentalmente de la sustancia investigada al utilizarla como anticátodo.*
- El cuarto y último tipo de método es el compuesto por los análisis microquímicos (cristaloquímicos).

¹⁵⁰ Es importante fijarse bien en la fecha, pues fue precisamente durante aquellos años –cuando Pauling tomaba los últimos cursos de su ingeniería– el momento en el que su inclinación hacia las ideas y las teorías, empezaba a hacerse patente. La interrogación por el modo en el que los átomos se unen para formar moléculas y el modo de determinar la estructura de cristales, se alojaron definitivamente en su cabeza.

<u>Singonía</u>	<u>Estructuras</u>
	Cúbica..... <i>o</i> , octaédrica (cubos centrados) <i>d</i> , dodecaédrica (cubos de caras centradas) <i>a</i> , estructura del diamante
	Hexagonal..... <i>n</i> , estructura hexagonal compacta <i>p</i> , estructura hexagonal romboédrica <i>i</i> , estructura hexagonal del grafito
	Tetragonal
	Rómbica
	Monoclínica

Los trabajos llevados a cabo habían constatado que los cuerpos más sencillos, por su composición química, suelen cristalizar en las dos singonías más elevadas. Sin embargo, hay una serie de compuestos sencillos que cristalizan en la singonía hexagonal. Del mismo modo, hay compuestos de varios elementos –complejos químicos– con singonías hexagonal y cúbica. La determinación de la singonía y la estructura cristalina de los elementos químicos, fue clave para el posterior desarrollo de la química y la cristalografía, ya que los trabajos llevados a cabo pusieron de manifiesto la estrecha dependencia existente entre la estructura química y la cristalina.

El punto de partida para el estudio de la relación existente entre una estructura y otra es la constatación, tras las investigaciones röntgenográficas, de que los elementos constitutivos de

la estructura de los cristales son los átomos. A partir de ahí, A. V. Shubnikov descubrió que entre la simetría de una sustancia cristalina y su fórmula química, había una conexión determinada. Ésta se conoce como ley cristalográfica de Shubnikov¹⁵¹, y dice así:

Si nosotros representamos por $A_a B_b C_c \dots Q_q$ la fórmula química de cualquier sustancia cristalina de composición constante, de modo que los átomos que son idénticos en su estructura, y, por consiguiente, juegan el mismo papel químico, sean representados por la misma letra, mientras que los átomos que juegan un papel diferente (aunque pertenezcan al mismo elemento) se representan con letras distintas, la relación entre los números $a, b, c \dots q$ de los distintos átomos de la fórmula no puede ser arbitraria. Los valores posibles de estos números se determinan por la *ley de simetría cristalográfica*¹⁵² y son una consecuencia de ella.¹⁵³

De dicha ley se deducen dos consecuencias de suma importancia. La primera de ellas es que, al representar los subíndices $a, b, c \dots q$ –en la fórmula química $A_a B_b C_c \dots Q_q$ – los átomos geoméricamente iguales dentro del sistema, tan sólo podrán cristalizar aquellos compuestos químicos que tengan una composición constante. La segunda consecuencia es que, a la hora de hacerlo –a la hora de precipitar–, sólo podrán alcanzar uno (o varios) de los tipos estereocristalinos. Como podemos vislumbrar, esta ley fue de suma importancia al restringir tanto las sustancias que podían ser estudiadas como las posibles estructuras geométricas a adquirir.

Cristalografía Estructural

Habíamos adelantado ya que la cristalografía tiene como fin la descripción y determinación de la geometría de la estructura interna de los cristales. El cimiento sobre el que se levanta es la *teoría estructural*. Sin embargo, antes de definir ésta y algunas de las implicaciones más importantes de la misma, es pertinente apuntar algunas de las notas históricas más relevantes que hicieron posible su formulación.

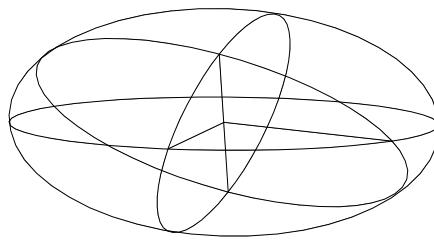
¹⁵¹ A. V. Shubnikov (1.922), “Ley fundamental de Cristalografía”, *Boletín de la Academia de Ciencias de Rusia*, pps. 515-524.

¹⁵² *En los cristales solamente son posibles los ejes de simetría de rotación y reflexión monarios, binarios, ternarios, cuaternarios y senarios* (Cita extraída de A. K Boldyrev (1.930), p. 64).

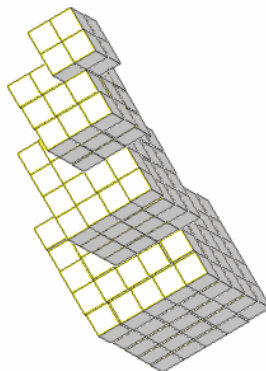
¹⁵³ Cita extraída de A. K Boldyrev (1.930), p. 385-6.

A. Historia

De manera muy esquemática podemos decir que en 1668, Jamitzer publicó algunas consideraciones –que podrían ser consideradas las primeras– sobre la estructura de los cristales. Veinte años más tarde, en 1688, Gygielmini recuperó este problema, llevando a cabo algunos cálculos de interés. Por su parte, en 1690 Huygens consideró que la calcita (CaCO_3) estaba formada por un conjunto de elipsoides de revolución muy pequeños e iguales¹⁵⁴:



Primero Westfeld en 1.767 y posteriormente Gahn y Bergman en 1.773, supusieron que los elementos estructurales que constituyen la calcita son pequeños romboedros de exfoliación. Para ello, Gahn construyó un escalenoedro colocando un conjunto de éstos, úbicados paralelamente unos a otros.

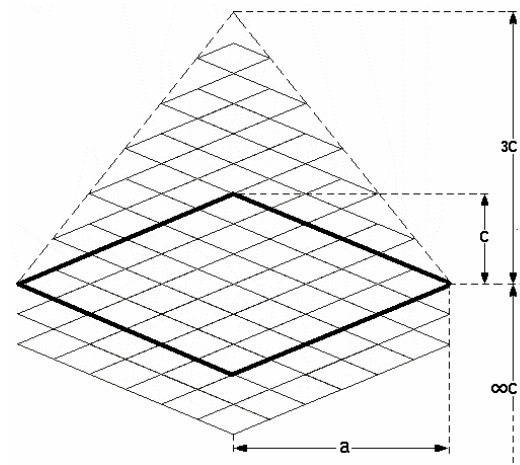


Escalenoedro de calcita construido por pequeños romboedros de exfoliación, dispuestos en un orden paralelepípedo

¹⁵⁴ Los tres próximos gráficos han sido realizados a partir de aquéllos que aparecen en la obra de W. F. de Jong (1.967), pp. 110-1.

Pero no fue hasta 1.783, cuando Haiüy consiguió dar un considerable empuje al desarrolló de esta teoría. Para este científico las pequeñas partículas que integran el cristal dan lugar primero a un núcleo que tiene la forma de un poliedro limitado por los planos de exfoliación (*forma primitiva*). Posteriormente, una serie de capas de partículas puede colocarse alrededor del núcleo, de tal manera que cada nueva capa muestra un decrecimiento regular. De este modo se obtiene una forma diferente (*forma secundaria*). El problema de este tipo de construcción, es que sólo es posible a partir de pequeños paralelepípedos y cristales que tienen tres direcciones de exfoliación no paralelas en la misma dirección.

El núcleo (en línea gruesa) con manto, para mostrar dos tipos de decrecimiento: en un caso la relación axial es 3:1, en otro ∞ :1. En todo crecimiento regular, puede medirse la razón.



Haiüy consideró que había 14 clases de núcleos y aunque este número fue reiteradamente cambiando, sus concepciones pueden considerarse la base de la cristalografía científica, ya que constituyeron el origen de numerosos trabajos posteriores. Ejemplo de ello fueron los trabajos de Bernhardt, quien en 1.807 defendió la existencia de tan sólo 6 clases de núcleos. En 1.813, Wollaston dio un giro a la teoría al señalar que las partículas elementales debían ser consideradas esféricas y muy pequeñas; y en 1.824, Seeber señaló que sólo debían tenerse en cuenta los centros de gravedad de las partículas. Estos centros –según Seeber– estaban ordenados de un modo regular en el cristal formado –denominado posteriormente retículo– debido a la extraordinaria importancia que cobrarían desde entonces, veamos las características de un retículo:

- Disposición regular a formar paralelepípedos
- Orientación paralela de todas las partículas
- Homogeneidad: cada una está igualmente rodeada por partículas igualmente orientadas.

A partir de la disposición y simetría, Frankenheim encontró en 1.835 que eran posibles, teóricamente, 15 retículos diferentes; y en 1.848, Bravais señaló que había 5 clases de retículos bidimensionales y 14 tridimensionales. Sin embargo Sohnke, en 1.879, advirtió que las partículas equivalentes no tienen necesariamente que estar todas igualmente orientadas en el interior del cristal. Debido a que el giro de unas con respecto a las otras daba lugar a partículas equivalentes, se vio que era posible distinguir 65 disposiciones distintas, según su microsimetría. Este número fue cambiando paulatinamente, al hacerse patente que podían obtenerse nuevamente partículas equivalentes, a partir de operaciones de reflexión, llegándose así a los 250 casos (Fedorov, 1.885; Schoenflies, 1.889; Barlow, 1.894)¹⁵⁵.

B. La teoría estructural

La teoría estructural tiene su base en una hipótesis según la cual, *cuando la cristalización se produce sin perturbaciones, todas las partículas iguales (átomos, iones o moléculas) crean a su alrededor un entorno equivalente*. Esta sencilla definición debe ser desarrollada a partir del análisis de dos conceptos fundamentales: *estructura* y *entorno*.

Por *estructura* debemos entender *la totalidad de los sistemas de puntos, cada uno de los cuales está formado por una clase de átomos*¹⁵⁶. Los dos requisitos que definen una estructura son: 1) *que átomos iguales deben tener entornos iguales*, y 2) *que un número virtualmente infinito de individuos de cada clase de átomos, puede formar un cristal tridimensional sólo si posee la simetría de uno de los 230 grupos espaciales*.

¹⁵⁵ Se recomienda A. E. H. Tutton (1.922), *Crystallography and Practical Crystal Measurement*, p. 565, donde encontramos los principios de derivación de estos casos. Asimismo se recomienda la revisión de esta obra para saber por qué a lo largo de este trabajo, siguiendo la línea de las demás obras consultadas, se hace referencia tan sólo a 230 casos, en vez de los 250 aquí señalados.

¹⁵⁶ W. F. de Jong (1.967), p. 124.

Tal y como señala Jong, nos puede ayudar a aprehender mejor el concepto de estructura y sus implicaciones, la definición de cristal que Groth había dado en 1.904: “Los átomos de un cristal forman una estructura de acuerdo con la simetría de un grupo espacial. Cada clase de átomos forma un sistema de puntos, y cada uno de estos sistema de puntos puede ser descrito como formado por uno o más retículos. Todos los retículos son congruentes y se interpenetran conservando una orientación paralela”¹⁵⁷.

Por su parte, *entorno* se refiere a la totalidad de puntos y distancias que rodean al átomo, siendo esta totalidad virtual y triplemente infinita¹⁵⁸. Dos entornos, o dos cuerpos, son iguales cuando todos los átomos y las distancias entre ellos, son equivalentes en ambos. Sin embargo, cuando átomos iguales poseen dos o más clases de entornos diferentes dentro de un mismo cristal, se dice que éstos son iguales químicamente, pero no equivalentes desde el punto de vista cristalográfico. La igualdad de entornos y las repeticiones en el mundo atómico, se manifiestan microscópicamente por la regularidad de las propiedades físicas del cristal y la simetría. La importancia de la simetría atómica de un cristal –su estructura–, llegó a convertirse en el principal objeto de estudio de la cristalografía estructural. Para dar cuenta de ello podemos acudir a Boldyrev¹⁵⁹, quien subrayó la importancia que juega no solamente en el análisis de la forma externa de los cristales, sino también en el de su estructura íntima. Por ello, el estudio de la simetría fue aplicado tanto por los cristalógrafos (Bravais, Gadolin, Fedorov), como por los matemáticos y físicos (Sohncke, Schoenflies). Su importancia es tal –indica el autor ruso–, que llegó a convertirse por sí misma en la parte más importante de la cristalografía, razón por la cual debemos ser cautos y prudentes, no tomando este concepto a la ligera y señalando, antes de continuar, que a la hora de hablar de la simetría tenemos presente tres definiciones fundamentales¹⁶⁰:

¹⁵⁷ Cita extraída de W. F. de Jong (1.967), p. 124.

¹⁵⁸ Líneas más adelante tendremos la oportunidad de hacer más referencias a esta triple infinitud de las estructuras cristalinas.

¹⁵⁹ Si bien este autor da fe de la importancia de la simetría en el capítulo dedicado a la cristalografía geométrica – recordemos que él no distingue la estructural–, los términos en los que lo lleva a cabo nos sirve igualmente para nuestro propósito.

¹⁶⁰ Dada la extraordinaria sencillez y acierto en la que el autor da cuenta de estas definiciones, nos permitimos reproducirlas tal y como aparecen en Boldyrev, A. K. (1.930), p. 9-10.

1. Dos sistemas de puntos se llaman *mutuamente simétricos*, si la distancia, entre dos puntos cualesquiera de un sistema, es igual a la que existe entre los dos puntos correspondientes de aquéllos en el otro sistema.
2. *Operaciones de simetría*. Se llama así a las que permiten que un sistema dado tome una nueva posición, simétrica a la que ocupaba.
3. *Sistema simétrico a sí mismo*. Se llama así el sistema en que al producirse una operación de simetría, el sistema resultante ocupa el mismo lugar del espacio que en un principio. Únicamente sus puntos, líneas y superficies son los que han variado de posición, permutándose entre sí, ocupando unos el lugar de los otros.

De esta teoría –la estructural– se deduce, como ya se había apuntado anteriormente, que la estructura de un cristal, es tridimensionalmente infinita¹⁶¹. Pero, ¿cómo podemos dar cuenta de éstas? No podemos hablar ciertamente de una metodología para la determinación de la estructura de cristales, sino de varias¹⁶². Sin embargo, durante las siguientes páginas vamos a desarrollar exclusivamente el método Bragg. La razón de ello es que es el método que llegó al Caltech y bajo el cual llevó a cabo Linus Pauling su trabajo.

C. El método Bragg

El 8 de noviembre de 1.895, Röntgen encontró en el curso de sus investigaciones de los rayos catódicos, un nuevo tipo de radiación al que llamó rayos X. Se trataba de una radiación sumamente misteriosa, ya que era capaz de atravesar cuerpos sólidos. El 28 de diciembre de ese

¹⁶¹ Debido a la complejidad de este tipo de estudios, es muy común encontrar en los textos de cristalografía un primer acercamiento al análisis de estructuras unidimensionales (simplemente infinitas); después de estructuras bidimensionales (doblemente infinitas), para poder dar el salto finalmente, al estudio de las estructuras cristalinas reales, que son triplemente infinitas. Este tipo de estudios nos permiten eludir la tentación de creer que puede darse algún tipo de desacuerdo entre la teoría –concretamente esta última afirmación– y el punto de vista físico. Sin embargo, no es así. En primer lugar, para la mayoría de los átomos, los límites del cristal se encuentran muy remotos en relación con las distancias interatómicas; en segundo lugar, cuando el cristal crece, sus límites se desplazan y sus propiedades no varían.

¹⁶² Para quienes tengan un mayor interés en conocer las distintas metodologías así, como el análisis de Fourier y el diagrama de Patterson –claves en muchos sentidos en el desarrollo de la cristalografía–, puede consultar prácticamente cualquier manual de cristalografía. No obstante, se recomienda especialmente examinar completa y detenidamente el capítulo II de la obra de W.F. Jong (1.951).

mismo año, presentó la primera de tres comunicaciones que preparó para la *Sociedad Física y Médica de Wurzburg*¹⁶³. Como hemos visto, desde hacía tiempo era conocida y aceptada la idea de que un cristal estaba formado por moléculas o átomos distribuidos a lo largo y ancho de una red espacial. Por ello, este nuevo descubrimiento ponía ante el mundo científico dos nuevas tareas que debían ser resueltas: descubrir la naturaleza de esa nueva radiación –algo que se tardó más de una década en conseguir–, y ver cómo los rayos X podían ayudar en la determinación de la estructura cristalina de los cristales. Este último problema era realmente doble, ya que había que desarrollar un método que permitiera asociar experimentalmente las estructuras cristalinas y distinguir los distintos átomos que constituyen el cristal.

Clave para dar cuenta de ambos problemas, fue el principio matemático desarrollado por Max Laue, a partir del cual era posible relacionar la estructura espacial de los cristales y la longitud de onda de la radiación de Röntgen. En 1.912, Laue junto a sus colaboradores Friedrich y Knipping, había demostrado experimentalmente que los rayos Röntgen son capaces de sufrir los fenómenos de reflexión, refracción, difracción, interferencias,... Asimismo, sus experimentos habían puesto de manifiesto las razones por las cuáles todas las pruebas llevadas a cabo anteriormente, habían fracasado: la longitud de onda de los rayos Röntgen era cerca de 10.000 veces más pequeña que la de los rayos luminosos visibles. Este descubrimiento tenía una doble importancia:

1. Servía para conocer la naturaleza de los rayos Röntgen.
2. Daba la clave para el conocimiento de la estructura de los cristales.

Sin embargo y a pesar de todo ello, el método desarrollado por Laue para la determinación de la estructura de los cristales resultaba poco eficiente. Afortunadamente tan sólo un año más tarde, William Henry Bragg y William Lawrence Bragg –padre e hijo respectivamente– dieron una solución más conveniente a partir de las demostraciones de Laue, llevando a cabo una experiencia que resultó ser clave para el futuro de la cristalografía:

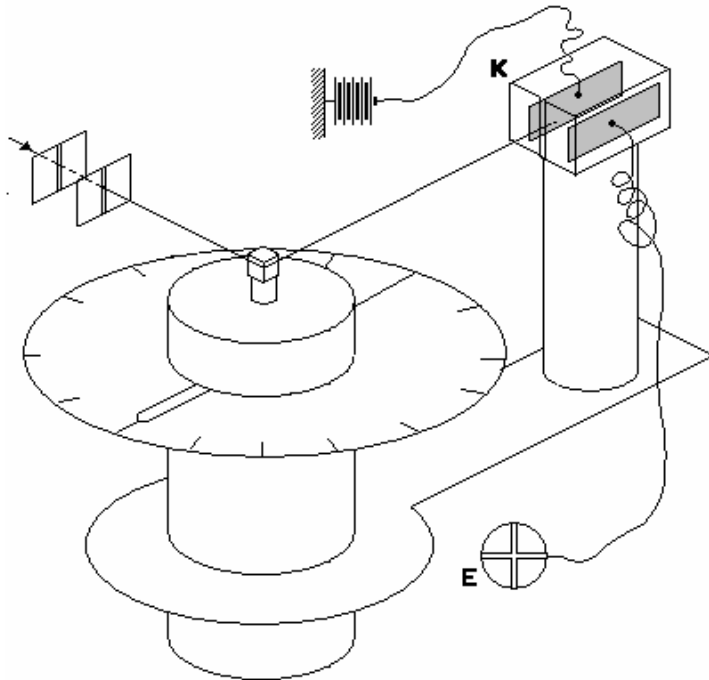
¹⁶³ J. M. Sánchez Ron (2.001), p. 54.

Para examinar de manera más completa el haz de rayos X reflejado, mi padre construyó un espectrómetro de rayos X. En este instrumento se puede colocar una cara del cristal de forma que refleje los rayos X con cualquier ángulo (de hecho es la única lámina de átomos paralela a la cara la que refleja), y se mide la intensidad del haz reflejado con una cámara de ionización. Con este instrumento realizó el siguiente gran descubrimiento. Además de la radiación X «blanca» de todas las longitudes de onda... encontró que cada metal utilizado en el tubo de rayos X como fuente de radiación daba un espectro de rayos X característico de longitudes de ondas definidas, exactamente igual que los elementos dan espectros en la región óptica.

El espectrómetro de rayos X abrió un nuevo mundo. Demostró ser un método para analizar la estructura cristalina mucho más poderoso que las fotografías de Laue que yo había utilizado. Se podían examinar las diversas caras de un cristal sucesivamente, y midiendo los ángulos en que y la intensidad con que esas caras reflejan los rayos X, se puede deducir la forma en que los átomos se encuentran distribuidos en capas paralelas a estas capas. La intersección de estas caras señalaban las posiciones de los átomos en el espacio. Por otro lado, se podía utilizar una cara cristalina adecuada para determinar las longitudes de onda de los rayos X característicos procedentes de los diferentes elementos utilizados como fuentes. Se podía seleccionar un haz «puro» de rayos X monocromáticos.¹⁶⁴

El método Bragg consistía, esencialmente, en registrar y medir los rayos secundarios reflejados en una cámara de ionización. Esta cámara giraba alrededor del mismo eje que el cristal, registrándose generalmente sólo las reflexiones del estrato cero:

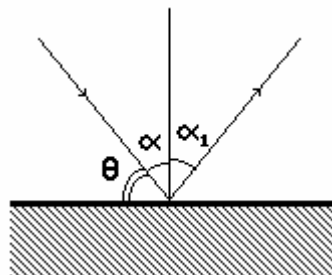
¹⁶⁴ Cita extraída de J. M. Sánchez Ron (2.001), 58.



Espectrómetro de Bragg: la conductividad del gas en la cámara de ionización *K* (provocada por el haz secundario de rayos X) se mide con el electrómetro *E*.

El punto de partida era la obtención de un haz estrecho de rayos Röntgen por medio de orificios practicados en una doble pantalla de plomo *Pb* y la pertinente colocación del cristal sobre el cual fuera posible el reflejo de estos rayos. Por ello, era imprescindible que se cumpliesen todas las condiciones de la reflexión:

1. El rayo incidente y el reflejado deben estar en el mismo plano
2. El ángulo de incidencia α será igual al de reflexión α_1 (los Bragg tomaron para sus cálculos el ángulo complementario θ)



α = ángulo de incidencia; θ = ángulo complementario; $\alpha = 90^\circ - \theta$

Tras la colocación del cristal, se ha de intercalar una *cámara de ionización (K)* en el supuesto trayecto recorrido por el haz reflejado, con el fin de saber si el ángulo es el correcto para que se produzca la reflexión. Si ésta se da, los rayos reflexionados llegan a la cámara de ionización, donde un gas –normalmente SO_2 – se descompone en iones –unos electropositivos y otros electronegativos–, haciéndose conductor de la electricidad. Se produce entonces una corriente en el circuito, manifestado en el galvanómetro *E*. La reflexión se produce sólo bajo ciertos ángulos registrados. A partir de estos datos, de los valores de las tablas trigonométricas naturales, y después de sencillas operaciones aritméticas, se pudo llegar a afirmar que *los senos de todos los ángulos sucesivos según los cuales se produce la reflexión de los rayos Röntgen en una misma cara de un cristal, son iguales al seno del ángulo más pequeño que produce reflexión, multiplicado correlativamente por la serie consecutiva de los números enteros*¹⁶⁵. Aunque esta ley empírica fue deducida primeramente por Vulf a partir de las experiencias de Laue, su fundamento teórico se puede deducir de varios modos, siendo el más sencillo y elegante, el dado por Bragg.

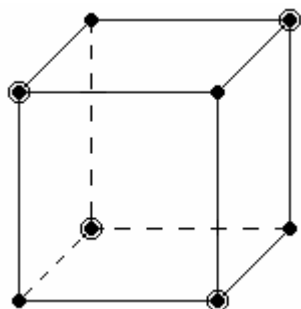
Los Bragg supusieron que las placas cristalinas se componían de una serie de planos reticulares, siendo posible la determinación experimental de la distancia entre estos planos (*d*). Para ello, sólo era necesario tener presente la teoría acerca de la estructura de los cristales y la fórmula de Bragg-Vulf: $\Delta = n \lambda = 2 d \sin \theta$ (ecuación con dos incógnitas λ y *d*).

Respecto a la estructura de los cristales, tras una serie de experiencias y razonamientos teóricos, los Bragg dedujeron que *en los cristales, en los nudos de un conjunto reticular o sistema regular de puntos se disponen no las moléculas químicas, sino los átomos separados*¹⁶⁶. En la siguiente figura se representa la estructura según Bragg del ClNa ¹⁶⁷.

¹⁶⁵ Cita extraída de A. K Boldyrev (1.930), p. 230.

¹⁶⁶ *O.c.*, p. 236.

¹⁶⁷ Las implicaciones de este sencillo caso son grandes, ya que de la misma se puede deducir que la noción de molécula química queda restringida a la materia cristalina. Como consecuencia de ello, se estableció una categórica separación entre la Cristalografía röntgenográfica y la Química clásica. La mayoría de los químicos apostaban por la existencia de moléculas en los cuerpos –tanto en los cuerpos sólidos, gaseosos o líquidos–, afirmando que están compuestos por un conjunto de moléculas individualizadas unas de otras.



Estructura del ClNa según Bragg:



Una vez descifrada de manera experimental la estructura del cristal y el valor de los ángulos complementarios de reflexión de los rayos Röntgen, era posible determinar las distancias absolutas entre los átomos del cristal (distancia entre sus planos reticulares) a partir de sencillas fórmulas:

En donde:

$$nMm = a^3 \rho$$

$$a = \sqrt[3]{\frac{nMm}{\rho}}$$

n: número de átomos, puede calcularse si conocemos la estructura.

M: peso atómico

m: peso absoluto de un átomo de hidrógeno.

a: arista del cubo; a^3 : su volumen.

ρ : densidad

A partir de estos rayos, se hizo mucho más fácil determinar distancias interatómicas y deducir qué elementos químicos formaban el cristal. En 1.913 los Bragg consiguieron determinar la estructura del diamante, extendiéndose rápidamente la fama del método entre los físicos y los químicos. Pero su contribución no quedó ahí: antes de que estallara la Primera Guerra Mundial, W. L. Bragg había determinado ya la estructura de la CaF_2 (fluorita), la FeS_2 (pirita) y la CaCO_2 (calcita). Podemos considerar que este fue el verdadero inicio de las investigaciones, en la determinación de las estructuras cristalinas mediante los rayos X.

La cristalografía en el Caltech

El prestigio del método Bragg, así como los éxitos obtenidos en la determinación de estructuras cristalinas, llegó hasta los EEUU. Noyes que –como ya indicamos en su momento– había enviado a Roscoe a estudiar esta técnica, fue el responsable original del desarrollo de la

cristalografía en el Caltech. El énfasis que el *Gates Laboratory* puso en la cristalografía, se centró en el uso de los datos que los rayos X podían aportar a la elucidación de las estructuras cristalinas. Los cristalógrafos del Caltech no se hicieron conocidos por sus contribuciones en el desarrollo de la técnica o de los aparatos, sino por la rápida explotación de sus resultados. No inventaron un nuevo tubo de rayos X, les fue suficiente con el uso del tubo de alto poder (*high-powered tube*), desarrollado por William D. Coolidge en la *General Electric*. No concibieron los dos mejores avances en la técnica cristalográfica alcanzados durante las últimas décadas del siglo XIX y las primeras del XX, pero sí fueron rápidos para probar éstos y otros nuevos métodos. Mientras que en otros laboratorios quedaron maravillados con los rayos X y su funcionamiento, encontrándolo tan emocionante como la geometría de los cristales, en el Gates Laboratory fueron acogidos con gran emoción y provecho en su persecución de información estructural.

Inicialmente el objeto de estudio sobre el cual llevaban a cabo sus análisis, eran simples sales inorgánicas, tales como el KCN y compuestos como $(\text{NH}_4)_2 \text{SiF}_6$. El criterio fundamental de elección de los cristales a estudiar, era su simplicidad. Sin embargo, el trabajo de elección fue mucho más duro y complejo de lo que en principio pudiera parecer. Afortunadamente, los resultados obtenidos validaron tanto las elecciones como los trabajos llevados a cabo. Gracias a los éxitos alcanzados fue posible el estudio de cristales cada vez más complejos, hasta llegar a mediados de la década de 1.920, cuando se produjo una pequeña crisis. Cada vez se hacía más evidente que, para poder llevar a cabo un trabajo serio sobre estructuras complejas, ya no era suficiente las reglas, las fórmulas, las herramientas y los métodos utilizados hasta ese momento. Este conflicto se solucionó en 1.929, con la publicación de un nuevo juego de reglas elaborado por el profesor postdoctoral del Caltech, Linus C. Pauling.

¿Cómo consiguió esto Linus Pauling? En primer lugar, recogiendo y resolviendo el problema central en que se encontraba la institución a partir de la confluencia de dos problemas y tradiciones: el problema del enlace químico y la química cuántica; temas que van a desarrollarse en los dos siguiente capítulos¹⁶⁸.

¹⁶⁸ Concretamente la química cuántica será tratada en la siguiente sección: FÍSICA.

1.3.1.4. La naturaleza del enlace químico

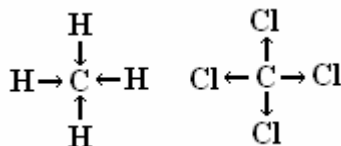
Desde el punto de vista histórico, el conocimiento del enlace químico fue el fruto de la confluencia de dos líneas de investigación: el estudio de las propiedades de las sustancias; y el desarrollo de teorías de unión de los átomos, basadas en la estructura atómica. Pero decisivos fueron también los datos aportados por el estudio de la naturaleza eléctrica de las fuerzas químicas a comienzos del siglo XIX. En 1.800, el inglés William Nicholson (1.753-1.815) descompuso el agua en oxígeno e hidrógeno, haciendo pasar por ella una corriente eléctrica. Poco más tarde, en 1.807, Humphry Davy (1.778-1.829) sugirió que las fuerzas que rigen las uniones químicas son de naturaleza eléctrica. De esta manera surgió la teoría electrovalente desarrollada por Berzelius, para quien las uniones químicas son el resultado de la atracción eléctrica entre partículas de carga opuesta. Con esta teoría era posible explicar el enlace entre un elemento metálico y otro no metálico. Sin embargo, no era posible explicar el enlace que se producía entre dos no metales o entre un elemento consigo mismo. Por ello, con una base exclusivamente experimental, se consideró que cada no metal tenía cierto número de enlaces potenciales que podían utilizar total o parcialmente. Es como si los átomos tuviesen un cierto número de ganchos con los que forman los enlaces, al unirse a los ganchos de otros átomos. Así, la capacidad de combinación de un elemento viene dada por el número de ganchos que posee.

Fundamental fue el descubrimiento de J. J. Thomson en 1.897 del *electrón*, partícula con carga negativa constituyente de todos los átomos. En 1.900, Lewis quedó profundamente influido por la lectura del texto de Werner *Neuere Anschauungen*. Aunque en dicho trabajo se ignoraba la naturaleza polar de muchos enlaces, lo verdaderamente importante del mismo, respecto a su influencia en el pensamiento de Lewis, era la demostración llevada a cabo por Werner de la existencia de enlaces no polares. Lewis desarrolló esta idea en 1.902, garabateando en el reverso de un sobre una serie de “átomos cúbicos” donde los lados contiguos compartían, en lugar de intercambiar, electrones externos a lo largo de la arista común. Este modelo cúbico estaba inspirado, más que en consideraciones cristalográficas, en la estabilidad mostrada por los gases nobles, lo cual parecía deberse a la presencia de ocho electrones en la esfera más externa del modelo del átomo de Thomson¹⁶⁹.

¹⁶⁹ Conocido como Pudín de Ciruelas.

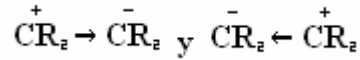
En 1.904, Thomson desarrolló la primera teoría de la valencia a partir de la reconstrucción del esquema electroquímico de Berzelius, teniendo en cuenta la teoría electromagnética de Maxwell. Fruto de ello, el enlace químico debía ser interpretado como una atracción electrostática: el enlace se forma cuando dos átomos intercambian o se transfieren un electrón o más, de tal manera que el átomo donante adquiere una carga positiva y el receptor una negativa (por electrón transferido). Ello permitió que ese mismo año –1.904– el químico alemán Richard Abegg (1.869-1.910) sugiriera que las uniones entre los átomos tienen lugar mediante los electrones, que las propiedades químicas de los elementos dependen de la disposición de sus electrones, y que éstos sirven como «lazo de unión» entre átomo y átomo. Abegg señaló una característica de la tabla periódica, según la cual, las valencias variables de los átomos parecían sumar siempre ocho. Por ello, proponía que quedaba por ver si se podía atribuir la misma estabilidad a los compuestos en el caso de que compartieran los electrones exteriores, y de ese modo, poder explicar la existencia de gases binarios como el O₂ y el Cl₂. Desafortunadamente, Abegg murió muy joven –con 40 años– en un accidente de globo, por lo que sus ideas tuvieron que ser desarrolladas posteriormente por otros científicos.

En 1.910 K. Geroge Falk –colega de Lewis– y John M. Nelson, de la universidad de Columbia, publicaron el artículo *The electron conception of valence*. Este texto fue de suma importancia, ya que constituyó un importante respaldo a la teoría del enlace por transferencia de electrones de Thomson. Introdujeron asimismo las flechas de los enlaces –para indicar la dirección de la transferencia del electrón–, tal y como Thomson había sugerido en su texto *Corpuscular Theory*:



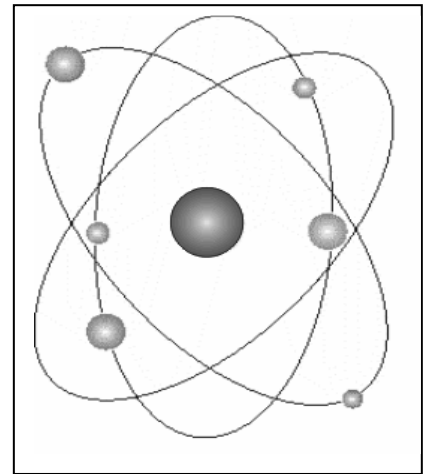
Dedujeron que, allí donde aparentemente se produce un doble enlace, lo que podía existir son dos isómeros electrónicos (“*electrómeros*”)¹⁷⁰:

¹⁷⁰ Aunque a partir de esta teoría no podía explicarse el enlace entre moléculas no ionizadas, la mayoría de la química parecía apoyarla.



En 1.911 Rutherford introdujo el modelo planetario, según el cuál el átomo se divide en un núcleo central que contiene protones y neutrones (y por tanto allí se concentra toda la carga positiva y casi toda la masa del átomo); y una corteza formada por electrones que giran alrededor del núcleo en órbitas circulares, de forma similar a como los planetas giran alrededor del Sol.

Los experimentos de Rutherford demostraron que el núcleo es muy pequeño comparado con el tamaño de todo el átomo: el átomo está prácticamente hueco. Aunque la formulación de este nuevo modelo fue clave para el futuro tanto de la química como de la física, el modelo tenía serias fallas que debían ser corregidas. Lo más urgente era destacar que se contradecía con las leyes del electromagnetismo de Maxwell, las cuales estaban ampliamente comprobadas mediante numerosos datos experimentales¹⁷¹, y no explicaba los espectros atómicos.



Módulo de átomo de Rutherford

Para evitar esto, en 1.913 Niels Böhr desarrolló su modelo atómico a partir de cuatro postulados fundamentales que, si bien no estaban demostrados en principio, sí llevaban a conclusiones que eran coherentes con los datos experimentales¹⁷²:

1. Los electrones orbitan el átomo en niveles discretos y cuantizados de energía, es decir, no todas las órbitas están permitidas, sólo un número finito de éstas.

¹⁷¹ Según las leyes de Maxwell, una carga eléctrica en movimiento acelerado (como es el electrón) debería emitir energía continuamente en forma de radiación, con lo que llegaría un momento en que el electrón caería sobre el núcleo y la materia se destruiría; esto debería ocurrir en un tiempo muy breve.

¹⁷² La justificación experimental de este modelo es *a posteriori*.

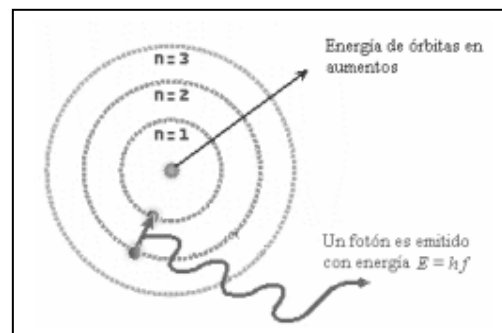
2. Los electrones pueden saltar de un nivel electrónico a otro sin pasar por estados intermedios.
3. El salto de un electrón de un nivel cuántico a otro, implica la emisión o absorción de un único cuanto de luz (fotón), cuya energía corresponde a la diferencia de energía entre ambas órbitas¹⁷³.
4. Las órbitas permitidas tienen valores discretos o cuantizados del momento angular orbital L , de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\mathbf{L} = n \cdot \hbar = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

Donde $n = 1, 2, 3, \dots$ es el número cuántico angular o número cuántico principal.

En el cuarto postulado o hipótesis, el valor mínimo de n es 1, y supone que el radio mínimo de la órbita del electrón¹⁷⁴ es de 0.0529 nm.

El modelo de Böhr permitió explicar adecuadamente el espectro del átomo de hidrógeno, pero fallaba al intentar aplicarlo a átomos polielectrónicos y al tratar de justificar el enlace químico. Además, los postulados de Böhr resultaban ser una mezcla un tanto confusa de mecánica clásica y mecánica cuántica, algo que tendremos que ver más adelante¹⁷⁵. Sin embargo, lo importante ahora es ver que el desarrollo de ambos modelos (Rutherford y Bohr) constituyó la nueva base sobre la que se desarrolló la teoría electrónica del enlace de Kössel y Lewis.



Módulo de átomo de Bohr

¹⁷³ Así, cuando el átomo absorbe (o emite) una radiación, el electrón pasa a una órbita de mayor (o menor) energía, y la diferencia entre ambas órbitas se corresponderá con una línea del espectro de absorción (o de emisión).

¹⁷⁴ A esta distancia se le denomina *radio de Bohr*. Un electrón en este nivel fundamental no puede descender a niveles inferiores emitiendo energía.

¹⁷⁵ Concretamente en el capítulo *Contexto e influencias filosóficas*, se intentará llevar a cabo una introducción a los conflictos surgidos entre la física clásica y cuántica en el seno de la física, que influyeron posteriormente tanto en la química como en la biología molecular.

La teoría electrónica del enlace químico

A. 1.916, Gilbert Newton Lewis

En 1.912 Lewis se trasladó del *Massachusetts Institute of Technology* (MIT) a la Universidad de Berkeley (California), donde fundó una escuela de investigación. Fueron de decisiva importancia para el desarrollo de la química los seminarios semanales que allí se llevaban a cabo: con total libertad se comentaban y criticaban las nuevas ideas que aparecían y los nuevos experimentos que se realizaban. En este contexto comenzaron a plantearse serias dudas sobre el modelo del enlace polar como único modelo posible. Fruto de estos seminarios fue la aparición en prensa de varios artículos. En el primero de ellos, firmado en 1.913 por William C. Bray y Gerard E. K. Branco, aunque se reconocía que la mayor parte de la química inorgánica dependía del enlace polar, se sostenía que no ocurría lo mismo en el ámbito de la química orgánica. Sus argumentaciones giraban en torno al fenómeno del tautomerismo¹⁷⁶, las bajas constantes dieléctricas y la escasa conductividad de estos compuestos. Además, propusieron que el enlace no polar debía caracterizarse por el concepto de “valencia total” o “número polar”¹⁷⁷. Lewis añadió posteriormente una nueva distinción entre un tipo de enlace y otro: mientras que los enlaces no polares se encuentran claramente fijos en el espacio –tal y como lo requiere la química estructural– no ocurre lo mismo con el enlace polar, debido a que las fuerzas electrostáticas tienen simetría radial. Según Lewis, tanto el concepto de Thomson de un enlace vectorial, como los intentos de Fry, Bray y Branco por indicar la dirección del intercambio del electrón ($\text{Na} \rightarrow \text{Cl}$), resultaban ser engañosos, ya que no era posible conocer de qué átomo provenían los electrones de dos compuestos como el HCl y CCl:

Dado que todos los electrones se parecen, y que presumiblemente no dejan rastro alguno tras de sí, no podemos afirmar que el átomo A cede un electrón al átomo B, y el C al D, sino que diremos solamente que los átomos A y C han perdido cada uno un electrón y que los átomos B y D han ganado cada uno un electrón.¹⁷⁸

¹⁷⁶ **Tautomerismo.** m (Química) Propiedad de ciertos compuestos orgánicos de comportarse en distintas reacciones como si tuvieran dos o más composiciones, como si los átomos del mismo compuesto estuvieran dispuestos de dos o más maneras distintas, expresables en diferentes fórmulas estructurales, ej. el grupo $\text{CH}:\text{C}(\text{OH})$ o CH_2CO en el etilo acetato; se debe a la migración reversible de un átomo, especialmente el hidrógeno, o grupo dentro de una molécula. *τό τόν* (gr. ‘lo’) + auto- *αὐτό* (gr. ‘que actúa por sí mismo o sobre sí mismo’) + mero- *μέρος* (gr. ‘parte’) + -ismos (gr. ‘proceso’, ‘estado’) [Cortés Gabaudan, Francisco. *Diccionario médico-biológico (histórico y etimológico) de helenismos*, Ediciones Universitarias de Salamanca].

¹⁷⁷ Es decir, el número total de enlaces polares y no polares en la fórmula gráfica de la sustancia.

¹⁷⁸ G.N. Lewis, *Journal of the American Chemical Society*, 35 (1.913): 1448-55.

A partir de ese momento los avances se produjeron a gran velocidad. Thomson tuvo que abandonar su modelo del pudín de ciruelas y aceptar el modelo planetario-nuclear del átomo de Rutherford. En 1.914 Alfred Parson, alumno británico de Lewis, sugirió que el enlace podía ser originalmente magnético y no eléctrico; de ese modo el electrón se convertía en electroimán. Este modelo estaba basado en el de Thomson, donde los magnetones se disponían en las esquinas de un cubo que rodeaba una carga positiva central. En 1.916, y de forma independiente, el alemán Kössel y el estadounidense Lewis¹⁷⁹, sugirieron que los compuestos químicos pueden interpretarse como consecuencia de la tendencia de los átomos a adquirir la configuración electrónica estable del gas noble más próximo a ellos.

El estudio de Lewis acerca de los cubos químicos se publicó en *Journal of the American Chemical Society*, en 1.916, con el título “The atom and the molecule”. En dicho artículo reconocía que “las capas atómicas exteriores son mutuamente interpenetrables”, de tal manera que “un electrón puede formar parte de una misma capa exterior de dos átomos diferentes y no podría afirmarse su pertenencia a ninguno de los dos de forma exclusiva”¹⁸⁰. Esta suposición se convirtió rápidamente en blanco de objeciones, como la famosa hecha por Casimir Fajans, y ridiculizaciones como la de R.A. Mullikan en una Conferencia Faraday. Lewis, consciente de las limitaciones de su modelo, fue muy sucinto con el empleo de sus esquemas cúbicos. A partir de éstos no era posible representar enlaces triples y el esquema no incluía los datos esteroquímicos disponibles. Pero lo más preocupante era su incapacidad para explicar el espectro. Por esa razón, a partir de 1.916 Lewis no volvió a utilizar el modelo del átomo cúbico. Lo más importante de su trabajo fue la idea del par de electrones compartidos como rasgo fundamental del enlace químico.

El encargado de difundir esta idea tras finalizar la Primera Guerra Mundial fue Irving Langmuir (1.881-1.957). La capacidad de éste para popularizar la teoría de Lewis hizo que muy pronto la teoría del par compartido fuera conocida como la teoría de Lewis-Langmuir. Esto produjo una situación tan incómoda entre ambos, sobre todo por parte de Lewis, que en 1.921

¹⁷⁹ Kohler, estudioso del tema, propone que Lewis dio con el par de electrones compartidos al intentar reconciliar el modelo de Thomson y Parson con sus esquemas cúbicos de 1.902.

¹⁸⁰ Tomado de Brock, W. H. (1.992), p. 406.

Langmuir abandonó el campo del enlace químico y Lewis se “vió obligado” a publicar en 1.923 el que sería su más importante e influyente texto: *Valence and the Structure of the Atom*. El mayor éxito¹⁸¹ de Langmuir fue el de saber dar la publicidad pertinente a la idea del par de electrones compartidos, y hacer que la comunidad científica estuviera especialmente receptiva cuando en 1.923, Lewis publicara su trabajo.

*Valence and the Structure of Atoms and Molecules*¹⁸²

Este ensayo de Lewis fue fundamental para el posterior desarrollo de la química. Aunque es anterior a las concepciones de la mecánica cuántica, constituye el eje central de la teoría química y estructural. En la primera parte del trabajo, Lewis lleva a cabo una revisión histórica de las teorías del enlace desde Berzelius, incluyendo la reproducción de una página de su cuaderno de 1.902, y un informe sobre el desarrollo de las ideas de la estructura atómica y de los espectros.

En su segunda parte, el texto nos muestra el problema ante el cuál se encontraba la comunidad científica al tener que buscar una forma de compatibilizar o conciliar el concepto de átomo estático e invariable de los químicos, con la imagen de un electrón en movimiento, y con fuerzas eléctricas coulombianas de atracción y repulsión de los físicos. Para Lewis, había que buscar la solución a través del modelo de Bohr: los electrones se sitúan en capas que protegen el núcleo, de tal manera que lo importante es la órbita *como un todo* y no la posición exacta de un electrón¹⁸³. De este modo, se pone de manifiesto que el apareamiento de los electrones en las capas externas, podía dar cuenta de la reacción entre los elementos y compuestos, sin tener que acudir a la transferencia de electrones:

Una teoría, que incluye como un caso especial la posibilidad de ionización completa, puede expresarse definitivamente de la siguiente manera: dos átomos pueden ajustarse a la regla de ocho, o regla del octeto, no sólo por la transferencia de electrones

¹⁸¹ Su gran innovación fue la ordenación en *capas* de todos los electrones de los elementos de la tabla periódica, a partir del principio de *Aufbau* (construcción) de Bohr. Sin embargo, sus hipótesis sobre la secuencia de capas electrónicas eran incorrectas, siendo rápidamente corregidas por Bury y Bohr.

¹⁸² Gilbert N. Lewis (1.923)

¹⁸³ Lewis mostró cómo esta imagen era muy parecida a la que él mismo había propuesto en 1.902 y publicado en 1.916.

de un átomo al otro, sino también compartiendo uno o más pares de electrones. Se puede considerar que los electrones comunes a los dos átomos pertenecen a la capa externa de ambos [las cursivas son de Lewis].¹⁸⁴

Veamos con algo más de detalle la propuesta de Lewis. Se había observado que los gases nobles, como el helio o el neón, existen como tales en la naturaleza en forma atómica, sin mostrar una tendencia a formar compuestos químicos. Ello había llevado a los científicos a analizar las distribuciones de los electrones de estos átomos, comprobándose que los átomos de los gases nobles se caracterizan por tener todos sus niveles y subniveles completamente llenos. A partir de tal constatación, la estabilidad de dichos gases se asoció con el hecho de que la estructura electrónica de su última capa estaba completamente llena; es decir, con ocho electrones. *El octeto (ocho electrones de valencia) es una disposición electrónica especialmente estable que coincide precisamente con la de los gases nobles, elementos de una gran estabilidad.* Por consiguiente, cuando se forma un compuesto químico los átomos se unen para alcanzar una estructura más estable: la configuración electrónica de un gas noble. La idea era que el conjunto de los electrones de un átomo se distribuye en distintos niveles energéticos, de forma que los niveles más profundos son los más estables, se puede considerar que los átomos están constituidos por dos partes: una formada por el núcleo y los electrones internos, originando un todo inseparable llamado *core atómico* (corazón cargado positivamente), y otra formada por los electrones de la capa electrónica más externa, que es la responsable del comportamiento químico. A los electrones de esta capa llamada *capa de valencia*, se les denomina *electrones de valencia*.

A partir de ahí, Gilbert N. Lewis propuso un modelo extraordinariamente simple para explicar el enlace entre dos átomos: éste se produce cuando los átomos comparten, al menos, un par de electrones. Las investigaciones previas habían puesto de manifiesto que en los compuestos iónicos, tanto los aniones como los cationes¹⁸⁵, presentaban configuraciones de capa cerrada con ocho electrones en la capa de valencia, igual que la que poseen los gases

¹⁸⁴ Lewis, G.N. (1.923), p. 79.

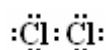
¹⁸⁵ Según la *Encyclopædia Britannica Online*:

Anion: atom or group of atoms carrying a negative electric charge.

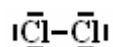
Cation: atom or group of atoms that bears a positive electric charge.

nobles. Por ello Lewis propuso que, como regla general, los átomos adquieren su máxima estabilidad cuando completan su última capa con ocho electrones, algo que pueden conseguir compartiendo electrones. De este modo, se redefinió la valencia como “el número de pares de electrones que un átomo comparte con otro átomo”. Ésta es la que se conoce como *Regla del Octeto*. Durante el enlace, el par de electrones se sitúa entre los respectivos núcleos, manteniéndolos ligados entre sí. Así, si tenemos dos átomos de hidrógeno compartiendo un electrón respectivamente, darían lugar a una estructura en la que el estado de cada átomo fuera más estable que si permanecieran separados. Al interaccionar los átomos para formar las diversas sustancias, únicamente intervienen los electrones de la capa de valencia. Por ello, se utilizan los denominados diagramas de Lewis, en los que el *core atómico* se representa por el símbolo del elemento y los electrones de valencia, mediante puntos rodeando al símbolo químico del elemento en cuestión. Para explicar la regla del octeto y mostrar cómo se generan los diagramas de Lewis, se suele acudir a los ejemplos de las moléculas biatómicas de hidrógeno, oxígeno y nitrógeno, mismas a las que nos referiremos.

Sin embargo, antes de ver esos ejemplos, debemos llamar la atención sobre otra de las grandes contribuciones de este texto: señalaba cómo llevar a cabo la ilustración gráfica de los enlaces, teniendo muy presente las posibilidades técnicas de los impresores del momento. A este nuevo tipo de representación, denominada estructuras de Lewis, la veremos junto a la exposición de los ejemplos ya mencionados. Un átomo de cloro tiene siete electrones en su capa de valencia, por lo que le falta un electrón para completar su octeto. Por ese motivo se une a otro átomo de cloro, compartiendo un par de electrones (uno de cada átomo).



Ahora bien, esta primera forma de representar las estructuras de Lewis fue sustituida por una forma más compacta que reemplazó los dos puntos que simbolizan un par de electrones por una línea. De este modo, la línea que se encuentra entre los dos átomos representa el par de electrones compartidos. En el caso que nos ocupa, podemos ver cómo, además del par de electrones compartidos, cada átomo de cloro tiene otros tres pares de electrones que completan su octeto y que no comparte con nadie (*pares libres o pares solitarios*).



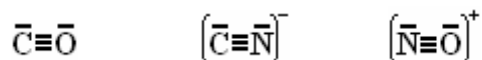
En el caso de la molécula de oxígeno, por tener seis electrones de valencia, es preciso que cada átomo comparta dos electrones, de tal manera que, para poder cumplir con la regla del octeto, la molécula de oxígeno tiene la siguiente estructura de Lewis:



Vemos así que no hay un par electrónico de enlace, sino dos, de tal manera que ambos átomos están unidos por un *enlace doble*¹⁸⁶, más fuerte que el que se da en uno sencillo. Ya que los núcleos son en principio atraídos por el doble número de electrones, la *longitud del enlace*¹⁸⁷ es menor que la observada en los enlaces simples, y la *energía de disociación*¹⁸⁸ es mayor. En el caso de la molécula biatómica del nitrógeno, al ser cinco los electrones de su capa de valencia, ha de compartir tres electrones con otro átomo. Por ello, su estructura electrónica es la siguiente:



En esta ocasión tenemos tres pares de enlaces, es decir, un enlace triple¹⁸⁹. Para escribir la estructura de Lewis de cualquier molécula biatómica, lo primero que se debe hacer es conocer el número total de pares electrónicos, y luego, distribuirlos entre los dos átomos, de tal manera que ambos cumplan con la regla del octeto.



Una de las ideas más importantes es la de estabilidad. Cuando dos átomos se encuentran distantes no interaccionan entre sí. Hace falta que se vayan acercando y a medida que lo hacen, va apareciendo una fuerza de atracción entre el núcleo de un átomo y los electrones del otro, así

¹⁸⁶ En ese momento aún no se apuntaba si las dos líneas que conectan a los átomos son iguales, es decir, si los enlaces son equivalentes. Será posteriormente la química cuántica, la que muestre que ambos enlaces tienen una naturaleza distinta.

¹⁸⁷ Distancia que separa los dos núcleos en la molécula.

¹⁸⁸ Energía necesaria para separar la molécula en sus dos átomos constituyentes.

¹⁸⁹ En este caso, tampoco el modelo de Lewis es capaz de decirnos si los tres enlaces son iguales. Tendrá que ser la química cuántica la que nos señale que dos de esos enlaces son de naturaleza similar, mientras que el tercero es distinto.

como fuerzas de repulsión entre los dos núcleos –cargados positivamente– y los electrones de ambos átomos cargados negativamente. La atracción núcleo-electrones del otro átomo y las repulsiones núcleo-núcleo y electrones-electrones, hacen que exista una distancia de equilibrio, denominada « r_0 », para la cual la energía del sistema es mínima. La distancia entre los núcleos en r_0 es la que se define como *longitud de enlace*, en donde la energía es mínima y la estabilidad del sistema máxima¹⁹⁰. Este texto de Lewis de 1.923 –*Valence and the Structure of Atoms and Molecules*–, concluía con dos ideas importantes:

La primera del propio Lewis, quien amplió la definición de los ácidos como una clase de sustancia, de moléculas, capaces de aceptar un par de electrones, mientras que las bases eran potenciales donantes. El desarrollo de la misma permitió el fomento de un nuevo campo de la química física orgánica. La segunda idea fue concebida por su discípulo Maurice L. Huggins, quien llevó a cabo la explicación del tautomerismo cetoenólico del ácido acetoacético, postulando un estado de transmisión en el que un núcleo de hidrógeno, se encontraba simultáneamente unido a un átomo de carbono y a uno de oxígeno. En *Valence...*, Lewis se refiere a este tipo de coordinación del hidrógeno como el “*enlace de hidrógeno*”, considerándolo “uno de los complementos más importantes de mi teoría”. Este enlace resultó fundamental en la representación visual de Pauling de la estructura de las proteínas en los años 30. Sin embargo, hay que señalar que la idea de Lewis no disfrutó de una aceptación inmediata, sino que fue incluso, tal y como ya había ocurrido en otras ocasiones, oportunidad para comentarios mordaces por parte de algunos de ellos, como el de Armstrong en *Nature* en 1.926.

¹⁹⁰ Un capítulo especial lo constituyen las estructuras de moléculas triatómicas, las cargas formales y otras aplicaciones más complejas. Sin embargo, para nuestros propósitos no es necesario entrar a detallar éstos, baste por ahora señalar su singularidad y ceñirnos, en lo que sigue, con la teoría general presentada hasta ahora.

1.3.2. FÍSICA

INTRODUCCIÓN

Comenzábamos señalando en la sección anterior que ante el intento de Pauling por crear un modelo que permitiera dar cuenta a la vez de la estructura y propiedades físicas y químicas de las moléculas era preciso responder, al menos, a tres cuestiones: la estructura atómica, la estructura molecular y el enlace químico. Vimos por ello entonces los intentos llevados a cabo – tanto antes como en el momento en el que Pauling comenzó su carrera de investigación– para dar cuenta de la estructura molecular y el enlace químico. En esta sección haremos lo mismo con el problema de la estructura atómica. Sin embargo, antes de entrar de lleno en ello, se hace oportuno señalar algunas cuestiones importantes; en primer lugar –como adelantamos en su momento– el estudio de la estructura atómica¹⁹¹ fue llevado a cabo por los físicos, no los químicos; en segundo lugar, el contexto físico en el que se inspiró y bajo cuyo paradigma trabajó Pauling fue el de la plena construcción de la mecánica cuántica. Como tuvimos la oportunidad de ver en la biografía Pauling fue testigo de la construcción de este nuevo modelo físico cuyas consecuencias e influencias fueron más allá de la física que constituyó el fundamento último sobre el que se construyó toda su obra científica, tanto química como biológica y médica. Fundamento último en un doble sentido. Desde el punto de vista científico el desarrollo que vivió la física durante la primera mitad del siglo XX resultó ser clave en el progreso y evolución de su pensamiento y obra química y biológica. En el ámbito de la química, y concretamente del enlace químico, fue clave la identificación de esta disciplina como un fenómeno cuántico. El descubrimiento del cuanto de acción supuso un evento determinante en el ámbito de la química inorgánica pero también motivo un extraordinario progreso de las ciencias de la vida. A juicio de uno de los protagonistas de la revolución física –N. Bohr– es necesario destacar el papel que desempeñó en el impresionante crecimiento que entonces vivió la moderna bioquímica, de la que a su vez salieron beneficiadas la fisiología y la

¹⁹¹ Es necesario señalar que nos referimos a los estudios llevados a cabo bajo el paradigma cuántico, dentro del cual se movió Pauling, dejando para otro momento las discusiones existentes sobre el papel que los químicos han jugado a lo largo de la historia en torno al concepto de átomo.

farmacología¹⁹². Pero, como decíamos, el gran valor del cuanto de acción no se agotó en su función de nuevo punto de conexión entre la física y la química o la física y la biología —el conocimiento de una serie de propiedades específicas de la materia produjo el rápido progreso de las ciencias de la vida—, sino que las repercusiones e implicaciones filosóficas de su hallazgo hicieron tambalearse los cimientos sobre los que se levantaba hasta ese momento la ciencia.

Ahora bien, la nueva física no sólo estuvo presente en el desarrollo de la nueva biología por medio del cuanto de acción, hay que señalar también el papel fundamental que jugó en la eliminación de toda distinción entre química orgánica e inorgánica que se estaba gestando en la bioquímica, donde había renacido la vieja pregunta por la medida en la que las ciencias físicas podían explicar el fenómeno vital. En palabras de A. Lehninger:

Los seres vivos están integrados por moléculas inanimadas. Cuando se examinan individualmente, estas moléculas se ajustan a todas las leyes físicas y químicas que rigen el comportamiento de la materia inerte.¹⁹³

Se hacía evidente que, si se quería comprender los procesos químicos que tenían lugar dentro de los seres vivos, debía previamente entenderse aquellos que se daban en los seres inertes, así como las leyes de la física que subyacen a toda actividad química. Por consiguiente, visto ya el contexto químico del que partieron los trabajos de Pauling, y quedando sólo pendiente ver —en ese ámbito— cómo se gestó la nueva química molecular a partir de la nueva mecánica cuántica, se hace oportuno antes de entrar en el ámbito de las ciencias de la vida llevar a cabo un recorrido por el ambiente que rodeó el nacimiento de esa nueva física que influyó tan singularmente en los dos ámbitos en los que Pauling desarrolló su obra.

Antes de adentrarnos en el estudio de las notas más importantes de la física cuántica es pertinente llamar la atención sobre dos puntos que no debemos perder de vista; Linus Pauling era químico, no físico; y el fin de esta presentación es intentar atender al problema de la estructura atómica, uno de objetos principales de estudio de los que Pauling debía dar cuenta. Con la intención de no perdernos dentro del infinito océano que constituye el mundo de la física

¹⁹² Bohr, Niels. (1.963), art. III “La Conexión entre las ciencias (1.960)”, p. 25

¹⁹³ Recogido por Gribbin, J. (1.985), p. 67 de la obra de Lehninger, Albert, *Bioquímica*, p. 1 del cap. 1

cuántica u olvidar el por qué de esta exposición se van a distinguir dentro del presente capítulo dos partes. En la primera de ellas y bajo el título *El encuentro con la mecánica cuántica*, haremos un breve recorrido histórico desde los orígenes de la física cuántica hasta la formulación por parte de Schrödinger de la mecánica cuántica. Para facilitar tal exposición, se distinguirán a su vez dos sub-apartados. Aquel que lleva por título *La vieja física cuántica* nos permitirá traer a la memoria algunos de los elementos claves que se produjeron desde que Planck llevara a cabo la formulación del cuanto de acción en 1.900 hasta la presentación de Sommerfeld de su átomo de hidrógeno en 1.913. En el segundo apartado –*La nueva mecánica cuántica*– vamos a poder ver brevemente cómo a través de las nuevas formulaciones físicas – representadas principalmente por Heisenberg y Schrödinger– no sólo se hacía posible superar la vieja mecánica newtoniana, sino principalmente se pudo superar la situación de crisis que se estaba dando dentro de la física.

Recordemos que Pauling vivió de cerca este segundo momento, que fue observador directo de cuanto estaba ocurriendo. Por ello, durante la segunda parte de este capítulo –*Hacia una interpretación de la química como un fenómeno cuántico*–, tras haber resaltado aquellos elementos claves en la formación de la nueva mecánica cuántica, tendremos la oportunidad de ver cómo se gestó la interpretación de la química como un fenómeno cuántico. Uno de los objetivos de este capítulo es el de intentar mostrar en qué sentido esta etapa de la historia de la ciencia constituyó un momento clave para nuestro protagonista y en el que la casualidad o la fortuna jugaron en varias ocasiones un papel fundamental, ya que permitieron al químico estadounidense estar en el lugar justo en el momento oportuno y poder relacionar rápidamente los nuevos hallazgos y descubrimientos que en la física se estaban produciendo con los problemas, con las cuestiones que en química él estaba trabajando; la estructura de los cristales y la naturaleza del enlace químico.

1.3.2.1. El encuentro con la mecánica cuántica

La vieja física cuántica

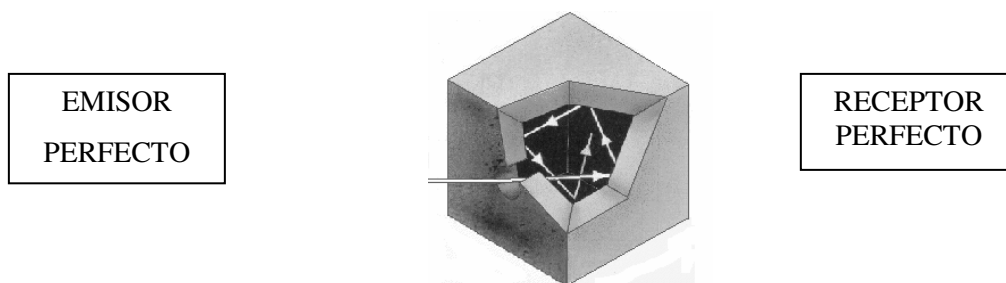
Aunque pueda resultar excesivamente reiterativo, queremos volver a señalar que este primer capítulo tiene por objeto facilitarnos la aprehensión de los dos siguientes dedicados a sus obras científicas. Para tal fin, tan sólo vamos a detenernos en esta breve exposición de la vieja teoría cuántica en cuatro momentos claves –representados cada uno de ellos por un autor– que entendemos son los principales para nuestro propósito; *Planck y la catástrofe del ultravioleta: origen de la física cuántica*; *Einstein y la segunda discontinuidad cuántica*; *Bohr y la estabilidad del átomo*; *Sommerfeld y el problema de la estructura fina del átomo de hidrógeno*.

A. *Planck y la catástrofe del ultravioleta: origen de la física cuántica*

Antes de adentrarnos en el trabajo de Max Karl Ernst Ludwig Planck en torno al problema del cuerpo negro tal vez sea oportuno comenzar preguntarnos por qué venimos tan atrás en la búsqueda del contexto científico bajo el cual desarrollo su obra Linus Pauling. Si bien el problema al que quería dar respuesta el físico alemán era muy local, la aparición del concepto de *cuanto de acción* tuvo una extraordinaria repercusión en todas las disciplinas científicas y en el trabajo de todos los científicos, incluido, por su puesto, en el trabajo de Pauling. Mas allá de los nuevos métodos e instrumentos de investigación desarrollados a partir de la nueva física cuántica, la obra de Linus Pauling está marcada completamente por este “hallazgo” de Planck. Y es que, valgan ahora como ejemplos, la estabilidad de los átomos, la naturaleza del enlace químico y, por consiguiente, la forma y estabilidad de las estructuras moleculares, están determinadas directamente por el cuanto de acción. A ello hay que unir, por otro lado, que el cuanto de acción fue el origen de una gran cantidad de problemas que desbordaron la misma física; a medio camino entre la ciencia y la filosofía, las nuevas cuestiones apuntadas condicionaron gran parte del pensamiento occidental del siglo XX. Pues bien, son precisamente a algunos de estos retos, de estas dificultades epistemológicas, ontológicas y metodológicas que se encontraban presentes en la obra de Linus Pauling, a los que intentamos dar respuesta en el presente trabajo. Por todo ello, se hace necesario prestar especial

y detenida atención al origen y posterior desarrollo del cuanto de acción así como de estas dificultades mencionadas.

A finales del siglo XIX era común dentro del ámbito de la física pensar que en esta disciplina ya estaba casi todo descubierto: tras el establecimiento de los principios de la termodinámica la única tarea pendiente era dar cuenta de algunos flecos sueltos. Entre esas lagunas había dos problemas pendientes que serían resueltos de manera rápida y sin complicaciones; por un lado había que determinar en qué medida el movimiento de la Tierra repercutía en el comportamiento de la luz¹⁹⁴; por otro lado había que dar resolver el problema que la radiación del cuerpo negro entonces planteaba. Este último problema, en principio muy local y poco influyente, rompió finalmente de forma drástica, radical la imagen que se tenía hasta entonces de la propia disciplina –la física– y de concebir la naturaleza, ya que fue precisamente a la hora de dar cuenta de este problema cuando surgió la noción de *cuanto*.

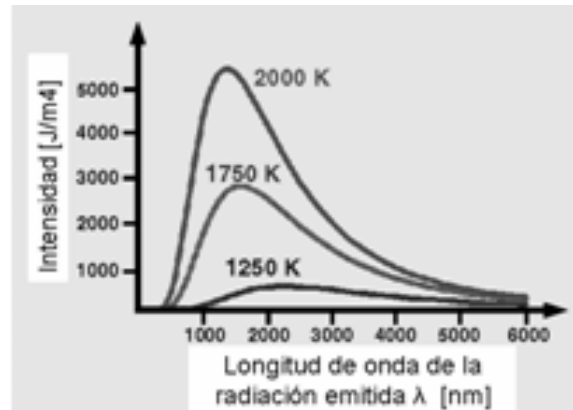


Como adelantábamos, el problema al que Planck debía dar respuesta era en principio muy local: descubrir las leyes de radiación térmica que rigen a los procesos de emisión de luz para cuerpos calientes. La cuestión era, en principio, muy sencilla: puesto que el proceso de emisión de luz depende del aumento de la temperatura de los cuerpos, a medida que el cuerpo se vaya calentando, irá disminuyendo la longitud de onda de la luz que emite. Se trataba por consiguiente de saber en qué medida la intensidad de energía emitida por el cuerpo –medida en unidades de energía (Σ) sobre distancia a la cuarta– dependía de la longitud de onda (λ) y de la temperatura. Como una primera aproximación a la solución de este problema, los físicos de

¹⁹⁴ Uno de los primeros intentos fue el experimento llevado a cabo por Michelson y Morley. El desarrollo de las investigaciones sobre este problema también fueron determinantes en el futuro desarrollo de la física, ya que dio lugar finalmente al desarrollo de la teoría de la relatividad.

entonces idealizaron el fenómeno y comenzaron a estudiar el cuerpo negro. La razón de ello era muy sencilla: el cuerpo negro ideal es un objeto que absorbe toda la radiación que incide sobre él –es decir, es un receptor ideal– y, de acuerdo con las leyes de la termodinámica, también es un emisor perfecto; además, experimentalmente se puede construir un objeto con una absorción de radiación de 99%.

La teoría sobre el cuerpo negro que se formulaba a partir de la física clásica adelantaba que la energía contenida en las ondas electromagnéticas contenidas por el cuerpo negro debía aumentar conforme disminuyera la longitud de onda de éstas. Por tanto, la energía emitida tendría que ir creciendo gradualmente con la temperatura y,



a partir de la región ultravioleta, la energía tendería al infinito, por ello se le nombró *la catástrofe ultravioleta* a este fenómeno teórico. Sin embargo, los experimentos demostraban una relación distinta entre energía, longitud de onda y temperatura; en la región del ultravioleta la energía emitida por un cuerpo caliente era muy débil y las mayores intensidades se encontraban entre el rojo y el infrarrojo. Este hecho se conoce desde que el hombre trabaja los metales: al calentar un material lo suficiente se puede observar una coloración rojiza y, de continuar su aumento de temperatura, el rojo puede convertirse en blanco incandescente.

Por consiguiente, el problema al que tenían que enfrentarse los físicos era el de explicar la relación existente entre la energía (Σ) y la frecuencia (ν)¹⁹⁵. El interrogante se solucionó el 14 de diciembre de 1.900 en Berlín, cuando Max Planck manifestó que para resolver la cuestión del cuerpo negro había que aceptar que las ondas electromagnéticas dentro del cuerpo negro no podían tener un rango continuo de energías. A modo de hipótesis había que suponer la existencia de elementos de energías, cantidades de energía indivisibles [a los que Einstein denominó *quantum* (cuanto)]. La propuesta de Planck permitía explicar que, a pesar de que la emisión de radiación es ondulatoria y por tanto continua, dicha radiación tan sólo tiene lugar bajo un valor mínimo o múltiplo de éste valor mínimo. Es decir, no todos los valores son

¹⁹⁵ La frecuencia y la longitud de onda son inversamente proporcionales.

posibles. Cuando los cuerpos emiten una frecuencia de luz sólo lo hacen en determinadas energías. Así, la relación buscada entre la energía y la frecuencia venía dada por la constante de Planck (h), en donde:

$$\Sigma = h \cdot \nu \quad h = 6.6262 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{seg}$$

A partir de esta hipótesis la distribución de la intensidad de emisión (I) vendría dada en términos de la (λ) y la temperatura (T) según la relación:

$$I \propto \frac{1}{\lambda^5 (e^{h\nu/kT} - 1)}$$

De esa manera se empezaba a hacer patente que las operaciones de la naturaleza, cuando se trataba al menos de microoperaciones, no eran continuas. Poco a poco, la idea leibniziana de que la naturaleza no da saltos empezaba a ponerse en entredicho. Pero que la estructura de la naturaleza fuera discreta no ofrecía problemas, lo que sí lo hacía era que se afirmara que las operaciones también fueran discretas y no continuas. El cuanto de Planck fue el origen de una gran cantidad de dificultades –que son precisamente con las que a partir de ahora nos vamos a enfrentar– que desbordaron lo físico; la determinación de las cadenas causa-efecto; la explicación del movimiento en el espacio y en el tiempo, se hacían extremadamente complejas, cuando no imposibles. De hecho, consciente de la inadmisibilidad de llevar a cabo la introducción de una explicación discreta dentro de una teoría¹⁹⁶ que se apoyaba en la continuidad –sabía perfectamente la fractura, la quiebra que en el principio de continuidad producía–, Planck no quiso que se le diera a la noción de cuanto el estatuto de realidad, sino sólo el de artificio matemático.

B. Einstein y la segunda discontinuidad cuántica

Sin embargo, hay que hacer notar que a pesar de los esfuerzos de Planck, su deducción acaecía de graves problemas ya que la base teórica de su ley de radiación no quedó en lo

¹⁹⁶ Todo el trabajo que se había llevado a cabo se hizo bajo la teoría de Maxwell.

esencial resuelta: Planck no dejaba tan sólo la tarea de extraer las consecuencias de la cuantización, sino que era necesario resolver el problema de la fundamentación teórica. De ahí que Albert Einstein, la persona que más se esforzó y profundizó en la instalación de la discontinuidad cuántica en la física, acudiera a las leyes de Wien y no a las del mismo Planck. Fue así que en 1.905, A. Einstein en “Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt”¹⁹⁷ extendió la discontinuidad cuántica que Planck había introducido.

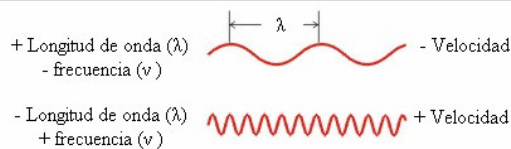
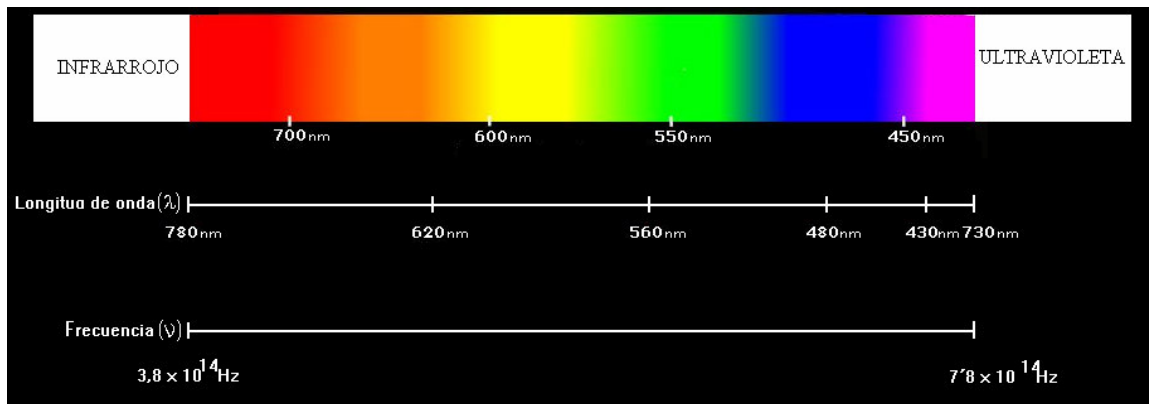
La principal diferencia entre las propuestas de ambos científicos estaba en que para Planck la discontinuidad estaba limitada al intercambio de energía entre osciladores y radiación, siendo esta última descrita por las ondas continuas del electromagnetismo. Por su parte, Einstein sostenía que había fenómenos que obligaban a pensar que la luz, la radiación electromagnética, estaban formadas por paquetes independientes de energía, por cuantos que obedecen a la misma expresión de Planck ($\Sigma = h \cdot \nu$). Hay que subrayar que el uso que Einstein lleva a cabo de la hipótesis de Planck no tenía nada que ver con el problema del cuerpo negro, sino con el del efecto fotoeléctrico: el uso de la hipótesis cuántica empezaba así a ir más allá de su utilización como mero instrumento matemático.

El efecto fotoeléctrico ya había sido observado por Heinrich Hertz en 1.887 y Philipp Lenard en 1.902. Se había constatado que al hacer incidir luz con una longitud de onda corta (ultravioleta) sobre una superficie metálica, tenía lugar el desprendimiento de partículas cargadas eléctricamente¹⁹⁸. La velocidad cinética con la que salían esas partículas debía estar relacionada con la energía de la luz incidente: ¿Cómo era esa relación? La teoría llevaba a pensar que al aumentar la intensidad del foco de luz, debía aumentar la energía de incidencia, fruto de lo cual aumentaría la energía cinética y, consecuentemente, la velocidad de los electrones. Sin embargo se observaba otra cosa: según se acercara o se alejara el foco de luz – con ello se modificaba la intensidad– la velocidad de las partículas desprendidas no variaba. Entonces ¿de qué dependía la energía cinética de éstas? Se observó que el aumento o la disminución de la intensidad no modificaba la velocidad de las partículas, sino el número de electrones desprendidos. Era el color de la luz, es decir la longitud de onda de la misma, lo que

¹⁹⁷ “Sobre un punto de vista heurístico relativo a la producción y transformación de la luz”

¹⁹⁸ Electrones.

afectaba a su velocidad. También se observó que a medida que la longitud de onda se iba acercando al rojo, la velocidad de los electrones emitidos disminuía hasta llegar un punto en el que deja de producirse la emisión de electrones ¿Cómo explicar este fenómeno? Debido a la relación inversa que existe entre frecuencia y longitud de onda, a medida que la longitud de onda se va acercando al rojo –es decir, la longitud de onda se va haciendo cada vez mayor– baja la frecuencia. Pues bien, hay un punto por debajo de cuya frecuencia ya no se produce la emisión de electrones: a este punto se le llamó *frecuencia umbral*.



De ese modo, se constataba que debía existir algún tipo de relación entre la frecuencia y la energía ¿Dónde encontramos una fórmula en la que podamos vincular ambas? En la ecuación de Planck. Para desligar los electrones de los cuerpos se necesita energía, pero una determinada cantidad de energía, que vendrá dada por esta ecuación. Esta energía no se encuentra distribuida de manera uniforme y continua en el frente de onda, sino que está concentrada en pequeñas regiones discretas, en unidades discretas indivisibles de energía. A partir de esta idea, y siendo Σ_c = energía cinética; $h \cdot \nu$ = energía de Planck; W = energía empleada para que se desprendan los electrones; Einstein planteó la cuantización de la energía cinética matemáticamente¹⁹⁹ así:

$$\Sigma_c = h\nu - W$$

¹⁹⁹ Este planteamiento tuvo su constatación experimental en 1.916 (R.A. Millikan) y 1.923 (A. Compton).

C. Bohr y la estabilidad del átomo

Tras el desarrollo de los modelos atómicos de Joseph J. Thomson y Ernest Rutherford, uno de los principales problemas con los que tuvieron que enfrentar los físicos –y de extraordinaria importancia también para la química– fue el de dar cuenta de la estabilidad del átomo. El modelo miniplanetario de Rutherford, a pesar de las mejoras introducidas respecto al del físico de Cheetham Hill (Manchester)²⁰⁰, tenía un gran problema: según Maxwell, toda partícula cargada y con movimiento acelerado debía emitir energía. Sin embargo, se había constatado que esto último no ocurría; el electrón por el hecho de girar en torno a su núcleo tiene una aceleración²⁰¹, a pesar de lo cual no emite energía constantemente, ya que de hacerlo, el átomo se colapsaría en menos de un segundo, algo que no se había observado. Esta cuestión llevó a la cuantización de su estructura (Bohr) y, posteriormente, a la afirmación de la existencia de ondas de materia (De Broglie). La química, concretamente la química física dentro de la cual se desarrolló gran parte del trabajo de Pauling, tuvo un gran interés por el primero de estos desarrollos. Incluso lo había para la cristalografía, ya que tal y como hemos comentado anteriormente, para esta disciplina no bastaba con saber qué átomos se encontraban presentes en el cristal y bajo qué forma geométrica. Para dar cuenta completa de la forma y propiedades de un cristal era necesario conocer también la estructura del átomo mismo y su estabilidad. Por esa razón, vamos a ver cómo se tuvo que recurrir a la ecuación de Planck para poder explicar la estabilidad del átomo.

Los primeros pasos hacia un átomo cuántico fueron dados por Niels Bohr durante su estancia en el laboratorio de Rutherford (Manchester). Había estado trabajando, a petición del mismo Rutherford, en una investigación experimental relativa a la estructura y estabilidad de unas moléculas. En el documento²⁰² que elaboró antes de volver a Copenhague hay un momento en el que dice²⁰³:

Según el modelo atómico propuesto por el prof. Rutherford para explicar la “gran difusión” de partículas α el átomo está formado por una carga positiva concentrada en un punto... rodeada por un sistema de electrones, cuya carga total es

²⁰⁰ J.J. Thomson.

²⁰¹ Por el simple hecho de tratarse de un movimiento circular.

²⁰² Conocido como “Memorandum Rutherford”.

²⁰³ Cita extraída de J.M. Sánchez Ron (2.001), p. 265-6.

igual a la del “núcleo” positivo; se supone que el núcleo es el asiento de la masa del átomo. En semejante átomo no puede existir una configuración de equilibrio sin movimiento de los electrones... Consideraremos, por tanto, en primer lugar las condiciones de estabilidad de un anillo de n electrones girando alrededor de un punto de carga positiva de magnitud $n \cdot e$.

Mediante un análisis análogo al utilizado por Sir J.J. Thomson en su teoría sobre la constitución del átomo se puede demostrar muy fácilmente que un anillo como el considerado aquí no es estable en el sentido mecánico habitual..., y, por consiguiente, la cuestión de la estabilidad se debe tratar desde un punto de vista diferente...

Al investigar la configuración de los electrones en los átomos nos encontramos inmediatamente con la dificultad (relacionada con la inestabilidad antes mencionada) de que si solamente se considera la fuerza de carga central y el número de electrones del anillo... no parece que exista algo que permita distinguir, a partir de consideraciones mecánicas, entre radio y tiempo de vibración [periodo de rotación]. En la investigación que sigue introduciremos y haremos uso, por tanto, de una hipótesis a partir de la cual se pueden determinar las cantidades en cuestión. Esta hipótesis es: que para todo anillo estable (cualquier anillo que tenga lugar en los átomos naturales) existirá un cociente definido entre la energía cinética del electrón del anillo y el tiempo de rotación. Se ha escogido esta hipótesis, sobre la que no se realizará ningún intento de fundamentación mecánica (ya que parece imposible [hopeless*]), como la única que parece ofrecer una posibilidad de explicación de todo el conjunto de resultados experimentales existente, y que aparenta confirmar las ideas sobre el mecanismo de la radiación propuestas por Planck y Einstein.

*Esto parece no ser sino lo que cabe esperar, ya que aparentemente está demostrado rigurosamente que la mecánica no es capaz de explicar los hechos experimentales relacionados con átomos en solitario. En analogía con lo que se conoce para otros problemas se tiene la impresión de que sólo es legítimo utilizar la mecánica en la investigación del comportamiento de un sistema si nos fijamos en cuestiones no relacionadas con la estabilidad (o del equilibrio estadístico final).

A través de sus experimentos Bohr pudo constatar que la mecánica clásica era impotente para dar cuenta de todos los hechos experimentales, haciéndose oportuno acudir a elementos mecánicos no clásicos. Para dar cuenta de estos problemas alude a ese elemento como una “Hipótesis especial”; $K = C \cdot v$, donde K es la energía cinética de un electrón y C una constante. Aunque todo indica que Bohr pensaba en términos de h , los valores obtenidos en sus experimentos no coincidían con la constante de Planck. Lo importante es que en julio de 1.912 Bohr ya apuntaba la necesidad de relacionar el átomo de Rutherford con los cuantos de Planck. Para tal fin, tan sólo un año más tarde, en 1.913, el mismo Bohr propuso para solventar el problema de la estabilidad atómica del modelo de Rutherford, la conveniencia de acudir a las “leyes que gobiernan los espectros ópticos de los elementos” teniendo en cuenta el modelo atómico propuesto entre 1.911 y 1.912 por J. W. Nicholson. El análisis de la fórmula de

Balmer²⁰⁴ a petición de Hans M. Hansen, hizo que todas aquellas piezas parecieran empezar a encajar. Fruto de ello, ese mismo año publicó tres artículos²⁰⁵ en *Philosophical Magazine* donde llevaba a cabo la cuantización del átomo de Rutherford.

D. El modelo de Bohr

El punto de partida de su modelo fue el átomo de Rutherford formado por un núcleo de carga $+e$ en torno al cual gira un electrón ($-e$). La órbita inicial de éste –el electrón– es elíptica con un eje mayor $2a$ que termina siendo circular con radio a . A partir de este modelo Bohr consigue resolver el problema de la precipitación del electrón sobre el núcleo –el problema de la estabilidad de las órbitas electrónicas– por medio de dos postulados:

Primer postulado: Un sistema atómico posee una multiplicidad de estados posibles – estados estacionarios– con una serie de valores discretos de energía y una estabilidad particular de tal manera que toda variación de la energía del átomo ha de ir acompañada de una transición de un estado estacionario a otro. A estos estados estacionarios–órbita múltiples les corresponden ciertos valores de energía también discretos. Por consiguiente, un átomo no puede estar en cualquier estado ni el electrón orbitar a cualquier distancia. Ello supone que la variación de la energía sólo se produce en los saltos de órbita y no por la aceleración de las cargas, ya que ésta, por sí sola, no emite radiación: la órbita de un electrón es estable porque no cambia energía cinética por radiativa.

El cambio de estado es un proceso discreto –*postulado cuántico*– en la medida en que a cada uno corresponde un valor que es discreto y la traslación en el espacio se produce de modo discontinuo. Como podemos ver, el primer postulado cuantiza las propias órbitas electrónicas y el movimiento del electrón: no hay infinitas posibilidades para W , sino que $W = \frac{1}{2} \tau h \omega$; donde h = constante de Planck; τ es un número entero positivo arbitrario²⁰⁶. Como vemos es

²⁰⁴ Fórmula de Rydberg: $\nu = R [(1/m^2) - (1/n^2)]$; donde ν es la frecuencia de la línea, m y n son pequeños números enteros, y R es la constante de Johann Robert Rydberg. Cuando “ m ” se fija a uno se obtiene la serie de líneas espectrales de Lyman; con $m=2$ la de Balmer, etc.

²⁰⁵ Bohr, Niels (1.913 b, c y d)

²⁰⁶ τ es el primer número cuántico introducido. Posteriormente será cambiado por n .

precisamente τ la que limita a tan sólo ciertos valores posibles W , r y ω . Es decir, que el radio de las órbitas no puede cambiar gradualmente, sino de manera discontinua, “cuántica”:

Según las consideraciones precedentes nos vemos conducidos a suponer que estas configuraciones corresponderán a estados del sistema en los que no hay radiación de energía; estados que, consecuentemente, serán estacionarios mientras el sistema no sea perturbado desde el exterior. Vemos que el valor de W es máximo si τ tiene el valor más pequeño, 1. Este caso corresponderá, por consiguiente, al estado más estable del sistema.²⁰⁷

De esta manera era posible dar cuenta por primera vez de la estabilidad del átomo a partir de su cuantización.

*Segundo Postulado*²⁰⁸: la posibilidad de que un átomo emita o absorba radiación está condicionado por las variaciones de energía del átomo –saltos de órbita–, de tal manera que la frecuencia de la radiación emitida queda determinada por la diferencia de energía entre los estados inicial y final según la siguiente fórmula: $h \cdot \nu = E_1 - E_2 = \Delta E$.

Un electrón emite o absorbe una radiación –en su salto de órbita– con una frecuencia dada por la diferencia entre la más alejada y la más próxima. Esta variación de energía viene dada por la hipótesis de Planck, de tal manera el mecanismo responsable de la energía, el movimiento de un móvil, está cuantizado.

En el primero de sus tres artículos referidos, Bohr insiste en que «Como se utiliza una relación de la teoría de Planck, podemos esperar que la radiación sea emitida en cuantos». Es decir, el paso de los sistemas de un estado estacionario a otro tiene lugar mediante la emisión de radiación homogénea, donde la relación entre la frecuencia y la cantidad de energía emitida viene dada por la teoría de Planck. De este modo, se hacía posible incluso dar cuenta de la razón

²⁰⁷ Bohr, Niels (1.913 a). Cita extraída de J.M. Sánchez Ron (2.001), p. 280

²⁰⁸ Si bien este segundo postulado no hace ya tanta referencia a la estabilidad del átomo, sino a su mecánica, es muy importante para el desarrollo de la segunda parte de este capítulo en el que –tal y como se adelantó– se llevará a cabo un repaso del desarrollo de la mecánica cuántica que conoció directamente y sobre la que trabajó Linus Pauling.

por la cual los saltos entre diferentes órbitas estacionarias producían radiación de ν diferente y, por consiguiente, líneas espectrales²⁰⁹:

$$\nu = \frac{2\pi me^4}{h^3} \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right)$$

Las consecuencias principales de la introducción del cuanto de acción en la estructura del átomo fueron:

1. Un átomo sólo puede existir en estados discretos –estacionarios–; los intervalos intermedios no son posibles, porque no son posibles valores intermedios. Los sistemas atómicos cambian de estados de modo discontinuo.
2. Hay que pensar que toda interacción –intercambio de energía– ha de tener valores que corresponden a la cantidad mínima de energía o múltiplo entero de esta.

Si expresamos esto en términos mecánicos, habrá que reconocer por un lado que hay órbitas prohibidas y órbitas permitidas, y por otro lado que entre una órbita y otra no media ningún espacio. Así, una trayectoria sería el conjunto de posiciones discretas que no puede ser representado por una línea. Por esa razón, el marco ordinario de descripción espacio-temporal se presenta inútil para la descripción de los fenómenos²¹⁰.

En este modelo tiene que haber una órbita con un valor mínimo, no es posible que sea cero, porque de lo contrario, si el electrón llegara hasta el núcleo, el átomo entero se desplomaría como ocurría con el modelo de Rutherford. La ecuación –sólo válida para el átomo de hidrógeno– que da cuenta de ello es:

$$\vec{r} \times m\vec{v} = \frac{nh}{2\pi}$$

²⁰⁹ Las líneas espectrales se refieren a aquellas frecuencias de luz específicas que emite un átomo. Cada elemento químico tiene un conjunto de líneas espectrales bien definidas, lo que permite identificarlos y –como fue el caso en el desarrollo de la teoría sobre el átomo de hidrógeno– estudiarlos.

²¹⁰ A pesar de que las consecuencias de tipo epistemológico van a ser muy importantes, ahora no podemos detenernos a examinarlos con la profundidad debida. Tendremos la oportunidad de desarrollar estas implicaciones oportunamente en siguientes capítulos.

A partir del modelo de Bohr, no sólo se lleva a cabo la cuantización del átomo²¹¹, sino que la misma espectroscopia quedaba reducida a física atómica. Sin embargo, y como venimos diciendo, la existencia de las órbitas prohibidas, el hecho de que los electrones no emitan radiación –a pesar de su movimiento alrededor del núcleo–, la identidad de los estados estacionarios, son hipótesis *ad hoc* que tenían que ser justificadas físicamente. Quien llevó a cabo esta tarea fue De Broglie en términos de onda estacionaria.

E. Sommerfeld y el problema de la estructura fina del átomo de hidrógeno.

Antes de comenzar a ver el trabajo y las aportaciones científicas de Sommerfeld, debemos señalar el extraordinario papel de profesor que el físico también supo representar, sobre todo si tenemos en cuenta el gran número de brillantes alumnos que tuvo bajo su tutela. La lista de estos es larga, haciéndose pertinente en este momento señalar que la cifra de estudiantes estadounidenses fue –gracias principalmente a las becas otorgadas por la Fundación Rockefeller– sumamente elevada. La mayoría de estos jóvenes científicos empezaron a desembarcar en Europa a partir de 1.926, como es el caso de Linus Pauling, atraídos por los extraordinarios avances que la física estaba viviendo en ese momento. Ahora bien, de ese capítulo de la física nos ocuparemos páginas más adelante, en este momento intentemos ver algo del trabajo que Sommerfeld llevó a cabo durante la década previa.

Tras la publicación del modelo atómico de Bohr se hacían pertinentes una serie de arreglos que no quedaron completamente agotados tras los trabajos de Broglie. Ya durante el mismo año de su publicación –1.913– se realizaron importantes aportaciones, siendo oportuno destacarse los nombres de Moseley, Johannes Stark y los experimentos sobre descargas en gases llevados a cabo por James Franck y Gustav Hertz²¹². Pero si hay que destacar un personaje por

²¹¹ Esta ecuación supone una segunda cuantización en el átomo de hidrogeno. Debemos hablar de una cuantización geométrica y ya no sólo energética. Representada por l esta segunda cuantización vendría a constituir el momento angular, es decir, la cantidad de rotación (movimiento rotacional) del electrón. Posteriormente se daría cuenta de una tercera cuantización relacionada con el momento magnético (m)

²¹² Estos experimentos fueron llevados a cabo entre 1.913 y 1.914.

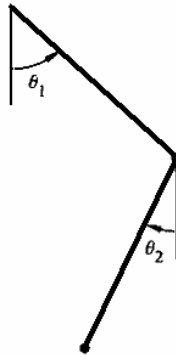
encima de todos, ese es el de Arnold Sommerfeld, con quien se llegó –en términos de Sanchez Ron– al clímax de la denominada vieja teoría cuántica²¹³.

El punto de partida de los trabajos que por entonces Sommerfeld realizó fue el “problema de la estructura fina del átomo de hidrógeno” ¿En que consistía este problema? Con la mejora de los medios técnicos se había constatado que las líneas espectrales eran, a pesar de haberse mostrado en principio sencillas, se encontraban en realidad desdobladas: a la hora de examinar las líneas espectrales del hidrógeno con una resolución elevada se podían observar dos líneas. Posteriormente, al llevar a cabo un examen más atento y preciso de estructuras más complejas se pudieron observar “tripletes”, “cuartetos”, “quintetos” y, finalmente, “multipletes”: grupos que no sólo incluían líneas separadas de otros grupos, sino también conjuntos de líneas con características similares. Ciertamente es que Michelson y Morley (1.887) ya habían observado la existencia de la estructura fina del espectro de hidrógeno, sin embargo este descubrimiento no tuvo ningún desarrollo significativo hasta que en 1.916 Sommerfeld recuperó el problema. Siguiendo a Sanchez Ron, podemos ver que la aportación de Sommerfeld al respecto se dio en dos fases que debemos distinguir. No obstante, antes de entrar directamente en la exposición de éstas se hace oportuno definir dos conceptos que fueron clave: *coordenadas generalizadas* (q) y *momentums conjugados* (p):

Cuando en física se hace referencia a q uno debe pensar en un conjunto de parámetros que sirven para determinar la posición de un punto, aunque no precisamente se trate de una posición geométrica, sino de una posición *dentro* de un continuo de estados posibles. A este conjunto de parámetros q se le llama coordenadas generalizadas. La introducción de estas coordenadas generalizadas permite tener libertad al definir el marco bajo el cual se describirá un sistema dado. Por ejemplo, supongamos que queremos estudiar un sistema compuesto por dos péndulos, uno sujeto al extremo del otro. Es posible establecer un origen para un sistema de coordenadas cartesianas; sin embargo, resulta más natural para el análisis describir a ambos péndulos a través de sus respectivos ángulos de apertura medidos contra una vertical, α_1 y α_2 , tal como lo ilustra la figura. Cabe remarcar que estas coordenadas pueden no ser de índole

²¹³ Se conoce como la vieja teoría cuántica la senda abierta por Niels Bohr. Más adelante tendremos igualmente la oportunidad de ver cuándo, cómo y en qué consistió la nueva teoría cuántica.

geométrica, también pueden ser parámetros de energía, frecuencia y demás. Lo que hay que tener en mente es que la localización del



sistema se realiza en un espacio que tiene la misma naturaleza que los parámetros escogidos, es decir, si hablamos de ángulos entonces la localización del estado del sistema estará dada por dos cantidades de rotación, si hablamos de energías la localización estará dada por dos niveles de energía, etcétera.

Por otro lado, el conjunto de variables p sirve para establecer una dinámica del sistema, aunque no se trate técnicamente de las propiedades de evolución geométricas algún sistema, y se le denomina moméntums conjugados. A diferencia de las coordenadas generalizadas no tenemos libertad para elegir los moméntums conjugados del sistema, sino que están definidos a través de la ecuación

$$p_i = \frac{\partial L(q_j, \dot{q}_j, t)}{\partial \dot{q}_i}$$

La ecuación nos dice que el i -ésimo moméntum generalizado (alguno de entre los muchos que puede haber en un sistema) está dado por la razón de cambio del Lagrangiano L – que no es más que la diferencia entre la energía cinética y la energía potencial del sistema– con respecto a la velocidad de cambio de la i -ésima coordenada generalizada. A las variables conformadas por los conjuntos de parámetros q y p se les llama variables canónicas.

Fue precisamente la extensión de estos dos conceptos –*coordenadas generalizadas (q) y moméntums conjugados (p)*– a la mecánica cuántica la que dio lugar a las dos fases que aludíamos previamente:

Primera Fase (1.915): Durante los trabajos que Sommerfeld llevó a cabo en 1.915 intentó generalizar las condiciones cuánticas de $u(\nu, T) = \nu^3 f(\nu/T)$ Planck²¹⁴ de tal manera que incluyesen sistemas de más de un grado de libertad. Es decir, lo que se propuso era hacer compatible el modelo de órbitas circulares de Bohr con un modelo de órbitas elípticas: «debemos imponer la condición $[\int p \cdot dq = n \cdot h]$ ²¹⁵ sobre cada grado de libertad del sistema, esto es, debemos postular que el valor de la integral de fase para el k-ésimo grado de libertad sea un múltiplo de h:

$$\int p_k dq_k = n_k h$$

A partir de ahí, y siguiendo el procedimiento bohriano de restar niveles energéticos diferentes e igualar a $h\nu$, Sommerfeld obtuvo la expresión correspondiente a la frecuencia de las posibles radiaciones emitidas entre dos niveles (n y s):

$$\nu = R \left[\frac{1}{(n + n')^2} - \frac{1}{(s + s')^2} \right]$$

donde R es la constante de Rydberg, $2\pi^2 m e^4 / h^3$.

Esta última expresión es, términos del mismo Sommerfeld, *de la mayor importancia y extraordinariamente simple*:

²¹⁴ En esta ecuación, debida a Wien, u es la densidad de energía de radiación del cuerpo negro, ν es la frecuencia, T es la temperatura y f es la función que Planck con sus trabajos llegó a determinar.

²¹⁵ Esta cantidad se le conoce como *acción angular* y sirve como base para el estudio de sistemas dinámicos de la física clásica. La extensión de este concepto a la mecánica cuántica hizo posible el desarrollo formal de la teoría.

*Hemos encontrado para la energía de las órbitas elípticas²¹⁶ el mismo valor [que el que se obtiene en la teoría de Bohr], con la única diferencia de que el **número cuántico** n [de Bohr] en este último caso **está reemplazado por la suma cuántica**, $n + n'$. Cada una de las elipses cuantizadas de nuestra familia tiene una cantidad de energía equivalente a la de un círculo definido por Bohr (...) Desde el punto de vista de los resultados prácticos esta fórmula espectral da de nuevo solamente la serie de Balmer, pero posee un significado teórico más profundo y su origen tiene ahora raíces diversas. Admitiendo nuestras órbitas elípticas, la serie no ha ganado líneas suplementarias y no ha perdido nada de su agudeza.²¹⁷*

Aunque el procedimiento teórico de Sommerfeld suponía un avance respecto al de Bohr, lo cierto es que no daba cuenta de la estructura fina, algo que sí hizo durante la segunda fase.

Segunda fase: Al igual que hiciera durante el año anterior, en 1.916 Sommerfeld trató de calcular la expresión relativista más general para la energía de los niveles energéticos (W):

$$1 + \frac{W}{m_0c^2} = \left[1 + \frac{\alpha^2}{(n' + \sqrt{n^2 - \alpha^2})^2} \right]^{-1/2}$$

donde α es la constante de estructura fina, $\alpha = 2\pi e^2/hc$.

A partir del modelo de órbitas elípticas, con esta fórmula general relativista se hacía posible dar cuenta de casi todos los fenómenos espectrales que el hidrógeno es capaz de exhibir²¹⁸. La explicación física está en el hecho de que al tenerse en cuenta la dependencia relativista de la masa con la velocidad, las órbitas elípticas avanzan con el tiempo: los electrones se mueven por orbitas elípticas no cerradas, es decir, la posición de afelios y perihelios de la elipse va cambiando. Por ello, la energía del electrón no depende de la suma de los números cuánticos n y n' , sino que éstos intervienen en cada momento por separado. De ahí surge una dependencia de los niveles energéticos con respecto al número cuántico azimutal, y por consiguiente que las diferentes posibilidades de los n y n' (o s y s') no proporcionen distintos

²¹⁶ Tal y como el mismo Linus Pauling señala (Nov. 7, 1.985), el trabajo de Sommerfeld fue de extraordinaria importancia para la química, ya que permitió introducir, aunque fuera de una manera inicial muy vaga, algunos elementos cuánticos en la disciplina. Ejemplo de ello es que hacía posible, a partir del concepto de átomo de carbono tetraedreal que manejaban, representar que en los compuestos de carbono cada uno de estos átomos tenía 4 orbitales elípticos dirigidos directamente hacia las esquinas de un tetraedro.

²¹⁷ Cita extraída de J.M. Sánchez Ron (2.001), p. 310. Hemos respetado las cursivas y negritas de la obra consultada.

²¹⁸ Faltaba por explicar el fenómeno de “hyperfine splitting”.

resultados, hay subniveles que pueden combinarse. Fruto de ello es la aparición de las distintas rayas del espectro –dobletes, tripletes,...–, aunque muy próximas y muy parecidas entre sí debido a que la diferencia de energía entre los subniveles es muy pequeña²¹⁹.

La nueva mecánica cuántica

Sin embargo, las investigaciones llevadas a cabo sobre átomos más complejos que el del hidrógeno, principalmente las realizadas por Heisenberg en Gotinga empleando los métodos perturbativos disponibles en la mecánica clásica y celeste mostraron claramente los límites del modelo Bohr-Sommerfeld: éste tan solo funcionaba con la molécula de hidrógeno. Los intentos llevados a cabo para solucionar este problema no funcionaban y la física teórica parecía empezar a desvariarse. El grado de desconcierto llegó hasta el punto en el que a partir de las teorías no era posible ya deducir *a priori* argumentos que permitieran saber en qué casos había que llevar a cabo cálculos a partir de números cuánticos semienteros –ya se había constatado que en algunas ocasiones funcionaba– y en cuales había que proceder con números cuánticos enteros. Es el principio del fin de la vieja física cuántica, ya que fruto de este contexto de confusión, entre junio de 1.925 y junio de 1.926, aparecieron 3 desarrollos distintos e independientes de una teoría cuántica completa²²⁰: la mecánica matricial de Heisenberg, la mecánica ondulatoria de Schrödinger y el álgebra cuántica de Dirac²²¹.

F. La mecánica matricial de Heisenberg

En el año 1.923 la situación se mostraba ya prácticamente insostenible, haciéndose cada vez más evidente la necesidad de un cambio. La cuestión más importante era, tal y como señaló Pauli en una carta que envió a Bohr el 21 de febrero de 1.924, « ¿en qué medida se puede hablar realmente de las órbitas definidas de los electrones en los estados estacionarios? Creo

²¹⁹ Estas diferencias dependen del factor α^2 , siendo $\alpha^2 = 5,3 \cdot 10^{-5}$

²²⁰ Posteriormente se demostró que las 3 teorías eran equivalentes.

²²¹ No obstante vamos a desarrollar tan sólo los dos primeros, ya que fueron estos los que influyeron –aunque en diferente medida– en el trabajo de Linus Pauling.

que en modo alguno se puede suponer que esto sea evidente en sí mismo... En mi opinión, Heisenberg da precisamente en el blanco cuando duda de la posibilidad de hablar de órbitas definidas»²²². Esta idea ya adelantada por Heisenberg y recuperada por Pauli fue desarrollada por el primero en su artículo “Über ein Abänderung der formalen reglen der Quantentheorie beim Problem der anomalen Zeemanefekte”. En este trabajo pone de manifiesto que «se hace más claro que nunca que una explicación del efecto Zeeman anómalo debe traer consigo modificaciones profundas en nuestras concepciones teóricas cuánticas»²²³. Estos cambios no se hicieron esperar, ya que el mismo día en el que el texto de Heisenberg llegaba a la redacción de *Zeitschrift für Physik*, también lo hacía el texto de Max Born “Über Quantenmechanik”. En este artículo, tal y como el mismo Born señaló al inicio del mismo, intentaba «dar un primer paso hacia una teoría cuántica del acoplo [interacción entre “sistemas” separados, como los átomos; JMSR] que tenga en cuenta algunas de las propiedades más importantes de los átomos (estabilidad, resonancia para frecuencias de transición, principio de correspondencia), y que surja de manera natural de las leyes clásicas. Esta teoría incluye la fórmula de dispersión de Kramers y revela una estrecha afinidad con la formulación de Heisenberg de las reglas para el efecto Zeeman anómalo»²²⁴. Era la primera vez que se utilizaba la expresión *mecánica cuántica*.

Al igual que la mecánica de Newton había servido para calcular las órbitas de los planetas, la mecánica cuántica debía servir para calcular las propiedades de los átomos. Quien mejor partido supo sacarle en principio a la situación que se estaba viviendo fue Heisenberg.

Cuando en mayo de 1.925 comenzó a trabajar sobre la elucidación de las intensidades del espectro de hidrógeno. Es decir, intentó diseñar un código que permitiera relacionar los números cuánticos y los estados de energía de un átomo con las frecuencias e intensidades de los espectros de luz. Sus intentos fueron en principio un fracaso, pero le llevaron a preguntarse por el significado de $x(t)$. Se sabía que en un átomo no representaba realmente la órbita. Entonces, ¿qué significaba? Representaba algún tipo de radiación, de tal manera que todas las frecuencias que se pudieran emitir de alguna forma representan esta $x(t)$. Fue entonces cuando

²²² Cita extraída de Sánchez Ron (2.000), p. 423. Se han conservado las cursivas tal y como aparecen en el texto revisado.

²²³ Cita extraída de Sánchez Ron (2.000), p. 424.

²²⁴ Born, Max (1.924). Cita extraída de Sánchez Ron (2.000), p. 424.

vio claramente lo innecesario que era seguir investigando las órbitas de los electrones del átomo, haciéndose posible renunciar a la interpretación habitual de la coordenada de posición x y crear un sistema mecánico matemáticamente más sencillo. Además, había que recuperar el viejo legado que Ernest Mach había propugnado: la física sólo debía admitir magnitudes directamente observables. Por ello, las órbitas podían ser sustituidas por la totalidad de las frecuencias de oscilación y de las magnitudes que determinan la intensidad de estas líneas (llamadas amplitudes) que sí eran magnitudes directamente observables²²⁵. Había que buscar un método para determinar datos teórico-cuánticos utilizando relaciones entre magnitudes observables y que no atentara contra el principio de conservación de energía. A partir de esa idea redefinió el problema previo desde la interpretación del comportamiento de un electrón como un oscilador armónico unidimensional capaz de producir todas las frecuencias del espectro.

Partiendo de las variables canónicas (p y q) Heisenberg descubriría algo sorprendente y desconcertante: en física cuántica $p \cdot q$ no era lo mismo que $q \cdot p$ ²²⁶. Con el fin de obtener las frecuencias de onda e intensidades correctas de las líneas espectrales se hacía patente que no bastaba con la física clásica, había que introducir el postulado cuántico, tal y como había hecho Bohr. Los estados de energía estaban cuantizados independientemente del tiempo, es decir, eran estacionarios como en el modelo de Bohr.

Los resultados de sus investigaciones fueron recogidos en uno de los artículos más importantes de la mecánica cuántica²²⁷. Pero igualmente importante fue el hecho de que Heisenberg dejara una copia del texto a Max Born –su superior– casi al mismo tiempo que enviaba otra a *Zeitschrift*. Born casi hechizado por el texto de Heisenberg estuvo meditando sobre la extraña ley de la multiplicación que proponía Werner hasta que se dio cuenta que esa multiplicación simbólica no era más que un cálculo matricial. Aunque el mismo Bohr dominaba

²²⁵ Esta fue una obsesión importante en el pensamiento de Heisenberg. Tal y como el mismo hizo saber a Albert Einstein en una conversación privada que mantuvieron en casa de este segundo en 1.926. En dicha ocasión Einstein le hizo ver que en su descripción matemática, Heisenberg no introducía en ningún momento el concepto de órbita de un electrón. Lo desconcertante era que ya se había observado directamente en la cámara de niebla la trayectoria. Heisenberg afirmó que realmente no se podía observar, lo que realmente se registraba eran las frecuencias de la luz emitida por el átomo, intensidades y probabilidades de transición, pero no órbitas.

²²⁶ $p \cdot q - q \cdot p$ no es cero, sino $2\pi i$, donde $i = \sqrt{-1} \rightarrow pq - qp = \frac{ih}{2\pi}$

²²⁷ Heisenberg, Werner (1.925).

este tipo de cálculo desde estudiante, pidió ayuda a su alumno Pascual Jordan –experto en métodos matriciales– reescribiendo la teoría de Heisenberg en un lenguaje matricial sistemático.

De ese modo era posible representar las frecuencias del espectro óptico mediante una matriz infinita. Heisenberg había apuntado que los osciladores individuales con impulso $p(t)$ y desplazamiento $q(t)$ vibraban con esas frecuencias, por lo que también eran matrices infinitas. Born pudo reescribir la ecuación de Heisenberg a partir de esas matrices de tal manera que se pudiera obtener las frecuencias e intensidades correctas, en donde p y q denotan matrices formadas por los elementos $p(nm)$ y $q(nm)$ e \mathbf{I} la matriz unidad:

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{I}$$

Tras este hallazgo, Born y Jordan comenzaron a redactar rápidamente un artículo, que completarían posteriormente con el mismo Heisenberg, conocido posteriormente como el trabajo de los “tres hombres”. En este artículo, en palabras de Sánchez Ron:

La mecánica matricial tomó su forma más acabada. En la mejor tradición de matemática de Gotinga, contiene el aparato matemático completo que se convertiría en habitual en los textos de mecánica cuántica: autovalores (espectros discretos y continuos) y autovectores, transformaciones canónicas, formas cuadráticas de Hilbert con un número infinito de variables (en resumen, apartados de lo que ahora denominamos teoría de los espacios de Hilbert), al igual que relaciones generales de conmutación, teoría de perturbaciones, aplicaciones físicas a sistemas con un grado de libertad o con un número arbitrario de grados de libertad, como leyes de conservación del movimiento lineal y angular, fórmulas para la intensidad del espectro, reglas de selección, el efecto Zeeman, osciladores armónicos acoplados. Faltaba, eso sí, un problema importante, el de comprobar que la nueva mecánica funcionaba bien para el átomo de hidrógeno. Tal tarea fue llevada a cabo por Pauli (1.926).

G. La mecánica ondulatoria de Schrödinger²²⁸

Podemos señalar como uno de los puntos más importantes para la génesis de la mecánica ondulatoria la no aceptación por parte de muchos científicos a renunciar a la visualización física del universo, concretamente a la estructura física del átomo²²⁹. Un gran número de los físicos mostraron su repulsa y frustración ante la pérdida de una imagen física de lo continuo, sobre todo a partir de la formulación de la mecánica matricial de Dirac. Por ello – tal y como señalan Ordóñez, Navarro y Sánchez Ron²³⁰–, la aparición de la mecánica ondulatoria supuso un gran alivio para muchos de ellos al prometer un retorno al continuo. Clave para esta reaparición fue la figura del físico francés Louis De Broglie. En la defensa de su tesis doctoral el 29 de noviembre de 1.924 en la Facultad de Ciencias de la Universidad de París, de Broglie sugería y desarrollaba las ideas que había publicado el año anterior según las cuales las partículas pueden mostrar una conducta similar a una onda. De esta forma se abría la posibilidad a una nueva mecánica cuántica ondulatoria que hacía posible el retorno de un enfoque físico. Fueron muchos los autores que creyeron en él, ya que lo único que hacía falta era desarrollar un método que permitiera llevar a cabo una descripción ondulatoria de la materia. Fue entonces el físico austriaco E. Schrödinger quien lo hizo posible a través de la formulación de una ecuación: la *ecuación de Schrödinger*.

Pero ¿cómo un físico preocupado por la relatividad llegó a la formulación de esta ecuación? Hay que reconocer que Schrödinger fue muy afortunado, ya que sus intereses cuánticos, casi por casualidad, se iniciaron en un momento oportuno: 1.923-4, periodo en el que de Broglie –como decíamos– desarrollaba y presentaba sus ideas sobre la dualidad onda-

²²⁸ Tal vez a un lector atento podría extrañarle que al modelo físico más influyente en la obra de Pauling, reconocido además por muchos autores como uno de los mayores logros del pensamiento del siglo XX –la mecánica ondulatoria de Schrödinger– le dediquemos menos espacio que a los modelos previos. El motivo de ello es muy sencillo. Podemos adelantar que la mecánica ondulatoria fue rápidamente aceptada como una herramienta matemática cuya eficacia para tratar los problemas de la estructura atómica no tenía precedentes. Por ello se hace oportuno llevar a cabo un estudio profundo y detenido de las influencias que ejerció sobre la obra y el pensamiento de Linus Pauling y, paralelamente, de la influencia que el trabajo de éste tuvo en la aceptación y posterior desarrollo de la mecánica cuántica, principalmente en el ámbito de la química. Creemos, por ello, que es más oportuno llevar a cabo tal análisis en un capítulo dedicado expresamente a ello y no dentro de esta breve descripción contextual. Por esa razón, durante las próximas líneas de este capítulo trataremos de mostrar algunos de los elementos más importantes que hicieron posible la formulación y desarrollo de la mecánica ondulatoria.

²²⁹ Esta observación es de suma importancia, ya que si cierto es que nos encontramos en un capítulo dedicado al contexto científico, pone claramente manifiesto la extraordinaria importancia que tuvieron los cuestionamientos filosóficos en el desarrollo de la mecánica cuántica.

²³⁰ Ordóñez, J., Navarro, V. y Sánchez Ron, J.M. (2.003), p. 528

corpúsculo y, de forma muy seguida, veían la luz los artículos de Bose (1.924) y Albert Einstein (1.924b, 1.925) sobre la nueva estadística cuántica iniciada por Planck con su trabajo sobre el cuerpo negro. Schrödinger reconoció abiertamente su deuda intelectual con de Broglie y Einstein, por quien sentía un gran respeto. Pero debemos destacar también el papel –tal vez involuntario– que Peter Debye jugó como inspirador. Creemos que una buena forma de dar cuenta de ello es hacerlo a través de los recuerdos que Felix Bloch vertió sobre un curioso episodio que tuvo lugar en la Escuela Politécnica de Zúrich (ETH) cuando él era aún estudiante de esa institución:

El coloquio, dirigido con firme autoridad por Debye, podía tener una audiencia de cómo mucho dos docenas de personas, en un buen día.

También se enseñaba física en la Universidad de Zúrich, en una Facultad más pequeña y algo menos ilustre que en la ETH. La teoría estaba en manos de un cierto austriaco de nombre Schrödinger, y el coloquio se celebraba alternativamente en ambas instituciones...

En una ocasión, al final del coloquio oí a Debye decir a Schrödinger algo como: “Schrödinger, en cualquier caso usted no está trabajando ahora en ningún problema muy importante. ¿Por qué no nos cuenta en alguna ocasión algo acerca de la tesis de de Broglie, que parece haber atraído alguna atención?”.

Así, en uno de los coloquios siguientes, Schrödinger dio una maravillosamente clara exposición de cómo de Broglie asociaba una onda con una partícula y como él podía obtener las reglas de cuantización de Niels Bohr y Sommerfeld exigiendo que se incluyese un número entero de ondas en una órbita estacionaria. Cuando había finalizado, Debye señaló de paso que él pensaba que ese modo de hablar era demasiado infantil. Como estudiante de Sommerfeld había aprendido que, para tratar apropiadamente con ondas, uno debía tener una ecuación de ondas. Sonó bastante trivial y no pareció que hiciese una gran impresión, pero Schrödinger evidentemente pensó después un poco más acerca de la idea.

Algunas semanas después dio otra conferencia en el coloquio en la que comenzó diciendo: “Mi colega Debye sugirió que se debía tener una ecuación de ondas; bien, yo he encontrado una”.

Y entonces nos contó esencialmente lo que iba a ser, bajo el título “Cuantización como un problema de autovalores”, el primer artículo de una serie publicada en el *Annalen der Physik*.²³¹

En el primero de estos artículos, tal vez el más importante, Schrödinger comienza afirmando:

²³¹ ²³¹ Cita extraída de Sánchez Ron (2.000), p. 456.

En este artículo deseo considerar primero, el caso más sencillo del átomo de hidrógeno (no relativista y sin perturbar), y demostrar que las habituales condiciones cuánticas se pueden reemplazar por otro postulado, en la que no se introduce la noción de “números enteros”, meramente como tales. Más bien, cuando aparecen la “entericidad” (la necesidad de utilizar números enteros) surge en la misma forma natural en que lo hacen en el caso del número de nodos de una cuerda vibrante. La nueva concepción se puede generalizar, y afecta, creo, muy profundamente a la verdadera naturaleza de las reglas cuánticas.

$$\Delta\psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0$$

La función de onda del sistema (ψ) podía ser reemplazada por una serie infinita de funciones de onda de los estados individuales, que son armónicos naturales unos de otros, es decir, la relación entre sus frecuencias son números naturales. El descubrimiento de Schrödinger suponía que las ondas reemplazantes describían los estados individuales del sistema cuántico y sus amplitudes indicaban el grado de importancia relativa de cada estado particular respecto al sistema global.

Ecuación de Schrödinger en una dimensión, donde:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ es la segunda derivada respecto de x .

x denota la posición

E es la energía del sistema

V es la energía potencial

Con su nuevo formalismo se superaban los resultados clásicos de la “vieja mecánica cuántica”. Pero todavía quedaba pendiente dar cuenta del significado de la función ψ . Si bien no vamos a desarrollar ahora este punto, es importante recuperar las palabras que el propio Schrödinger dedica en este primer artículo a uno de los problemas filosóficos más importantes de la mecánica cuántica: la relación de este formalismo matemático con la posibilidad de se representación pictórica.

Naturalmente, se nos muestra con intensidad que debemos intentar ligar la función ψ con algún *proceso de vibración* en el átomo, que esté más próximo a la realidad que las órbitas electrónicas, cuya existencia real está siendo muy cuestionada en la actualidad. Inicialmente, pretendía dar las nuevas condiciones cuánticas de una forma más intuitiva, pero finalmente las he expresado de la forma matemática anterior más neutra porque evidencian con mayor claridad lo que es esencial. Este aspecto esencial es

a mi parecer el que el postulado de “números enteros” ya no entra de manera misteriosa en las reglas cuánticas, sino que hemos dado un paso más allá en la identificación de su origen. Encontrando que la “entericidad” tiene su origen en la finitud y unicidad de una cierta función espacial.

Resumiendo, el modelo propuesto por Niels Bohr, con los electrones girando alrededor del núcleo en órbitas estáticas –de forma análoga a cómo lo hacen los planetas alrededor del Sol en el modelo copernicano– debía ser superado. Además de violar importantes leyes físicas, el modelo se había mostrado exitoso tan sólo para explicar el problema de la radiación del átomo de hidrógeno con un solo electrón –siendo muy insuficiente a la hora de explicar la radiación de átomos más complejos– y sólo porque era el investigador quien determinaba esas trayectorias permitidas. Tras varios intentos, la solución vendría a partir de los trabajos del físico francés Louis De Broglie, quien demostró que las partículas –como por ejemplo los electrones– podían mostrar una conducta similar a las ondas, tal y como se había visto que ocurría con la luz. Erwin Schrödinger aplicó tal idea a los electrones atómicos que se encontraban en torno al núcleo del átomo. De esa forma, sugería el físico austriaco, los átomos e iones que contienen varios electrones podían ser tratados bajo un modelo idealizado en el que se sustituía la capa de electrones interiores por un revestimiento de cargas eléctricas y un electrón simple en la órbita penetrante de la superficie envolvente. Siendo las ondas permitidas aquellas que dan lugar a configuraciones estáticas, era posible explicar las reglas de selección para el “salto cuántico”. Bajo esta visión, que coincide con la representación atómica moderna, desaparecía el concepto de órbita que era reemplazado por el de “nube electrónica”, la cual vendría a representar la región atómica dónde la probabilidad de acumulación de los electrones es máxima.

Las implicaciones físicas y filosóficas de este modelo van a estar presentes de forma muy especial a lo largo de la obra de Linus Pauling. Adelantemos tan sólo que la opción del químico de Pórtland por la propuesta de Schrödinger nos obliga a revisar las implicaciones epistemológicas, ontológicas y metodológicas que estaban en juego dentro del ámbito de la

física²³² –antes que en la obra de Pauling– y que, al igual que ocurriera en otros campos, tuvo su reflejo en la química, sobre todo, a la hora de interpretar ésta como un fenómeno cuántico.

Hacia la interpretación de la química como un fenómeno cuántico

Tras la aparición de la mecánica matricial y ondulatoria su aplicación al ámbito de la química no se hizo esperar. Tan solo un año después de los trabajos de Heisenberg y Schrödinger, el joven danés O. Burrau aplicó la nueva mecánica cuántica al cálculo de la energía, la distancia de los enlaces y la distribución de los electrones en el compuesto de H_2^+ a partir de coordenadas elípticas. Sorprendentemente para muchos, sus resultados coincidían con los datos aportados por los experimentos. Aunque su ecuación contenía fallas, ofrecía un buen conocimiento sobre la estabilidad del sistema. Poco después Edgard U. Condon publicó un tratado aproximado sobre el enlace de par de electrones en la molécula de hidrógeno. Ese mismo año, Walter Heitler y Fritz London publicaron los datos obtenidos a partir de los cálculos llevados a cabo sobre la molécula de dihidrógeno (H_2). Aunque se les suele considerar físicos, frecuentemente se considera el trabajo de Heitler y London como el primer cálculo de química cuántica. Basadas en la teoría de las perturbaciones²³³ las investigaciones llevadas a cabo señalaban, de manera general, que la energía del enlace para el par de electrones podía ser atribuido a la energía resonante correspondiente al intercambio de los dos electrones entre los orbitales atómicos.

Pronto otros investigadores mejoraron los primeros resultados obtenidos contrayendo un poco el orbital del átomo de hidrógeno, introduciendo varias polarizaciones y por medio de condicionadores iónicos. A partir de funciones más complicadas, las propiedades calculadas de

²³² Tal revisión se llevará a cabo en la sección dedicada precisamente al contexto filosófico, donde examinaremos en primer lugar el debate suscitado entre los llamados “*Caballeros del continuo*” y los seguidores de la “*Interpretación de Copenhagen*” en torno al significado físico de la nueva mecánica cuántica. Veremos así, qué es lo que estaba en juego, qué fue lo que pudo mover a decidirse a Pauling y las implicaciones que tuvo su elección en su obra. Posteriormente, veremos la acomodación que vivieron este debate y otras implicaciones de carácter epistemológico, ontológico y metodológico provenientes de la física en el seno de la química junto a otras implicaciones inherentes a misma disciplina. Todo ello será decisivo –valga reiterarlo una vez más– para poder hacernos cargo con alguna mayor garantía, de la dimensión de la obra de Pauling

²³³ La teoría de las perturbaciones es una herramienta matemática que permite introducir modificaciones pequeñas a la solución de un sistema ya estudiado sin necesidad de volver a plantear el problema.

las moléculas de hidrógeno estuvieron muy pronto en completa sintonía con los valores observados. Desde entonces, desde 1.927, la teoría moderna de la química basada en la mecánica cuántica fue progresando continuamente. Sin embargo este progreso no se llevó a cabo en una sola dirección, sino que siguió dos líneas diferentes. La primera de estas vías fue la desarrollada a partir de la ecuación de Schrödinger. El segundo método, en el que el mismo Pauling se mostró especialmente interesado –tal y como él mismo reconoció²³⁴–, fue el de la aplicación de las ideas de la mecánica cuántica, en combinación con la información empírica, al problema de la estructura y las propiedades de sustancias, así como al desarrollo y extensión de una teoría semiempírica de la estructura química que hiciera posible a todos los químicos mejorar en la comprensión y el conocimiento de sus observaciones.

Linus Pauling²³⁵ señaló que aunque los cálculos llevados a cabo por medio del método de perturbación no proveían de ninguna información nueva, podía resultar útil para saber el grado de aproximación alcanzado en aquellos casos en los que la función de onda no podía ofrecer una solución precisa. Pero más importante era el modo en el que permitía resolver el problema de la interacción entre un átomo de hidrógeno en estado de reposo y un protón. Desde una interpretación clásica, tal interacción resultaba siempre repulsiva independientemente de la distancia. Ahora bien, desde la mecánica cuántica se podía sostener que el electrón, por no estar localizado sobre uno de los átomos, y la función de onda al ser tomada como una combinación lineal de las dos funciones atómicas de onda en estado de reposo, entonces la energía de interacción ha de tener un mínimo marcado en una distancia aproximada de 2 a.u. Este fue el primer ejemplo de lo que vino a ser denominado posteriormente como el método de combinación lineal de orbitales atómico (LCAO)²³⁶.

A pesar de los centenares de cálculos mecánico-cuánticos *ab initio* que los químicos tenían que llevar a cabo y su complejidad, la mayoría de los resultados obtenidos coincidían en gran medida con los aportados por los experimentos. Fue por ello por lo que rápidamente se vio en la mecánica cuántica un excelente medio para encontrar las respuestas correctas acerca de la

²³⁴ Pauling, L. (Nov. 7, 1.985).

²³⁵ A partir de aquí se nos va a dificultar hablar del contexto sin hacer referencia al mismo Pauling, ya que fue una figura clave en el mismo. Por esa razón, aludiremos a su trabajo y sus esfuerzos tan sólo cuando sea indispensable, posponiendo un desarrollo más profundo y exhaustivo para aquellos capítulos dedicados precisamente a tal fin.

²³⁶ Base de la moderna teoría del orbital molecular.

estructura molecular y la estructura cristalina. Incluso, a través de los ordenadores se podían predecir los valores de ciertas propiedades de sustancias que aún no habían sido sujeto de investigación experimental, permitiendo hacer frecuentes predicciones, muy fiables²³⁷.

Linus Pauling y John C. Slater desarrollaron independientemente el modelo de Heitler y London de 1.927 dando lugar al modelo de enlace de valencia²³⁸. En el mismo se asociaba cada enlace covalente convencional con un par de electrones en un orbital colocado y considerando todas las posibilidades en las que esos electrones pueden “intercambiarse”. La preferencia de Pauling por la teoría del enlace de valencia sobre la teoría orbital molecular²³⁹, quedó de manifiesto en muchas ocasiones. Esto fue de suma importancia, ya que esta fue la base sobre la que escribió la serie de artículos que llevaron por título “The Nature of the Chemical Bond”²⁴⁰. En el primero de estos artículos (1.931) presentó cómo bajo el programa que se iba a presentar, el cálculo mecánico cuántico podía proveer información acerca de:

La fuerza relativa de los enlaces formados por diferentes átomos, los ángulos entre enlaces, la rotación libre, o la falta de rotación en el eje de los enlaces, la relación entre los números cuánticos de electrones enlazados y el número y disposición espacial de enlaces, y más. También se desarrolla una teoría completa de los momentos magnéticos de moléculas e iones complejos, y se muestra como para muchos elementos compuestos involucrados de los grupos de transición esta teoría, junto a las reglas del enlace a partir de un par de electrones, es posible dar una asignación única de la estructura de los electrones tan bien como una determinación definitiva del tipo de enlaces implicados²⁴¹.

En gran medida Pauling desarrolló su propio lenguaje para describir sus nuevos conceptos, y de los muchos términos introducidos, tres parecen ineludiblemente asociados ya a

²³⁷ Incluso sobre sustancias inestables, tales como, por ejemplo, el isomero HNC, el cual es mucho menos estable que HCN.

²³⁸ O también conocido como modelo Heitler-London-Slater-Pauling.

²³⁹ El método de orbitales moleculares fue desarrollado como un método alternativo por Friedrich Hund y Robert S. Mulliken. En este modelo, en que los electrones se describían por funciones matemáticas deslocalizadas por toda la molécula, menos intuitivo para los químicos, era no obstante más potente a la hora de predecir propiedades que el método de enlace de valencia, razón por la cual es virtualmente el único usado en los últimos años.

²⁴⁰ A partir de estos artículos publicó en 1.939 uno de los libros de química más importantes del siglo XX que llevaría el mismo título.

²⁴¹ Pauling, Linus (1.931). Cita extraída del artículo de Jack Dunitz que se encuentra en Mead Clifford (2.001), p. 84.

su nombre: hibridación, resonancia y electroafinidad, conceptos estos que serán desarrollados, junto a otros igualmente claves en su obra, en la segunda parte de este trabajo.

Sin embargo, antes de terminar este capítulo, debemos señalar por un lado la extraordinaria aplicación efectiva que los químicos llegaron a hacer de la mecánica cuántica molecular en sus esfuerzos por comprender los mecanismos de las reacciones químicas. Por otro, que la influencia de la mecánica cuántica en el trabajo de Pauling rebasó el ámbito de la química. Como él mismo señaló²⁴²,

La mecánica cuántica, junto con la información experimental acerca de las distancias de enlace, los ángulos de enlace y otras propiedades de las moléculas y cristales obtenidas por medio de difracción por rayos X, difracción de electrones y varias técnicas de espectroscopia, han permitido a la moderna química estructural desarrollar aquellos puntos que más han contribuido al progreso científico. Algunos ejemplos son el descubrimiento de la hélice alfa y el enlace polipeptídico en las proteínas, así como el descubrimiento de la doble hélice del ADN, el material genético de los organismos vivos. La biología molecular es ahora uno de los campos de la ciencia que más rápidamente están progresando.

Es justo, yo creo, decir que la biología molecular es un producto de la mecánica cuántica, y que Niels Bohr, por su formulación de su teoría del átomo de hidrógeno en 1.913, hizo una crucial contribución a su desarrollo.

²⁴² Pauling, Linus (1.985). Cita extraída de Barbara (1.995), p. 78.

1.3.3 LAS CIENCIAS DE LA VIDA: BIOLOGÍA Y MEDICINA

INTRODUCCIÓN

Como vimos en el capítulo dedicado a la biografía de Pauling, entre 1.929 y 1.935 los cambios producidos en el Caltech con la creación de la nueva división de biología, la figura y el dinero omnipresentes de Warren Weaver, y la necesidad de nuevos y cada vez más complicados retos, fueron espoleando a Linus Pauling hacia el estudio de sustancias orgánicas. En la amplia bibliografía existente en torno a la vida y obra del científico estadounidense se suele hacer referencia a esta época como un periodo de quiebra con respecto a su trabajo anterior. Sin embargo, y a pesar del gran giro que el nuevo rumbo emprendido significaba –adentrarse en el ámbito de las ciencias de la vida–, entendemos que no podemos hablar de una total fractura con respecto a sus inclinaciones y preocupaciones anteriores. Debemos hablar por el contrario de continuidad, a otro nivel, con otros objetivos inmediatos desde luego, pero también del mantenimiento de una posición teórica que se hace evidente si atendemos a una constante y bien definida perspectiva metodológica, ontológica y epistemológica. Aunque las sustancias cambiaran, aunque las motivaciones y problemas fueran en principio otros, las respuestas finales seguían estando dentro del mismo orden: el descubrimiento de la estructura de las moléculas, las fuerzas que intervienen, sus propiedades y funcionamiento desde el punto de vista químico. A mediados de los años 30, uno de los problemas principales con el que se tenían que enfrentar los biólogos y médicos era precisamente el de los enlaces presentes en las sustancias “vivas”. Estos enlaces eran clasificados en dos grupos, los llamados enlaces “fuertes” y los “débiles”²⁴³. El más fuerte era el enlace químico covalente, el más débil el enlace de hidrógeno, también llamado fuerzas de Van der Waals. Muy pronto se vio como, a pesar de su debilidad, de ser efímeros y evanescentes, los enlaces de hidrógeno²⁴⁴ jugaban un importante papel en la formación de las estructuras de las moléculas biológicas y, por consiguiente, de sus funciones específicas. Pero incluso Pauling quien –como vimos– se sentía poseedor de una “comprensión esencialmente completa del enlace químico”, era a la vista de todos tan sólo un

²⁴³ Estos no deben confundirse con los enlaces “fuertes” y “débiles” que se dan en el núcleo atómico.

²⁴⁴ De forma muy sencilla podemos adelantar que estos enlaces tan sólo se dan mientras dos grupos de átomos están lo suficientemente próximos como para producir fluctuación de cargas en los campos eléctricos respectivos. Esto hace que las cargas opuestas se atraigan y de ese modo se forme el enlace.

pionero orientado en una tierra salvaje que aún estaba por explorar y sobre la cual había que construir un nuevo mundo: la biología molecular.

Las implicaciones de sus trabajos en la construcción de la nueva biología molecular eran evidentes, pero como el mismo químico estadounidense advirtió, su interés por la estructura de las moléculas biológicas, el *secreto de la vida* y todo cuanto hacia en torno a ellas, no eran más que pequeños pasos que le dirigían hacia la medicina. Pauling nos recuerda como “mi interés serio en eso que se llama ahora biología molecular empezó alrededor de 1.935”²⁴⁵. Es decir, aunque sus primeros escauceos con la biología habían empezado a finales de los años 20, él mismo reconoce como los orígenes formales de sus trabajos sobre sustancias biológicas aquellas investigaciones médicas que llevó a cabo sobre la hemoglobina. El siguiente año –1.936– fue decisivo en el giro que tomaron sus investigaciones e intereses científicos. Gran parte de ese año lo dedicó, junto a Charles Coryell, al estudio de algunas de las más diminutas y finas características estructurales de la hemoglobina²⁴⁶. Pero sus trabajos relacionados con la medicina tan sólo comenzaban. Como vimos en la biografía, a raíz de estos trabajos y la presentación de los mismos en el “Rockefeller Institute for Medical Research”, Pauling conoció al Dr. Kart Landsteiner quien con tesón terminó por arrastrarle hacia el campo de la química inmunológica y el desarrollo de un programa de investigación que, en un futuro, ayudaron a la comprensión de la especificidad biológica y la naturaleza de la vida²⁴⁷.

Durante cerca de 60 años Linus Pauling estuvo fascinado con la idea de poder entender alguna vez por qué hay organismos vivos en cualquier rincón de la Tierra, qué mecanismo fue el que hizo que surgiera la vida, y en qué consiste esa capacidad que muestran tantas formas distintas de vida al reproducirse de forma tan precisa. Para dar cuenta de ello, y a raíz de lo expuesto líneas más arriba, este capítulo dedicado al contexto científico bajo el cual Linus Pauling desarrolló su obra ligada al problema de la vida, debemos distinguir dos secciones: la primera dirigida al contexto de la biología, donde se prestará especial atención a las cuestiones de la especificidad y herencia biológica, al evolucionismo y a la genética, bases sobre las que nació la biología molecular; la segunda sección estará dedicada a los primeros trabajos desarrollados en torno a dos importantes problemas médicos relacionados directamente con la

²⁴⁵ Pauling, Linus (1.970, Mayo). Cita extraída de Anthony Serafini (1.989), p. 62.

²⁴⁶ Entre ellas la forma en la que la hemoglobina se combinaba con el oxígeno.

²⁴⁷ Estos trabajos se verán en el capítulo III. Ciencias de la Vida

estructura de la materia: la anemia y la inmunología²⁴⁸. Estos trabajos constituyeron a su vez el nacimiento de la medicina molecular.

1.3.1.1 BIOLOGÍA

En varias ocasiones se ha visto ya cómo Pauling empezó a interesarse por el problema de la vida a finales de la década de los veinte y principios de los treinta. Pero, ¿qué se quiere decir exactamente con eso? ¿A qué nos referimos cuando hablamos del *problema de la vida* en biología? La respuesta es a la herencia biológica²⁴⁹, y hablar de la herencia biológica es, a principios del siglo XX, hablar sobre todo de evolucionismo y genética.

Como vimos en su momento, fue en 1.929, tras la apuesta de los consejeros del Caltech por la irrupción de la institución en el ámbito de la investigación biológica, cuando Pauling comenzó a desarrollar un especial interés por la naturaleza de la vida. No se trató de una temerosa decisión por parte de los directivos, sino de un fuerte desafío que trató de hacerse realidad alrededor de la figura Thomas Hunt Morgan. El rápido y gran desarrollo que vivió la nueva división de biología, unido a su gran curiosidad, llevó a Pauling a interesarse por los trabajos que allí mismo se estaban realizando. Fue de ese modo como se hizo posible que desde muy pronto Pauling tuviera un valiosísimo acceso a las investigaciones y desarrollos más importantes que en ese campo se estaban llevando a cabo. El trabajo de estos biólogos impactó y llamó la atención del químico en tal grado que, con el tiempo, sus intereses científicos se fueron acercando a los de aquellos, si bien es cierto que desde una perspectiva muy distinta.

Para entender cómo la presencia de Morgan y su equipo influyó en la obra de Pauling, debemos ver en qué consistieron los trabajos de estos científicos y el contexto bajo el cual los llevaron a cabo²⁵⁰, haciendo especial alusión al concepto de especificidad y al problema de la herencia biológica, ambos estrechamente vinculados. Pero debemos hacer notar también que

²⁴⁸ Aunque se trate en el punto anterior, debemos señalar que para ambos problemas el tema de la especificidad era también central.

²⁴⁹ Como muy bien recogería posteriormente Schrödinger en su famoso libro *¿Qué es la vida?*, preguntarse en ese momento por el problema de la vida era hacerlo por la herencia biológica.

²⁵⁰ Ver principalmente el capítulo dedicado a *Morgan y la especificidad Biológica*.

estos trabajos se realizaron bajo un nuevo marco, nueva perspectiva sobre la vida, fruto del lento cambio que se fue dando en la biología desde mediados del siglo XIX. Por ello, dedicaremos unas líneas a la investigación biológica que se había estado desarrollando a mediados del siglo XIX y principios del XX; permitiéndonos ver posteriormente el contexto, el debate y la posición que, ante el mismo, se refleja en el trabajo de Pauling.

La investigación biológica a mediados del siglo XIX y principios del XX

A mediados del siglo XIX la biología vivió una verdadera revolución, y es que en menos de veinte años aparecieron la definitiva teoría celular, la teoría de la evolución, el análisis químico de las grandes funciones, el estudio de la herencia, el de las fermentaciones y la síntesis total de los primeros complejos orgánicos. Con los trabajos de Virchow, Darwin, Claude Bernard, Mendel, Pasteur, Berhelot quedaron definidos los conceptos, los métodos y los objetos de estudio que sirvieron de base a la futura biología del siglo XX. Convertida por entonces ya en ciencia experimental, la biología empezó a ver en la organización su objeto propio. Es a partir de este momento cuando se empieza a plantear la cuestión del origen de la vida atendiendo, por un lado, al papel que juegan la causalidad y el azar y, por otro, a la constatación que se produce de la insuficiencia del análisis del organismo en su totalidad: hay que añadir nuevos objetos de estudio como las células o las reacciones químicas. Así, la biología se empieza a escindir en dos ramas:

- Aquella que estudia al *organismo en su totalidad*, como una unidad compleja, como el elemento de una población o una especie, operando con los conceptos de la historia natural.
- Aquella que busca reducir el *organismo a sus constituyentes*, convirtiendo a la naturaleza en una historia en la que los seres vivos son la prolongación de las cosas del mundo inanimado.

Si la teoría de la evolución había convertido a la reproducción en el mecanismo encargado de perpetuar las estructuras y de determinar las variaciones, la teoría celular había ubicado este mecanismo en la célula, concretamente en el huevo. Sin embargo, aunque a mediados de siglo XIX se había hecho posible –gracias a los métodos de la fisiología– analizar el funcionamiento de los seres vivos en varios dominios, aún no se había podido hacer lo mismo con la herencia y la reproducción. Para Claude Bernard “la herencia es un elemento que escapa a nuestro poder y del cual no podemos disponer como lo hacemos con otras propiedades vitales”²⁵¹. Siguiendo a Bufón, el fisiólogo de Rhône situó ésta memoria en un sistema particular, donde reside el *diseño* que se transmite por *tradición orgánica* de un ser a otro; la formación de un organismo se atiene a un *plan* cuya puesta en marcha representa la ejecución de *consignas* muy estrictas. La fisiología experimental se encontraba desarmada, desbordada ante el fenómeno de la reproducción, y es que su interés estaba centrado en el individuo. Mas la experimentación, para acceder a la herencia, requería olvidarse del individuo y centrarse en poblaciones unidas por parentesco. El estudio de grandes números, el estudio estadístico, fue una de las características definitorias de este momento de la ciencia, de la investigación en todos los ámbitos, empezando por una física afanada en la manipulación de grandes números, enormes conjuntos de moléculas que componen los cuerpos, haciendo del azar la trama del universo; Darwin, para hacer surgir la variación de las fluctuaciones estadísticas que se encuentra, echó mano de grandes poblaciones; Mendel, para poder medir y deducir las leyes de los procesos hereditarios observados, tuvo que seguir el comportamiento de un gran número de caracteres en grandes poblaciones. Sin embargo, como tendremos la oportunidad de ver con mayor detalle, va a ser precisamente esta idea de los grandes números, este estudio estadístico, con el que va a tener que enfrentarse gran parte de la biología del siglo XX. Diversos análisis demostrarán que los caracteres de los seres vivos no procedían de fenómenos estadísticos, sino que la clave del orden que observamos en la naturaleza era fruto de la estructura interna de las moléculas biológicas. Empezarán entonces a emerger el concepto de información como el instrumento de acceso a este orden y de su transmisión; siendo Pauling –como también veremos– uno de los protagonistas en la búsqueda de dichas estructuras informativas, y los fundamentos físicos y químicos últimos de las mismas. Pero volvamos a mediados del siglo XIX, momento en el que también empezaron a afianzarse los lazos entre la física y la biología

²⁵¹ Bernard, Claude (1.876), p. 20.

de un modo tal, que el puente roto entre lo orgánico y lo inorgánico comenzó a reconstruirse. De la materia inanimada a lo viviente no había ya diferencia de naturaleza, sino de complejidad, y es que ya no era suficiente con observar los seres vivos, había que analizar las reacciones químicas, estudiar las células, desencadenar fenómenos: se hacía necesario el establecimiento de niveles de integración. Por ello, a partir de ese momento, muchas disciplinas científicas comenzaron a ser encuadradas bajo el término “biología”. Sin embargo, para nuestros propósitos, se hace necesario destacar dos de ellas²⁵²:

- La *bioquímica*, encargada de estudiar los componentes de los seres vivos y las reacciones que se producen en ellos, que intentó relacionar la estructura de los seres vivos y sus propiedades con la red de reacciones químicas y con el papel desempeñado por ciertas clases de moléculas.
- La *genética*, que a partir del interrogatorio de amplias poblaciones de organismos para analizar la herencia, atribuyó tanto la producción de lo idéntico como la aparición de lo nuevo a las cualidades de una estructura nueva, cuya sede está en el núcleo de la célula. Esta nueva estructura, de tercer orden, ya no solo obedece a leyes rigurosas, sino que además legisla sobre todos los demás niveles, determinando los caracteres del organismo y actividades. En esta estructura reside la “memoria” de la herencia.

Veamos con cierto detenimiento cada uno de estos puntos.

Fundamentos de la Bioquímica moderna

De una manera muy esquemática podemos decir que el nacimiento de la bioquímica moderna fue el resultado de un largo proceso que comenzó con la paulatina desaparición de la distinción entre la química de lo viviente y la química de lo inanimado, la escisión gradual que se fue produciendo entre 1.800 y 1.840 en el cuerpo general de la química que dio lugar al nacimiento de la química de la vida –la química orgánica–, la conexión que se produjo entre la química orgánica y la fisiología entre 1.840 y 1.880 y, finalmente, la separación de la

²⁵² De momento tan sólo se pretende hacer ver la extraordinaria importancia de ambas disciplinas en el futuro desarrollo de la biología molecular y, por ende, en el trabajo de Pauling. Por esa razón, ambas serán desarrolladas ampliamente en los dos capítulos siguientes.

bioquímica moderna de la fisiología. En sus inicios la bioquímica nació dirigiendo su atención a dos problemas²⁵³:

- a. El establecimiento de la estructura y las propiedades de los compuestos químicos descubiertos en los organismos vivientes
- b. La explicación de los cambios químicos asociados a la vida: la descripción de los fenómenos vitales en el lenguaje de la química.

Debe reconocerse que las principales aportaciones de la bioquímica de principios del siglo XX deben buscarse en el campo de aplicación de los métodos de la química orgánica al estudio de la estructura y propiedades de los compuestos biológicos. Por medio de la aplicación de estos métodos fue posible aislar, caracterizar y sintetizar en algunas ocasiones compuestos existentes en los tejidos vivos. La culminación de dichos trabajos la encontramos en la obra de Emil Fischer con quien la bioquímica descriptiva estructural –o lo que hoy se conoce como bioquímica estática– alcanzó su punto culminante a raíz de sus investigaciones sobre la química de los azúcares, grasas y proteínas, así como el aislamiento y síntesis de compuestos orgánicos relativamente sencillos que llevó a cabo. Debemos destacar no obstante, la introducción de la hipótesis del enlace peptídico que tanto él como Franz Hofmeister en 1.902 formularon de forma independiente; ésta constituyó uno de los más importantes pasos en el conocimiento de la estructura de las proteínas, y fue clave para el posterior trabajo de Linus Pauling.

Los estudios sobre la estructura de los compuestos de origen biológico fueron más o menos rápidos. En cambio, mucho más lentos fueron las investigaciones que se llevaron a cabo en torno al problema de los cambios, los mecanismos de las reacciones, la relación existente entre los cambios químicos y los procesos fisiológicos en los tejidos vivos. Como señala Francisco Grande Covian, las extraordinarias dificultades con las que se enfrentaron los bioquímicos hicieron que a la hora de abordar el segundo problema muchos de sus trabajos fueran sujetos de un gran escepticismo, e incluso de burlas. Sin embargo, los éxitos posteriores hicieron de la bioquímica una de las disciplinas más importantes del siglo XX. Entre quienes se

²⁵³ Grande Covian, Francisco (1.975), p. 57

dedicaron al segundo problema hay que recordar los nombres de cuatro físico químicos que aportaron conceptos fundamentales para el estudio de las reacciones bioquímicas: J.W. Gibbs (termodinámica química); J.H. van't Hoff (cinética química); W. Ostwald (Catálisis); S. Arrhenius (disociación electrónica).

Hacia un nuevo tipo de acercamiento entre la física y la química: la genética

En el centro de este nuevo acercamiento entre la física y la biología encontramos dos hechos fundamentales relacionados entre sí:

1. Los conceptos de *equivalencia* y *energía*²⁵⁴, ya que ésta –entendida como todo aquello que es trabajo, produce trabajo o proviene del trabajo– fue concebida como algo indestructible en valor absoluto. Podía sufrir todo tipo de transformación y aparecer bajo los aspectos más variados, siendo el principio de equivalencia el que hacía que, en cada uno de estos cambios, se de una conservación de la energía. Sin embargo, en un sistema cerrado a intercambios de energía con el exterior, aunque la cantidad de energía fuera constante, ésta no caracterizaría al sistema, ya que la energía posee cierta calidad –determinada por su capacidad para producir trabajo– que tiende a degradarse. De ahí, el sentido único que impone a ciertos fenómenos²⁵⁵.
2. Impuesto en parte por el primero, aparece *la irreversibilidad del tiempo* ligada tanto a la teoría de la evolución como la mecánica estadística. Si la selección natural podía acentuar una determinada diferenciación, e incluso desviar la dirección de la evolución, a un grupo le era imposible volver a un estado anterior; de la misma

²⁵⁴ Más adelante veremos no sólo el acercamiento que gracias a ellos se produce entre la física y la biología, sino también al papel que desarrollaron para el nacimiento de una nueva interpretación de la vida.

²⁵⁵ La descripción de esta variación del estado de un cuerpo o de un sistema viene dada por la entropía, de tal manera que en un sistema aislado la energía tiende a degradarse, los movimientos tienden a pararse, las diferencias de potencial eléctrico o químico a anularse, la temperatura a uniformarse y, por consiguiente, a aumentar su entropía.

manera que para la física era la segunda ley de la termodinámica la que imponía la dirección de los fenómenos²⁵⁶.

Las implicaciones que aquí encontramos son extraordinarias, ya que la intención de Boltzmann era la de seguir el ejemplo de Charles Darwin y dotar a los fenómenos físicos de una descripción evolucionista, dotarles de una flecha del tiempo frente a la visión newtoniana, donde las leyes físicas eran aceptadas como expresión de un conocimiento ideal, objetivo y completo que afirmaban la equivalencia entre pasado y futuro. Pero además, con la termodinámica, el *a priori* que separaba los seres vivos de las cosas, y la química de los seres vivientes de la del laboratorio, desapareció. Existían dos generalizaciones que reconciliaron la biología con la física y la química:

- Los seres vivos y la materia inanimada están constituidos por los mismos elementos.
- La conservación de la energía se aplica tanto a los acontecimientos del mundo viviente como a los del mundo inanimado²⁵⁷.

El siglo XIX se encontraba marcado por la visión que imponía la mecánica estadística, la cual hacía derivar todas las propiedades de los cuerpos de su estructura material, asociando dos conceptos hasta ese momento extraños entre sí: el orden y el azar. Ya no se pretendía dar una explicación causal de los acontecimientos, no se intentaba explicar por qué se producen, sino cómo. Consecuencia de eso fue la pérdida de significado de la noción de *causalidad*, la cual no

²⁵⁶ Con Boltzmann, la segunda ley de la termodinámica, que regula la marcha del universo, se convierte en una ley estadística, según la cual, la mayoría de los fenómenos físicos simplemente representan la tendencia natural de las poblaciones moleculares de pasar del orden al caos.

²⁵⁷ A simple vista parece que los seres vivos atentan contra la segunda ley de la termodinámica al mantener ciertas estructuras constantes a lo largo de sucesivas generaciones. Sin embargo, no es así, ya que si la termodinámica impone una dirección general a un sistema, ello no excluye excepciones locales, es decir, que ciertos elementos luchan contracorriente: lo que se degrada es el sistema en su conjunto y no todas y cada una de sus partes. Los seres vivos conservan su bajo nivel de entropía gracias al aporte de energía que obtienen por medio de los alimentos. Así, los conceptos de energía y equivalencia vendrían a sustituir al de fuerza vital, explicación última a la que, hasta ese momento, se recurría.

se recobraría hasta principios del siguiente siglo, cuando autores como Schrödinger intentaron llevar a cabo la recuperación, aunque sin éxito, de conceptos clásicos como éste²⁵⁸.

Como hemos indicado, las nociones de energía y equivalencia condujeron a la aparición de una nueva representación del mundo viviente al hacer patente la existencia de un nexo común entre la química de los seres vivos y la del resto de los sistemas. Además, establecían un fundamento común entre las diversas actividades del organismo, a la vez que la energía empezó a sustituir de manera casi definitiva a la fuerza vital. Sin embargo, a principios del siglo XX aún nada explicaba la unión de las células, el lugar de los átomos en los isómeros, la especificidad de las arquitecturas moleculares. La mecánica estadística interpretaba el comportamiento medio de las grandes poblaciones moleculares. Sin embargo, diversos análisis que se basaban en la cualidad de algunas sustancias contenidas en los cromosomas habían demostrado que los caracteres de los seres vivos no procedían de fenómenos estadísticos, es decir, que su orden no podía producirse a partir del desorden. Por ello, la mecánica estadística tuvo que renunciar al conocimiento de la estructura interna de un sistema clave localizado en el núcleo de las células. Empieza entonces a aparecer el concepto de información como el instrumento de acceso a este orden y su transmisión. Fue entonces cuando empezó a verse que la entropía y la información se encontraban relacionadas íntimamente entre sí, como el anverso y el reverso de una moneda: en un sistema dado, la entropía mide el grado de desorden y el grado de nuestra ignorancia sobre la estructura interna; la información nos da la medida del orden y de nuestro conocimiento. La información era, por consiguiente, lo que se podía medir, transmitir y transformar. De este modo, todo sistema organizado podía analizarse a partir de dos conceptos: el del mensaje y el de la regulación por retroacción. La herencia –uno de los grandes problemas con los que tenía que enfrentarse Pauling– empezó a ser vista como la transmisión de

²⁵⁸ Debemos de tener muy presente que la manera en que hoy en día conocemos, concebimos la naturaleza, es fruto en gran parte de la termodinámica: nuestro mundo relativista y de incertidumbres, sometido a las leyes cuánticas y a la teoría de la información, en el que materia y fuerza no son sino dos aspectos de una misma cosa, es el resultado de un devenir cuyo germen, cuyo origen, se explica en esta disciplina.

un mensaje que se repite generación tras generación: en el núcleo del huevo se encuentra el *programa embriogenético* rigurosamente prescrito²⁵⁹.

Bajo la sombra del neodarwinismo

Fue entonces cuando muchos científicos se lanzaron al desciframiento de ese programa embriogenético, apareciendo figuras como la de Thomas Hunt Morgan, que cambiarían la manera de enfrentarse al secreto de la vida. Fueron todos trabajos desarrollados bajo el paraguas del neodarwiniano, ya que no sólo se tenía en consideración el mecanismo de la selección natural de Darwin, sino que además sus protagonistas se tenían que hacer cargo de los datos aportados por la genética y la teoría de la mutación, elementos que Pauling también tuvo que asumir. Por ello, debemos tener presente no sólo los aspectos más importantes del darwinismo, sino también algunas notas del nacimiento y desarrollo tanto de la genética como de la teoría de la mutación y de la teoría sintética.

El punto de partida de todas las propuestas evolucionistas –o transformistas– es la constatación de que los caracteres de los individuos se transmiten de padres a hijos. La observación de plantas y animales lo hacía patente, ya sea que se realizase esta observación acudiendo a la naturaleza misma, o viendo la selección artificial que llevan a cabo los criadores en sus granjas. Sin embargo, habían aspectos que no resultaban tan obvios, tan patentes, y a los que se tenía que dar una solución. Pues bien, durante el siglo XIX los científicos se encontraron con esta tarea, la de tener que dar cuenta por un lado de la *continuidad*, de la *permanencia*, de la *herencia*, y por otro lado del *cambio*, de la aparición de *nuevas especies*; hallando en ambos casos tremendas dificultades. Una muestra patente de las dificultades con las que se enfrentó Darwin la podemos encontrar en aquellos capítulos en los que el naturalista inglés intenta dar respuesta al *cambio*, a la aparición de nuevas especies, apoyándose en el viejo canon de la historia natural según el cual *natura non facit saltum*. De esta manera intentaba salvaguardar la *teoría de la selección natural*, la cual tal y como había sido planteada, sólo podía actuar sobre

²⁵⁹ Este *programa* donde descansa el orden de un ser vivo ha de ser la estructura de una gran molécula, que por razones de estabilidad, de organización, tiene que asemejarse a la de un cristal (como veremos más adelante a la de un “cristal aperiódico”).

ligeras variaciones sucesivas, y no sobre modificaciones grandes. Este posicionamiento resultó tan conflictivo y con unas consecuencias tales, que llevaron incluso a su mayor defensor, Thomas Henry Huxley –conocido como “el bulldog de Darwin”–, a recriminarle el haberse *creado* una dificultad innecesaria adoptando tan abiertamente ese principio; ya que se hacía conveniente considerar la posibilidad de la aparición de novedades a saltos, y no tanto la forma gradual y continua que defendía su predecesor.

Si bien desde la aparición de la obra de Darwin se había constatado una y otra vez que muchos de los sucesos de la naturaleza sólo pueden ser explicados desde la evolución, y sus aportaciones se habían visto posteriormente reforzadas con nuevas evidencias que la confirman –pruebas aportadas desde la paleontología²⁶⁰, la anatomía comparada²⁶¹, la bioquímica comparada²⁶², la embriología²⁶³, la adaptación/mimetismo, la distribución geográfica o la domesticación– durante las primeras décadas del siglo XX la pregunta seguía siendo la misma que se había planteado el naturalista inglés, ¿cómo se produce la evolución? Para muchos autores, como señala por ejemplo K. Popper²⁶⁴, el darwinismo estaba muy lejos aún de poder considerarse una teoría perfecta; resultaba sumamente chocante el carácter tautológico o cuasi-tautológico de las filosofías evolucionistas, ya que en términos de Herbert Spencer la evolución se explicaba a partir de «la supervivencia del más apto», lo cual no dista mucho de decir que «los que sobreviven son los más aptos». Pero sólo sabemos que son más aptos porque sobreviven: no hay más criterio que el de la supervivencia efectiva; del hecho de que un ser, un organismo, haya sobrevivido, concluimos que es el más apto o más adaptado a las condiciones vitales. Este carácter tautológico muestra la lejanía a la que aún se encontraba el darwinismo de constituirse en una teoría perfecta, y le hacía precisar una reformulación. Esta es la tarea que muchos científicos se propusieron llevar a cabo y que dio lugar al nacimiento del

²⁶⁰ Demuestra la existencia de un proceso de cambio mediante la presencia de restos fósiles de floras y faunas extinguidas y su distribución estratificada. Así, numerosas formas se presentan como puentes entre grupos pertenecientes a distintas épocas y grupos, como es el caso del *Archaeopteryx*, verdadero ejemplo de la evolución desde los pequeños dinosaurios del Mesozoico a las actuales aves.

²⁶¹ Distintas especies presentan partes de su organismo constituidas bajo un esquema estructural similar, lo que nos indica la existencia de una homología entre los órganos o similitud de parentesco, y por tanto de un origen y desarrollo común durante un determinado periodo de tiempo.

²⁶² Existen homologías de carácter bioquímico que constituyen una de las características más importantes de la escala evolutiva.

²⁶³ Encontramos características ancestrales similares en el desarrollo embrionario en todas las especies que desaparecen durante dicho proceso. Esto llevó a Ernst Haeckel a enunciar en 1.866 la teoría de la recapitulación, en la que nos indica que la ontogenia es una recapitulación de la filogenia (Haeckel, E. (1.866).

²⁶⁴ Popper, K. (1.972).

neodarwinismo o teoría sintética. La nueva biología tenía que dar cuenta de una estructura de tercer orden en donde se sitúa la herencia (Mendel), la responsable de la permanencia, y la posibilidad de cambios (Darwin) debido a las mutaciones (de Vries). Por ello, el redescubrimiento de la obra de Mendel, llevado a cabo en 1.900 por Hugo de Vries, Karl E. Correns y Erich Tschermak, tuvo importantísimas consecuencias en todos los niveles de la biología, pero especialmente en el debate evolucionista. Y es que el holandés Hugo de Vries, a pesar de presentarse como darwinista, dio un importante golpe al gradualismo de Darwin con su Teoría de la Mutación, aun cuando reconoce la variación espontánea y el azar, ambos requeridos por la selección natural que actúa eliminando los individuos más desfavorecidos dentro de las poblaciones. Según de Vries, la selección natural sólo puede actuar ante cambios genéticos de envergadura, aquellos que de un golpe pueden producir una subespecie, de tal manera que, de todas las subespecies resultantes, al final solo sobrevivirán aquellas que representen una verdadera mejora sobre lo ya existente: es lo que se conoce como las mutaciones progresivas, y que permite la aparición de nuevas especies al cabo de varias de estas mutaciones.

Con una genética ya en marcha, a finales de la década de 1.910 el norteamericano Thomas Hunt Morgan²⁶⁵ encuentra en la mosca de la fruta (*Drosophila melanogaster*) el material adecuado para estudiar las leyes de la herencia. Es un momento de grandes conflictos entre distintas disciplinas, donde cada una de ellas defiende enérgicamente su terreno como el propicio para el estudio de la herencia, tachando a las adversarias de alejarse de la realidad biológica. Para Morgan, el secreto de la herencia se encontraba en las botellas de leche donde tenía guardadas las moscas con las que trabajaba. Este *material* le permitía tener una nueva generación cada dos o tres semanas, un ritmo mucho más alto que el de Mendel. Pudo observar la emergencia de mutaciones en forma de variaciones discretas, siendo posible actuar sobre las variaciones seleccionando a los individuos a partir de su morfología (fenotipo). Esto le llevó a concluir que las mutaciones se transmiten según las leyes de Mendel y que la selección natural, operando sobre éstos cambios, puede llevar a producir nuevas especies, al cabo de muchas generaciones.

²⁶⁵ Destacamos a este genetista, de entre otros muchos científicos que por aquella época estaban trabajando sobre el problema de la herencia, por la decisiva importancia que tuvieron sus investigaciones en la aceptación de un nuevo darwinismo y, evidentemente, por la gran influencia que tuvo en la obra de Linus Pauling.

Thomas H. Morgan

La influencia directa que los trabajos de Morgan tuvieron en la obra de Linus Pauling nos obliga a detenernos en los mismos. Con el fin de tener una visión clara de lo que supusieron dichos trabajos –sin entrar directamente sobre los mismos–, del contexto bajo el cual se desarrollaron y su influencia en el futuro de la biología y en la obra de Linus Pauling, se hace oportuno dedicar un apartado a la figura del biólogo de Lexington (Kentucky) y sus investigaciones, distinguiendo tres importantes y decisivos periodos²⁶⁶: aquel en el que desarrolló sus trabajos junto a sus estudiantes en la *Columbia University*; la era en la que Morgan fue director de la división de biología del *Caltech*; y la división de biología del *Caltech* bajo la dirección de G. W. Beadles.

A. Morgan y su periodo en Columbia (1.910-1.928)

Tras la obtención de su grado de Doctor en 1.890 en la *Johns Hopkins University*, Thomas Hunt Morgan realizó un viaje a Europa que –al igual que ocurriera con Pauling– marcó profundamente su posterior trabajo. Sobre todo, tal y como él mismo reconoció, fue decisiva su estancia en el *Naples Marine Laboratory*, donde tuvo un importante contacto con A. Dohrn y H. Driesch. Allí, pudo apreciar la gran trascendencia del ejercicio experimental –tan opuesto al descriptivo que conocía– para acercarse al estudio de la biología, particularmente de la embriología, ámbito que le había interesado profundamente desde los inicios de su carrera.

Tras su regreso a los EEUU, su estilo de hacer ciencia fue de suma importancia no sólo por el valor de sus descubrimientos, sino también por ser un nuevo y claro ejemplo de trabajo para sus colegas estadounidenses. Su viaje a Europa le había hecho perder el miedo a ir contra el paradigma existente, se había vuelto muy escéptico, y reflejaba un gran descontento ante el excesivo formalismo que los genetistas habían adoptado entre 1.901 y 1.909 en el redescubrimiento del mendelismo. Incluso, ridiculizó las explicaciones que se daban a partir de los resultados obtenidos, en donde se postulaban más y más factores hereditarios sin señalar

²⁶⁶ Durante las próximas páginas vamos a intentar señalar qué factores fueron los responsables de los sucesos que Morgan y sus estudiantes protagonizaron en la *Columbia University*, y cómo estos factores se transfirieron a la era *Caltech*, primero bajo la dirección de Morgan, y después de G.W. Beadle.

ningún camino determinado para indicar cuál de aquellos factores era el fundamental. Es decir, Morgan quería descubrir el fundamento, las bases físicas que se encontraban en el origen de todos aquellos factores²⁶⁷.

Siendo profesor en la *Columbia University*, Morgan supo atraer rápidamente la atención de sus estudiantes más dotados, en particular la de A.H. Sturtevant, C.B. Bridges y H.J. Muller (galardonado con el Premio Nobel en 1.946), con quienes descubrió un número importante de leyes genéticas a partir de los trabajos realizados en la *Fly Room*, en el departamento de Zoología de Columbia. Durante aquel tiempo Morgan y sus estudiantes tenían que trabajar sobre un banco: según Morgan, el investigador debía estar encima de la muestra para poder reconocer, si se producían, resultados inesperados. Sturtevant llegó a afirmar que Morgan les había advertido de la extremada facilidad que había para que los experimentos arrojaran muchos resultados inesperados. Posteriormente, se vio cómo esos “resultados inesperados” eran fruto y ejemplo de uno de los problemas fundamentales con los que los biólogos y el mismo Pauling se tuvo que enfrentar: la “especificidad biológica”.

Para poder llevar a cabo las investigaciones era imprescindible buscar, en primer lugar, el ser vivo apropiado. Éste vendría a ser la *Drosophila*: su corto ciclo de vida, la facilidad para cultivarla y su gran fecundidad la hacían óptima, pero también lo obraba el hecho de que pudiera criarse un gran número de moscas a un bajo coste. Éste era un factor muy importante en un periodo como aquel en el que había muy pocos fondos disponibles para soportar la investigación básica. Morgan se mostró por ello muy ahorrativo a la hora de llevar a cabo las compras del equipo del laboratorio y su abastecimiento, pero –como reconoció Sturtevant– fue muy generoso con la ayuda económica que dio a sus estudiantes. Para Morgan –como tuvimos la oportunidad de ver con Noyes en el Caltech– la pieza fundamental durante los inicios de las investigaciones fue claramente la valiosa mano de obra con la que contó. Ejemplo de ello es el cultivo que, durante algún tiempo, llevaron a cabo simplemente sobre bananas²⁶⁸.

²⁶⁷ Aunque a finales del siglo XIX ya se sabía el papel que podían desempeñar los cromosomas como portadores de la información genética, no se trataba de un conocimiento muy generalizado, ni siquiera en los años en los que Morgan llevaba a cabo sus experimentos.

²⁶⁸ Tuvo que pasar un tiempo hasta que Bridges introdujera instrumentos avanzados como el microscopio estereoscópico.

Los primeros intentos de Morgan para encontrar mutaciones óptimas de ser estudiadas fueron bastante decepcionantes. Afortunadamente, perseveró y encontró la *white-eyed fly*. Esto le permitió descubrir la vinculación sexual en la herencia, que, junto al hallazgo poco tiempo después de una segunda vinculación en la mutación, le permitieron desvelar el secreto del entrecruzamiento (*crossing over*). Dentro de este grupo de investigación dirigido por Morgan caben destacar los trabajos realizados por Bridges y Sturtevant. El primero de ellos creó una colección básica de moscas mutantes mapeando virtualmente todos sus genes, y más tarde en el Caltech, dibujó el mapa definitivo de los cromosomas de la glándula salivar. Su enorme producción investigadora debe ser atribuida, en parte, a su pertenencia como miembro de la *Carnegie Foundation*, lo que le permitió librarse de impartir clases así como de otras obligaciones académicas. Sturtevant –por su parte– pudo comprobar finalmente el modo en el que los cromosomas debían ser identificados como los portadores del material hereditario. En una conversación con Morgan, en 1.911, acerca de la relación especial de los genes en el núcleo, Sturtevant, quien aún no se había graduado, se dio cuenta que los factores de vinculación sexual (*sex-linked factors*) debían ser colocados en un orden lineal. Pasado el tiempo relató cómo después de esa primera intuición, se fue a casa y pasó toda la noche construyendo un mapa genético basado sobre las cinco mutaciones *sex-linked* que por entonces habían sido descubiertas. En 1.912, Bridges y Sturtevant identificaron y mapearon dos grupos de factores *autosomal* (*no sex-linked*) y un tercero fue identificado por Muller en 1.914. Los cuatro grupos de vínculos se correlacionaban muy bien con los cuatro pares de cromosomas que se sabía que la *Drosophila* poseía. La comprobación de esta correlación no fue accidental, sino que vino cuando Bridges uso los resultados de la segregación irregular de los cromosomas sexuales (*or non-disjunction*) para proporcionar una prueba elegante al hecho de que los cromosomas son algo más que los portadores de los factores hereditarios o genes como hasta entonces se sabía. Bridges publicó su demostración en 1.916, en el primer artículo del volumen I de la revista *Genetics*.

Sturtevant con frecuencia comentó el extraordinario poder intuitivo de Morgan, sobre todo al describir cómo, después de explicarle algunos resultados extraños de sus experimentos, el genetista estadounidense acertaba a proponer algún tipo de especificidad que, con el tiempo, pudieron observarse citológicamente. Morgan se mostró durante aquella época –algo que continuó en su paso por el Caltech– no sólo como un buen investigador, sino también como una

persona estimuladora, alguien que reconocía a los buenos estudiantes a los que daba libertad y espacio para trabajar, inspirando en ellos la confianza suficiente para que echaran mano cuanto fuera preciso de su imaginación: algo importantísimo para el avance de la ciencia.

B. La era de Morgan como director de la División de Biología del Caltech (1.928-1.942)

En 1.928 Morgan fue invitado por el astrónomo G.E. Hale como director de la División de Biología en el *California Institute of Technology*. Hale había concebido la idea de crear el *Caltech* algunos años antes y había hecho lo mismo con R.A. Millikan (Premio Nobel en Física en 1.923) y A.A. Noyes para que encabezaran la división de Física y Química respectivamente. Según Sturtevant, Morgan informó a su grupo de Columbia de la invitación de Hale y de por qué era imposible decirle que no. Morgan aceptó y fue al Caltech en 1.928. Se llevó consigo a Sturtevant como profesor titular, a T. Dobzhansky –quien más tarde llegaría también a ser profesor titular– y a Bridges. Además de Sturtevant y Dobzhansky, el profesorado de genética estaba compuesto por E.G. Anderson y S. Emerson. J. Schultz quien –miembro como Bridges de la *Carnegie Institution de Washington*– participó como profesor en un curso de laboratorio avanzado en genética.

Durante este segundo periodo, muchos genetistas visitaron la División de Biología en varias ocasiones. Aquellos científicos de países foráneos, como D. Catcheside, B. Ephrussi, K. Mather, and J. Monod (Premio Nobel en 1.965) y profesores invitados como Muller, L.J. Stadler y B. McClintock (Premio Nobel en 1.983) a través de la *National Research Fellow* en los inicios de la década de 1.930.

Al igual que Noyes, Morgan tuvo la capacidad de darse a conocer fuera de la comunidad científica atrayendo el interés de mucha gente influyente. Esto era algo importantísimo para la captación de capital, como lo demuestra la descripción que J.R. Goodstein hiciera de la forma en la que la *Rockefeller Foundation* y donaciones privadas fueron fundamentales en la financiación económica, tanto de la División de Biología como de otras divisiones durante aquel periodo. En 1.933, Morgan recibió el Premio Nobel de Fisiología o Medicina “*por los descubrimientos sobre el papel de los cromosomas en la herencia*”. El galardón fue un factor

decisivo para la consolidación del prestigio y estatus de la División de Biología dentro de la misma Institución, ya que por aquel tiempo, el único otro Nóbel que había en el Caltech era Millikan. A pesar de los grandes avances y el extraordinario prestigio adquirido a través de sus estudios genéticos, Morgan abandonó su desarrollo y volvió a interesarse por los organismos marinos. Fue entonces Sturtevant quien se hizo cargo en gran parte de su herencia²⁶⁹. Sturtevant, siguiendo los pasos de su gran mentor, también permitió a sus estudiantes graduados considerable libertad para elegir sus proyectos de tesis y consultarle sobre aquellos proyectos e ideas que tenían, incluso sobre otras materias. Sus puertas, tal y como señala Edward B. Lewis, siempre estuvieron abiertas a los estudiantes y profesores.

C. *La División de Biología del Caltech bajo la dirección de G. W. Beadles (1.946 – 1.961)*

En 1.946 Sturtevant y Linus Pauling –vemos el papel y vinculación que Pauling tenía ya en el ámbito de la biología que se hacía en el Caltech²⁷⁰– persuadieron a George Beadle, profesor por entonces de Biología en la *Stanford University*, para que fuera director de la División de Biología del *Caltech*. Una vez que aceptó la invitación, Beadle siguió la tradición de Morgan de apoyar fuertemente la investigación básica y mantener una buena atmósfera intelectual²⁷¹. Beadle ya había estado trabajando antes en el Caltech en la década de 1.930 –nada más obtener su grado de Doctor en la Cornell University– como *National Research Fellow*. Durante su primera permanencia en la División de Biología había colaborado de hecho con el mismo Sturtevant en un monumental estudio sobre especificidad y en la publicación de un libro de texto de genética. Sin embargo, el trabajo más importante que llevó a cabo durante su primera estancia en Pasadena lo llevó a cabo con Boris Ephrussi. En sus memorias biográficas sobre Beadle, Horowitz describe cómo Beadle y Ephrussi prosiguieron un reciente descubrimiento de Sturtevant en torno a la existencia de una sustancia intermedia en la síntesis de la pigmentación marrón de los ojos de la *Drosophila*. A pesar de los éxitos conseguidos con la *Drosophila*, Beadle se dio cuenta perfectamente de que el hongo *Neurospora* podía ser un mejor material genético para las explicaciones que en ese momento se estaban buscando. Por

²⁶⁹ Desde 1.942 a 1.946, la División fue dirigida por un comité presidido por Sturtevant.

²⁷⁰ Recordemos que en ese momento era uno de los centros de investigación biológica más importantes del mundo.

²⁷¹ Beadle fue claramente un heredero de Morgan.

ello, junto a Edgard Lawrie Tatum decidió estudiar –siendo ya era profesor de Genética de la *Stanford University*– los mutantes nutricionales del moho rojo del pan (*Neurospora crassa*), obteniendo un gran éxito en el descubrimiento de los procesos bioquímicos que están implicados en la síntesis de muchas vitaminas y aminoácidos en los organismos. Estos trabajos sobre la genética bioquímica del moho del pan –*Neurospora*– abrieron una nueva era conocida como genética molecular, y le encumbraron en lo más alto de la genética: en 1.958 recibió junto a Tatum el Premio Nobel en Fisiología y Medicina por sus trabajos llevados a cabo en la *Stanford University*.

Durante el tiempo de Beadle como director²⁷² de la división de biología del Caltech, N.H. Horowitz, H.K. Mitchell, R.D. Owen y R.S. Edgar se unieron al cuerpo de profesores de genética. Horowitz y Mitchell habían estado asociados con Beadle en *Stanford*, y habían jugado un gran papel en la revelación de la hipótesis *un gen–una enzima* que permitió obtener el Premio Nobel a Beadle y Tatum. Beadle fue también el responsable de persuadir a Delbrück para que volviera al Caltech como profesor titular. Bajo la dirección de Beadle se unieron también al área de virología animal R. Dulbecco (Premio Nobel en 1.975), y M. Vogt. Howard Temin (uno de los estudiantes graduados de Dulbecco y después un co-ganador con él del Premio Nobel en 1.975). También R. Sperry (Premio Nobel en 1.981) se incorporó al grupo y fue nombrado profesor titular en 1.954, continuando el trabajo sobre las divisiones cerebrales que había empezado en la *University of Chicago*.

La investigación básica empezó a ser apoyada económicamente de manera gradual por distintas agencias federales como la *Office of Naval Research*, la *Atomic Energy Commission*, los *National Institutes of Health*, y la *National Science Foundation*. Tales apoyos fueron esenciales para la obtención de personal, equipo y suministros necesarios para el nuevo campo de la genética molecular y microvial, cuyo mayor florecimiento se produjo bajo la dirección de Beadle. Durante este tercer periodo se llevaron a cabo muchas investigaciones postdoctorales en la División de Biología, incluyendo la de S. Benzer (*Crafoord Prize* en 1.993), quien desde 1.949 a 1.951 fue profesor ayudante post-doctoral en el grupo de Delbrück. En 1.967 fue nombrado profesor titular. Por su lado, J. Weigle fue profesor visitante y un valioso miembro

²⁷² Como hemos podido ya observar durante este periodo el contacto de Linus Pauling y la influencia que éste ejerció en la División de Biología del Caltech es muy directa. Por esa razón, es importante dar cuenta de quienes formaban la facultad de la misma, y la orientación de las investigaciones que se estaba llevando a cabo.

del grupo de Delbrück. Durante aquel periodo, fueron invitados científicos tan importantes como F. Jacob (Premio Nobel en 1.965) y J. Watson (Premio Nobel en 1.962). B. McClintock volvió en 1.946 por muy poco tiempo, trabajando con uno de los estudiantes graduados, Jessie Singleton, y perfeccionando un método de análisis de los cromosomas de la *Neurospora*. Es de destacar que R. Feynman, profesor por entonces de física del *Caltech* (Premio Nobel en Física en 1.965), pasó parte de un año académico trabajando con R. Edgar y otros miembros del grupo de Delbrück.

Beadle tenía una extraordinaria versatilidad de destrezas. Abandonó pronto sus investigaciones sobre la *Neurospora* a fin de dedicarse el tiempo completo a la dirección de la División. Fue muy fructuoso con la búsqueda de donadores que permitieran financiar becas postdoctorales y llevar a cabo la construcción de nuevos edificios. Estas becas fueron también usadas, muy a menudo, para financiar las visitas de científicos foráneos que, de otra forma, no hubieran sido capaces de ir a los EEUU. Como en periodos previos, las enseñanzas de estos profesores arrojaron mucha luz. Algunas de estas clases se impartieron en forma de seminarios. Los profesores de biología formaron un gran grupo armonioso y los estudiantes disfrutaron de una considerable libertad para elegir sus grupos. Como ejemplo del éxito de esta atmósfera intelectual y de trabajo alcanzada –de la que participó y disfrutó en buena medida Linus Pauling hasta que abandonara el Caltech–, valga mencionar el premio Nóbel de Fisiología y Medicina concedido a los profesores Delbrück, Dulbecco y Sperry, algo que se hizo posible en la División bajo la dirección de Beadle.

Génesis de la biología molecular

El avance del conocimiento bioquímico –que vimos páginas atrás–, y la introducción de nuevas técnicas durante las primeras décadas del siglo XX facilitó el desarrollo de nuevos campos que, en algunas ocasiones, dio lugar a la constitución y emancipación de nuevas disciplinas. Un ejemplo de ello lo encontramos –según Grande Covian²⁷³– en la biología molecular que “de forma muy general puede definirse como una ciencia que intenta la

²⁷³ Grande Covian, Francisco (1.975), p. 63

explicación de las propiedades de la materia a través del estudio de la estructura y funciones de las moléculas individuales de la célula”²⁷⁴. Ahora bien, debemos tener presente que desde su mismo origen se han producido profundos debates acerca del nacimiento de la biología molecular. Su carácter multidisciplinar, la disparidad de disciplinas, intereses, objetos y métodos de análisis que encontramos en dicho campo lleva consigo aparejada un origen complicado, enrevesado, que nos permite hablar de un origen múltiple. De manera coincidente, el análisis molecular de materiales orgánicos se empezó a desarrollar en distintas disciplinas y con intenciones, como veremos, en principio muy variadas. Valga a modo de ejemplo las distintas interpretaciones de dos autores reconocidos, como lo son D.T. Zallen y S.F. Gilbert.

Zallen²⁷⁵ sostiene que en el origen de la biología molecular hay que distinguir dos escuelas: aquella cuyos trabajos pretendían determinar la arquitectura detallada de ciertas moléculas biológicas claves a partir, principalmente, del análisis cristalográfico por medio de los rayos X; y aquella otra escuela (*grupo de los fagos*) que, trabajando con virus bacteriales, se mostraba interesada en dilucidar los procesos mediante los que el material hereditario puede producir las propiedades características de los organismos.

Por su parte, Gilbert²⁷⁶ defiende que la biología molecular surge de la fusión de dos tradiciones diferentes en la conceptualización de la vida: una desarrollada en torno a la analogía de la vida con el cristal, y preocupada principalmente por el crecimiento y la replicación; y otra, que compara la vida con un flujo, y que considera que la forma organizada es más importante que los materiales que entran a formar parte de ella. Ésta última se preocuparía principalmente por explicar los aspectos metabólicos de la vida.

A la hora de llevar a cabo un análisis de los estudios históricos sobre la biología molecular nos encontramos con muchos autores para quienes ésta nace, se constituye como tal con el descubrimiento en 1.953 de la estructura del ADN. Pero también nos encontraremos con otros historiadores que sostienen que, si se desea situar en algún punto concreto su origen, su nacimiento, tendremos que hacerlo acercándonos al inicio de los estudios de las macromoléculas de cadena larga. Sin embargo, discutir sobre el nacimiento concreto de esta

²⁷⁴ Grande Covian, Francisco (1.975), p. 63

²⁷⁵ Zallen, D. T. (1.996), pp. 47-48.

²⁷⁶ Gilbert, S. F. (1.982), pp. 151-162.

disciplina es secundario en este momento. Lo más importante por ahora es ver los primeros pasos de la biología molecular, las dos versiones más importantes sobre las que se construyó – “versión proteica del Dogma Central” y la “versión del ADN del Dogma Central”–, contexto bajo el cual se desarrolló el trabajo de Linus Pauling, cuya obra fue, a su vez, el pilar sobre el que en gran medida nació y se desarrolló la misma biología molecular. Por ello, vamos a revisar algunos de los capítulos, de los momentos y de los conceptos más importantes del origen de esta disciplina, sin apartar nuestra mirada del trabajo de Pauling.

A. La “versión proteica del Dogma Central”

Durante los años 30 la biología molecular vivió una primera fase en la que se pensaba que la información del gen, descrito ya en términos moleculares, se encontraba en las proteínas. Se suponía que, si la información genética estaba de alguna manera codificada por la disposición de los átomos dentro de una molécula, entonces lo más probable era que esa molécula fuera un polímero, ya que la cantidad necesaria de datos para poder aportar todas las características de un organismo, por simple que éste fuera, sería enorme.

Por su parte, dos científicos suecos, Torbjörn Caspersson y Einar Hammersten, utilizaron nuevos métodos que permitieron por primera vez medir el tamaño real de la molécula de ADN, demostrando que se trataba de un polímero²⁷⁷. Comprobaron que en el ADN los monómeros estaban constituidos a partir de la combinación de los cuatro tipos de nucleótidos existentes: cada uno con una base distinta. Sin embargo, el significado biológico del ADN seguía sin descubrirse como consecuencia, principalmente, de la insistencia de Levene en afirmar que las cantidades de las cuatro bases que se presentaban en todas las moléculas eran iguales, repitiéndose siempre la misma secuencia. Esta creencia de Levene, convertida en dogma, fue conocida como la *hipótesis tetranucleótida*, la cual condujo a creer que el ADN tan sólo jugaba un papel de soporte en el proceso hereditario: su única misión era la de mantener a las importantes proteínas nucleares en su posición. Esta postura era, en principio lógica ya que, así como los ácidos nucleicos parecían moléculas relativamente sencillas, las proteínas, que

²⁷⁷ *Polímero*: Una molécula larga compuesta por un número de moléculas más pequeñas denominadas monómeros que están químicamente unidas entre sí.

también eran polímeros, resultaban ser complejas y sutiles. El químico alemán Emil Fischer –a quien ya vimos páginas atrás– había demostrado que los monómeros de las proteínas eran simples moléculas denominadas aminoácidos, presentándose veinte tipos en las proteínas. De este modo, la cantidad de secuencias posibles, al unirse los monómeros por centenas o millares a la hora de formar una proteína, era enorme. Comparado esto con la monótona regularidad del ADN de Levene, hace fácilmente comprensible por qué los bioquímicos apostaron por las proteínas y no por los ácidos nucleicos. Este «dogma de la proteína» constituyó una creencia poderosa a la que algunos bioquímicos se agarraron hasta mitad de los años cincuenta, antes de que se develara completamente el papel del ADN.

B. La “versión del ADN del Dogma Central”

Sin embargo, en 1.944 Oswald Avery y su equipo²⁷⁸ anunciaron el descubrimiento de que era el ADN, y no las proteínas, el responsable del secreto de la vida. El exhaustivo informe que Avery presentó al *Journal of Experimental Medicine* prácticamente demostraba que los genes estaban compuestos de ADN, sin embargo optó por atajar todo tipo posible de entusiasmos:

La sustancia inductora, conforme a sus propiedades químicas y físicas, parece ser una forma de desoxirribonucleato [ADN] de sodio muy polimerizada y viscosa (...) Si los resultados del presente estudio se confirman, entonces se deberá considerar que los ácidos nucleicos poseen una especificidad biológica cuya base química aún está por determinar²⁷⁹.

Avery, un microbiólogo médico del *Rockefeller Institut*, y su descubrimiento tuvieron una gran acogida por parte de sus colegas. Sin embargo, fuera del Instituto la respuesta fue algo más cauta, aunque pocos dudaron de la importancia de sus resultados. Tras el anuncio de estos resultados, muchos científicos al volver a sus lugares de trabajo quisieron verificar los datos

²⁷⁸ Colin McLeod y Maclyn Macarty.

²⁷⁹ Avery, O. T., MacLeod, C. M. y McCarty, M. (1.944), pp. 137-158.

obtenidos por Avery. En muy poco tiempo, descifrar el secreto del funcionamiento del ADN se convirtió en la primera prioridad en la agenda científica.

Durante los años cuarenta los estudios genéticos con base química se solían llevar a cabo sobre bacteriófagos²⁸⁰, razón por la cual muchos de los biólogos moleculares de la época se apuntaron a un famoso curso de verano –*Phage Course*– sobre fagos, que se ofrecía en el Laboratorio *Cold Spring Harbor*, en Long Island, Nueva York. Fruto del famoso experimento que Alfred Hershey y Martha Chase llevaron a cabo con fagos²⁸¹, se confirmó definitivamente el descubrimiento de Avery respecto al papel principal del ADN como la molécula transmisora de la información entre las generaciones. Este cambio de modelo creó toda una serie de nuevas preocupaciones en lo referente al transporte de la información y su traducción en la actividad bioquímica de la célula. Durante los inicios de esta segunda fase de la biología molecular se empieza a considerar que la mayoría, si no toda la información del gen, debía provenir de los ácidos nucleicos.

Este cambio de parecer fue posible gracias a la disponibilidad de ADN más altamente polimerizado, y de contar con mejores métodos de reinterpretación de los datos aportados por los Rayos X. Entre ambas fases encontramos un contraste conceptual en el modo de encarar la teoría molecular del gen, un cambio de interpretación –las ya mencionadas versiones “*proteica del dogma central*” y “*del ADN del dogma central*”–, si bien dándose una continuidad en las aspiraciones. Pero para que pudiera llevarse a cabo gran parte de estas investigaciones, y por consiguiente, este cambio de mentalidad, fue imprescindible el empleo de tres técnicas que permitieron revelar hasta el más mínimo detalle la composición de estas moléculas, su organización interna –donde los trabajos de Pauling fueron elementales–, y los procesos de síntesis de los polímeros en los seres vivos, algo que ya se conocía desde principios del siglo XIX:

1. Gracias a la *cromatografía*²⁸² fue posible reducir la complicada estructura tridimensional de los polímeros a una estructura de una sola dimensión: se constató

²⁸⁰ Bacteriófagos (o *fagos*): virus “comedores de bacterias”.

²⁸¹ Podemos encontrar una exposición muy clara del mismo en la obra de Aldridge, Susan (1.996), p. 25 y ss.

²⁸² Cromatografía: La «escritura coloreada» se basa en la aplicación de una mezcla de partículas (muestra), como los pigmentos extraídos de los pétalos de una flor, en un trozo de papel secante. Las moléculas se adhieren a la

que los polímeros estaban formados por algunos centenares de unidades –de bases– unidas entre sí y formando una cadena lineal. La complejidad en el espacio nacía de los repliegues de la cadena sobre sí misma, y su forma particular dependía de la longitud de la cadena y de la secuencia de las unidades que la formaban.

2. A partir del descubrimiento de los radioisótopos²⁸³ por los físicos, se hizo posible el análisis no sólo de la composición de los seres vivos, sino de toda la dinámica de sus transformaciones químicas.
3. Gracias al perfeccionamiento de los medios de observación, se abrió el acceso a la estructura de las macromoléculas:
 - Con el microscopio electrónico se aumenta cerca de mil veces el poder de resolución del ojo.
 - Con el análisis de los cristales por la difracción de los rayos X se pudo distinguir no sólo la forma general de una molécula, sino la posición exacta de cada átomo, incluso en las arquitecturas más elaboradas.

En numerosos trabajos se apunta a que esta última técnica quedó reservada a los físicos, muchos de los cuales empezaron a interesarse a partir de ese momento por el estudio de la biología. Convencidos de que las fuerzas de las células vivas sólo podían encontrarse a partir del estudio de la configuración de las macromoléculas biológicas, muchos físicos de la escuela de cristalografía empezaron a dedicarse a su estudio, siendo precisamente desde éste ámbito, desde donde se propuso la expresión “biología molecular” para designar éste tipo de análisis.

celulosa del papel, pero con diferentes afinidades dependiendo de su naturaleza química. Algunas se adhieren rápidamente a la celulosa y otras lo hacen con menos intensidad. Si se coge un extremo de papel secante y se introduce en el interior de un recipiente que contiene un disolvente, éste empezará a subir por la tira de papel a través de los canales situados entre las fibras de la celulosa. A medida que el disolvente sube, arrastra con él los componentes de la mezcla. Los que se unen débilmente a la celulosa se mueven más adelante en el papel que aquellos que se han adherido con más fuerza. Por consiguiente, obtenemos un despliegue de los componentes sobre el papel según su afinidad por la celulosa. Se deja secar el papel y se localizan las posiciones de los componentes sobre el mismo. Si se desea, se puede proceder a una investigación química más completa para obtenerse, una vez separados, una identificación de los componentes de la mezcla.

²⁸³ *Radioisótopos*: isótopos inestables que de manera espontánea emiten radiación. También llamados isótopos radiactivos.

Isótopos: forma alternativa de un elemento con distinto número de neutrones pero el mismo de protones y electrones.

Sin embargo, queremos llamar la atención sobre el papel que llevaron a cabo en este campo químicos como el mismo Linus Pauling. Se trataba, como se señaló al principio de este capítulo, de una actividad multidisciplinar en la que la química estructural desempeñó un importante papel. Al igual que muchos físicos, principalmente cristalógrafos que de forma algo aislada al principio empezaron a tantear con la complejidad de los sistemas biológicos, muchos químicos desilusionados y decepcionados por la utilización militar de su disciplina decidieron en su búsqueda de nuevas disciplinas científicas donde llevar a cabo su carrera investigadora, atracar en el mundo de la biología. Un ámbito que, por entonces, se mostraba prometedor y que, como veremos, parecía ser la fuente –según Bohr y Schrödinger– de la que deberían brotar nuevas leyes físicas, y el lugar de renovación y de descubrimiento en el campo que principalmente nos ocupa, el de la herencia.

Las aportaciones de la física y la química al nacimiento de la Biología Molecular

A. El Phage Group

La biología molecular no nació, como en algunas ocasiones se ha considerado, de la absurda búsqueda de paradojas por parte de tres físicos (N. Bohr, E. Schrödinger y M. Delbrück) que consideraron la biología como el campo propicio para ello. Biólogos, químicos y físicos asistieron al *Phage Course* –al cual hicimos alguna referencia antes–, donde tuvieron la oportunidad de conocer al *Phage Group*, un grupo multidisciplinar cuya tarea autoimpuesta fue la de analizar un fenómeno universal de la vida: la replicación genética y su mecanismo. Los esfuerzos llevados a cabo permitieron ver que las leyes físicas tradicionales y la química estructural ortodoxa regían la replicación, lo que permitía llevar a cabo la descripción molecular del proceso.

Sin embargo, y a pesar de lo que algunos físicos han defendido, la biología molecular no tuvo su auténtico comienzo sólo en el *Phage Group*, ni siquiera se operó exclusivamente dentro de la física, ya que el tema central de la misma no es la información biológica. También existía la escuela estructural de los radiocristalógrafos, que había establecido vínculos con el *Phage Group*. Como ya hemos podido comprobar, fueron varios los intereses que habían movido a los

físicos a preocuparse por la biología, por lo que los acercamientos que se llevaron a cabo por parte de los mismos resultaron igualmente desiguales.

Como vemos, debemos hablar al menos de dos escuelas²⁸⁴: la *escuela estructuralista*, donde se reflejaba cierta preocupación realista por la relación entre la física, la química y la biología, y la *escuela informacionista*, movida por la idea de que la biología podía efectuar importantes aportaciones a la física. La máxima figura de esta escuela –la informacionista– fue Delbrück, quien impresionado y animado por el discurso de Bohr, *Light and Life*, actuó en el *Phage Group* como coordinador de los trabajos sobre fagos. Este hecho fue de una importancia decisiva al condicionar desde entonces el modo en que, desde la física, se entendió y desarrolló toda una interpretación acerca de la naturaleza de la vida.

B. Los físicos y los químicos ante la nueva biología

El conocimiento y la comprensión de la naturaleza del enlace químico gracias a la obra de Linus Pauling *The Nature of Chemical Bond*, inspirados en la física cuántica, llevó a muchos físicos y químicos a interesarse por el estudio de moléculas cada vez más complejas, incluidas las moléculas de la vida. Ejemplo de ello lo encontramos en el mismo L. Pauling y en el camino que abrió con sus estudios sobre la hemoglobina, la molécula encargada de transportar el oxígeno en la sangre²⁸⁵. Estos trabajos llevados a cabo en el CalTech sobre la hemoglobina tuvieron tal éxito que la nueva interpretación del enlace químico empezó a utilizarse para intentar conocer la estructura de otras moléculas biológicas.

Esta inmersión de los químicos y los físicos proporcionó a la biología un nuevo marco interpretativo, un nuevo modo de enfrentarse a los objetos biológicos. Pero, ¿qué suscitó verdaderamente el interés de los físicos y los químicos por la biología? ¿A qué tipo de retos les enfrentaba? ¿Por qué era tan importante el papel de los físicos y los químicos? El esclarecimiento de estas cuestiones puede ayudarnos a ver qué era lo que realmente estaba en juego desde el punto de vista químico y físico, y cuál era el papel que Pauling jugó. Pero antes

²⁸⁴ Se volverá a hacer referencia nuevamente a estas dos escuelas líneas más abajo.

²⁸⁵ Se tratará con algún detalle en el próximo capítulo.

de entrar de lleno en ello, recordemos que el químico de Pórtland había redefinido la disciplina como un fenómeno cuántico, por lo que el nuevo interés suscitado en los físicos por la biología –y que condujo desde unos primeros titubeos al desarrollo de la biología molecular– era prácticamente coincidente con el que operó en Linus Pauling y otros químicos.

La biología reclamaba la ayuda de los físicos y de los químicos, ya que hacía falta buscar un soporte material que contuviera la información, las instrucciones que permitieran la obtención de entidades replicadas; que éstas fueran también replicables; que los errores producidos en las réplicas pudieran copiarse también; y que las instrucciones y sus productos se mantuvieran unidos. Pues bien, al haber quedado descartada toda distinción entre materia-inerte y materia-viva en el estudio de los últimos elementos de los sistemas vivos, se hizo necesaria la aportación de los físicos y los químicos como máximos conocedores en ese momento del mundo de la materia. Compton, en sus conferencias dadas en la Fundación *Terry*²⁸⁶ (1.931), fue uno de los primeros en analizar las implicaciones biológicas que ponía de manifiesto el nuevo indeterminismo físico. Sostenía que la nueva teoría no era capaz de resolver sólo problemas físicos, sino también biológicos y filosóficos.

Para los físicos, los acontecimientos gobernados por las leyes que estudiaban nunca eran consecuencia de una bien ordenada configuración de átomos, a no ser que se repita un gran número de veces, como ocurre con los cristales periódicos. La física no podía predecir el comportamiento concreto de una molécula determinada, asignar comportamientos predecibles a pequeños números de moléculas. Sin embargo, en biología se podían encontrar con que un reducido grupo de átomos podían producir acontecimientos altamente ordenados, armonizados entre sí; esto suponía enfrentarse a unos sucesos cuyo desarrollo regular y reglamentado estaba gobernado por un “mecanismo” completamente diferente al de la regularidad regida por probabilidades, algo habitual en física.

Se sabía que el principio director de una célula estaba contenido en una asociación atómica que daba lugar a sucesos que constituían un modelo de orden. Ello no tenía ningún paralelo en el mundo físico, tan sólo se daba en los sistemas biológicos. Sin embargo, como

²⁸⁶ Recogido en Compton, A. H. (1.935). Obra basada fundamentalmente en las pronunciadas por Compton en Yale en 1.931 en la Fundación Terry.

hemos señalado ya, este nuevo interés suscitado entre los físicos en torno a la biología, no se tradujo en un posicionamiento homogéneo entre los mismos. Habían sido dos las principales motivaciones que habían empujado a los físicos a interesarse por la biología, y que habían dado lugar al nacimiento de dos escuelas. Por un lado la escuela estructural, donde había una preocupación realista por la relación entre la física y la biología. Según esta escuela «todos los fenómenos biológicos, independientemente de su respectiva complejidad, en último extremo pueden ser explicados en términos de leyes de físicas convencionales»²⁸⁷. La escuela informacionista, por su parte, sostenía que las leyes físicas ortodoxas eran insuficientes, no bastaban; de tal manera que los análisis de los procesos genéticos darían lugar –como ya señalamos– al descubrimiento de nuevas leyes físicas. Las ideas sobre las que se apoyaba esta última escuela se encuentran representadas en la aplicación del principio de complementariedad de Bohr a la biología, mientras que las ideas de la escuela estructural se ven reflejadas la obra de Schrödinger *¿Qué es la vida?*²⁸⁸, donde queda patente que las leyes de la física que se esperan encontrar en la biología vienen a completarla, y no a ocasionar una revolución –como pretende Bohr–, produciendo la aparición de barreras impenetrables a la aplicación de los métodos físicos a la biología.

En el fondo lo que hay es una lucha de rango no sólo científico, sino también filosófico ante la que Pauling –como veremos– tomó una opción. Si bien este debate nunca fue reconocido por sus auténticos protagonistas, quedó perfectamente representado finalmente por las figuras de Schrödinger y Bohr. Ambos reflejaron esas dos posiciones enfrentadas a través de las cuales se hace patente la situación que dentro del ámbito de la física se estaba viviendo en torno a la biología. Es necesario advertir que la “polémica Bohr –Schrödinger” representó un debate que se venía dando desde muy atrás, que formaba parte del contexto científico posterior a la aparición de la mecánica cuántica y, por consiguiente, coetánea con los primeros trabajos de Linus Pauling en el ámbito de las ciencias de la vida. Por consiguiente, el desarrollo de estas cuestiones y planteamientos, ante los que nuestro autor tuvo que tomar una postura, serán desarrollados con mayor profundidad en la sección *Contexto e influencias filosóficas*.

²⁸⁷ Stent (1.968), p. 392.

²⁸⁸ Schrödinger, E. (1.967).

Por ahora, basta con señalar que estas consideraciones llevadas a cabo por los físicos, tanto desde el punto de vista científico como filosófico, no cayeron en saco roto. Ejemplo de ello fue la forma en la que M. Delbrück se vio influido y arrastrado por las palabras de Schrödinger y Bohr, principalmente de éste último²⁸⁹, hacia el misterio biológico de la naturaleza de las moléculas de la vida. Buscó la solución a un problema que se encontraba en el centro mismo de las leyes de la física cuántica, al advertir la analogía entre la observación que los biólogos habían hecho –¿por qué cierta cantidad de energía en forma de radiación de onda corta provocaba la mutación de material genético?– y el modo en el que un cuanto de luz provoca el salto de un electrón de un estado a otro. En la década de los años treinta los experimentos con la *Drosophila* proporcionaron las primeras pruebas directas de la naturaleza molecular de los genes. No podemos cerrar este capítulo sin recordar que el físico que más se acercó a la solución del misterio de la vida fue Schrödinger al emplear la expresión “escritura cifrada” para referirse a lo que hoy en día se denomina *código genético*.

Con lo ya expuesto, podemos tener una clara idea del contexto biológico –y cómo la física y la química condicionaron ésta– dentro del cual Linus Pauling llevó a cabo su trabajo en esta disciplina. Por ello, pasemos ahora a trazar algunos de las líneas generales más importantes del contexto médico que influyeron en el trabajo de Pauling, teniendo muy presente que desde 1.936 hasta sus últimos años de vida, el científico estadounidense se dedicó –de una forma u otra– a esta disciplina.

²⁸⁹ Principalmente por las palabras de Bohr que serán recogidas en el cap. “La polémica Bohr – Schrödinger” Bohr, N. (1.933), p. 421.

1.3.3.2. MEDICINA

Los orígenes de la medicina molecular

Durante el primer cuarto del siglo XX la química tuvo una profunda influencia en el desarrollo de la medicina. Tal y como señalara el mismo Pauling²⁹⁰, muchas de las investigaciones médicas llevadas a cabo en el ámbito de la medicina habían estado condicionadas por los últimos desarrollos realizados en el de la química. Un ejemplo de ello lo encontramos en las investigaciones llevadas a cabo en torno al uso de sustancias químicas en tratamientos médicos. Estos primeros trabajos fueron, desde el punto de vista metodológico, no muy ortodoxos; la investigación era oscura y el progreso lento. Afortunadamente este escenario empezó a cambiar al rededor de 1.950, cuando los químicos empezaron a considerar de forma más seria la posibilidad de hacer significativos progresos en el desarrollo farmacológico y en la práctica médica, así como en la comprensión de las bases moleculares de la actividad químico-terapéutica. Para conseguir este fin era necesaria la investigación en torno a tres aspectos fundamentales:

- La estructura molecular detallada de las sustancias químico-terapéuticas.
- La estructura molecular detallada de muchas de los constituyentes de los organismos directamente implicados (bacterias, anticuerpos, virus) y del organismo humano, con los cuales aquellos agentes entraban en contacto.
- La naturaleza de las fuerzas implicadas en las interacciones intermoleculares entre las sustancias y los organismos.²⁹¹

Pero este cambio de actitud e interés no fue azaroso, sino posible y motivado por los significativos progresos llevados a cabo durante el segundo cuarto del siglo XX; el desarrollo de los métodos de investigación sobre la estructura de las moléculas –tal y como vimos al tratar el

²⁹⁰ Pauling, L., (1.949, 7 de Diciembre).

²⁹¹ *Idem*, p. 4.

tema de la cristalografía–, el progreso de la química orgánica, y el desarrollo de fórmulas estructurales de muchos compuestos orgánicos, ayudaron a entender cómo los átomos se unen en moléculas como la penicilina. Ahora bien, el conocimiento de la estructura molecular de organismos vivos era mucho más lento. Para empezar, había un problema de tamaño. Por comparación con la miniatura de las moléculas orgánicas, las moléculas biológicas como la hemoglobina, la fibrina y otras proteínas, eran auténticos gigantes. Además, debía tenerse en cuenta la presencia de otras fuerzas de enlaces que el clásico y familiar enlace covalente que Pauling había utilizado para “jugar” con las moléculas inorgánicas. Estaba, por ejemplo, el fenómeno del enlace de hidrógeno que, a pesar de ser aproximadamente una décima parte menos fuertes que el enlace covalente ordinario, era uno de los más importantes conectores intermoleculares simples de las moléculas de la vida.

A. El papel de las proteínas en la génesis de la nueva medicina molecular

Uno de los pasos más importantes en la constitución de la nueva medicina molecular fue – al igual que ocurriera como vimos en la génesis de la biología molecular– la determinación detallada de la estructura de algunas proteínas. En ese sentido debemos destacar los trabajos realizados por Robert Coray y sus colaboradores en torno a la estructura cristalina de aminoácidos y pépticos simples. Estos trabajos mostraron la importancia del enlace de hidrógeno y la fuerza de este enlace en la configuración de la estructura de una cadena polipeptídica y del enlace que se producía entre moléculas adyacentes. La importancia de los conocimientos que se estaban obteniendo sobre las proteínas y las fuerzas que se daban entre las grandes moléculas era cada vez mayor; la configuración, el orden de los aminoácidos en una cadena polipeptídica, la naturaleza de las fuerzas entre átomos y otras moléculas, así como la naturaleza de las fuerzas entre las macromoléculas, se iban convirtiendo poco a poco en las principales cuestiones a resolver. Pero a su gran tamaño se unía otro gran problema a hora de estudiar las proteínas, su desnaturalización. Este problema, cuya naturaleza y resolución tendremos la oportunidad de ver a la hora de abordar la obra de Linus Pauling²⁹², tuvo

²⁹² Será entonces cuando tengamos la oportunidad de ver el artículo de Linus Pauling y Alfred Mirsky de 1.936 en el que, por primera vez, se da cuenta de los dos niveles o tipos de enlaces presentes en las proteínas junto a los dos tipos de desnaturalización relacionados.

importantes consecuencias tanto para el mundo de la biología como de la medicina, especialmente en la inmunología. Pues bien, hasta entonces el principal modelo en el que la inmunología podía inspirarse para proponer una explicación de la interacción entre las moléculas de un agente químico-terapéutico y las proteínas de los organismos, será la interacción entre agentes y anticuerpos. Los experimentos llevados a cabo por H. Campbell, David Pressman y otros científicos en Pasadena habían arrojado importantes datos cuantitativos acerca de la formación de enlaces entre el agente y el anticuerpo así como de los efectos inhibitorios de los precipitados²⁹³ observados. Pero uno de los principales protagonistas para su futura resolución fue Pauling, quien había empezado a mostrar interés por la estructura de los anticuerpos y las reacciones serológicas –tal y como ya señalamos en su biografía– entre 1.936 y 1.939. La razón de ello la encontramos en la especial relación que empezó a mantener con Kart Landsteiner durante esos tres años. La vinculación que a partir de entonces mantuvieron ambos científicos y los trabajos que Pauling llevaba a cabo en torno a la estructura de la hemoglobina, fueron claves para el avance de la inmunología y el nacimiento de un nuevo tipo de medicina: la medicina molecular. Como tendremos la oportunidad de ver más detenidamente, el nacimiento oficial de esta nueva disciplina podemos situarla en 1.949, con la aparición en *Science* de su artículo “Sickle-cell Anemia, a Molecular Disease”. La relevancia de esta publicación en la comunidad biomédica queda de manifiesto al hacernos cargo del crucial papel que jugó en el nacimiento tanto de la medicina molecular –de la que venimos hablando– como de la biología molecular. En este trabajo, Pauling y su equipo mostraron cómo los pacientes con un determinado tipo de anemia poseen moléculas de hemoglobina con una carga electroforéticamente distinta a la que poseen las moléculas de hemoglobina de personas sanas. Ahora bien, en aquel momento ya se sabía que la hemoglobina de adultos y fetos era desde ese punto de vista²⁹⁴ distinta, y que muchas enfermedades estaban relacionadas con la estructura alterada de las proteínas sanguíneas. Entonces ¿Por qué era tan importante y novedoso el artículo de Pauling? En primer lugar, era la primera vez que se demostraba que una enfermedad podía estar provocada por una alteración en la estructura molecular. En segundo lugar, relacionando lo anterior con la naturaleza hereditaria de esta enfermedad –algo que se sabía desde hacía tiempo–, se podía concluir que los genes determinaban la estructura de las

²⁹³ De antígenos y anticuerpos.

²⁹⁴ Electroforético

proteínas. Por esta razón, muchos investigadores han señalado que el trabajo de Pauling supuso la inauguración oficial de la medicina y la biología molecular.

Pero no adelantemos por ahora más elementos ni hagamos más alusiones a la influencia que su obra tuvo²⁹⁵. En este capítulo dedicado al contexto del progreso médico bajo el cual desarrolló Pauling su obra, llevaremos a cabo en lo que sigue una rápida exposición de algunos de los elementos contextuales más importantes que influyeron en su trabajo y que le permitieron desarrollar su teoría. Para tal fin, centremos nuestra atención en los desarrollos que se estaban produciendo en los ámbitos de la hematología, prestando especial atención a las investigaciones realizadas en torno a la anemia, y la inmunología.

Hematología

La historia de la hematología²⁹⁶ debe ser presentada como un “despliegue armónico de varios *vectores históricos*, cada uno de los cuales lleva consigo unas posibilidades técnicas de disección analítica y un estilo peculiar de elaboración sintética”. Así, debemos señalar en primer lugar los *vectores citomorfológico e inmunohematológico* como las dos líneas pioneras a las que vendrían a sumarse poco después dos nuevas corrientes técnicas que la dotaron de una segunda dimensión: los *vectores bioquímico y dinámico*. Finalmente, la hematología vivió un trepidante avance terapéutico a través del *vector terapéutico*. Como podremos ver, el trabajo de Linus Pauling estuvo ligado principalmente a dos de estas líneas: el *vector Inmunohematológico* y el *vector Bioquímico*.

Vector Inmunohematológico

Dentro de esta línea histórica debemos señalar cuanto menos el desarrollo de cuatro orientaciones o caminos durante las primeras tres cuartas partes del siglo XX. Para la primera de

²⁹⁵ Tal desarrollo será llevado a cabo en el capítulo *Medicina Molecular* del tercer módulo, dedicado éste, recordémoslo, al estudio concreto de la obra de Pauling.

²⁹⁶ Sanchez Fayos, José (1.975), p. 318.

ellas, la *dirección isoinmunológica*, la fecha clave es 1.900. Fue ese año cuando Ehrlich –cuya obra fue trascendental para el desarrollo de la inmunología como tendremos la oportunidad de ver– y Morgenroth propusieron la teoría del *horror autotoxicus*: resistencia a la autodestrucción inmunológica. Pero fue también en 1.900 cuando Landsteiner comunicó su descubrimiento del grupo sanguíneo ABO, hallazgo este que le permitiría pasar a la historia como el padre de la Inmunohematología²⁹⁷. A éste se sumarían posteriormente los descubrimientos que el infatigable inmunólogo nacido en Australia llevara a cabo de los grupos sanguíneos M, N y P en 1.927 junto a Levine, y del sistema Rh en 1.939 junto a Wiener. Ese mismo año, Levine y Stetson descubrían la sensibilización trasplacentaria, y en 1.945 Coombs, Mourant y Race redescubrían el test antiglobulinas –usado a principios del siglo XX por Morechi– que, junto a la utilización de otras técnicas dieron lugar al conocimiento del mosaico antigénico eritocitrario y el descubrimiento de nuevos sistemas de grupos sanguíneos²⁹⁸.

Podemos señalar a 1.946 como el año de inicio de la *orientación autoinmunoematológica*. Tras la demostración de Boorman, Dodd y Loutit de que algunas anemias hemolíticas eran consecuencia de un proceso de sensibilización del enfermo ante sus propios hematíes, se vio como el *horror autotoxicus* de Ehrlich podía dar en algunas ocasiones a un “error autotóxico”²⁹⁹. Por su parte, el conocimiento del papel alérgico de ciertas drogas en la realización de algunos tipos de hemacitopenias agudas medicamentosas, donde la interpretación de Akroyd (1.949) sobre el púrpura del Sedormind fue clave, abrieron un tercer camino que dentro del cual hay que destacar el hallazgo por parte de Moeschlin de leucoaglutininas farmacodependientes en algunos casos de agranulocitosis por piramidón³⁰⁰. Finalmente, encontramos los trabajos de Waldenstrom, Osserman, Franklin, Seligman y otros, que abrieron una cuarta vía centrada en el conocimiento inmunológico e inmunobioquímico de diferentes proteínas plasmáticas de interés hematológico.

²⁹⁷ El descubrimiento de la existencia de distintos grupos sanguíneos fue interpretado como una confirmación de la concepción “ehrllichiana” del *horror autotoxicus*.

²⁹⁸ Sanchez Fayos, José (1.975), p. 319.

²⁹⁹ Para el estudio de estas anemias hemolíticas autoinmunes fue clave el redescubrimiento llevado a cabo por Coombs y cols. del test de antiglobulinas señaladas anteriormente.

³⁰⁰ Sanchez Fayos, José (1.975), p. 320

Vector Bioquímico

Uno de los principales protagonistas de este vector fue, precisamente, el mismo Linus Pauling. A pesar de los avances producidos durante los últimos años, la hematología necesitaba una comprensión de las patologías lesionales desde un punto de vista molecular, requiriendo por ello del apoyo de la bioquímica. El punto crucial para este vector lo constituyó la publicación en 1.949 del artículo de Linus Pauling “Sickle-cell Anemia, a Molecular Disease”. En dicho artículo el químico estadounidense mostraba que los pacientes con anemia drepanocítica tenían una hemoglobina de movilidad electroforética anormal que se traducía en una anomalía bioquímica a nivel molecular. Nació así un nuevo campo de investigación y tratamiento: la “medicina molecular”, y un nuevo concepto asociado: “enfermedad molecular”. Al descubrimiento de la hemoglobina S por parte de Pauling –que veremos con más detalle en capítulos posteriores– le siguieron los descubrimientos de Itano y Neel de la hemoglobina C en 1.950 y de Itano en solitario de la hemoglobina D en 1.951. Se inauguraba así, una nueva línea de estudio en torno a las *hemoglobinopatías moleculares* entre quienes hay que destacar a Ingram, Stretton, Weatherall y Perutz, entre otros.

Como podemos observar, el estudio de la anemia ocupó un lugar especial en el nuevo marco de investigación abierto por Pauling en torno a la hemoglobina, concretamente la “anatomía funcional” de la molécula de hemoglobina. Si bien la anemia falciforme fue caracterizada por primera vez en un reporte del Dr. B. Eric sobre un paciente que sufría de una “extraña enfermedad” (Linde 1.972), los primeros estudios que permitieron la localización de una nueva hemoglobina enferma (HbS) fueron los llevados a cabo a finales de la década de 1.940 por Pauling y sus colaboradores. Si bien el químico estadounidense no fue por supuesto el único interesado en esta molécula ni en el problema de la anemia, sino que deben destacarse nombres como los de sus colaboradores Itano y Harvey así como los de los grandes investigadores Pertuz, Mitchson y Harrys, la importancia y originalidad de sus trabajos nos obligan a postponer un análisis más riguroso de este tema hasta el capítulo 3, donde se llevará a cabo una exposición más específica de sus trabajos sobre la anemia falciforme.

Immunología

Podemos situar el nacimiento de la inmunología moderna entre las décadas de 1.880 y 1.890. Uno de los factores más importantes en el desarrollo de esta disciplina lo constituyó la formulación en 1.883 de la *teoría celular o fagocítica de la inmunidad* por parte de Elie Metchnikoff. Esta teoría estaba inspirada en parte en los trabajos que, 25 años atrás, llevara a cabo Rudolf Virchow para quien toda enfermedad estaba basada en el trastorno o malfuncionamiento de determinados grupos de células. Para Metchnikoff la inflamación, fruto principalmente de la reacción de células migratorias, constituía la principal defensa del organismo contra las infecciones bacterianas. Dicha teoría apareció publicada en la Revista del instituto de Zoología de Viena en 1.883. En este trabajo Metchnikoff utiliza por primera vez los términos *fagocito* (del griego *phagein*, comer y *kytos*, célula), para referirse a las células migratorias involucradas en las reacciones de defensa del organismo que digerían los elementos extraños y *fagocitosis*, para designar al proceso de ingestión y destrucción intracelular de bacterias. Es importante mencionar que ya se había observado previamente la ingestión de ciertas partículas por parte de algunas células. Es el caso, por ejemplo, de Ernst Haeckel en 1.862 y el mismo Metchnikoff en 1.865, quien había estudiado la digestión intracelular de partículas en gusanos del género *Fabricio*³⁰¹.

La publicación de la teoría celular de la inmunidad generó una gran controversia, si bien hay que hacer notar que muchas de las objeciones iniciales carecían de una base experimental adecuada. La totalidad de estas objeciones se iniciaron en Alemania con Paul von Baumgarten en Berlín, y fue seguida por reconocidos patólogos como H. Bitter, Christmas-Dirckinck, E. Ziegler, Georg Gotinga, Carl Weigert en Breslau, y Franck en Friedrichsheim. Pero en Alemania encontramos también algunos de los mayores defensores de la teoría celular. Entre ellos encontramos a Heidelberg, Hugo Ribbert y Hans Buchner. Otros científicos importantes partidarios de la teoría celular fueron Nikolai Fyodorovich Gamaleia, Guido Banti, Carl Gamus y la mayoría de los inmunólogos franceses.

Con la intención de hacer frente a las críticas recibidas, Metchnikoff recopiló en 1.891 los resultados de sus experimentos e ideas en un trabajo titulado *Patología Comparada de la*

³⁰¹ Fruto de estas observaciones Metchnikoff había publicado en 1.880 un artículo sobre la digestión intracelular en los celenterados.

Inflamación donde formalizaba su teoría y presentaba en detalle su desarrollo evolutivo. A pesar de sus esfuerzos, poco a poco aparecían trabajos bien fundamentados que demostraban la existencia de factores no celulares en la sangre con un importante papel en los fenómenos de inmunidad. Estas investigaciones, que desembocarían en el descubrimiento de los anticuerpos y del sistema del complemento³⁰², permitieron a los anticelularistas formular una teoría humoral de la inmunidad. En clara oposición a la teoría celular de Metchnikoff, esta nueva teoría sostenía que la defensa del organismo frente a los microbios dependía sobre todo de las propiedades químicas de la sangre y de otros líquidos del organismo, lo que dejaba –en el mejor de los casos– un papel muy pequeño a los elementos celulares en el mecanismo de defensa.

Clave fue entonces el descubrimiento de Emil Behring y Shibasaburo Kitasato en 1.890: la producción de anticuerpos (antitoxinas) como mecanismo de resistencia en casos de difteria y tétanos. Este hallazgo, junto al desarrollo de aplicaciones basadas en el mismo para el tratamiento de dichas enfermedades por medio del uso de antisueros, supuso un duro golpe para la teoría celular. A ello hay que añadir la serie de descubrimientos que se sucedieron durante la década de 1.890 en torno a la función e interrelación de antígenos, anticuerpos y complementos. De ese modo, el estudio de los componentes humorales de la inmunidad representó durante esta década el principal objetivo de la investigación inmunológica. A pesar de las nuevas evidencias en favor de la teoría celular presentadas por Metchnikoff, poco a poco dicha teoría iba perdiendo terreno en favor de la teoría humoral gracias a su capacidad para explicar la mayoría de las observaciones reportadas sobre los fenómenos de la inmunidad natural y adquirida.

En un intento final por recuperar algo del terreno perdido, Metchnikoff publicó en 1.901 su famoso libro *Inmunidad en las Enfermedades Infecciosas*³⁰³. Este trabajo es considerado una obra clásica en el desarrollo de la ciencia, y una de las primeras monografías dedicadas por entero al estudio del fenómeno inmunitario. De especial interés resultan los dos últimos capítulos que presentan, respectivamente, una revisión histórica del desarrollo de la ciencia de la inmunidad y un

³⁰² Desde finales del siglo XIX y principios del siglo XX se sabía que ciertos efectos observados en la reacción antígeno-anticuerpo –ya fuera *in vivo* o *in vitro*– no tenían lugar sin la cooperación de algunos sistemas efectores puestos en marcha por la reacción inmunológica. Sin embargo, estos efectores eran distintos al antígeno y al anticuerpo. Fue entonces cuando apareció el concepto de “complemento”. Ferrata había demostrado a principios del siglo XX que el “complemento” no era una sustancia única, sino un sistema formado por dos componentes cuya acción conjunta y cooperativa era necesaria para el resultado final. Pero en 1.912 Ritz mostró la existencia de un tercer componente y, en 1.926 Gordan y sus colaboradores el de un cuarto.

³⁰³ Con título original "Immunité dans les maladies infectieuses"

resumen del conocimiento inmunológico existente en esa época. Además, este trabajo fue uno de los primeros intentos de reconciliación entre las teorías celular y humoral de la inmunidad³⁰⁴. A pesar de dicho intento, los estudios sobre la inmunidad celular quedaron relegados durante más de 50 años –a excepción de algunas investigaciones aisladas–, hasta finales de la década de 1.950, momento en el que resurgió un nuevo interés en torno a los linfocitos como agentes principales.

Volvamos a los inicios del siglo XX. Durante la primera década ya se sabía que la inmunidad era un fenómeno complejo. Las observaciones habían demostrado que la penetración en el organismo –ya fuera de forma natural o inducida– de sustancias extrañas al mismo, principalmente bacterias o sustancias químicas de naturaleza proteica, estimulaban el desarrollo de otras sustancias: los anticuerpos, los cuales reaccionaban con la sustancia estimulante o antígeno. Pero ¿cómo eran estos anticuerpos? ¿Cómo funcionaban? Para 1.919 Landsteiner –cuyo trabajo fue clave para Pauling– había publicado ya una serie de artículos en torno a la estructura química y la especificidad sexológica: trabajos que constituyeron³⁰⁵ un modelo de rigor científico que vendrían a marcar en buena medida el futuro de la Inmunoquímica³⁰⁶.

Sin embargo, a finales de los años 30 la inmunología parecía hallarse en una vía muerta. Si entre 1.890 y 1.938 se había acumulado un impresionante cuerpo de información sobre la reacción de antígenos y anticuerpos, así como su uso práctico en campos tan diversos como la microbiología, la patología, la medicina forense y la industria, los esfuerzos parecían estar destinados por entonces, de forma casi exclusiva, a confirmar las observaciones hechas durante las décadas previas. Más grave parecía, además, la imagen que estaba empezando a generarse en torno a la inmunología: comenzaba a ser considerada más una técnica de la microbiología que una ciencia propiamente dicha. Una de las razones de esta crisis la podemos encontrar en el hecho de que, a pesar del enfoque químico dado por Ehrlich –que luego trataremos con un poco más de atención– y otros investigadores a estos estudios, solo se sabía por entonces que los anticuerpos podían ser considerados como globulinas, término todavía muy impreciso. La dificultad en aclarar

³⁰⁴ Pero como decimos se trata de uno de los primeros. Hay que hacer notar la existencia de otros intentos por llevar a cabo una investigación basada en teorías alternas según las cuáles los conceptos humorales y celulares no eran excluyentes sino complementarios. Cabe destacar entre estos investigadores al químico y bacteriólogo inglés Ernest Hanbury Hankin y a Jean-Baptiste Denys y J. Havet de Lovaina (Bélgica).

³⁰⁵ Ortiz Masllorens, Fernando (1.975), p. 177.

³⁰⁶ Este término que había sido ideado años antes por Arrhenius, designa en la actualidad una de las grandes divisiones de la Inmunología.

la verdadera naturaleza de los anticuerpos se debía, fundamentalmente, al hecho de que era virtualmente imposible, con las técnicas existentes por entonces, diferenciar en un precipitado de complejos antígeno-anticuerpo, cuál era el antígeno y cuál el anticuerpo.

Afortunadamente, a finales de los años 30 se produjo un notable mejoramiento en el conocimiento de los antígenos y de los anticuerpos que permitió un estudio más profundo de la reacción antígeno-anticuerpo. De esa forma, en 1938 Marrack resumía en un pequeño libro titulado *La química de los antígenos y los anticuerpos* los resultados de las investigaciones llevadas a cabo durante los últimos años, y formulaba la teoría “*lattice theory*” sobre la reacción antígeno-anticuerpo. Por primera vez se podían dar, asentadas sobre bases científicas, explicaciones de fenómenos no bien conocidos hasta la fecha, y que a menudo se habían estado explicando de forma más o menos arbitraria. Por la misma época Heidelberg, Kendall y otros científicos llevaron a cabo un minucioso análisis de las reacciones de precipitación, abriendo de ese modo un camino cuyas recompensas llegarían décadas después con el perfeccionamiento tecnológico. Herederos de alguna forma de los trabajos de Landsteiner sobre los antígenos de los eritrocitos y las modificaciones químicas de los antígenos proteicos, los estudios de Heidelberg y su discípulo Rabat estaban centrados principalmente en los antígenos hidrocarburados. Después de siete años de trabajo, Heidelberg y Kendall acumularon suficientes datos para postular una teoría cuantitativa de la reacción de precipitación, no solo para antígenos polisacáridos, sino también para antígenos proteicos. Estas investigaciones fueron fundamentales para posteriores investigaciones inmunológicas y el descubrimiento de la caracterización de los anticuerpos.

Una de las cuestiones que más llamó la atención de los científicos era la pregunta por el mecanismo de arranque, qué era lo que producía la respuesta inmune frente a un estímulo antígeno. Al principio los estudios se limitaron al establecimiento de una cronología de respuesta, a señalar las diferencias observadas que se producían entre la primera penetración (respuesta primaria) y las penetraciones posteriores (respuesta secundaria) del mismo antígeno. Poco después comenzaron los estudios sobre la participación de determinados órganos en la respuesta, estudios que se llevaron posteriormente al nivel celular. Fruto de este giro fue la aparición de disputas entre quienes propugnaban que la célula plasmática era la célula formadora de anticuerpos, y quienes atribuían ese papel a los linfocitos.

Habría que esperar al fin de la segunda guerra mundial, a la introducción de los métodos de inmunofluorescencia y el empleo de antígenos y anticuerpos marcados radioisotópicamente, para que se diera un gran progreso en el conocimiento de la respuesta inmune. Los estudios sobre el papel inmunológico del timo –sobre todo los llevados a cabo por Miller– mostraron la existencia de una división en el sistema linfático. Se probó la existencia de dos compartimentos cada uno constituido por varias estructuras de los órganos linfáticos periféricos y regidos por un órgano linfático central: el timo para las células llamadas T, y la bolsa de Fabricio para las células B. Cada uno de estos compartimentos estaría a cargo de distintas funciones inmunológicas: respuestas humorales por parte del sistema B y respuestas celulares del sistema T, si bien se apreciaba cierta cooperación entre los dos sistemas en algunos casos.

Las investigaciones permitieron reconocer una serie de agentes o influencias que exaltaban (adyuvantes) o deprimían (inmunodepresoras) la respuesta ante un determinado antígeno. Así, fue posible que en 1.952 Bruton describiera por primera vez el caso de un niño con agammaglobulinemia, un síndrome de inmunodeficiencia. Se hacía evidente, poco a poco, cómo la respuesta inmune podía ser manejada de la manera más conveniente en cada caso.

A partir de los aspectos químicos de la Inmunología y la inmunidad de acción, fue posible ver desde muy pronto, durante las primeras décadas de la existencia de la Inmunología como ciencia, cómo los fenómenos inmunológicos que contribuyen a la defensa del organismo vivo frente a las enfermedades –produciendo o contribuyendo a producir alteraciones en su estructura o función–, eran mecanismos básicamente iguales a los que intervienen en la inmunidad defensiva y en otras reacciones responsables de algunas lesiones más o menos importantes³⁰⁷ del sujeto³⁰⁸.

Muchos de los hallazgos que se fueron dando se iban incorporando a medida que se iban produciendo –tal y como señala Ortiz Masllorens³⁰⁹– a esquemas teóricos que trataban de explicar los fenómenos inmunitarios en su conjunto dentro de las concepciones generales de la

³⁰⁷ Algunas lesiones pueden incluso provocar la muerte.

³⁰⁸ Pirquet propuso entonces el término de alergia para definir un nuevo estado adquirido por el sujeto como resultado del contacto con un anticuerpo, pudiendo este estado alérgico conducir a una situación de defensa contra un agente infeccioso o tóxico (inmunidad en sentido estricto), o a una situación de hipersensibilidad contra sustancias antigénicas que de suyo, sin la mediación de este mecanismo “inmunológico”, incluso podrían ser totalmente inocuas.

³⁰⁹ Ortiz Masllorens, Fernando (1.975), p. 181

biología entonces vigentes. Sin embargo, en muchas ocasiones fue necesaria la “construcción” de nuevas teorías que, a su vez, solían servir de hipótesis de trabajo sobre las que era posible el diseño de nuevos planes experimentales.

Con el fin de dar cuenta del contexto más inmediato en el que trabajó Pauling se hace oportuno señalar cuatro momentos que deribarón en cuatro tipos de teorías. Bajo éstas se recogían las principales respuestas del momento en torno a las cuales se desarrollaron de las ideas acerca de la naturaleza y significación de la respuesta inmune, así como de formación de los de los antígenos.

Las teorías selectivas

En primer lugar nos encontramos con las *teorías selectivas*. La primera y más importante fue la formulada por Paul Ehrlich en 1.900, y se conoció como como la teoría de receptores o cadenas laterales. Según este autor las células poseen en su superficie anticuerpos o receptores específicos para los diferentes antígenos contra los cuales un individuo puede reaccionar. Esta teoría estuvo vigente hasta que en los años 20 Karl Landsteiner demostrara que se podían producir anticuerpos ante antígenos artificiales³¹⁰. Las observaciones llevadas a cabo ponían en entre dicho la teoría de Ehrlich, ya que su defensa suponía entonces aceptar la existencia de anticuerpos específicos preformados para un número prácticamente ilimitado de antígenos. Los avances producidos en la inmunología –sobre todo en lo referente a la base química de la especificidad antigénica– dieron las bases para superar las dificultades que presentaba la teoría de Ehrlich.

Teorías de instrucción

Así, Oskar Bail y sus colaboradores propusieron entre 1.909 y 1.914 la primera de las *teorías instructivas*. Vigentes durante cerca de 40 años, para estas teorías la penetración del

³¹⁰ Como proteínas tratadas con dinitroclorobenceno o con ácido sulfanílico

antígeno dentro de la célula daba a ésta la información necesaria para la síntesis de un anticuerpo complementario al antígeno. Dicha información era previamente inexistente en la célula, por lo que ésta había sido incapaz de formar los anticuerpos específicos hasta ese momento. Por ello, la presencia del antígeno o fragmentos del mismo, serían necesarios para la síntesis de la globulina “modificada” a partir de gamma globulinas “normales”. Herederas de esta propuesta, a principios de la década de 1.930³¹¹ aparecieron las teorías instructivas de Friedrich Breinl, Felix Haurowitz y Topley (1.930), J. Alexander y Stuart Mudd (1.932) y, unos años más tarde, las de A. Rothen y Karl Landsteiner (1.939), Linus Pauling (1.940) y Fred Karush (1.958). El común denominador de estas teorías era³¹² –como adelantamos– que el antígeno llevaba en sí mismo la información que determinaba la especificidad del anticuerpo correspondiente, actuando en cierta forma como un molde sobre el cual se construía directamente una molécula complementaria. Este concepto tuvo amplia aceptación entre los inmunólogos de la época, ya que parecía explicar la mayor parte de los problemas relacionados con la formación de anticuerpos, especialmente los de la especificidad y diversidad³¹³. Como tendremos la oportunidad de ver, fue precisamente Linus Pauling, quien más se aferró a esta idea, proponiendo que todos los anticuerpos que se formaban en un determinado organismo poseían la misma cadena peptídica³¹⁴, diferenciándose entre sí sólo por su conformación tridimensional, la cual era adquirida por contacto directo con el antígeno.

Teorías de instrucción indirecta

Sin embargo, estas teorías eran insuficientes para explicar algunos de los hechos conocidos acerca de la respuesta inmune. Por ello, fueron dando paso en la década de 1.940, poco a poco, a las *teorías de instrucción indirecta*. Según estas teorías, el antígeno induciría en la célula un cambio específico, estable y replicable, en virtud del cual la célula y su descendencia habrían aprendido a fabricar un anticuerpo complementario para el antígeno en cuestión. En 1.941, Frank Macfarlane Burnet proponía en la monografía “La producción de

³¹¹ Soyano, Andres.

³¹² Ortiz Masllorens, Fernando (1.975), p. 181

³¹³ Soyano, Andrés.

³¹⁴ Es decir, una secuencia de aminoácidos idéntica.

anticuerpos” que el antígeno actuaba sobre enzimas intracelulares que, a su vez, sintetizaban los anticuerpos correspondientes. En la segunda edición de esta monografía (1.949) –en colaboración con Frank Fenner– Burnet postulaba que el antígeno imprimía su información sobre los ácidos nucleicos –no sobre enzimas intracelulares– a partir de los cuales se formaba posteriormente un molde que determinaba la síntesis de los anticuerpos respectivos. De esa forma, según científicos como Burnet y Fenner, sería posible la producción de un anticuerpo aún en ausencia del antígeno complementario. En un contexto más cercano al de Pauling, R.S. Schweet y R.D. Owen del Instituto Tecnológico de California, adaptaron en 1.957 los nuevos conocimientos en genética celular³¹⁵ a la teoría de Burnet.

Modernas versiones de la teoría selectiva

Pero muchos de los hechos observados –como la autoinmunidad– seguían sin poderse explicar. Fue entonces, cuando algunos investigadores volvieron la mirada a la centenaria teoría de Ehrlich y a la formulación de modernas versiones de su *teoría selectiva*. Estas teorías suponían que el antígeno no aportaba nada a la célula, ninguna información en cuanto a la proteína (inmuno globulina) que debía formar. El antígeno simplemente se limitaba a poner en marcha, a seleccionar un mecanismo preexistente ya en la célula o a estimular a una de las varias presentes, cada una con un mecanismo distinto. La primera teoría selectiva del período post-erlichiano vio la luz en 1.940. Con un profundo contenido químico la teoría de P. Jordan sugería que una vez que el antígeno ingresaba al organismo seleccionaba de una población de anticuerpos preexistentes aquellos con los cuales podía interactuar específicamente, determinando su formación en gran cantidad. Sin embargo, el verdadero renacimiento de las teorías selectivas se dio a partir de 1.955³¹⁶ con los trabajos de Niels Jerne. El inmunólogo nacido en Londres postuló que un animal era capaz de producir durante su vida embrionaria un innumerable número de anticuerpos diferentes; posteriormente, el antígeno introducido seleccionaba de entre los diferentes anticuerpos disponibles aquel, o aquellos, que le son específicos formándose un complejo

³¹⁵ La síntesis de proteínas se hacía a partir del ácido desoxiribonucleico (ADN), sobre el cual se formaba el ácido ribonucleico mensajero (ARNm), que llevaba la información para la formación de las proteínas, en este caso, los anticuerpos.

³¹⁶ La teoría de P. Jordan tuvo poca aceptación debido, principalmente, a los críticas llevadas a cabo por Linus Pauling y Max Delbruck.

antígeno-anticuerpo. Este complejo sería transportado a los sitios de producción de anticuerpos, donde se iniciaría la síntesis a gran escala del anticuerpo correspondiente. La importancia de la obra de Jerne es doble. Por un lado, es necesario hacer notar que su teoría proveía de una explicación molecular tanto para la formación de los anticuerpos, como para el fenómeno de tolerancia inmunitaria³¹⁷. Por otro, a partir de sus ideas, David W. y Frank Macfarlane Burnet, modificaron, profundizaron y extendieron el concepto de selección antigénica de forma independiente. La nueva idea básica era que el antígeno seleccionaba las células productoras de anticuerpos, las cuales tenían en su superficie los receptores específicos. Pero de los dos, quien más contribuyó al desarrollo de la teoría selectiva fue Burnet con su famosa monografía "La teoría de la selección clonal de la inmunidad adquirida" (1.959). A partir de la corrección y ampliación de las ideas de Jerne expuestas cuatro años antes, Burnet desarrolló una teoría basada en la selección clonal³¹⁸. En el curso de la diferenciación celular –vendría a decir Burnet– se produce un gran número de clones o líneas celulares distintas, cada una dotada de una especificidad para un antígeno determinado. A partir de este modelo se hacía posible por fin explicar muchos de los hechos que habían quedado hasta entonces fuera³¹⁹. Esta teoría, que desempeñó un papel fundamental en el desarrollo de la inmunología celular, no se libró de las críticas. Tuvo que enfrentarse a muchas de las objeciones que se le habían presentado al mismo Ehrlich. Una de ellas, tal vez la que más interés levantó, tenía que ver con la enorme diversidad de anticuerpos que posee un individuo y la identificación de los mismos.

A partir del análisis de las propiedades fisicoquímicas de las proteínas presentes en los anticuerpos, se constató que la mayoría de ellas diferían de las otras proteínas plasmáticas. Su principal característica era su falta de homogeneidad y la formación de familias o grupos de moléculas estrechamente relacionadas. Por ello, la clasificación de los anticuerpos ocupó un lugar central en su estudio. Uno de los primeros criterios de clasificación de los anticuerpos o inmunoglobulinas fueron sus características físico-químicas, atendiendo fundamentalmente su sedimentación. En base a estas características, se estableció a comienzos de la década de 1.940 la

³¹⁷ La teoría de Jerne señalaba que aquellas moléculas con reactividad para antígenos propios eran eliminadas durante la vida fetal.

³¹⁸ En donde intentó explicar además los fenómenos de tolerancia y autoinmunidad.

³¹⁹ Un ejemplo es el de la autoinmunidad: cuando las células de una especificidad se muestran incapaces de responder a *su* estímulo específico (por inmadurez o depresión en la capacidad de respuesta), tales células son destruidas o irreversiblemente inactivadas, produciéndose de ese modo una tolerancia natural frente a los antígenos propios o a la tolerancia adquirida ante antígenos exógenos.

existencia de dos clases de anticuerpos: la globulina gamma³²⁰ y la macroglobulina beta o macroglobulina gamma 1³²¹.

Tras su indentificación y clasificación, empezaron a llevarse a cabo extensos trabajos para establecer un modelo de sus estructuras tanto primarias como secundarias. A pesar de las dificultades presentadas –debido sobre todo a que las inmunoglobulinas de individuos normales son una mezcla muy heterogénea de numerosas moléculas, que aunque similares, distan mucho de ser idénticas–, se vivió un gran impulso gracias al descubrimiento en 1.962 de que la proteína de Bence-Jones, idéntica a las cadenas livianas de las inmunoglobulinas.

En los últimos años, la determinación de la secuencia de aminoácidos de gran cantidad de inmunoglobulinas mielomatosas humanas y múridas así como su comparación por medio de técnicas de computación, ha permitido obtener una mejor apreciación de los mecanismos de la síntesis de anticuerpos y de los aspectos genéticos relacionados con ellos. Sin embargo, estos desarrollos quedan ya muy lejos del contexto dentro del cual Linus Pauling llevó a cabo sus primeros trabajos de inmunología.

Medicina ortomolecular

Hemos visto hasta ahora el contexto bajo el cual Linus Pauling llevó a cabo sus investigaciones más importantes dentro de los ámbitos hematológicos e inmunológicos. Se trataba de trabajos realizados bajo una metodología y unos presupuestos que le llevaron a ser reconocido como uno de los investigadores más importantes de la medicina tradicional. Sin embargo, esa misma metodología, lógica y presupuestos le llevaron en 1.968³²² a proponer una nueva rama médica acusada en muchas ocasiones de carecer de suficiente rigurosidad técnica y de las pruebas suficientes para su aplicación clínica: la medicina ortomolecular. En este artículo de 1.968 Linus Pauling definió la medicina molecular como “el tratamiento de enfermedades por medio de la provisión de un ambiente molecular óptimo, especialmente las concentraciones

³²⁰ La más abundante, de aproximadamente 150.000 daltones de peso molecular, coeficiente de sedimentación 7S (7 unidades Svedberg) y movilidad electroforética gamma (Conocida desde 1.964 como IgG)

³²¹ Posteriormente se descubrirían otros dos tipos.

³²² Pauling, Linus (1.968b).

óptimas de sustancias normalmente presentes el cuerpo humano”, o como “la preservación de una buena salud y el tratamiento de enfermedades por medio de la variación de la concentración en el cuerpo humano de sustancias que normalmente presentan en el cuerpo y son requeridos par la salud”³²³.

Según la medicina ortomolecular, el padecimiento de muchas enfermedades por motivos congénitos, adquiridos o no específicos, producen –entre otras cosas– aberraciones bioquímicas cuya acumulación es la responsable de los síntomas e indicios que nos permiten percibir el estado de enfermedad. De ahí, que algunas enfermedades se puedan describir como un conjunto de anomalías bioquímicas. Por ello, ante cualquier sospecha el doctor ortomolecular se vale en gran medida de pruebas clínicas que van más allá, en muchas ocasiones, de las analíticas estándares empleando una amplia gama de sofisticados análisis de laboratorio³²⁴. Una vez llevadas a cabo las pruebas de laboratorio, la terapia consiste en proporcionar al enfermo las cantidades óptimas de las sustancias normales del cuerpo que se crean oportunas. Durante los primeros años estas terapias consistieron, en la mayoría de los casos, en proporcionar altas dosis de un solo nutriente³²⁵. Sin embargo, paulatinamente el médico ortomolecular ha ido empleando el uso de múltiples sustancias vitales (aminoácidos, enzimas, nutrientes no esenciales, hormonas, vitaminas, minerales, etc.) con el fin de restaurar los niveles estadísticamente normales³²⁶.

Sin entrar ahora en polémicas en torno a su ortodoxia, lo cierto es que investigaciones y estudios científicos, así como la experiencia clínica, han constatado como la nutrición terapéutica puede tratar, y a veces curar, problemas con el acné, la picaduras de abejas, arañas y serpientes, quemaduras, cáncer, enfriamientos comunes, problemas de drogadicción, enfermedades coronarias, hepatitis agudas, herpes, influenza, mononucleosis infecciosa,

³²³ Pauling, Linus (1.968b). Traducciones a partir de las citas recogidas en “Definition of Orthomolecular medicine” en www.orthomed.org (acceso 12 de junio de 2.007) y Stephen Lawson (Noviembre, 1.999), “What is Orthomolecular Medicine?” del *Linus Pauling Inst.* en <http://lpi.oregonstate.edu/f-w99/orthomolecular.html> (acceso 12 de junio de 2.007).

³²⁴ Análisis de aminoácidos, ácidos orgánicos, vitaminas y minerales, el estado de vitaminas funcionales, hormonas, inmunología, microbiología y función gastrointestinal, que en muchas ocasiones no han sido aceptadas por la medicina convencional.

³²⁵ Por lo general este nutriente solía ser una vitamina, lo que daba lugar a las llamadas *terapias de megavitaminas*. Éstas consistían en la administración de grandes cantidades de vitaminas, muchas veces mayores que las cantidades diarias recomendadas (RDA por sus siglas en inglés, de "recommended dietary allowance"). Ha sido precisamente este tipo de terapias los objetivos de las mayores críticas que ha recibido la medicina ortomolecular.

³²⁶ Teniendo como referencia los niveles de personas jóvenes sanas.

envenenamiento por hongos, esclerosis múltiple, osteoporosis, polio, alergias, artritis, epilepsia, autismo, hipertensión, hipoglucemia, migrañas, depresiones, deficiencias del aprendizaje, desorden mental y metabólico, problemas en la piel, hiperactividad, la enfermedad de Raynaud, intoxicación por metales pesados o radiación, esquizofrenia, conmociones, tétanos y neumonía viral. Por ello, no podemos cerrar esta breve referencia al campo de la medicina ortomolecular sin señalar previamente que la diversificación de estudios vivida, la riqueza de las investigaciones llevadas a cabo, y los éxitos logrados nos obligan –aunque el campo ortomolecular siga asociándose a la figura de Linus Pauling– a poner junto al nombre del científico de Pórtland los de otros investigadores como Irwin Stone, Robert F. Cathcart, Abram Hoffer, Otto Heinrich Warburg, David R. Hawkins, William J. Walsh, Steve Hickey y Albert Sent.-Gyorgyi, a los que tendrían que sumarse todo un batallón de médicos especializados.

1.4. CONTEXTO E INFLUENCIAS FILOSÓFICAS

INTRODUCCIÓN

Es difícil empezar a hablar del contexto filosófico en el que se desarrolló el trabajo científico de un autor –como es el caso de Linus Pauling– que declaró³²⁷ en muchas ocasiones su excusa devoción por la filosofía y su único interés por la ciencia. Sin embargo, la crisis y revolución científica que se vivió a finales del siglo XIX y principios del siglo XX, así como el extraordinario desarrollo que vivieron las ciencias en el segundo cuarto del pasado siglo –y del que participó el mismo Pauling– estuvieron fuertemente condicionadas por el contexto filosófico e intelectual que se vivía: la nueva lógica-matemática y la influencia de la recientemente constituida filosofía de la ciencia recogidas por el positivismo lógico, fueron claves para el desarrollo de la temprana ciencia del siglo XX. Pero la necesidad y urgencia de llevar a cabo un estudio del contexto e implicaciones filosóficas de su obra está en la constatación de las extraordinarias implicaciones epistemológicas y ontológicas que los mismos científicos pusieron en juego. La ruptura del marco clásico con la aparición en escena del cuanto de acción de Planck puso en tela de juicio los fundamentos últimos sobre los que estaba construida toda la ciencia. Por ello, se hace sumamente importante –y máxime cuando se trata éste de un trabajo filosófico– dar cuenta del contexto filosófico e intelectual aunque sea de forma muy general dentro del cual se desarrolló la vida y el pensamiento de Linus Pauling.

A lo largo de las siguientes páginas trataremos, por ello, hacer una breve descripción del estado intelectual que rodeó y marcó el desarrollo científico de la primera mitad del siglo XX y que, en gran medida, condicionaron y marcaron el trabajo científico de un hombre que contaba en su biblioteca privada³²⁸ de 4.090 libros con 247 títulos entre libros de filosofía, psicología y religión –casi todos ellos con anotaciones de su puño y letra–, más de 300 ejemplares de historia y más de 500 sobre política y ciencias sociales.

Es curioso, o puede resultar, el hecho ya apuntado de que en varias ocasiones Pauling mostrase tajantemente su escaso interés por las cuestiones e implicaciones filosóficas

³²⁷ Pauling, Linus (1.937), “The Significance of Structural Chemistry”. Primera conferencia que dio como *George Fisher Baker Nonresident Professor of Chemistry* en Itaca, Nueva York.

³²⁸ Actualmente dicha biblioteca constituye –como vimos en su momento– parte de una de las colecciones especiales de la Universidad Estatal de Oregón, la llamada *Ava Helen and Linus Pauling Papers*.

que fundamentan y están en juego detrás de las teorías científicas. Sobre todo, cuando la preocupación por el método, la finalidad de la ciencia y el tipo de conocimiento que obtenemos a través de la ciencia fueron recurrentemente objetos de su preocupación y reflexión. Uno de los principales objetivos de este trabajo –en ese sentido– es el de mostrar cómo pudo influir en Pauling los dos viajes que realizó a Europa, su contacto con los principales protagonistas de la nueva mecánica cuántica y ondulatoria en 1.926, a la hora de tomar partida ante toda una serie de cuestionamientos, de posicionamientos en torno a la naturaleza y finalidad de la ciencia, al carácter ontológico de los conceptos básicos así como de la vigencia de los conceptos de causalidad, determinismo y representatividad espacio-temporal. Seguros de que todos estos problemas filosóficos condicionaron en buena medida el desarrollo e interpretación de su obra científica posterior, dedicaremos este capítulo a conocer las dos posiciones más importantes que en torno a las nuevas cuestiones filosóficas que se gestaron en el corazón mismo de la nueva mecánica cuántica: la concepción realista de la ciencia –a cuyos principales representantes (Einstein y Planck) se refería burlescamente Heisenberg en una carta enviada a Pauli como “Los caballeros del continuo”³²⁹– y la *Interpretación de Copenhague*. En la tercera y última parte de este capítulo se llevará a cabo un primer acercamiento a la posición de Pauling –a la vez que se clarifican nuevos conceptos filosóficos– en torno a las cuestiones planteadas en la ya mencionada. De ese modo, los dos siguientes capítulos, se dedicarán a constatar cómo estas respuestas se encuentran presentes en su obra científica; tanto en la dedicada a la química estructural moderna como en la relacionada con la biología y la medicina. Pero antes de todo ello, se hace oportuno –tal y como ya se indicó– una muy breve introducción al contexto filosófico e intelectual.

El contexto filosófico e intelectual en el que se desarrollaron los primeros años de vida y de trabajo de Linus Pauling se hallaba bajo el signo de una profunda crisis. Los síntomas de la inestabilidad e incertidumbre que vivía el mundo intelectual eran resultado de la aparición de movimientos contrarios a las dos posiciones más poderosas del pensamiento moderno; el mecanicismo materialista y el subjetivismo. Esta ruptura, que iba más allá del campo filosófico, abrigó toda la cultura moderna. El profundo cambio que vivió Europa desde el punto de vista del pensamiento social, las graves perturbaciones económicas, las novedades en el campo de las

³²⁹ Ordóñez, J., Navarro, V. y Sánchez Ron, J.M. (2.003), p. 528

artes, la revolución notable en los dominios religiosos, son algunos ejemplos de ello. En todos los sectores de la vida se manifestaba una actitud diferente a la que se había mostrado décadas atrás y que encontró incluso reflejo en las guerras que estaban por venir, en unos conflictos que pusieron todo de su parte para acelerar un proceso de disolución propio de todo momento de crisis.

Siendo imposible dar cuenta de todos los cambios acontecidos que afectaron en la transformación profunda de la vida espiritual y las circunstancias sociales, nos limitaremos a señalar como algunas de las causas y factores espirituales directos que, en el ámbito de las ciencias, participaron en la transformación de esta factores, tres movimientos espirituales que se encontraban entrelazados; la crisis vivida en la física y la matemática que dieron lugar al desarrollo del pensamiento analítico y el abandono de ciertas actitudes espirituales típicas del siglo XIX; el desarrollo de los nuevos métodos lógico-matemático y fenomenológico; la aparición de nuevas concepciones del mundo, entre las que hay que destacar el irracionalismo y la nueva metafísica realista. Estos tres movimientos espirituales mantuvieron entre sí una fuerte relación de interdependencia: así como el desarrollo de la lógica-matemática tuvo su origen en la crisis matemática, las incertidumbres de la física reforzaron el irracionalismo, la influencia que la fenomenología tuvo en el desarrollo de la nueva lógica-matemática y la coincidencia de pensadores en la fundación del método fenomenológico y del nuevo realismo.

La aparición simultánea de movimientos tan diferentes –un acontecimiento sin precedentes– trajo consigo una transformación completa de la ciencia. Pero esta metamorfosis científica fue el resultado, principalmente, de los conflictos de carácter filosófico que se produjeron dentro de cada disciplina. Los más importantes, por lo menos por su repercusión interna y externa, fueron los que se produjeron dentro de la mecánica cuántica: dificultades que no se encontraban ni trataron paralela, secundariamente al desarrollo de la disciplina, sino que instaladas en el corazón mismo de la nueva teoría, condicionaron en buena medida su desarrollo y la interpretación de la misma. Estos conflictos fueron –como decíamos– más allá de la propia física, perneando en otras disciplinas. Por esa razón, debemos dedicar el primer apartado de este capítulo a analizar estos problemas que, dentro de la mecánica cuántica, se encontraban entre la física y la filosofía.

1.4.1. ENTRE FÍSICA Y FILOSOFÍA

Como ya mencionamos, la aparición en la escena científica del cuanto de acción Planck hizo necesaria la revisión de las convicciones y supuestos fundamentales sobre los que se basaba el pensamiento científico y la constitución de una nueva física de los sistemas atómicos. Bajo el marco clásico, los procesos y fenómenos naturales podían ser representados en un espacio regido por la geometría euclídea.

El desarrollo de la mecánica cuántica y desaparición de la continuidad –fundamento del análisis matemático y garantía de las representaciones espaciales– situó a sus protagonistas ante una serie de problemáticas científicas generales, tan generales, que podrían ser llamadas –tal y como sostiene Franco Selleri³³⁰– filosóficas, y ante las que sus protagonistas tenían que tomar una posición.

La descripción espacio-temporal de la física clásica mediante magnitudes cinemáticas y dinámicas permitía una representación visual. Dentro de este marco cualquier sistema se interpretaba dentro de un escenario continuo en el que cualquier cambio dentro del sistema se producía de manera continua, pasando por todos los estados intermedios. Por su parte, la ruptura cuántica vendría a romper con esta imagen a partir del establecimiento de la energía como una magnitud no continua. La energía se emite y se absorbe de forma discreta, lo que significa que los estados estacionarios del sistema atómico se corresponden a una serie discreta de valores de energía y, por consiguiente, la transición de un estado estacionario a otro ocurre de forma no continua, sin pasar por todos los estados intermedios posibles. Consecuencia de ello es la cuantización de otras magnitudes que describen el sistema (cinemáticas y dinámicas) que ya no pueden ser plegadas a las condiciones de espacio y tiempo clásicos.

Por su parte, la descripción del átomo dentro del marco cuántico produjo un cambio radical de la concepción del sistema atómico. El electrón debía ser considerado como onda y partícula (superposición de estados), sujeto al principio de incertidumbre (posición y momento) y el conocimiento de su comportamiento estaba condicionado enteramente por el sistema, en el que debe incluirse el mismo diseño experimental. Por todo ello, se hacía imposible –como ya

³³⁰ Selleri, Franco (1.986), p. 17.

hemos señalado– las descripciones espacio-temporales clásicas del electrón dentro de un átomo: no tienen sentido los conceptos clásicos de radio, órbita, trayectoria, etc. Entonces ¿qué lenguaje hay que utilizar para interpretar el formalismo matemático-cuántico? La interpretación de Copenhague señala que hay que mantener el lenguaje natural como instrumento básico³³¹, como algo prioritario por su conexión con la experiencia ¿Qué representación pictórica podemos hacer del átomo, de un sistema que sólo puede entenderse en el marco de la complementariedad y del principio de incertidumbre? A esta cuestión es a una de las que más espacio le vamos a dedicar. De momento adelantemos que cuando representamos pictóricamente un átomo, lo que llevamos a cabo es una representación gráfica de una parte de la descripción matemática, se sesga el formalismo.

Junto a estas preguntas por resolver debemos poner aquellos problemas señaladas por Franco Selleri³³² –cuyas implicaciones epistemológicas se terminó escuchando en todos los ámbitos del conocimiento humano– que podrían resumirse en estas tres cuestiones:

1. ¿Existen de hecho las realidades básicas de la física atómica, tales como los electrones, fotones e incluso los mismos átomos, con independencia de los seres humanos y de sus observaciones?
2. Si la respuesta a la pregunta anterior es afirmativa, ¿es posible comprender la estructura y la evolución de los objetos atómicos y sus procesos, en el sentido de formarse imágenes mentales que estén en correspondencia con la realidad?
3. ¿Deberían formularse las leyes físicas de tal manera que cualquier efecto observable tuviese al menos una causa?

El desarrollo de estas preguntas muestran claramente cómo en el fondo lo que se esconden son dos importantes cuestiones filosóficas ligadas entre sí: una cuestión *epistemológica* en torno a la posibilidad de considerar las teorías científicas como conjuntos de enunciados verdaderos o falsos, y una cuestión *ontológica* en torno al tipo de realidad que cabe

³³¹ García Chico, Ruth y González Recio, José Luis (2.007), pp. 7-8.

³³² Selleri, Franco (1.986), p. 17.

atribuir a las entidades extralingüísticas designadas por los términos de las teorías (átomos, células, radiación, etc.). Es oportuno insistir que fueron precisamente los físicos, los mismos protagonistas de la revolución cuántica, quienes se estaban cuestionando en torno a estos interrogantes, al igual que hizo –y demostrar esto es uno de los objetivos de esta tesis– en su momento el mismo Pauling en los ámbitos de la química y la biología molecular. A pesar de sus reiteradas declaraciones³³³ en torno a su poca afición por la filosofía y su único interés por la ciencia –posición que coincide con la que mantuvo quien fuera su principal tutor, Sommerfeld, durante su estancia europea en 1.926–, la constante preocupación del químico estadounidense por la finalidad de la misma, el tipo de conocimiento que obtenemos a través de ella y su interés por el método científico³³⁴, colocan al científico dentro de un contexto intelectual –que vivió intensamente durante su primer viaje a Europa ya mencionado– muy preocupado por las implicaciones filosóficas de la nueva ciencia.

Para tal fin, a lo largo de las próximas páginas vamos a examinar aquellos cuestionamientos ontológicos, epistemológicos y metodológicos que impregnaron y condicionaron el desarrollo e interpretación de la nueva mecánica cuántica y que pudieron influir en el pensamiento de Linus Pauling. El objetivo principal es hacer una descripción que nos permita posteriormente situar y entender la postura que frente a los mismos tenía el químico estadounidense así como su concepción de la ciencia. Vamos a centrarnos para ello en una serie de puntos³³⁵ fundamentales en torno a la naturaleza de la nueva física cuántica en los que se recogen las preguntas, cuestiones y problemas que han ido surgiendo hasta ahora:

- El estatus cognoscitivo de las teorías científicas: realismo versus instrumentalismo.
- El estatus ontológico de las entidades teóricas designadas por los términos teóricos de las teorías científicas.
- La interpretación física de la nueva mecánica cuántica.
- La vigencia de la noción de causa

³³³ Como se constata por ejemplo en la primera conferencia que Linus Pauling dio en 1.937 como *George Fisher Baker Nonresident Professor of Chemistry* (Itaca, Nueva York) titulada, “The Significance of Structural Chemistry”.

³³⁴ Marinacci, Barbara (1.995), p. 86.

³³⁵ Cuestiones extraídas del programa “Ciencia y Realismo”, curso impartido por la Dra. Ana Rioja, curso 1.998-9, UCM.

Un análisis atento de las respuestas dadas por los protagonistas de la nueva ciencia muestra claramente cómo éstas presentaban una gran uniformidad en torno a dos grandes bloques. Uniformidad completamente comprensible y justificable, como lo constata por ejemplo uno de los principales problemas que estaba en juego: la defensa o crítica de la realidad de los objetos atómicos. De nada sirve defender la existencia real de los objetos si sus principios no son comprensibles; sin esa comprensibilidad la realidad física se transforma en un fantasma en la penumbra, aislado para siempre de nosotros y misterioso; sin causalidad es imposible seguir, de manera completa, la evolución de un proceso físico. Como podemos constatar, lo que en el fondo se esconde es un interrogante en torno a la naturaleza de la misma física: si la ciencia fuese un reflejo *puro* de la realidad objetiva no habría lugar para el desacuerdo (a excepción de errores) entre las personas inteligentes; pero si la ciencia contiene elementos lógicamente arbitrarios –como prejuicios filosóficos–, junto a conquistas cognitivas irreversibles seguirán apareciendo fuertes discrepancias. Ante estas cuestiones surgieron las dos posturas enfrentadas anunciadas previamente: la postura de aquellos que dieron una respuesta afirmativa –los oponentes a la física cuántica (Planck, Einstein, Ehrenfest, Einstein, Schrödinger y de Broglie)– y la de aquellos que mostraron una actitud negativa ante las mismas –los creadores y defensores de la física cuántica (Sommerfeld, Born, Bohr, Pauli, Heisenberg, Jordan, Dirac).

Veamos brevemente en qué consistieron algunas de estas respuestas y algunas notas importantes del contexto filosófico de las primeras décadas del siglo XX con el fin de poder situar –como mencionábamos líneas más arriba– con mayor rigurosidad las respuestas o posición de Linus Pauling.

1.4.1.1. “Los caballeros del continuo”

Antes de adentrarnos directamente en las respuestas que este grupo dio a las cuestiones planteadas, vale la pena adelantar que el realismo defendido no les impedía reconocer, como es el caso de Albert Einstein, que la física era una creación del intelecto humano en su intento por comprender el mundo físico. En tanto que *creación* toda teoría es, al menos en parte –reconocen–, arbitraria; en cuanto *comprensión* del mundo físico, en la medida en que tenga

éxito debe contener –sostienen– elementos objetivos, que suponen una conquista irreversible que puede enriquecerse por investigaciones futuras.

El estatus cognoscitivo de las teorías científicas: realismo versus instrumentalismo

En 1.925 De Broglie había demostrado que la dualidad onda corpúsculo era algo que se daba no sólo en los fenómenos de la luz, sino también de la materia, como en los electrones. Por su parte en 1.926 Schrödinger había llevado a cabo la formulación, por medio de una ecuación de ondas, de una ley según la cual las ondas materiales se propagan bajo el impulso de un campo de fuerzas electromagnéticas. De ese modo las posiciones estacionarias de una capa atómica se podían comparar a las oscilaciones estacionarias de un sistema³³⁶: así, las energías de las posiciones estacionarias se corresponden con la frecuencia de las oscilaciones estacionarias. Los resultados obtenidos por medio de la ecuación de ondas se ajustaban a los resultados aportados por la nueva mecánica cuántica, de donde se desprendían tres consecuencias:

- Las dos mecánicas resultan ser formulaciones matemáticas de las mismas estructuras.
- Se genera una gran confianza en la exactitud del nuevo formalismo matemático.
- La ecuación de ondas facilitaba cálculos extraordinariamente complicados en la mecánica cuántica

Detrás de estas formulaciones –sobre todo de las dos primeras– se encuentra un claro enfoque realista de la ciencia, al entenderse a ésta como la búsqueda de las regularidades matemáticas realmente presentes en la naturaleza. Este posicionamiento se encuentra estrechamente vinculado con la armonía matemática presente en la naturaleza defendida por el pitagorismo; las relaciones invariantes presentes en la naturaleza que el científico ha de aprender y conocer según Platón; el lenguaje matemático y los caracteres triangulares y circulares del universo galileano; así como con las de regularidades matemáticas que

³³⁶ Uno de los ejemplos más sencillos para ilustrarlo se encontraba en la imagen que ofrece una cuerda vibrante.

encontramos en las tres leyes del movimiento planetario de Kepler³³⁷. A través de estas regularidades matemáticas la física, como creación del intelecto humano en su intento por comprender el mundo material, puede facilitarnos una descripción real de cuanto hay.

[La ciencia no es una] mera colección de leyes, un catálogo de hechos sin relación mutua. Es una creación de la mente humana, con sus ideas y conceptos libremente inventados. Las teorías físicas tratan de dar una imagen de la realidad y de establecer una conexión con el amplio mundo de las impresiones sensoriales. La única justificación de nuestras estructuras mentales es si esa conexión se logra y de qué modo se hace³³⁸.

Cierto es –reconocen los realistas– que la ciencia es una creación de la mente humana, pero el físico teórico considera los productos de su imaginación –y querría que los demás también lo hicieran– como realidades dadas y no como creaciones del pensamiento³³⁹. A pesar de ello –admite Einstein– ese mundo que existe con independencia de los seres humanos nos es accesible a través de la inspección y el pensamiento³⁴⁰. De forma muy parecida Planck defendía la existencia de un mundo físico objetivo y de nuestra capacidad para conocerlo:

El mundo de las sensaciones no es el único mundo que existe, sino que... hay, además, otro. Ese otro mundo no nos es directamente accesible, pero su existencia está indicada, de manera repetida y con una claridad convincente, por nuestra vida práctica y por los trabajos de la ciencia... las leyes del razonamiento humano coinciden con las leyes que gobiernan las secuencias de las impresiones que recibimos del mundo que nos rodea... por consiguiente, el razonamiento puro puede permitir que el hombre se forme una idea del mecanismo de este último...el hecho evidente de que seamos capaces, al menos hasta cierto grado, de someter a nuestro proceso de pensamiento acontecimientos naturales futuros y acomodarlos a nuestra voluntad, sería un misterio totalmente incomprensible si no se nos permite, al menos, conjeturar una cierta armonía entre el mundo externo y el intelecto humano³⁴¹.

³³⁷ Debido al desarrollo específico y profundo que merece este punto –sobre todo por ser clave para entender la interpretación que tiene Pauling de la ciencia–, posponemos su desarrollo más exhaustivo a un capítulo posterior.

³³⁸ Selleri, Franco (1.986), p. 31.

³³⁹ *O. c.*, p. 30.

³⁴⁰ Einstein, Albert (1.981), p. 242.

³⁴¹ Selleri, Franco (1.986), pps. 20-21.

Postura ésta muy parecida a la de Schrödinger quien afirmara:

Un dogma ampliamente aceptado afirma que no pueda ver un cuadro o objetivo de la realidad en ninguno de los sentidos en que antes se creía. Tan sólo los optimistas que hay entre nosotros (entre los cuales me cuento yo mismo) consideran esto como una extravagancia filosófica, como una medida desesperada tomada ante una gran crisis. Esperamos que lo vacilante de los conceptos y las opiniones sólo revele un violento proceso de transformación, que finalmente nos conducirá a algo mejor que el estéril formulismo que ha paralizado nuestra situación actual³⁴².

La clave está, según Einstein, en reconocer que *todo conocimiento de la realidad comienza en la experiencia y desemboca en ella*³⁴³. Entonces cabe preguntarse ¿Cuál es el papel de la razón? ¿Cuál es la relación que se da entre los dos componentes inseparables de nuestro conocimiento –lo empírico y lo racional–, entre el contenido de las teorías y el conjunto de los hechos empíricos? A finales del siglo XIX la mayoría de los científicos sostenían, inspirándose en Newton, que los conceptos y las leyes básicas de sus sistemas podían ser derivados de la experiencia (“*hypotheses non fingo*”). Si bien Newton no se sintió completamente cómodo con los conceptos de espacio absoluto, reposo absoluto o fuerzas que operan a distancia, ni él ni los físicos de los siglos XVIII y XIX pudieron reconocer el carácter ficticio de los fundamentos del sistema newtoniano: en la experiencia no podemos encontrar nada que se corresponda con estos conceptos que le dieron un tremendo éxito práctico a la doctrina.

No podemos dudar –defiende Einstein– que el carácter ficticio de los principios fundamentales de toda teoría es evidente. Todo intento de deducción lógica de los conceptos básicos y postulados de la mecánica a partir de los experimentos elementales está condenado al fracaso³⁴⁴.

En términos del científico alemán, todo sistema completo de la física teórica está compuesto por conceptos, leyes fundamentales aplicables a esos conceptos y conclusiones alcanzables por deducción lógica. Estas conclusiones –cuyo alcance a través de la deducción

³⁴² Bohr, Niels (1.950), p. 139.

³⁴³ Einstein, Albert (1.981), p. 243.

³⁴⁴ *O. c.*, p. 245.

suele ocupar casi toda la obra del físico teórico– deben corresponder con nuestra experiencia individual.

¿Podemos esperar que alguna vez hallemos el camino correcto? Y, lo que es más, ¿este camino correcto existe más allá de nuestras ilusiones? ¿Podemos confiar en que la experiencia sea una guía segura cuando existen teorías (tal como la mecánica clásica) que en gran medida hacen justicia a la experiencia pero sin comprender los hechos en toda su profundidad?... Sí y somos capaces de hallarlo³⁴⁵.

Para Einstein –como vimos en su momento– la naturaleza es la realización de las ideas matemáticas más simples que se puedan concebir, lo que significa que por medio de construcciones puramente matemáticas podemos descubrir los conceptos y leyes, los elementos que proporcionan la clave para la comprensión de los fenómenos naturales. La experiencia puede sugerir los conceptos matemáticos, pero éstos no pueden ser deducidos de aquella. El principio creativo reside en la matemática, el criterio último de la utilidad física de esta construcción matemática está en la experiencia: *el pensamiento, tal y como señalaban los antiguos, puede captar la realidad.*

Es en el limitado número de campos y de ecuaciones simples que puedan existir matemáticamente donde descansa la esperanza del teórico de captar lo real en toda su profundidad³⁴⁶.

Esto es de suma importancia ya que permite seguir soñando –como sostiene Einstein– con una concepción realista de la física:

Aún creo que es posible un modelo de la realidad, o sea una teoría que represente las cosas en sí mismas y no tan sólo la probabilidad de su aparición... no consideraré resuelto el enigma cuántico hasta que una estructura atómica haya sido representada de esta manera³⁴⁷.

³⁴⁵ O. c., p. 245.

³⁴⁶ O. c., p. 246.

³⁴⁷ O. c., p. 247.

Pero para que sea posible la construcción de un modelo realista de la ciencia, deben concederse a las entidades teóricas una existencia real. Veamos por ello cómo se afronta este problema desde la concepción realista asociada a una noción de objetividad en términos epistemológicos, a la idea de un mundo que evoluciona en el espacio y en el tiempo puede ser conocido tal cual es.

El estatus ontológico de las entidades teóricas básicas de la física atómica como los electrones, los fotones y los átomos con independencia de los seres humanos y de sus observaciones

Mientras se abrían paso en el siglo XVIII las nociones idealistas en el mundo filosófico, la concepción epistemológica abrigaba dentro de la filosofía natural una concepción realista y objetiva: los sistemas –se vendría a decir– poseen propiedades observables que se reflejan en las operaciones de medición.

Desde Galileo conocer la naturaleza supone alcanzar un conocimiento reductivo de la naturaleza que se adecua a un determinado marco del saber. Un filósofo natural, un físico lo que pretende conocer es un *sistema* (campo eléctrico, punto causa, átomos), el *estado* de un sistema. Pero, ¿cómo se puede llegar a determinar el estado de un sistema determinado? Mediante el conocimiento de ciertas variables observables, a través de un número mínimo de propiedades observables cuyo conocimiento determina el conocimiento del sistema. Se reconoce así una relación directa entre el sistema, el estado del mismo y sus propiedades observables. Mas estas propiedades no han de ser solo observables, sino también medibles, han de facilitar una información selectiva, reductiva a la que se denomina *magnitudes*. Lo que conocemos, por consiguiente, es el sistema a partir de sus magnitudes, de sus propiedades observables. Por consiguiente se trata de buscar el número mínimo de magnitudes que nos permitan determinar el estado del sistema. Las magnitudes se convierten de esa forma en la única información relevante.

Así, para la mecánica clásica poder conocer un determinado sistema mecánico requiere tan sólo la observación, la combinación de ciertos pares de magnitudes; unas nos dan la

localización espacio-temporal, otras la evaluación del sistema. Para ello es preciso tener en cuenta principios de conservación de los sistemas, considerar los sistemas cerrados.

Tal y como vimos en el contexto científico, $p \cdot q$ no era lo mismo que $q \cdot p$. Eso tenía importantes consecuencias ya que de ahí se deriva el principio de incertidumbre. Esta asimetría suponía una relación forzada por el principio de incertidumbre. Aquí energía-tiempo, cantidad de movimiento-posición vendrían a ser pares cuya relación estaría forzada por este principio.

- Cantidad de movimiento-Posición
- Energía-tiempo

Cabe entonces preguntarse, ¿qué relación guardan las propiedades –las magnitudes– con el sistema al que pertenecen? Sustantiva. Los sistemas *tienen* propiedades y lo hacen al margen de los procesos de medida: toda propiedad es de algo, y ese algo tiene esas propiedades. Es en este planteamiento realista, clásico de la expresión de sustancia y accidente, en donde los sistemas, los objetos –los átomos, electrones, etc.– han de concebirse como el soporte de las propiedades (accidentes):

1. Los sistemas poseen esas propiedades en todo tiempo.
2. Las propiedades lo son de un sistema individual (otra cosa es que luego hagamos promedios)
3. Si estas propiedades son las que necesitamos para determinar el estado de un sistema, entonces estas propiedades son compatibles: al mismo tiempo un sistema es soporte de distintas propiedades simultáneamente.
4. En todo tiempo las propiedades de un sistema poseen un valor definido.

Si rige el principio de continuidad –como es el caso dentro de este modelo realista–, a pesar de que la operación de medida supone la interacción con el sistema, ello no impide llegar a decir que la propiedad que se observa es una propiedad del sistema, de los objetos implicados.

Por consiguiente, los objetos cuánticos, como los electrones, los átomos, tienen una existencia real. Hay que reconocer que el conocimiento que de ellos se tiene se corresponde a una aproximación ideal, una aproximación imperfecta pero cuya mella se encuentra en la limitación de nuestro conocimiento, ya que los objetos físicos se dejan estudiar exhaustivamente.

La figura de Schrödinger se presenta como una de las más importantes en la defensa de esta concepción realista de las entidades teóricas. Ejemplo de ello lo encontramos en aquellos escritos llenos de sentencias apreciativas de la realidad de sus ondas atómicas:

Muchos científicos están obsesionados, aún hoy, por la idea de que la química es el lugar natural y único de los “átomos” y “moléculas”, argumentando que fue a partir del muy hipotético, en alguna medida nimio, papel que ahí jugaban (la escuela de Ostwald las rechazó de plano) cómo fueron elaborados por vez primera a la categoría de realidad física por Maxwell y Boltzmann en la teoría de gases.³⁴⁸

Por su parte, el realismo de De Broglie queda constatado desde sus primeros trabajos en los que tácitamente adoptó

[L]a posición de que era esencial mantener el concepto de una realidad física independiente del observador, al igual que en la física clásica, y traté de obtener una representación clara de los procesos físicos en el marco del espacio y del tiempo³⁴⁹.

Y al referirse a sus ondas en los siguientes términos:

Enfrentado a los fenómenos de interferencia y difracción, un físico sin ideas teóricas preconcebidas se ve compelido que se trata de la propagación de ondas reales, y no una simple representación de una probabilidad que sólo existe en su mente.³⁵⁰

³⁴⁸ Cita extraída de Selleri, Franco (1.986), p. 34.

³⁴⁹ *O. c.*, p. 41.

³⁵⁰ Cita extraída de Selleri, Franco (1.986), p. 41.

De ese modo se hace posible recuperar no solo la concepción de una realidad física independiente del observador, sino también una interpretación física que hace permite las representaciones espacio-temporales y pictóricas de los sistemas cuánticos.

La interpretación física de la nueva mecánica cuántica (posibilidad de seguir haciendo representaciones pictóricas, espacio-temporales)

Una de las principales dificultades en torno al problema que ahora nos ocupa –la interpretación física de la nueva mecánica cuántica– es el de la trayectoria de las partículas, como por ejemplo la de un electrón a la hora de pasar de una órbita estacionaria a otra dentro de un átomo. Es razonable pensar que habrá un momento en este paso en el que el electrón se encuentre en un punto intermedio entre las dos órbitas. Esto que es razonable en la física clásica no lo es en la nueva mecánica cuántica. Como vimos en el capítulo dedicado al contexto científico, Heisenberg resolvió el problema en 1.925 a partir del desarrollo de la mecánica cuántica matricial. A partir del conocimiento del estado inicial y final del sistema, concibió la idea de agrupar la información en forma de cuadros de doble entrada, es decir, de matrices. De ese modo era posible predecir los resultados observables de la interacción entre materia y radiación. Sin embargo el nuevo formalismo matemático propuesto carecía completamente de contenido intuitivo, físico. Por esa razón el físico vienés ocupó gran parte del siguiente año cuestionándose si había que otorgarle un carácter intuitivo, es decir, llevar a cabo descripciones espacio-temporales o había que quedarse con el puro formalismo matemático. El carácter puntual por el que apostó Heisenberg le llevó –como veremos más detenidamente en próximas páginas– a aceptar igualmente la discontinuidad y a renunciar al marco espacio temporal. Sin embargo, tras la lectura de la tesis doctoral de De Broglie, Schrödinger propuso en 1.926 –como ya vimos en su momento– un nuevo formalismo, distinto al de Heisenberg. La consideración de Schrödinger de las ondas atómicas como entidades realmente existentes permitieron este nuevo formalismo matemático –equivalente al de Heisenberg– en el que el uso de la noción de paquetes de ondas con una velocidad de dispersión muy alta y de un espacio totalmente

abstracto, hacían posible la recuperación de las descripciones espacio-temporales³⁵¹ y la eliminación de las discontinuidades³⁵². La discusión estaba, como podemos constatar, en la interpretación de los formalismos, en el lenguaje: ¿Había que quedarse con el lenguaje estrictamente matemático, acuñar un nuevo lenguaje físico o quedarse con el lenguaje de la física clásica?

Para los realistas la estructura, los conceptos fundamentales de una teoría física no nos puede obligar a renunciar a la representación adecuada de todo contenido empírico.

La estructura del sistema es resultado del trabajo de la razón; el contenido empírico y las mutuas relaciones deben hallar su representación en las conclusiones de la teoría. Es en la posibilidad de tal representación donde el sistema encuentra valor y justificación, y de forma especial los conceptos y principios fundamentales que lo sustentan³⁵³.

Sin embargo –debía reconocer Einstein–, vemos cómo en la física cuántica crece la distancia entre los conceptos fundamentales y sus leyes con respecto a las conclusiones que han de relacionarse con nuestra experiencia.

De Broglie –quien mantuvo siempre una postura intelectual muy parecida a la Einstein– señaló por su parte que una de las razones más importantes que nos impiden una recuperación satisfactoria del realismo físico está en la alteración que sufre todo sistema microfísico al intentar ser observado. Alteración ésta que es, como consecuencia de la existencia

³⁵¹ Sin embargo, esta recuperación se lleva a costa de la pérdida del significado de la variable de la ecuación. La ecuación de Schrödinger permite efectivamente recuperar una descripción dentro de un marco espacio-temporal, pero no define qué magnitud se utiliza. A saber: $\hat{H}\psi = E\psi$ donde \hat{H} (Hamiltoniano) es un operador, es decir, opera sobre los estados de Ψ , incluyendo momento y posición; E es la energía relacionada con el tiempo, es una magnitud (Ec. de Schrödinger es independiente del tiempo); Ψ es la función de onda. Para la resolución de la ecuación es necesario encontrar aquellos estados $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ que, al verse operados por \hat{H} , sólo cambian de “tamaño”. Dicha noción –la de “tamaño”–, así como el mundo en donde viven estos estados, viene dado por el formalismo de Heisenberg. Gracias a la ecuación de Schrödinger la evolución de un sistema –compuesto por uno o varios estados en determinado instante– puede representarse espacio-temporalmente. En la actualidad uno no puede utilizar la información que Ψ arroja, sino la de $|\psi|^2$, debido a la naturaleza de las soluciones.

³⁵² Sólo correcto en cuanto que estamos hablando de paquetes de onda, no si estudiamos otro sistema en donde no se nos asegura que nos encontremos con sistemas continuos.

³⁵³ Einstein, Albert (1.981), p. 244.

del *quántum de acción*, inevitable³⁵⁴. Pero el quantum es de crucial importancia no sólo por ser su valor numérico el responsable de fijar el límite inferior de la perturbación, sino principalmente por expresar un nuevo tipo de unión, de relación entre los aspectos geométrico y dinámico de las cosas. Unión ésta que imposibilita, de un modo general, un análisis, una descripción detallada de los fenómenos naturales por medio de figuras y movimientos con arreglo al ideal de Descartes; tal descripción, posible a nivel macrofísico, “viene a ser del todo impracticable en microfísica”³⁵⁵. Esto tiene consecuencias de enorme trascendencia ya que, tal y como sostiene de Broglie, “Somos seres humanos y todas nuestras percepciones se nos presentan como ordenadas en el espacio y en el tiempo; casi no podemos imaginar una descripción de la evolución de las cosas que no apele a estas nociones primordiales”³⁵⁶.

Ahora bien, cuando intentamos utilizarlas dichas nociones en nuestra descripción de los fenómenos microfísicos chocamos con serias dificultades. Para poder obtener una descripción completa de los fenómenos de la microfísica de Broglie defendió durante una temporada el concepto de complementariedad de Bohr, imágenes continuas que, en principio contradictorias entre sí, permiten obtener las distintas fases de la realidad³⁵⁷. Sin embargo se trató, como decíamos, de una apuesta temporal:

La idea de complementariedad ha tenido mucho éxito y se han hecho muchos intentos, de las formas más peligrosas, para extrapolar las fuerzas del marco de la física, por ejemplo, la biología, sociología, psicología, etc. Durante mucho tiempo acepté la idea de la complementariedad dentro del marco de la física cuántica, comprendiendo al mismo tiempo que era inadecuada. En los últimos años he empezado a mirar al concepto de complementariedad con una desconfianza creciente³⁵⁸.

¿Qué tipo de conocimiento entonces podemos obtener? Nada mejor que el mismo de Broglie para contestar a esta pregunta:

Que nuestras teorías científicas estén ligadas a las reglas de funcionamiento de nuestro espíritu, a la estructura de nuestra razón, a los conceptos de que disponemos, es sin duda un punto en el cual ningún científico dotado de un espíritu

³⁵⁴ De Broglie, L. (1.951), p. 124

³⁵⁵ *Idem.*

³⁵⁶ *O. c.*, p. 126

³⁵⁷ Por ejemplo las imágenes de onda y corpúsculo para dar cuenta de las propiedades de la luz y del electrón

³⁵⁸ Cita extraída de Selleri, Franco (1.986), p. 42.

algún tanto crítico nunca pudo naturalmente abstraerse del todo: la ciencia de los hombres es humana y jamás podrá dejar de serlo; sobre este punto ninguna incertidumbre es posible. Pero la cuestión de saber si nuestros medios de observación y el hecho de utilizar necesariamente fenómenos susceptibles de ser directamente percibidos por nuestros sentidos, nos permiten trazar un cuadro verdaderamente objetivo, exacto y unívoco de lo que sucede en el mundo material, es otra cuestión menos fácil de zanjar. El conjunto de las concepciones que utilizamos en nuestras teorías y de los razonamientos que desarrollamos tiene una forma esencialmente humana, pero el científico, que siempre admite más o menos implícitamente la realidad del mundo exterior, puede muy bien pensar, aun cuando tenga bastante espíritu filosófico para recordar siempre que toda ciencia está a nuestra medida, que pueda existir una correspondencia exacta y unívoca entre el mundo exterior y la imagen que llegamos a representarnos. Admitirá entonces que las observaciones o las experiencias efectuadas con suficiente habilidad y precisión llegarán siempre a hacernos conocer con exactitud todas las magnitudes que son necesarias para una descripción completa, si no del mundo material en su integridad, por lo menos de algunos fenómenos que en él se desarrollan. Sin duda no puede olvidar que siempre existe en la observación y en la experiencia causas de error que es imposible eliminar completamente y de las cuales todo físico concienzudo debe apreciar siempre su importancia. Pero si tales errores son inevitables, un experimentador hábil sabrá disminuirlos en amplia medida, siempre susceptible de ser acrecida; sabrá también evaluar los errores que persisten y asignarle límites estrictos. Así, puede esperarse, por lo menos en principio, ver tender hacia cero a las incertidumbres de que están afectados nuestros conocimientos de los parámetros que deben servirnos finalmente para describir el estado del mundo material. Puede entonces esperarse, y éste es uno de los postulados de la ciencia clásica, poder llegar a expresar, evidentemente en lenguaje humano, pero, sin embargo, en forma perfectamente precisa, la evolución en el curso del tiempo de todo cuanto sucede en el espacio que nos rodea.³⁵⁹

La riqueza de este texto es extraordinaria, ya que presenta de forma muy clara la posición que mantuvieron los realistas en torno a las tres cuestiones vistas hasta ahora: la apuesta por el realismo, el reconocimiento de la correspondencia exacta y unívoca entre el mundo exterior y la imagen que a través de la ciencia nos representamos y, finalmente, la capacidad para hacer descripciones pictóricas, tal y como señalaban todas las teorías clásicas: “la posibilidad de localizar de manera exacta y unívoca en el espacio y en el tiempo todas las transformaciones que se operan en el mundo físico”. Desde esta perspectiva, todas nuestras percepciones, nuestras relaciones con el mundo exterior se dan en el espacio y el tiempo. Es este cuadro el que nos permite ordenar nuestras sensaciones y seguir la evolución de los fenómenos:

³⁵⁹ De Broglie, L. (1.951), pps. 128-9.

Los científicos han dado una precisión completa a las nociones de espacio y tiempo refiriéndolas a posiciones en el espacio mediante coordenadas referidas a sólidos geométricos que sirven de sistemas de referencia y las posiciones en el tiempo con ayuda de una variable t , el tiempo de la física matemática clásica, definido en relación con el movimiento de los astros por los ciclos de los sistemas periódicos llamados relojes.³⁶⁰

A partir de estas coordenadas de espacio y de tiempo la física matemática podía representar de una manera precisa la sucesión de los fenómenos que se dan alrededor nuestro y que constatan nuestros sentidos. De ese modo se hacía posible pensar que toda la evolución del mundo físico podía –o debía– representarse por medio de magnitudes localizadas en el espacio y variando en el curso del tiempo. Era posible así describir el estado del mundo físico en cada momento y llevar a cabo una descripción íntegra de la naturaleza por medio de figuras y movimientos siguiendo el programa de Descartes. Por medio de ecuaciones diferenciales sería posible seguir la localización y evolución en el tiempo de todas las magnitudes que definen el estado del mundo físico.

La vigencia de la noción de causa

Ligada a la posibilidad de descripciones espacio-temporales está la vigencia de la causalidad y el determinismo. Si bien no todos los científicos realistas concebían exactamente del mismo modo en qué debían consistir las descripciones del mundo por medio de figuras y movimientos, sí coincidieron en gran medida en la aceptación de una representación de la causalidad que la física cuántica rebatirá ferozmente. Pero antes de ver en qué consistió esa crítica, veamos algunos intentos, ciertamente ambiguos en muchos casos, de algunos de estos físicos realistas.

Tal vez sea el caso de Schrödinger el que más claramente muestre una gran ambigüedad en torno al problema del determinismo. Si bien afirmó que “difícilmente cabe la posibilidad de decidir de este asunto por medio del experimento; y por los métodos del

³⁶⁰ O. c., p. 130.

razonamiento puro es evidente que podemos derivar, según prefiramos, el azar de las leyes o las leyes del azar”³⁶¹, las ondas que introdujo en sus artículos científicos obedecían completamente las leyes causales³⁶². Otra prueba de la ambigüedad de Schrödinger ante el dilema del determinismo la encontramos al constatar cómo entre 1.928 y 1.933 aceptó la mecánica cuántica tal y como en ese momento era formulada. Sin embargo, antes y después de este periodo, la oposición de Schrödinger a toda interpretación que dejara fuera una explicación causal, confirma una posición favorable a la causalidad:

A de Broglie, al igual que a mí, no le agradaba la interpretación probabilística de la mecánica ondulatoria, al menos eso creo. Pero pronto y por un dilatado periodo de tiempo se vio obligado a abandonar esa oposición y aceptarla como una solución provisional³⁶³.

Efectivamente de Broglie, quien mantuvo una perspectiva muy similar a la de Einstein, defendió también en este aspecto una posición filosófica realista; defensa de la causalidad, creencia en un mundo real susceptible de ser entendido por el hombre –que existe objetivamente– y un rechazo a la complementariedad: “la crítica general a la interpretación usual de la mecánica ondulatoria es que constituye una prolija negativa a proporcionar una explicación real y esto, me parece a mí, es completamente contradictorio a los principios del bien fundado método científico”³⁶⁴. Pero como mencionaba Schrödinger, de Broglie se vio obligado durante un periodo a cuestionar si después de los descubrimientos de la mecánica cuántica era aún posible esperar que los fenómenos físicos pudieran seguir siendo explicados bajo un esquema de determinismo muy exactamente definido:

Lo cierto es que los fenómenos físicos, en la medida en que eran exactamente representados por las ecuaciones diferenciales de la física clásica, se encontraban sometidos a un determinismo muy exactamente definido.

De este modo, la física clásica se representaba todo el universo físico como proyectado con precisión absoluta en el cuadro del espacio y del tiempo, y evolucionando según leyes de inexorable necesidad...la existencia de errores experimentales, no veía en ello más que un resultado de la imprecisión de nuestros sentidos y

³⁶¹ Selleri, Franco (1.986), p. 34.

³⁶² Ahora bien, sus ondas no se pueden medir directamente. En la actualidad se interpreta $|\psi|^2$ probabilísticamente.

³⁶³ *O. c.*, p.35.

³⁶⁴ *O. c.*, p. 41.

de la imperfección de nuestras técnicas, y admitía la posibilidad de reducirlos indefinidamente, al menos en principio, por un adecuado perfeccionamiento de nuestros métodos...¿Puede decirse hoy otro tanto? Después de los sorprendentes descubrimientos de la microfísica, esto es muy dudoso.³⁶⁵

Sin embargo, antes y después de este periodo de cierta crisis, de Broglie condenó enérgicamente todo intento de abandonar la causalidad:

La idea de complementariedad ha tenido mucho éxito y se han hecho muchos intentos, de las formas más peligrosas, para extrapolar las fuerzas del marco de la física, por ejemplo, la biología, sociología, psicología, etc. Durante mucho tiempo acepté la idea de la complementariedad dentro del marco de la física cuántica, comprendiendo al mismo tiempo que era inadecuada. En los últimos años he empezado a mirar al concepto de complementariedad con una desconfianza creciente.³⁶⁶

Del mismo, Planck condenó todo intento de deslegitimación de la causalidad, como el llevado a cabo por el principio de indeterminación que “había inducido a algunos indeterministas a ver la ley de la causalidad como decisivamente refutada en física. Sin embargo, un examen más minucioso demuestra que esta conclusión es, cuando menos, precipitada”³⁶⁷.

Esta defensa de la causalidad fue tachada de ingenua por muchos de los padres de la nueva mecánica cuántica. Pasemos por ello a ver la posición de los físicos cuánticos ante las cuatro cuestiones planteadas comenzando por ésta última.

³⁶⁵ De Broglie, L. (1.951), p. 132.

³⁶⁶ Selleri, Franco (1.986), p. 42.

³⁶⁷ Selleri, Franco (1.986), p. 21.

1.4.1.2. La “Interpretación de Copenhague”

La vigencia de la noción de causa

La ley de la causalidad fue definida por Kant no como una aserción que pudiera ser comprobada o negada empíricamente, sino como la condición de posibilidad de toda experiencia, como categoría –junto al espacio y el tiempo– *a priori* del entendimiento puro. Para el pensamiento kantiano las impresiones sensoriales darían lugar, sin estas categorías, a un simple juego subjetivo de sensaciones sin correspondencia con un objeto: *Si bien nada de nuestro conocimiento trasciende la experiencia, una parte de él es a priori y no se infiere deductivamente a partir de la experiencia*³⁶⁸. Por ello, el punto de partida de nuestro conocimiento es el mundo externo que nos suministra el material con el que se construye, las sensaciones. Pero este material ha de ordenarse de alguna forma, y eso es lo que hace nuestro aparato mental; ordena las sensaciones en el espacio y en el tiempo, y vincula las percepciones bajo un esquema causa y efecto. La causalidad es por consiguiente un instrumento de nuestro pensamiento con el cual transformamos la materia prima de nuestras impresiones sensoriales en experiencias.

Entonces, si las ciencias naturales tratan de experiencias objetivas, toda teoría de la naturaleza debe presuponer la ley de la causalidad: solo puede haber ciencia en cuanto hay ley de causalidad. La cuestión entonces es ¿Cómo puede la mecánica cuántica pretender borrar la ley de la causalidad y pretender mantenerse como ciencia?

El primer ataque a las clásicas concepciones sobre el espacio y el tiempo –sobre las que se apoyaban el determinismo y la causalidad– fue fruto del desarrollo de las ideas relativistas. Sin embargo, a pesar de lo radical que pudieran parecer las nuevas ideas introducidas por la teoría de la relatividad, no se destruyó por ello el cuadro espacio-temporal admitido por la física clásica. Al contrario, ya no era preciso considerar al espacio y al tiempo aisladamente, ni darle un carácter universal, sino fundir ambos –el espacio y el tiempo– en un continuo de cuatro dimensiones (espacio-tiempo de Einstein o Universo de Minkowski) donde se localizase todos los «acontecimientos» cuyo conjunto constituyera la historia del

³⁶⁸ Einstein, A. (1.981), p. 243.

mundo físico. Por ello, como de Broglie sostiene, «lejos de trastornar a la física clásica, la teoría de la relatividad constituiría más bien su coronamiento»³⁶⁹.

Mucho más importante fue la introducción en física del *quantum de acción*. La existencia del quantum de acción expresaba un nuevo vínculo entre el cuadro espacio-temporal y los fenómenos dinámicos que dentro del mismo se desarrollan; un cuadro esencialmente estático:

Un cuerpo, una entidad física que tiene una localización exacta en el espacio y el tiempo está, en realidad, también privada de toda propiedad evolutiva; al contrario, un cuerpo que evoluciona, que está dotado de propiedades dinámicas, no puede verdaderamente estar ligado a ningún punto del espacio y del tiempo. Éstas son observaciones filosóficas que se remontan hasta Zenón de Elea y sus discípulos. Las relaciones de incertidumbre de Heisenberg parecen emparentadas con esas observaciones; en efecto, ellas nos enseñan que es imposible atribuir a un cuerpo simultáneamente un movimiento bien definido y un lugar bien determinado en el espacio y en el tiempo. Cuanto más nos permite una experiencia o una observación el precisar la localización espacio-temporal de un sistema, más nos deja en duda respecto a su estado exacto de movimiento, e inversamente. En la exacta expresión de las incertidumbres de Heisenberg, la constante de Planck h interviene naturalmente de un modo esencial³⁷⁰.

La posición negativa de Bohr con respecto al problema de la causalidad queda patente en unos términos muy parecidos cuando afirma:

Verdaderamente, es la interacción finita entre el objeto y los instrumentos de medida, consecuencia inmediata de la existencia del cuanto de acción lo que impone (a causa de la imposibilidad de controlar la reacción del objeto sobre los aparatos) la necesidad de renunciar de forma definitiva al ideal clásico de causalidad y de revisar a fondo nuestra actitud frente al problema de la realidad física.³⁷¹

No debemos olvidar asimismo cómo muchas de las experiencias que apoyaban la interpretación estadística de la teoría cuántica, habían puesto en crisis la ley de la causalidad. La interpretación probabilística de las ondas de Schrödinger por parte de Bohr dejó las puertas

³⁶⁹ De Broglie, L. (1.951), p. 134.

³⁷⁰ *O. c.*, pps. 135-6.

³⁷¹ Cita de Niels Bohr recogida en Selleri, F. (1.986), p. 38.

abiertas a la indeterminación del comportamiento de un sistema individual, a toda una nueva forma de descripciones acausales. Tomemos a modo de ejemplo el mismo que propone Heisenberg:

Supongamos que tenemos que trabajar con un átomo aislado de la sustancia de radio B. Sin duda, es más fácil experimentar a la vez con muchos átomos de esta clase, es decir, con una pequeña cantidad de radio B, que con un solo átomo; pero en principio no hay obstáculo alguno para estudiar también el comportamiento de un único átomo de esta clase. Lo que sabemos es que, tarde o temprano, el átomo de radio B emitirá un electrón en determinada dirección, y con ello se transformará en un átomo de radio C. Por término medio, esto tendrá lugar después de un segundo o de varios días. Al decir “término medio” queremos significar en este caso que, si trabajamos con muchos átomos de radio B, después de media hora se habrán desintegrado, aproximadamente, la mitad de los átomos. Sin embargo, no podemos indicar, y aquí precisamente se manifiesta cierto fallo de la ley de la causalidad, en el caso de un solo átomo individual de radio B, causa alguna por virtud de la cual se transforme en este preciso momento y no más temprano o más tarde, y emita el electrón precisamente en esta dirección y no en cualquier otra. Por muchas razones, estamos convencidos de que tales causas no existen.³⁷²

Ante tal ejemplo objetan quienes defienden la causalidad que es un error deducir la no existencia de una causa por el hecho de no haberla encontrado: se hace preciso continuar – reclaman– la investigación hasta encontrarla. Sin embargo, sostiene P. Jordan:

Quizá cabría la posibilidad de completar esta teoría (la teoría cuántica), de tal manera que la teoría completa fuese, de nuevo, determinista. Sin embargo, esto es matemáticamente imposible. Von Neumann ha demostrado, con un análisis exacto, que la teoría actual sería en parte errónea si fuese completa en ese sentido.³⁷³

Mientras que Heisenberg³⁷⁴ subraya como el conocimiento completo del átomo constata la no existencia de los factores determinantes buscados. Además, sostiene el físico alemán nacido en Würtzburg:

³⁷² Heisenberg, H. (1.930-32), p. 148.

³⁷³ Cita de Pascual Jordan recogida en Selleri, F. (1.986), p. 46.

³⁷⁴ Heisenberg, H. (1.930-32), p. 149.

La cadena de efecto y causa podría ser cuantitativamente verificada sólo si se considerase al universo completo como un sistema individual, pero en ese caso la física se desvanece y únicamente nos queda un esquema matemático. La participación del mundo en observador y sistema observado impide una formulación clara de la ley del efecto y la causa”.³⁷⁵

El error –recuerda Carl Friedrich³⁷⁶– está en seguir intentando vincular, ordenar las percepciones de la física cuántica según el modelo de la “cosa en sí”, bajo la concepción de un mundo constituido a partir de cosas que están en el espacio y se transforman en el tiempo según reglas determinadas. Pero tal y como señaló la filósofa Grete Herman³⁷⁷, un error muy común es la confusión en el uso de los conceptos de “cosa en sí” –desde un punto de vista kantiano– con el de “objeto físico”, haciéndose oportuno distinguir entre ambos. La cosa en sí, en términos kantianos, no aparece, no se representa en el fenómeno ni siquiera de modo indirecto, sino que designa aquello acerca de lo cual no se sabe absolutamente nada. Pero nuestro saber depende de la experiencia y experimentar significa conocer las cosas tal y como se nos aparece. Por ello, en vez de hablar de “cosas en sí”, debemos hablar de objetos (físicos), entendiendo por tal partes del mundo de los fenómenos, como las sillas, las estrellas o los átomos. El mundo fenoménico es una totalidad coherente resultado de lo visto y deducido a partir de ello.

Pero estas percepciones –sostiene Carl Friedrich– se dan dentro de una determinada situación a la que debemos referirlas. El problema de Kant es, por consiguiente, el de haber absolutizado las formas de la intuición espacio y tiempo, así como la categoría de causalidad, como *a priori* con respecto a toda experiencia de fenómenos físicos³⁷⁸: así, todos los conceptos que permiten describir las experiencias tienen un campo limitado de aplicación. Siguiendo con esta idea, Heisenberg asegura que tan solo obtenemos leyes empíricas para determinadas “situaciones de observación”. Para Dirac se hace urgente revisar nuestras ideas acerca de la causalidad: “La relación causal se aplica sólo a sistemas que no hayan sido alterados... Sólo tienen un significado real las preguntas relativas a los resultados de los experimentos y son sólo

³⁷⁵ Cita de Werner Heisenberg recogida en Selleri, F. (1.986), p. 44.

³⁷⁶ En Heisenberg, H. (1.930-32), p. 149-50.

³⁷⁷ En Heisenberg, H. (1.930-32), p. 150-51.

³⁷⁸ Como vimos anteriormente a través de Bohr no podemos imaginarnos a través de los conceptos intuitivos con los que describimos los sucesos de la vida diaria y los experimentos de la física clásica, los fenómenos cuánticos.

esas preguntas las que debe contestar la física teórica”³⁷⁹. Para Dirac eso supone que la causalidad no es nunca aplicable a situaciones físicas significativas.

Fruto de todo ello las matemáticas se van a convertir en un instrumento que nos ayuda más a describir lo posible que lo fáctico, a la realización de algunos pronósticos –constatamos nuevamente la concepción instrumentalista de la ciencia por parte de los integrantes de la interpretación de Copenhague– exactos y precisos, así como facilitar algunas conclusiones acerca de la posibilidad de un futuro evento. Debe considerar entonces a los átomos como parte de situaciones de observación, partes que poseen un alto valor explicativo para un análisis filosófico de los fenómenos:

El progreso de la ciencia no sólo se realiza con el conocimiento y la comprensión de nuevos hechos por parte del hombre, sino que también se efectúa porque aprendemos de nuevo y sin cesar el genuino significado de la palabra *entender*.³⁸⁰

Esto nos lleva a tener que atender el problema de la interpretación física de la teoría y ontológica de los conceptos básicos ahora también son claras. Empecemos por el primero de ellos.

Interpretación física de la mecánica cuántica (Interpretación de Copenhague)

Frente al optimismo expresado por los físicos realistas en torno al significado físico de la mecánica cuántica, los científicos más cercanos a la interpretación de Copenhague se mostraron muy escépticos. Fruto de ello se desató una viva lucha por aclarar la nueva representación matemática de la naturaleza que encontró su máxima representación en la discusión que protagonizaron Schrödinger y Bohr³⁸¹.

³⁷⁹ Cita de Paul A. M. Dirac recogida en Selleri, F. (1.986), p. 47.

³⁸⁰ Carl Friedrich en Heisenberg, H. (1.930-32), p. 155.

³⁸¹ Tras la conferencia de Schrödinger en Múnich en 1.926, Heisenberg escribió una carta a Niels Bohr haciéndole saber de la desafortunada recepción que –a su juicio– habían tenido sus objeciones a la interpretación de la mecánica ondulatoria del físico vienés. Inmediatamente Bohr invitó a Schrödinger a pasar unos días en

Para Schrödinger la noción de saltos cuánticos lleva necesariamente a un contrasentido. En una posición estacionaria del átomo el electrón da vueltas periódicas en una determinada órbita sin emitir radiación, por ello, para que se pueda producir la emisión de radiación el electrón ha de saltar de un orbital a otro ¿Cómo se realiza éste salto? ¿Poco a poco o de forma repentina? Si pensamos en una transición gradual debemos suponer que el electrón cambia paulatinamente de posición y, por consiguiente, también lo va haciendo su frecuencia orbital y su energía. Pero entonces ¿Por qué aparecen frecuencias nítidas en las rayas del espectro? Por su parte, desde una concepción en la que la transición se produce de forma repentina podemos llegar al número exacto, a un número entero de ondas de luz. Pero ¿cómo se mueve el electrón? ¿Por qué no emite un espectro continuo? ¿Por qué leyes se determina su movimiento al saltar? De una forma u otra –concluye Schrödinger³⁸²– la idea de los saltos de los “quanta” es sencillamente absurda.

Bohr sostiene que efectivamente no podemos imaginarnos a través de los conceptos intuitivos con los que describimos los sucesos de la vida diaria y los experimentos de la física clásica –como lo son el espacio y el tiempo– fenómenos cuánticos como el salto de un electrón de un nivel a otro, pero eso no significa que no se produzcan. Por ello, mientras Heisenberg propone las relaciones de incertidumbre como medio para superar esta dificultad, el físico danés hace lo propio por medio de la complementariedad. Ambos intentos tratan de encontrar un puente entre el formalismo (matemáticas) y la naturaleza, así como la recuperación de la noción de trayectoria (descripciones espacio-temporales) dentro del ámbito de validez del nuevo formalismo. La cuestión entonces es la de establecer la forma en la que se pueda dar esa conexión entre teoría y experiencia, en cómo utilizar el formalismo matemático para describir una situación experimental dada y en cómo interpretar en términos físicos un formalismo matemático. Se trata por consiguiente de un problema que está en el ámbito del lenguaje: interpretar los experimentos y el formalismo significa hallar el modo de correlacionar símbolos del lenguaje matemático con el lenguaje natural depurado por la física clásica. Ante esta situación cabían tres posibilidades:

Copenhague con objeto de conocer y discutir a fondo dicha interpretación. Schrödinger aceptó y se instaló en la casa de los Bohr. De ese modo, desde las primeras horas del día hasta las más avanzadas de la noche, se alargaron unas discusiones que terminaron llevando a Schrödinger a guardar cama como consecuencia –en opinión de Heisenberg– del enorme esfuerzo intelectual al que se sometieron mutuamente ambos científicos [Heisenberg (1.926-27), p. 92-93].

³⁸² En Heisenberg, W. (1.926-27), p. 94.

1. No interpretar el formalismo matemático, pero eso nos lleva a desconocer cómo se adecua a la naturaleza.
2. Construir un lenguaje informal artificial, algo que nunca se llegó a realizar.
3. Emplear el lenguaje informal ordinario, natural, a sabiendas que este es impreciso.

Sea de una forma u otra, para Bohr y Heisenberg la búsqueda de la conexión –el paso del lenguaje matemático al ordinario– es irrenunciable. Ello supone la incorporación de términos como posición, velocidad, espacio, tiempo, etc. –a los que se había renunciado– bajo ciertas restricciones y condiciones: relaciones de incertidumbre o principio de indeterminación. El problema del lenguaje físico conduce a restricciones de uso, ligado al problema semántico y no con la determinación de la naturaleza. Porque el lenguaje clásico, empleado en el contexto de fenómenos cuánticos, no se puede utilizar de la misma manera. Hay que ver por consiguiente si se puede utilizar de la misma manera para fenómenos observados y para fenómenos no observados.

Como podemos observar para Bohr y Heisenberg uno de los problemas principales a resolver es el del proceso bajo el cual se lleva a cabo la formación de los conceptos. Sin embargo para realistas como Schrödinger es indiferente el lenguaje que utilicemos, cómo se lleve a cabo la formación de los conceptos, lo que interesa es saber qué es lo que ocurre dentro del átomo, cómo se mueven los electrones, cómo se comportan en una posición estacionaria o en el paso de una posición a otra. Vemos como Schrödinger no puede abandonar una concepción realista de las entidades básicas que le lleva sostener que el formalismo matemático de la mecánica cuántica u ondulatoria obliga a cambiar la imagen que tenemos de las mismas³⁸³. Se hace por ello necesario dejar de ver los electrones como una partícula y comenzar a verlos como ondas electromagnéticas o materiales, lo que nos va a permitir dar cuenta –defiende Schrödinger– de las nítidas frecuencias de las ondulaciones, la desaparición de las contradicciones de la nueva mecánica cuántica y ver cómo la radiación de la luz se hace tan comprensible como la emisión de ondas por parte de una radio.

³⁸³ De la mecánica cuántica u ondulatoria.

Sin embargo para Bohr la situación es muy distinta: las contradicciones no desaparecen, se desplazan hacia otro sitio. No se puede negar cómo para la ley de radiación de Planck es decisiva la asunción de valores discretos y el cambio discontinuo en la energía del átomo. Por ello –señala el físico de Copenhague– no hay esperanzas para el cambio de imagen. El cuanto elemental de acción desborda la antigua idea de la divisibilidad infinita de la materia de tal manera que a la hora de observar un fenómeno cuántico la interacción entre objeto y aparato forma parte inseparable del mismo. Por ello toda explicación de los fenómenos cuánticos debe incluir, en principio, una descripción de todos los detalles pertinentes del montaje experimental y una distinción de los instrumentos de medida y los objetos atómicos a observar.

La investigación de la presencia de una determinada partícula atómica en un dominio limitado de espacio-tiempo exige un montaje experimental que entraña una transferencia de cantidad de movimiento y de energía con cuerpos tales como escalas fijas y relojes sincronizados, transferencia que no puede incluirse en la descripción del funcionamiento de dichos cuerpos, si es que estos van a servir para definir el sistema de referencia. Recíprocamente, toda aplicación estricta de las leyes de conservación de la cantidad de movimiento y de la energía a los procesos atómicos implica, en principio, una renuncia a la coordinación detallada de las partículas en el espacio y en tiempo.³⁸⁴

Aparece por consiguiente una limitación de la aplicación de los conceptos de espacio-tiempo y de las leyes dinámicas de la conservación y se da una exclusión mutua de los montajes experimentales necesarios para la definición inequívoca de los fenómenos cuánticos, impidiéndose de ese modo una descripción determinista.

Bohr encuentra la solución en la complementariedad, en la yuxtaposición comparada de las dos representaciones intuitivas –la imagen corpuscular y la imagen ondulatoria– de las partículas materiales –por ejemplo los electrones– y de la luz. El principio de complementariedad da cuenta de la imposibilidad de resolver completamente las contradicciones aparentes³⁸⁵ que se producen en la física atómica³⁸⁶:

³⁸⁴ Bohr, N. (1.958), pps. 7-8.

³⁸⁵ Contradicciones aparentes porque, como veremos inmediatamente, Bohr habla de relaciones simétricas recíprocas.

[L]a evidencia que se obtiene bajo condiciones experimentales diferentes no puede ser incluida en una representación única, sino que han de considerarse como complementarias, en el sentido de que sólo la totalidad de los fenómenos agota la información posible sobre los objetos.³⁸⁷

Por ello debemos hablar –sostiene Bohr³⁸⁸– de una relación de simetría recíproca³⁸⁹ entre las descripciones espacio-temporales y las leyes de conservación de la energía y de cantidad de movimiento³⁹⁰ y no de verdaderas contradicciones. Se hace precisa así la renuncia a una única descripción bajo representaciones espacio-temporales y causales:

[T]odo intento de coordinación espacio-temporal entraña una rotura de la cadena causal, dado que semejante intento está íntimamente conectado a un intercambio esencial de energía y cantidad de movimiento entre los “individuos” y las reglas y los relojes utilizados para la observación que no puede ser tomado en consideración si deseamos que los instrumentos de medida desempeñen la función para la que fueron construidos. A la inversa, cualquier conclusión relativa al comportamiento dinámico de los “individuos” basada de forma inequívoca en la conservación estricta de la energía y de la cantidad de movimiento implica de manera evidente la renuncia total a seguir su evolución en el espacio y en el tiempo.³⁹¹

Llegados a este punto se hace oportuno señalar –recurriendo nuevamente a Bohr³⁹²– la estrecha analogía que se da entre esta insuficiencia de nuestras formas de intuición, basada en la imposibilidad de llevar a cabo una separación estricta entre los fenómenos y los medios de observación, y los límites generales de la capacidad humana para crear conceptos. Las raíces de tal analogía se encuentran en el intento por llevar a cabo una diferenciación entre sujeto y objeto³⁹³. Consecuencia de ello es la aparición de problemas epistemológicos y psicológicos que –como reconoce Bohr– caen fuera del ámbito propio de la física. Brevemente podemos resumir el problema epistemológico al que se refiere Niels Bohr en los siguientes términos: describir

³⁸⁶ Dualidad onda-corpúsculo.

³⁸⁷ Selleri, Franco (1.986), p. 36.

³⁸⁸ Bohr, N. (1.929), p. 135.

³⁸⁹ Esta reciprocidad es de suma importancia para el formalismo mecánico ya que la influencia del cuanto de acción aparece sólo en aquellas relaciones en las que las coordenadas espacio temporales y las componentes de la energía-cantidad de movimiento intervienen de una manera simétrica y recíproca.

³⁹⁰ Leyes que se pueden aplicar en gran medida sin seguir el curso de los fenómenos en el espacio y en el tiempo.

³⁹¹ Bohr, N. (1.929), p. 138.

³⁹² Bohr, N. (1.929), p. 136.

³⁹³ Bohr, N. (1.929), p. 136.

una actividad mental supone que un contenido objetivamente dado ha de ser puesto en presencia de un sujeto observador. Sin embargo, no es posible la separación entre sujeto y objeto, dado que el sujeto observador pertenece también al contenido mental. Por consiguiente debe reconocerse no solo que el significado relativo de cada concepto –o palabra– depende de la elección del punto de vista, sino que debe reconocerse asimismo que la elucidación completa exige la adopción de puntos de vista que desafían una única descripción.

Esta renuncia a una única descripción, a las representaciones intuitivas³⁹⁴ que impregnan todo nuestro lenguaje llevó a Bohr a un nuevo enfrentamiento directo: en esta ocasión con Albert Einstein durante el Congreso Solvay³⁹⁵ en 1.927.

Einstein había dedicado el trabajo de toda su vida a investigar el mundo objetivo de los procesos físicos que tienen lugar en el espacio y en el tiempo, independientemente de nosotros, según leyes fijas. Para el físico nacido en Ulm³⁹⁶ los símbolos matemáticos de la física teórica debían reflejar ese mundo objetivo y posibilitar las predicciones sobre su comportamiento futuro. Sin embargo para Bohr –como ya vimos en su momento–, al descender al nivel atómico desaparecía ese mundo objetivo en el espacio y en el tiempo y, los símbolos matemáticos comenzaban a reflejar, tan solo, lo posible y no lo fáctico.

Así como hemos visto distintas formas de abordar la imagen física de la mecánica cuántica entre los realistas, lo mismo ocurre dentro de la interpretación de Copenhague. Junto a la teoría de la complementariedad de Bohr encontramos el principio de incertidumbre de Heisenberg. Es en las nuevas relaciones de indeterminación de Heisenberg en donde se especifican los márgenes recíprocos de fijación de valores de las variables cinemáticas y dinámicas requeridas para la definición del estado de un sistema clásico.

Podemos acercarnos a su visión a través de su inquietud por la forma en la que puede representarse matemáticamente la trayectoria del electrón en la cámara de niebla desde la

³⁹⁴ Es preciso aclarar que si bien este fragmento corresponde a un texto que escribió en 1.929, en el mismo se recogen muchas de las ideas que ya había hecho públicas mucho antes del Congreso de Solvay al que haremos referencia en breve.

³⁹⁵ El llamado Congreso de Solvay, celebrado en Bruselas, al que solo fueron invitados, según la tradición de la Fundación Solvay, un pequeño grupo de especialistas para debatir sobre los problemas de la teoría cuántica.

³⁹⁶ Albert Einstein.

mecánica cuántica³⁹⁷. Para poder dar cuenta de esta cuestión debemos partir de dos hechos: la trayectoria del electrón en la cámara de niebla y el esquema matemático de la mecánica cuántica. En principio no debería existir ningún tipo de duda, a pesar de todas las apariencias exteriores, de problema a la hora de llevar a cabo la conexión. Sin embargo, recuerda el mismo Heisenberg, Einstein le había comentado en una ocasión que “sólo la teoría decide sobre lo que puede observarse”³⁹⁸. Aquel recuerdo le llevó a cuestionarse qué era realmente lo que había observado en la cámara de niebla ¿se trataba realmente de una trayectoria? Lo único que percibimos es una sucesión discreta de lugares imprecisamente determinados del electrón: tan sólo se ven gotitas aisladas de agua, más extensas que un electrón, en la cámara. Por consiguiente se hacía oportuno cambiar la pregunta: lo importante era ver si era posible representar dentro de la mecánica cuántica una situación aproximada del electrón y su velocidad. La respuesta la encontramos, nuevamente, en la mecánica cuántica matricial. A través de ella se hacía posible –como vimos– representar matemáticamente la situación y la imprecisión a costa, eso sí, de la pérdida de la representabilidad espacio-temporal.

El estatus ontológico de las entidades teóricas básicas de la física atómica como los electrones, los fotones y los átomos con independencia de los seres humanos y de sus observaciones.

La concepción realista y objetiva de ciencia aseguraba la existencia de los objetos que poseían dichas propiedades en la posibilidad de observación de los objetos estudiados. Sin embargo, la actitud epistemológica de los físicos pertenecientes a la interpretación de Copenhague, como es el caso de Heisenberg –condicionada principalmente por el principio de indeterminación– les llevó, de igual forma que ocurriera con la causalidad, al rechazo de la realidad física. Por ello se hace oportuno ver en qué medida la irrupción del sistema cuántico determina –bajo el enfoque de la interpretación de Copenhague– el concepto de observación y en qué medida afecta a la concepción ontológica de las entidades teóricas básicas como los átomos, electrones, etc.

³⁹⁷ Heisenberg, W. (1.926-27), p. 98.

³⁹⁸ Heisenberg, W. (1.926-27), p. 98.

El grado de perturbación, de interacción que produce todo proceso de observación tiene un valor finito, no reductible por principio, que coincide con el cuanto de acción de Planck. Se pone así en juego un grado de perturbación tal que hace imposible distinguir en el proceso de observación el objeto y los mecanismos puestos para su conocimiento así como determinar la diferencia del sistema antes de observarlo y después de hacerlo. Por ello, tan solo queda conocer el estado del sistema mientras se observa. Se trata por consiguiente de un conocimiento fenoménico en el que se pierde el camino que va del fenómeno a la realidad y en el que, cualquier operación de medida, modifica el estado del objeto a medir, de tal manera que nos encontramos ante un nuevo fenómeno. Este cambio que se produce en el objeto es discontinuo, de tal manera que no se hace posible subdividir el paso del estado y, por consiguiente, el grado de interacción observacional resulta incalculable, lo que hace indeterminable los procesos.

Esta alteración del sistema es, cuando se trata de una observación a nivel microcósmico, relevante, nada despreciable. Por ejemplo, cuando iluminamos un objeto atómico con la intención de observarlo, la interacción de la luz sobre el mismo modifica el sistema “gravemente” hasta tal punto, que debemos reconocer que aquello que se observa es un nuevo fenómeno. Se produce así –bajo la interpretación de Copenhague– la pérdida de noción de *objeto*. Cabe entonces preguntarse: Las partículas subatómicas ¿tienen una existencia real o formal, matemática? Los electrones ¿son ondas o corpúsculos? ¿Existen realmente? ¿Qué es real? ¿Qué significa conocer?

Para Bohr el principio de contradicción establece un límite absoluto; el formalismo cuántico es consistente y no se da en él contradicción experimental, ya que onda y corpúsculo se presentan en experiencias distintas, en el mismo estado no son a la vez onda y partícula. Se da una exclusión lógica entre onda –que es continua– y corpúsculo –que es discontinuo– y una exclusión matemático-experimental entre variables dinámicas y geométricas, por lo que no se pueden determinar ambos simultáneamente.

Si para Pauli la física moderna se ha visto forzada al abandono de la “concepción de un objeto material como un objeto cuya naturaleza y constitución es independiente del modo en el que se observa”³⁹⁹, Pascual Jordan muestra una posición típicamente positivista:

Un malentendido frecuentemente es que, de acuerdo con el enfoque positivista, *debería negarse la existencia de un mundo externo real*. La negación de una sentencia carente de significado produce otra también carente de significado; la opinión de la no existencia de un “mundo exterior real” no tiene más significado que la opinión de su existencia. *Ninguna de las dos es verdadera o falsa, sino carente de significado*.⁴⁰⁰

Nada mejor que las mismas palabras de Heisenberg para mostrar cómo la física atómica había dado la espalda a la tendencia materialista de la ciencia del siglo XIX:

[L]a partícula elemental de la física moderna es todavía mucho más abstracta que el átomo de los griegos... no es una partícula material en el espacio y en el tiempo, sino, de algún modo, sólo un símbolo con cuya introducción las leyes de la naturaleza asumen una forma especialmente simple... [L]a moderna ciencia natural no posee ya al comienzo al objeto material, sino a la forma, a la simetría matemática. Y ya que la estructura matemática es, en un último análisis, un contenido intelectual, podríamos decir, utilizando las palabras del Fausto de Goethe: “En el principio era la palabra – el logos”.⁴⁰¹

En cuanto a la exclusión matemático-experimental entre variables dinámicas y geométricas, debe partirse de la constatación de que toda situación de experimentación que quiera dar cuenta de la localización espacio-temporal de una partícula atómica produce inmediatamente una modificación en el estado dinámico del objeto, haciendo imposible toda información relativa al mismo. Por ello, se da una exclusión entre la localización espacio temporal y la descripción del estado dinámico (cantidad de movimiento y energía). Esta exclusión ¿tiene un valor epistemológico u ontológico? Es decir, ¿se trata de un problema de exclusión epistemológica –se debe a limitaciones cognoscitivas– o la relación de exclusión se da entre las propias magnitudes, no pueden tener valores concretos para un mismo estado del

³⁹⁹ Selleri, Franco (1.986), p. 43.

⁴⁰⁰ Selleri, Franco (1.986), p. 45-46.

⁴⁰¹ Selleri, Franco (1.986), p. 44.

sistema? Si queremos conocer cuál es la posición de una partícula subatómica en un determinado momento debe pararse el sistema, lo que supone cancelar su cantidad de movimiento; si lo que se quiere es conocer es su movimiento, se hace imposible una localización espacio-temporal exacta.

Como consecuencia de este principio de indeterminación nos encontramos con la imposibilidad de pintar, de llevar a cabo representaciones pictóricas del átomo. La trayectoria – como vimos– ya no es una línea continua bien definida, sino una sucesión discontinua de regiones, y no una ocupación sucesiva de lugares infinitamente próximos. Aun cuando se reintroduzcan el espacio y el tiempo, se pierde la posibilidad de representar intuitivamente el mundo. Entonces ¿cuáles es la finalidad de la ciencia?

El estatus cognoscitivo de las teorías científicas: realismo versus instrumentalismo en la Interpretación de Copenhague

Desde el marco realista –descriptivo causal– el fin de la ciencia es el de facilitar una descripción real de la naturaleza a partir de variables –magnitudes– observables compatibles. Una descripción completa de los sistemas estudiados tan sólo puede llevarse a cabo a partir de magnitudes compatibles ya que no puede formar parte de una descripción completa elementos entre los que se de una relación de exclusión, es decir, elementos que entren en contradicción. Esas variables observables tienen que ver con una descripción geométrico-dinámica que permita una descripción causal espacio-temporal. Han de tener, por consiguiente, un valor definido y dar información sobre las propiedades de los objetos. Por ello el fin de la física no es el estudio de lo que las cosas son en sí mismas, sino aquellas propiedades que puedan ser observadas y medidas.

Sin embargo, para Bohr es una gran equivocación “pensar que la tarea de la física es averiguar cómo es la naturaleza. La física se refiere a lo que nosotros podemos decir de ella [de la naturaleza]”⁴⁰². Desde un marco de complementariedad una descripción completa abarca tanto variables observables compatibles (onda, partícula) como no compatibles (posición,

⁴⁰² Selleri, Franco (1.986), p. 36.

movimiento) en una relación de complementariedad. La incompatibilidad es irreducible, por lo que no se puede reconstruir el marco clásico. Por ello hay que restringir la validez de aplicaciones de los términos excluyentes, limitar el campo de aplicación de los conceptos; no se pueden aplicar variables observables incompatibles a un mismo objeto con absoluta precisión y sin límite alguno. La aplicación limitada del uso de los conceptos tiene relación cuantitativa con el principio de indeterminación de Heisenberg. En ese sentido, el mayor conocimiento de una de las variables observables incompatibles supone un menor conocimiento de la otra; se puede intentar conocer las dos a la vez, pero no con igual grado de validez, ya que tal conocimiento viene regulado por el principio de incertidumbre. Tales variables no tienen por consiguiente un valor bien definido, por lo que no son propiedades de los objetos; no pueden ser poseídas por ningún sistema porque nada puede tener propiedades incompatibles. El mundo no puede ser descrito al margen de la operación de medida, lo incompatible es complementario, pero no remite a un objeto entendido en sentido clásico. Es un conjunto de fenómenos discontinuos; no hay objetos idénticos.

Si atendemos por ejemplo a la variable posición, ésta tan solo se puede atribuir a un sistema como consecuencia de una operación de medida. El resultado es un valor probabilístico, producto de la combinación de diversas probabilidades, por lo que nuevamente se constata que no se trata de un valor determinado. Un sistema tiene diversos valores potenciales, solo la medida actualiza la potencia y hace que el fenómeno sea distinto. Así, la trayectoria real, por ejemplo, es únicamente la resultante tras llevar a cabo la operación de observación; las trayectorias potenciales son las distintas posibilidades las cuales coexisten mientras no lo midamos. Por consiguiente, el valor de las variables observables se define a través del mecanicismo de observación.

¿Tiene sentido entonces decir que la acción de medida altera el valor de lo que se mide? Esto sería decir que altera un valor previo, pero no lo hace porque no hay un valor determinado previo. El tiempo –por ejemplo– es el tiempo que podemos medir, no hay un tiempo absoluto; no hay un mundo que yo conozco deformado, la medida no altera nada porque no hay nada que alterar, sino que arroja un resultado que es el que es, pero simultáneamente no me puede dar el valor de dos magnitudes. Las cosas son lo que podemos medir de ellas. Así, los sistemas cuánticos no tienen propiedades definidas en todo tiempo; y es que además no se puede

hablar de la indivisibilidad de los objetos cuánticos por no tener valores espacio-temporales; aquí nos encontramos con que los objetos realmente no son tal, sino que son fenómenos discontinuos que no nos permiten reconstruir la realidad del objeto: “las leyes fundamentales [de la naturaleza] no gobiernan el mundo directamente tal y como éste aparece en nuestra imagen mental, sino que actúan sobre un sustrato del que no podemos formarnos ninguna imagen mental sin cometer desatinos”⁴⁰³. Por todo ello, a la hora de hablar de fenómenos hay que hacer referencia al sistema de observación dentro del cual se da y que lo condiciona. En palabras de Bohr “defiendo, como modo más apropiado de expresarnos, que la palabra “*fenómeno*” se utilice exclusivamente para referirnos a observaciones obtenidas en circunstancias bien determinadas, incluida la descripción de todo el dispositivo experimental”⁴⁰⁴. Por ello, propone Heisenberg, hay que evitar todo uso del lenguaje que haga referencia directa a la realidad de los objetos atómicos.

Esta renuncia a una posible descripción real de la naturaleza conduce hacia concepciones idealistas o instrumentalistas de la ciencia. Una de las más claras muestras de esta segunda concepción la encontramos en Heisenberg, para quien la física teórica es esencialmente una creación humana cuya *única* función es la de predecir resultados experimentales a partir de los fenómenos estudiados. Por consiguiente, el estatus cognoscitivo de las teorías científicas – dentro de la interpretación de Copenhague– es claramente instrumentalista, aumentar nuestras posibilidades predictivas.

⁴⁰³ Cita de Dirac recogida en Selleri, Franco (1.986), p. 47.

⁴⁰⁴ Selleri, Franco (1.986), p. 38.

1.4.2. FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA

INTRODUCCIÓN

Como venimos diciendo, el objetivo principal de este trabajo es el de analizar, estudiar las implicaciones epistemológicas, ontológicas y metodológicas que se encuentran en aquella parte de la obra de Linus Pauling relacionada directamente con el problema de la estructura de la materia. En el capítulo anterior tuvimos la oportunidad de ver la extraordinaria importancia que las dimensiones filosóficas apuntadas jugaron en el desarrollo mismo de la mecánica cuántica, lugar en el que se estaba debatiendo la naturaleza de las propiedades básicas de la materia. El alcance de estos debates fue tan amplio, que las discusiones permearon al resto de disciplinas científicas. Estas cuestiones heredadas, junto a las diversas interpretaciones que se hicieron de las mismas, vivieron una acomodación dispar en cada una de las disciplinas donde se vieron reflejadas, como es el caso de la química. Si en su momento tuvimos que detenernos en el surgimiento y desenlace que vivieron estos problemas en el ámbito de la física, ahora trataremos de ver cómo esas cuestiones que se encontraban entre la física y la filosofía encontraron su reflejo en la química junto a los problemas filosóficos propios de esta disciplina, relacionados, igualmente, con la estructura de la materia.

Se hace oportuno señalar –antes de continuar con la presentación de esta sección– la extraordinaria dificultad que aparece al intentar dar cuenta de las cuestiones filosóficas que estaban en juego sin hablar directamente de la obra de Pauling. Él fue uno de los protagonistas principales en la consolidación y posterior desarrollo de la *química cuántica* como lo constata su obra, dedicada –principalmente– a tal proyecto y desarrollada bajo dicho paradigma. El químico estadounidense es considerado además el principal representante de uno de los dos modelos aproximativos que estaban en juego: la teoría del enlace de valencia⁴⁰⁵.

Por consiguiente, en este capítulo dedicado al contexto filosófico de la química vamos a intentar dar cuenta de aquellas cuestiones epistemológicas, ontológicas y metodológicas que estaban en juego en la temprana química cuántica. Eso sí, centrando nuestra atención en aquellas cuestiones en donde se pone en juego la naturaleza y legitimidad de los conceptos de

⁴⁰⁵ El otro modelo es, efectivamente, el orbital molecular de Hund-Mulliken.

forma molecular y orbital, la posibilidad de representación espacio-temporal y, ligadas a estas cuestiones, aquellos interrogantes que aparecieron en torno a la imagen y concepción de la ciencia en general y de la química como disciplina científica en particular. La intención es que, de forma natural, se vayan haciendo presentes toda una suerte de cuestionamientos ontológicos, epistemológicos y metodológicos que, entre otros, nos permitan ir entendiendo cómo se fue posicionando ante dichas cuestiones, de forma implícita o explícita, Linus Pauling. Para conseguir tales fines, se destacará la importancia de las aproximaciones en química y la presencia de los dos modelos aproximativos que estaban en juego, se constatará el intento de fundamentación de la química como ciencia y se señalará el debate producido en torno a la naturaleza pragmática o realista de los conceptos de orbital y resonancia ligados a la forma y estructura molecular. Comenzaremos, no obstante, acudiendo a una simple definición que el propio Pauling da de química y revisando de forma general algunos aspectos problemáticos que giran en torno a los conceptos de elemento y estructura.

1.4.2.1. Química, elemento químico y estructura

Definición de Química

Una de las mejores formas para obtener definiciones claras e intuitivas –sin perder por ello el mínimo rigor científico– de los conceptos más importantes de la química y de la obra de Linus Pauling es acercándonos a su libro de texto *Química General*. En dicha obra –como pudimos constatar una de las más influyentes– Pauling lleva a cabo una serie de definiciones introductorias, que si bien serán estudiadas con mayor profundidad en próximos capítulos, nos servirán ahora como punto de partida para la contextualización de algunas de las cuestiones filosóficas más importantes de la química. La primera cuestión a resolver es, siguiendo su propio esquema, precisamente la definición de química y es que esta obra pedagógica comienza con la siguiente definición:

1-1. Materia y Química. — El Universo se compone de sustancias (formas de materia) y energía radiante. La Química es la ciencia que estudia las sustancias: su estructura, sus propiedades y las reacciones que las transforman en otras sustancias.

Esta definición de la Química es a la vez demasiado limitada y demasiado amplia. Es limitada, ya que el químico, en su estudio de las sustancias, debe considerar también la energía radiante—luz, rayos X, ondas electromagnéticas—en su interacción con aquéllas. Debe interesarse acerca del color de las sustancias, que se produce por la absorción de la luz, así como de su estructura atómica, determinada por difracción de rayos X... o aun por absorción o emisión de ondas electromagnéticas por las sustancias.

Por otra parte, la definición es demasiado amplia, ya que casi todas las ciencias podrían incluirse en ella. El astrofísico estudia las sustancias que están presentes en las estrellas y en otros cuerpos celestes, o que están distribuidas en concentración muy pequeña por el espacio interestelar; el físico nuclear, las que constituyen los núcleos de los átomos; el biólogo, las presentes en los organismos vivos, y el geólogo, las llamadas minerales, que forman la Tierra. Es verdaderamente difícil delimitar la Química de las otras ciencias.⁴⁰⁶

Debido a esta dificultad, puede venimos bien definir el trabajo que lleva a cabo el químico. Así, afirma Pauling:

El químico estudia la materia en todas sus formas: en minerales, drogas, combustibles, materiales de construcción y organismos vivos sobre la Tierra; en las diminutas partículas de 10^{-12} cm. de diámetro, que se combinan entre sí para formar átomos y moléculas, y en las distantes nebulosas de un millón de años luz de diámetro, que sólo pueden ser estudiadas por la luz que llegan a la Tierra y es recogida en una placa fotográfica por el espejo parabólico de un telescopio gigante.⁴⁰⁷

Constatamos de ese modo cómo el objeto de estudio de la química es la materia, pero ¿En qué consiste ésta? ¿Qué es lo que diferencia a la química de otras disciplinas científicas que también estudian la materia como es el caso de la física? Según la teoría de la relatividad, tal y como lo recoge Pauling, “la materia comprende todas las sustancias que componen el universo que tienen masa cuando están quietas (masa en reposo)”.⁴⁰⁸ Sin embargo, debemos tener presente que hay varios tipos de materia ya que esta palabra “se emplea al hacer referencia a cualquier clase de materia, homogénea o heterogénea [siendo que m]aterial heterogéneo es el que consta de partes que poseen propiedades diferentes [y el] material homogéneo tiene todo él las mismas propiedades”.⁴⁰⁹ Constatamos así cómo las sustancias⁴¹⁰ vienen a ser según Pauling una especie de materia homogénea de composición química definida cuyas propiedades

⁴⁰⁶ Pauling, Linus (1963), p. 3

⁴⁰⁷ Pauling, Linus (1.963), p. 4

⁴⁰⁸ Pauling, Linus (1.963), p. 7

⁴⁰⁹ Pauling, Linus (1.963), p. 10

⁴¹⁰ La palabra sustancia equivale químicamente a sustancia pura.

químicas⁴¹¹ están relacionadas con su comportamiento en las reacciones químicas, entendiendo por tal, los procesos por medio de los cuales una sustancia se transforma en otra⁴¹².

Ahora bien, debemos tener presente que en la naturaleza, en el universo, el químico se encuentra con una gran diversidad material, de sustancias, haciéndose oportuno al menos una clasificación, una distinción básica. Basándose principalmente en los trabajos realizados por Lavoisier, la teoría química distingue las sustancias elementales y los las sustancias compuestas (o sencillamente compuestos). Las primeras son aquellas que constan de átomos de una sola clase, mientras que los compuestos son sustancias que constan de átomos de dos o más clases diferentes⁴¹³. Así, una sustancia elemental se compone de un elemento, pero un compuesto de dos o más. Para intentar evitar confusiones –como el mismo Pauling apunta⁴¹⁴– es necesario aclarar en la medida de lo posible lo que se entiende por una clase particular de átomos en la definición de elemento. Evidentemente el químico estadounidense tenía su propia concepción, pero sí queremos dar cuenta de la importancia y significado de este concepto, así como situar su posición al respecto dentro de un contexto más general, debemos ir –y es lo que haremos en lo que sigue de apartado– más allá de su posición.

Definición de elemento

En el ámbito de la química uno de los problemas conceptuales más importantes ha sido el de la definición de elemento. La importancia de tal definición se hace patente a la hora de llevar a cabo la ordenación de los elementos en la tabla periódica y de dar cuenta de su permanencia en los compuestos complejos. Podemos encontrar a lo largo de la historia⁴¹⁵ dos grandes perspectivas en torno a la interpretación de *elemento*; una primera denominada *metafísica ingenua* o *literal* desde la cual los elementos se entienden como seres que están más

⁴¹¹ Entre estas propiedades el “sabor y olor están estrechamente relacionados con la naturaleza química de las sustancias y se consideran como propiedades químicas” Pauling, Linus (1.963), p. 15.

⁴¹² Pauling, Linus (1.963), p. 14

⁴¹³ Estos átomos deben estar presentes en una relación numérica constante, puesto que las sustancias, por definición, tienen una composición determinada.

⁴¹⁴ Pauling, Linus (1.963), p. 76

⁴¹⁵ En la obra que ahora nos ocupa –*Química General* (pps. 80-81)– Pauling presenta una breve *Historia del concepto de elemento y de los símbolos químicos* que si bien no vamos a seguir da cuenta de la importancia que otorga al desarrollo y función de este concepto dentro de la química.

allá de la observación; y una visión de los elementos como entidades fundamentales o clases naturales de la química.

A. *Los elementos como sustancias inobservables*

El punto de partida de la visión metafísica, para la que los elementos químicos han de ser entendidos como sustancias básicas o portadoras de características, es su inobservabilidad. Tal perspectiva fue evocada por primera vez por algunos filósofos griegos y, lejos de desaparecer completamente, volvió a resurgir desempeñando un importante papel en el siglo XX, aunque en un sentido diferente. Antes de entrar de lleno a la forma en la que se recuperó la visión metafísica durante el pasado siglo –y que condicionó como veremos en su momento el trabajo de Pauling–, se hace oportuno señalar previamente como sugiere Eric R. Scerri⁴¹⁶ –a quien seguimos principalmente en esta ocasión– el doble sentido en el que se ha definido dicho término; el elemento como “sustancia básica” –que es precisamente al que nos venimos refiriendo–, como portador de características a la vez que se encuentra desprovisto de propiedades; y elemento como una “sustancia simple” que puede aislarse y tomar diferentes estructuras⁴¹⁷.

El punto de vista metafísico desde el que el elemento ha de ser entendido como una sustancia inobservable portadora de características fue parcialmente abandonada como resultado de la revolución química⁴¹⁸. Sin embargo, la noción de elemento como sustancia básica hizo su reaparición con Mendeléiev, quien insistió en que su clasificación periódica había sido construida principalmente a partir de esta concepción. Ahora bien, Mendeléiev no recobró la visión antigua tal cual, sino que a la definición del elemento como sustancia básica desprovista completamente de propiedades había que añadirle la posesión de un atributo: a saber, su peso atómico, que debía servir como criterio para la distinción de unos elementos de otros y que podía ser utilizado para ordenar los elementos en una única secuencia. La distinción entre elementos como sustancias básicas y como sustancias simples fue de crucial importancia para

⁴¹⁶ Scerri, Eric R. (2.005)

⁴¹⁷ Como ocurre con el carbono en el diamante o el grafito.

⁴¹⁸ Autores como Lavoisier habían encontrado de mayor utilidad centrarse en una visión de los elementos como sustancias simples observables que podían ser aisladas.

Mendeléiev. Ejemplo de ello lo encontramos en muchos de los pasajes en su clásico libro de texto “The Principles of Chemistry”, donde lo constata extensamente.

En el siglo XX, Paneth –uno de los cofundadores de la radioquímica– apoyó igualmente la visión de los elementos como sustancias básicas. Pero tuvo que introducir otra novedad: los recientes descubrimientos llevados a cabo en el campo de la física, y sobre todo los trabajos llevados a cabo por Moseley, le exigieron cambiar el atributo del peso atómico por el de número atómico como criterio de distinción y ordenación⁴¹⁹. De esta forma, la química adoptaba una “posición intermedia” entre un realismo ingenuo y una visión metafísica. Pues bien, precisamente va a ser éste el criterio que propone Linus Pauling para definir exactamente una *clase particular de átomo* como “*un átomo cuyo núcleo tiene una carga eléctrica determinada*”⁴²⁰ y que va a permitir definir a su vez el elemento como “*un tipo de materia en la que todos los átomos tienen el mismo número atómico*”⁴²¹.

Uno podría considerar –siguiendo como decíamos a Scerri– que la terminología de Paneth es algo desafortunada⁴²² puesto que no contraponía realismo y metafísica tal y como generalmente se hace, ni el realismo con el reduccionismo. Sin embargo, Paneth confrontó una visión macroscópica del fenómeno químico (realismo ingenuo) con una descripción microscópica (reducción física). Debe apreciarse también que la opción de Paneth estaba centrada en el contraste entre elemento como sustancia simple (realismo ingenuo) y elemento como sustancia básica (metafísica en el sentido de estar más allá de la observación). Para Paneth la reducción física representaba un proceso que cada vez permitía menos la posibilidad de observar las clases que son más familiares al químico.

Paneth reclamó que el químico podía permitirse tomar una actitud realista ingenua a la hora de dar cuenta de la mayoría de las características observadas, pero que tal realismo se debía romper en el momento en el que el químico se enfrentara con la persistencia de los elementos en los compuestos. En tales casos, el investigador estaba forzado a abandonar el punto de vista de los elementos como simples sustancias y debía mantener una visión metafísica en el sentido de

⁴¹⁹ Paneth, F.A. (1.962)

⁴²⁰ Pauling, Linus (1.963), p. 76. Las cursivas son del texto original.

⁴²¹ Pauling, Linus (1.963), p. 77. Las cursivas son del texto original.

⁴²² Si bien Paneth no era filósofo, el hecho de que fuera responsable de la introducción de la definición actual de un elemento químico, nos obliga a examinar sus opiniones filosóficas al respecto

elementos como sustancias básicas inobservables. Es decir, a la hora de intentar dar cuenta de la estructura de las grandes sustancias complejas –compuestos como vimos– los elementos (simples) se vuelven inobservables para el químico. Por todo ello –sugería Paneth–, los químicos generalmente operan desde una posición intermedia que ni es completamente realista ni metafísica⁴²³.

B. Elementos como entidades básicas de la química o clases naturales de la química.

En 1.892 Frege subrayó la forma en la que normalmente utilizamos expresiones como un nombre propio para referirnos o designar un objeto, ya que entendemos que el nombre está asociado con algunos contenidos descriptivos acerca del mismo. Análogamente, utilizamos términos generales o nombres como “tigre”, “bellota” o “elemento” para referirnos a los objetos en virtud de su “sentido”, entendiendo como tal la descripción que proporciona del objeto. Esta concepción de la relación entre lenguaje y realidad fue duramente criticada entre los años 60 y 70 del siglo XX. El fundamento principal de esta crítica residía en el hecho de que las descripciones asociadas con un nombre o término como “tigre” no proporcionan una condición necesaria y suficiente para su aplicación al objeto en cuestión. Por ejemplo, un locutor podría referirse a un tigre aunque la criatura en cuestión no tuviera las líneas comunes que poseen los tigres (p. ej. un tigre albino). Inversamente, una criatura de otra especie podría exhibir un aspecto rayado parecido al de un tigre. Por esa razón, algunos autores señalaron la necesidad de observar los hechos teniendo presente las relaciones causales objetivas que se dan en el mundo, y no las ideas que solemos tener en la cabeza. En este contexto, la teoría causal de Kripke-Putnam de referencias encontró su lugar: se podía demandar así que los términos naturales no tuvieran su extensión determinada por conceptos descriptivos –tal y como ocurre por ejemplo

⁴²³ Podemos sintetizar en un pequeño cuadro la forma en la que los elementos entendidos como sustancias básicas se han interpretado históricamente:

- Filósofos griegos: elementos como sustancia básica era completamente inobservable.
- Mendeleev: elementos como sustancias básicas permanece “invisible” (en palabras del propio Mendeleev) y están caracterizadas por una propiedad principal: su peso atómico
- Paneth: comprensión de los elementos como sustancias básicas no implica completamente inobservable y poseen un importante atributo: número atómico.

con Aristóteles⁴²⁴ – sino por una cadena causal que comenzara con el bautismo o el nombramiento original de un objeto de muestra. Por su parte, la referencia de los términos iniciales venían dados por las más recientes investigaciones científicas. De ese modo, el uso del número atómico permitió a Kripke y Putnam adoptar la definición de elemento en términos de número atómico⁴²⁵. Esto fue de suma importancia ya que vemos así como nuevamente como desde una interpretación del elemento como una sustancia básica viene definido por el número atómico ¿Por qué esto es tan importantes? La clave la encontramos en la asignación de números atómicos a los elementos y en la aparición de un gran número de isótopos en un breve lapso de tiempo.

Como señalara Linus Pauling⁴²⁶, si bien tras el descubrimiento del electrón como constituyente de la materia se hizo posible la asignación de números atómicos a los elementos, no fue hasta 1.913, a partir de los trabajos de H. G. J. Moseley, cuando empezó a hacerse correctamente. La aparición de los isótopos estuvo a punto de poner a la química entre las cuerdas ¿podía seguir acomodándose los átomos en la tabla periódica tal y como se venía haciendo hasta la fecha? Los isótopos de un elemento –como sabemos– “son átomos cuyos núcleos contienen el mismo número de protones (igual al número atómico del elemento) pero diferente número de neutrones”⁴²⁷. Los experimentos llevados a cabo demostraron que las propiedades químicas de los isótopos del mismo elemento eran sustancialmente las mismas, por lo que éstas están dadas principalmente por el número atómico y no por el peso atómico⁴²⁸. Consecuentemente, el químico podía mirar todos los isótopos de cualquier elemento como pertenecientes a la misma sustancia simple, aún cuando mostraran diversas formas isotópicas. La clave va a estar, consecuentemente, en la interpretación del elemento como sustancia básica y no simple, como sustancias básicas, no del todo inobservables y que poseían un importante atributo: el número atómico. De haberse optado por la visión de los elementos como sustancias simples –que pueden aislarse y que poseen diferentes estructuras–, los químicos se hubieran visto forzados a reconocer a los isótopos como nuevos elementos y, por consiguiente, a

⁴²⁴ De hecho, para Pauling la diferencia principal entre la concepción moderna de elemento y la aristotélica está en que para el filósofo macedonio los elementos se refieren más a los estados que a los tipos de materia (Pauling, Linus (1.963), p. 80).

⁴²⁵ Puesto que permanece como la definición científica más actualizada de un elemento.

⁴²⁶ Pauling, Linus (1.963), p. 77

⁴²⁷ Pauling, Linus (1.963), p. 89

⁴²⁸ Prueba de la coincidencia de esta interpretación la encontramos en Pauling, Linus (1.963), p. 90.

reconstruir y reinterpretar toda la tabla periódica. Incluso, sin la aparición de los isótopos, esta situación se hubiera dado igualmente –como de hecho nuevamente apareció– en el ámbito de la formación de los compuestos.

Como hemos podido ya constatar, el trabajo de Pauling está directamente vinculado con una interpretación y consideración de los elementos (y sus isótopos) así como su distribución en la tabla periódica al estar ambas cuestiones relacionadas directamente con la estructura de la materia y del enlace químico, elementos claves a la hora de hablar de las propiedades de la materia. Por consiguiente, si el fin de la química es el conocimiento de las propiedades de la materia, de las sustancias ¿Cómo llevar a cabo esta tarea de comprensión? Como hemos ido señalando a lo largo de las páginas precedentes, para Pauling la clave está en la elucidación de su estructura:

Las propiedades de la materia se conocen y comprenden más fácil y claramente cuando se relacionan con su estructura, en función de las moléculas, átomos y partículas todavía más pequeñas. Por estructura hay que entender la disposición de los átomos que constituyen toda la materia y que, mediante las interacciones de unos con otros, dan individualidad y variedad a la misma.⁴²⁹

Pero Pauling no era el único preocupado por la estructura de la materia, su trabajo no lo realizó desde la nada, sino que lo fue desarrollado –como hemos señalado– dentro de un determinado programa de investigación: la nueva química cuántica. Este nuevo programa no se desarrolló de forma homogénea, no podemos hablar de una única posición común entre los químicos, sino de una pequeña –pero importante– y notable heterogeneidad. Tal y como señala R.F. Hendry⁴³⁰, la emergencia de la química cuántica en la primera mitad del siglo XX fue un episodio tan interdisciplinar como internacional: un diálogo entre físicos y químicos alemanes, estadounidenses y británicos. Si bien los físicos y químicos implicados en el desarrollo de la química cuántica durante las primeras décadas tendieron a sostener puntos de vista opuestos a las explicaciones aceptadas, estandarizadas de sus respectivos campos, el debate no se dividió entre las dos líneas disciplinarias. Tan solo encontramos pequeñas diferencias como la defensa de un rigor mecánico cuántico y la aplicación de principios fundamentales como el valor de los

⁴²⁹ Pauling, Linus (1.963), p. 3

⁴³⁰ Hendry, Robin Findlay (2.003), p. 44.

modelos como guías del enlace molecular en el caso la física –ejemplo de ello es el trabajo de Slater–, frente a la preocupación de los químicos por la recuperación de la explicación química tradicional y el poder explicativo sistemático de su disciplina. Pero estas diferencias quedan mitigadas ante una separación más importante, como es la que se da entre los dos esquemas de aproximaciones presente entre los mismos químicos: el método de enlace de valencia de Heitler-London-Pauling-Slater y de la propuesta de orbitales moleculares de Hund-Mulliken.

Siguiendo a Hendry⁴³¹, es precisamente la presencia de estos dos esquemas de aproximaciones lo que plantea serias dificultades a la hora de dar cuenta de la temprana historia de la química cuántica y su intento por llevar a cabo la recuperación de la explicación química tradicional y el poder explicativo sistemático. Ambos modelos –concebidos en Europa en la década de los años 20 y desarrollados en la década de los 30 en Estados Unidos– fueron contruidos tanto desde comprensiones físicas como desde teoremas matemáticos y arrojaban resultados igualmente factibles sobre la estructura de las moléculas. Desde el método de enlace de valencia de Heitler-London-Pauling-Slater se interpretaban las funciones de onda de las moléculas como la superposición de estados correspondientes a estructuras enlazadas clásicamente. De esta forma los estados mecánico-cuánticos resultantes se debían concebir como “híbridos resonantes” de estructuras conocidas. Por otro lado, la concepción de orbitales moleculares se levantaba sobre la idea de orbitales moleculares deslocalizados con orbitales atómicos libres.

De este debate surgieron algunas dificultades e implicaciones epistemológicas acerca de los méritos relativos de cada uno de los dos esquemas –tradicionalmente representados por las figuras de Linus Pauling y Ch. Coulson– que debían ser revisadas. Se trataba en principio de dos juegos diferentes de principios y valores, dos posiciones diferentes en torno a cómo los modelos de aproximación deberían ser evaluados. Además, sobre la mesa lo que estaba en juego era, entre otras cosas, la autonomía, autoridad y afiliación disciplinaria: ¿Debería la mecánica cuántica molecular ser considerada como una importación de la física completamente descriptiva, una estancia de la mecánica cuántica de sistemas de partículas cargadas? ¿O debería la mecánica cuántica adaptarse a las demandas explicativas de la química, adaptar caso por caso a la recuperación de estructuras conocidas? Pauling y Coulson apelaron –cada uno

⁴³¹ Hendry, Robin Findlay (2.003)

desde una posición distinta— a los valores químicos de poder explicativo en química⁴³². Podemos apreciar cómo algunas de las cuestiones más importantes que están en juego en la nueva química cuántica estaban ligadas a su relación de dependencia/independencia con respecto a la física. Por ello, para poder dar cuenta de estos conflictos, así como de los heredados directamente de la mecánica cuántica, debemos atender al problema de la constitución de la química como ciencia ligado al intento de superación de un fisicalismo hasta la fecha no logrado completamente⁴³³.

1.4.2.2. Concepción de la química como ciencia

¿De dónde procede esta relación de dependencia, de subordinación de la nueva química con respecto a la física? Ciertamente es que la química cuántica nace de la aplicación de nueva mecánica cuántica al campo de la química, pero esta relación entre las dos disciplinas viene de atrás. A finales del siglo XIX la química era vista por los físicos como una disciplina descriptiva cuyos fundamentos tenían que buscarse en su campo⁴³⁴. Esta imagen de la química como una disciplina inferior hunde sus raíces en el pensamiento de dos grandes autores y una importante confusión. Kant había defendido tanto en la *Crítica de la Razón Pura* como en los *Fundamentos Metafísicos de la Ciencia Natural* que tan sólo podían considerarse ciencias aquellas disciplinas susceptibles de matematización. El mismo Kant, ignorando cómo este proceso se estaba llevando a cabo ya en la química⁴³⁵, afirmó que ésta jamás podría llegar a constituirse en una genuina disciplina científica. Pero a ello hay que unir el desafortunado error del siglo XIX; la confusión de matemáticas y ecuaciones diferenciales. Este error tuvo serias consecuencias en el desarrollo y la imagen de distintas disciplinas —entre ellas la química— al condicionar el estatus de ciencia a aquellas disciplinas que pudieran basarse en ecuaciones diferenciales. No ayudó a

⁴³² Vamos a dejar fuera la posición de los físicos para centrarnos ahora en el contexto propiamente químico. Sin embargo, no queremos dejar pasar la oportunidad para señalar que entre los físicos, como es en el caso de Slater, no se comprometieron con este debate entre los dos esquemas aproximativos rivales.

⁴³³ Villaveces C., J. L. (2.000), pp.19-20.

⁴³⁴ Ver Nye (1.993), pp. 33 y 57.

⁴³⁵ Matematización que se llevó a cabo principalmente durante las tres últimas décadas del siglo XVIII por químicos como Guyton de Morveau (1.737-1.826), Carl Wenzel, Bergman (1.715-1.784), Kirwan (1.733-1.812) o el mismo Lavoisier (1.743-1.794), que hicieron del estudio de las afinidades un objetivo primordial y trataron de encontrar métodos fiables para su medida.

mejorar la imagen de la química la jerarquización llevada a cabo por Comte, al ponerla por debajo de la física y las matemáticas tanto desde el punto de vista lógico como fundacional.

Esta percepción de la química como una disciplina inferior, subordinada en muchas ocasiones a la física, no varió mucho con la llegada del siglo XX. El entusiasmo producido por la nueva física llevó a muchos a científicos a considerar que toda la química podía entenderse desde la física. Reflejo de ello lo encontramos en las palabras de Harold Clayton Urey, primer editor de la *Journal of Chemical Physics*, para quien gracias a la nueva mecánica cuántica “se ha tendido un puente total sobre la frontera entre las ciencias de la química y la física”⁴³⁶. De forma muy parecida Henry Eyring reflejaba aún esa idea en 1.944 al sostener que “hasta donde sea correcta la mecánica cuántica, las cuestiones químicas son problemas de matemática aplicada”⁴³⁷. La idea que subyacía era muy sencilla; si se quiere ir más allá de la descripción, si se quiere ir a los fundamentos últimos de la química, han de buscarse en la mecánica cuántica. Esta visión es de suma importancia para nuestros propósitos, ya que constituye precisamente – como venimos observando– el paradigma bajo el cual Linus Pauling desarrolló toda su obra. Ejemplo de ello lo encontramos –tal como tuvimos la oportunidad de señalar en su momento⁴³⁸– cuando el mismo Pauling señala que «la química moderna tomó forma durante los primeros treinta años del siglo XX. La química es un fenómeno cuántico, o mejor dicho, una gran colección de fenómenos cuánticos»⁴³⁹. Sin embargo –como tuvimos que mencionar–, una parte importante de los químicos desconocían la física y la nueva química cuántica –no se interesaron por ella⁴⁴⁰–, produciéndose así un aparente abandono, desinterés por la reflexión teórica. Sin embargo, debemos subrayar *aparente*, ya que la química orgánica clásica, la bioquímica, la química inorgánica de compuestos complejos, el uso de asimetrías en química, la consolidación de las espectroscopias y cromatografías como fundamentación de análisis y muchos más campos que se desarrollaron durante el siglo XX, crearon un importante corpus teórico que ha sido percibido, no obstante, como local.

⁴³⁶ Cita extraída de Villaveces, p. 16.

⁴³⁷ Ídem.

⁴³⁸ Concretamente en el capítulo dedicado al contexto científico (física).

⁴³⁹ Pauling, L. (Nov. 7, 1.985), p. 54.

⁴⁴⁰ Situación ante la que tuvo que enfrentarse el mismo Pauling en muchas ocasiones.

Se hace oportuno señalar, antes de continuar, que la superación del fisicalismo, entendiendo por tal la búsqueda de una “base química de la química” más allá de la física, es un problema –como anunciábamos líneas más arriba– todavía no resuelto de forma completa. El siglo XXI ha comenzado con una actitud muy distinta a la del siglo anterior, ya que el problema de la fundamentación de la química constituye en la actualidad un problema central de la disciplina. Debemos considerar no obstante –señala Villaveces–, que los recientes intentos serios de superación del fisicalismo comenzaron con la publicación en 1983 de Hans Primas “Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism” y los esfuerzos llevados a cabo durante la última década del siglo XX, entre los que cabe destacar: el comienzo de la publicación HYLE en 1995, la celebración en Marburgo del tercer coloquio *Erlenmeyer* para la filosofía de la química (1996), el texto de Schummer “The Chemical Core of Chemistry”⁴⁴¹. Como muy bien señaló Wooley en 1991, el problema de fondo de la química contemporánea se encuentra en el tratamiento de los electrones como partículas cuánticas y de los núcleos como partículas clásicas ¿A qué se debe esto? ¿Por qué nos ha de interesar a la hora de abordar el trabajo de Linus Pauling? Adelantemos que la respuesta puede ser clave para poder dar cuenta de uno de los problemas fundamentales con el que nos encontramos a la hora de abordar la obra del químico estadounidense: si la fundamentación de su química está en la física cuántica pero su obsesión es la determinación de la estructura molecular de las sustancias, base de sus propiedades ¿Cómo compaginar ambas si el cuanto de acción de Planck había negado tal posibilidad?

Las moléculas son sistemas de átomos unidos por enlaces químicos, sistemas que se describen bajo un formalismo mecánico-cuántico, ya que los enlaces químicos están constituidos por electrones compartidos. Sin embargo, pueden ser representadas pictóricamente –en ciertos aspectos y bajo ciertas condiciones– bajo un marco conceptual clásico ¿Cómo es posible? Si bien encontramos una primera teoría cuántica del enlace en Bohr, los trabajos más importantes son precisamente los llevados a cabo por Linus Pauling. Bajo el marco de la teoría cuántica y cálculos basados en la ecuación de Schrödinger, el químico estadounidense estableció los cimientos matemáticos del enlace químico en términos físicos y las bases desde las que era posible la descripción de las estructuras moleculares. Pero, mientras la mecánica

⁴⁴¹ En este texto de 1996 Schummer intenta llevar a cabo la construcción de una arquitectura cognitiva propia para la química.

cuántica supuso la desintegración en física de la visión mecanicista del mundo –desintegración que había comenzado en el siglo XIX– la teoría de campos de Maxwell supuso el reforzamiento de la imagen mecánica ¿En qué sentido?

La clave estuvo en el uso generalizado –luego desarrollado la bajo la forma de los dos modelos señalados– de una de las más importantes aproximaciones de la química cuántica; la llamada *aproximación de Born-Oppenheimer* basada en el desacoplamiento de los movimientos electrónicos y nucleares. Al ser la masa del núcleo mucho mayor que la de los electrones, su velocidad relativa es mucho menor. Por ello, si fijamos nuestra atención en el núcleo, los electrones parecen una *nube de carga*, mientras que si nos fijamos en los electrones, los núcleos parecen estar quietos. Esto permite, tal y como propone la aproximación Born-Oppenheimer, la separación de las coordenadas de los electrones y de los núcleos de las moléculas. Las coordenadas de los núcleos se han de tomar como parámetros, como constantes, mientras se resuelve la ecuación intermedia. De ese modo se obtienen objetos matemáticos intermedios denominados “función de onda electrónica” y “energía electrónica”, bases para el segundo proceso: la resolución de la ecuación en las variables nucleares una vez integradas las electrónicas.

Pero hablábamos del uso generalizado de la aproximación y, ese uso, en la práctica real, se traducía en muchas ocasiones a la resolución –por parte de un número considerable de científicos– tan sólo de la primera parte: la obtención de la “ecuación de onda”, al trabajo con la función de onda y la energía electrónica. Es decir, se centraron exclusivamente en la investigación de la distribución cuántica de los electrones sobre un esqueleto rígido de núcleos fijos, dando lugar a una imagen de las moléculas como conjuntos de bolitas y palitos –reminiscencia del siglo XVII– frente al formalismo cuántico. De ese modo se hacía posible la recuperación de las descripciones espacio temporales. Sin embargo, la parcial o mala utilización de una metodología no termina por resolver, deshacer un problema epistemológico. Por ello, en vez de quedarnos ahí, debemos seguir rastreando, detectar en primer lugar algunos de los límites del conocimiento químico y examinar aquellos problemas de carácter epistemológico y ontológico que se encontraban ocultos detrás del uso de las aproximaciones.

1.4.2.3. De los límites del conocimiento químico al método científico de las aproximaciones

La ciencia moderna –señala Andrea Tontini⁴⁴²– nos ha proporcionado un avance considerable en nuestra comprensión del mundo físico e importantes desarrollos técnicos que han asegurado una mejora sustancial de nuestro estándar de vida. Ahora bien, aunque en principio pudiera parecer un tanto paradójico, la ciencia del siglo XX nos ha permitido percibir –posiblemente mejor que la de siglos anteriores– la inmensa, la ineludible complejidad de la existencia material. A pesar de la proclamación del químico francés Marcellin Berthelot⁴⁴³ en 1.887 según la cual *de ahora en adelante, el universo ya no guarda más secretos*, durante el pasado siglo, los científicos se fueron encontrando con barreras cada vez más infranqueables y aparentemente insalvables a la hora de investigar la estructura del mundo material. Los límites inherentes del conocimiento científico son muy variados y han sido ampliamente discutidos. Comprenden temas tan diferentes como el estado completo de sistemas axiomáticos (como ocurre en la aritmética), el principio de incertidumbre de Heisenberg, la imprevisibilidad del comportamiento de los sistemas complejos o el significado médico de la información genética. Puede ser interesante distinguir –tal y como propone el cosmólogo J.B. Hartle⁴⁴⁴– tres tipos de límites del conocimiento científico:

1. La “diferencia entre qué puede ser observado y qué puede ser predecido” se presenta como un primer límite, una primera frontera que da fe del inevitable contraste existente entre la complejidad intrincada del mundo y la simplicidad de “las leyes que gobiernan las regularidades del mundo”.
2. Límite debido al hecho de que “incluso las teorías más simples requieren cálculos imposibles o insuperables para proporcionar predicciones específicas”
3. Un tercer tipo de límite concierne a nuestra habilidad de conocer teorías a través de procesos de inducción y test⁴⁴⁵.

⁴⁴² Tontini, Andrea (2.004), pp. 23-46.

⁴⁴³ Marcellin Berthelot (1.827-1.907), químico e historiador francés.

⁴⁴⁴ Hartle, J.B. (1.996), pp. 116-7

⁴⁴⁵ Tontini, Andrea (2.004)

Llevados al ámbito de la química, estos límites nos obligan –subraya el autor italiano– a reconocer que el descubrimiento, comprensión y aplicación efectiva de los modelos moleculares tan solo es posible cuando éstos –modelos– poseen cierto grado de simplicidad. Por ello, cuando la complejidad de los eventos químicos es muy grande se hace necesaria la simplificación de los modelos implicados. Ahora bien, debemos señalar cómo el autor está asumiendo una estructura molecular previa definida por la experimentación química tradicional y llevando a cabo una aproximación implícita en ese modo de representación teórica. Volvemos a encontrarnos así con el método de las aproximaciones⁴⁴⁶, proceso que, lejos de ser algo extraño en el mundo de la ciencia, se encuentra por el contrario presente en todas las disciplinas. De hecho, en su famoso libro de texto *Química General*, y tras señalar que el método de la inducción nunca puede realizarse de un modo completo, Linus Pauling indicó que “[u]n método importante por medio del cual la ciencia ha progresado es el *proceso de las aproximaciones sucesivas*”⁴⁴⁷. Al igual que ha ocurrido en otros tiempos con la inducción y la deducción, se trata de un método que ocupa y ha ocupado la base de algunas de las discusiones más recientes en la filosofía de la química⁴⁴⁸, sobre todo a la hora de abordar problemas como el de la forma de las moléculas, el papel de los orbitales y la explicación física de la tabla periódica de los elementos. Por ello, este tema, se presenta como un lugar privilegiado desde el que abordar algunas de las cuestiones de carácter filosófico más importantes que se encuentran en la obra de Pauling. Si bien éstas últimas se desarrollarán en próximos capítulos, se hace oportuno definir previamente –aunque sea de forma breve, y es lo que aquí nos proponemos– la significación ontológica y epistemológica, así como el papel crucial que las aproximaciones tienen en la generación de imágenes cualitativas y de modelos comprensibles. Sin embargo, antes de llevar a cabo dicha presentación, debemos reconocer el descuido y las malas interpretaciones que en muchas ocasiones se han hecho de las aproximaciones por parte de otras ramas de la filosofía de la ciencia.

⁴⁴⁶ Desde que comenzamos el capítulo hemos estado insistiendo que el desarrollo de la química cuántica es el resultado de dos propuestas aproximativas.

⁴⁴⁷ Pauling, Linus (1.963), p. 16.

⁴⁴⁸ Ostrovsky, Valentin N. (2.005)

El problema de las aproximaciones en ciencia

Como punto de partida para la comprensión de lo que suponen las aproximaciones en la ciencia podemos acercarnos a la física. Aunque esta disciplina se considera por regla general como una ciencia exacta, en la física todo es aproximado. Tal y como señala el físico teórico A.B. Migdal⁴⁴⁹, a la hora de abordar cualquier problema físico debemos descuidar siempre algunos factores, algunos efectos que consideramos que no son importantes para el fenómeno particular que tenemos en mente. Sin embargo, es muy importante tener presente, poder estimar, la magnitud de las cantidades que descuidamos. A ello hay que añadir –señala Migdal– que antes de calcular un resultado numérico se hace oportuno investigar el fenómeno desde el punto de vista cualitativo. Es decir, estimar el orden de la magnitud de las cantidades que estamos interesados en descubrir.

Para entender qué se quiere decir al hablar del problema de la aproximación podemos apoyarnos, a modo de ejemplo tal y como sugiere Valentin N. Ostrovsky⁴⁵⁰, en una confusión muy general que se suele dar entre el público no especializado ante declaraciones como: “En la mecánica cuántica uno puede obtener solamente un resultado para el átomo de hidrógeno, pero no para un átomo con varios electrones”. Esta afirmación parece indicar que tan solo es posible la obtención de una solución exacta para el átomo de hidrógeno a través de la ecuación no-relativista de Schrödinger. Pero esta ecuación es en sí misma una aproximación, ya que deja fuera, sin explicar, algunos aspectos importantes como lo son los efectos relativistas. Por ello, debemos asumir que se trata tan solo de un modelo, de una aproximación, que permite calcular resultados que emparejan solamente datos experimentales.

Podría objetarse que también podemos obtener una solución exacta para el átomo de hidrógeno a partir de la ecuación de Dirac, que toma en consideración la teoría de la relatividad. Si bien esta ecuación asegura una mayor correspondencia con los datos obtenidos experimentalmente –por ejemplo al describir la estructura de los niveles de energía– sigue siendo una aproximación ya que también deja fuera otros aspectos, en este caso la ecuación de Dirac no explica la interacción atómica con el campo electromagnético. Por ello, si se sigue

⁴⁴⁹ Migdal, A.B. (1.989)

⁴⁵⁰ Ostrovsky, Valentin N. (2.005)

queriendo ir más lejos e intentar alcanzar un grado de exactitud más alto, debemos volver la mira hacia la electrodinámica cuántica, pero ni siquiera ésta última proporciona una ecuación “exacta”. Tan solo permite calcular propiedades de átomos e iones dentro de un cierto orden de aproximación, sobre parámetros pequeños que caracterizan efectos relativistas.

Así, la física no es nada más que una jerarquía de aproximaciones, sin una sola ecuación o resultado exacto. Ésta no es una desventaja temporal que se pudiera quitar con el curso de tiempo, sino algo permanente, puesto que refleja la esencia del acercamiento de la física al describir la naturaleza. En primer lugar porque las leyes de la física no se dan *a priori*, se prueban experimentalmente con solo cierta precisión. En segundo lugar, hay algunas aproximaciones inevitables. Cualquier investigador debe seleccionar un pedazo del universo para ser estudiado y descrito⁴⁵¹ –por medio de la aproximación– descuidando el resto del mundo⁴⁵². En tercer lugar, aunque se conocieran teorías más exactas, todavía sigue teniendo un profundo sentido el recurrir a las aproximaciones, no solo por razones pragmáticas, sino también epistemológicas. Las aproximaciones enriquecen inmensamente nuestro cuadro cualitativo de la naturaleza. No obstante insistiremos en este punto líneas más abajo⁴⁵³.

Son muchos los ejemplos⁴⁵⁴ que podríamos seguir poniendo para constatar la presencia de las aproximaciones en todas las teorías físicas, pero lo que nos interesa ahora es el tema de las aproximaciones en el ámbito de la química ya que es –como señalábamos– el centro de muchas discusiones filosóficas de la disciplina que ahora nos ocupa. Sobre todo nos vamos a

⁴⁵¹ Por ejemplo un átomo o un sistema planetario

⁴⁵² Solamente algunas teorías cosmológicas demandan evitar estas limitaciones pero contienen un número inmenso de otras aproximaciones.

⁴⁵³ Ver punto *El valor epistemológico de las aproximaciones*.

⁴⁵⁴ Como podría ser el aparentemente estatus especial de las leyes de conservación en física. Algunas de ellas, consideradas inicialmente estrictas, se vieron posteriormente que eran solamente aproximaciones, como la conservación de la paridad. La más importante y conocida es la ley de conservación de la energía que parece permanecer inmovible. Sin embargo, esta ley tiene un carácter especial según lo acentuado por Feynman (1.992). Como nuestro conocimiento de la naturaleza se amplía, las nuevas formas de energía son abrazadas por la ley para obtener la energía total que es conservada. Así, la conservación de la energía significa que hasta ahora hemos conseguido siempre encontrar nuevos términos que se pueden ir añadiendo para conservar constante la energía total. Esta disponibilidad es, por supuesto, un principio profundamente arraigado de la naturaleza. La gente interesada en resultados y declaraciones exactas realmente deberían volverse hacia las matemáticas más que a la física. Las matemáticas no son una ciencia natural, si bien se aplican en las ciencias naturales. Las matemáticas funcionan con construcciones abstractas que deben ser consistentes internamente, sin contradicciones lógicas. No se impone ninguna otra restricción. Los matemáticos construyen un “universo” lógicamente no contradictorio y trabajan con él. No necesitan cuidar si ese universo es en el que vivimos. Los físicos no pueden construir su universo; tienen que estudiar el único del que disponen.

centrar en aquellas cuestiones relacionadas con la forma de las moléculas –preocupación central de Pauling–, la posibilidad de observar los orbitales en los experimentos o el tipo de explicación física que pueden darnos de la tabla periódica de los elementos.

Las aproximaciones en química

Empecemos, no obstante, atendiendo a una cuestión apuntada por García-Sucre y Bunge⁴⁵⁵: las aproximaciones⁴⁵⁶ –sostienen– siendo en el fondo un mero “artefacto”, representan algunas propiedades objetivas importantes de los sistemas mecánico-cuánticos, entre ellos geométricos. Entonces ¿cómo es posible que algo artificial, un artefacto *ad hoc*, represente algunas características objetivas importantes? Autores como Giuseppe del Re⁴⁵⁷ sostienen que este problema podría ser clarificado o remediado por medio de un cambio terminológico. Por ejemplo, para evitar la confusión que lleva a algunos investigadores a pensar que la aproximación Born-Oppenheimer no tiene ningún contenido físico, podríamos escribir “teorema” en vez de “aproximación”. Algo similar podría hacerse, tal y como propone Scerri⁴⁵⁸, ante la actual discusión que se da sobre el estado y la observación de los orbitales. Según Scerri el modelo orbital sigue siendo enormemente útil como una aproximación y se encuentra en el corazón de mucha de la química cuántica, pero debemos reconocer que se trata solamente de un modelo, sin un significado físico, de lo que son conscientes todos los químicos y físicos computacionales.

Estos ejemplos muestran como, al igual que ocurría en la física, las discusiones no versan sobre algunos detalles técnicos marginales, sino que se encuentran en el corazón mismo de la química cuántica. Por lo tanto, el significado y la significación de las aproximaciones en ciencia merecen un análisis profundo desde un punto de vista ontológico y epistemológico que

⁴⁵⁵ García-Sucre, M. & Bunge, M. (1.981)

⁴⁵⁶ Estos autores se refieren explícitamente a la aproximación Born-Oppenheimer. Sin embargo, por no tratarse de la única presente en química cuántica –ya vimos las dos más importantes– vamos a referirnos a las aproximaciones en general, aunque muchas de las notas que siguen son fruto de las reflexiones hechas en torno a la aproximación Born-Oppenheimer.

⁴⁵⁷ Del Re, G. (2.000)

⁴⁵⁸ Scerri, E.R. (2.001)

nos permita dar cuenta de las siguientes cuestiones en torno a las aproximaciones defendidas por Pauling: ¿Son las aproximaciones necesarias o pueden ser evitadas para hacer una ciencia realmente exacta? ¿Son estos “artefectos” arbitrarios y subjetivos? ¿Cómo pueden estar ligados a algo observable?

Como hemos ido viendo, uno de los temas sobre los que más se discute en la literatura química actual tiene que ver con el problema de la forma, la estructura molecular. Recordemos que en la mecánica cuántica un sistema de varias partículas no posee generalmente una característica tal como una forma definida ¿cómo pudieron dar cuenta los primeros químicos cuánticos –como es el caso de Pauling– de esta contradicción? Se puede atribuir –como ya adelantamos también– una forma a una molécula por medio de una aproximación. Este método, con un carácter instrumental muy claro, juega un papel muy importante dentro de la química cuántica, sobre todo en aquellas reacciones químicas que no son acompañadas por un cambio de los estados eléctricos. Mas no podemos obviar, debemos reconocer, la legitimidad de aquellos autores que exhiben un profundo descontento ante una química basada en las aproximaciones y donde la forma molecular no es absoluta, sino que se concibe como una propiedad transitoria con un limitado dominio de aplicabilidad. Entre estos últimos podríamos situar a García-Sucre y a Bunge, quienes califican las aproximaciones –concretamente la aproximación de Born-Oppenheimer– como un “artefacto”. No aclaran el significado de este término, pero el contexto sugiere –siguiendo a Ostrovsky⁴⁵⁹– que emplean el término artefacto como algo hecho por el ser humano y sin relación con la naturaleza. Sin embargo, el que algo sea hecho por el hombre (*human-made*) no es algo extraño en ciencia –veremos en su momento cómo se consideró y criticó la introducción del concepto de resonancia de Pauling en química como un artefacto–, ni significa sin relación con la naturaleza. Toda la ciencia ha sido creada por los seres humanos en la búsqueda de una descripción de la naturaleza que nos permita entenderla. En ese sentido, toda la ciencia es un artefacto. Ahora bien, al aplicarse el término “artefacto” también a los objetos materiales producidos por los humanos, nos vemos obligados a matizar y a utilizar a partir de ahora el término *artefactos ideales*. ¿Hay –en cuanto que de artefactos ideales se trata– diferencias importantes entre una función de onda “exacta” y la aproximación por ejemplo de

⁴⁵⁹ Ostrovsky, Valentin N.(2.005)

Born-Oppenheimer?⁴⁶⁰ Una solución exacta de la ecuación de onda de Schrödinger describe – podrían decir algunos filósofos– algo inexistente, tratándose simplemente de un formalismo matemático que podría, en el mejor de los casos, quedar justificada físicamente como una buena aproximación. En tal caso, si a partir de una función de onda “exacta” de Schrödinger lo que se obtiene no es más que una aproximación ¿No debería concedérsele la misma validez a la función de onda obtenida dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer?

Algunos químicos cuánticos usan la ecuación de Schrödinger en el dominio que les es apropiado, aunque esta ecuación no sea exacta (puesto que no incluye efectos relativistas); otros investigadores van más allá de la ecuación de Schrödinger y encuentran interesantes y significativos efectos –desde el punto de vista químico– conocidos a partir de la aproximación de Born-Oppenheimer; otros van más allá de la aproximación de Born-Oppenheimer y llaman a esta química no-Born-Oppenheimer. Y es que, de hecho no hay diferencias importantes entre el uso de la ecuación “exacta” de Schrödinger (hoy considerada una aproximación) y la aproximación de Born-Oppenheimer. Las diferencias están, en primer lugar, en la exactitud numérica que puede asegurar cada una de ellas y, en segunda lugar, en la posibilidad de desarrollar una interpretación cualitativa y una comprensión por medio de diferentes aproximaciones.

Volvamos al término “artefacto” ya que aún nos puede dar más juego. En muchas ocasiones parece señalar, indicar algo artificial y subjetivo, no relacionado directamente con la naturaleza. Sin embargo, este significado es engañoso. Las aproximaciones reflejan directamente la naturaleza específica de las moléculas como sistemas cuánticos: a saber, el hecho de que las moléculas consistan en las partículas pesadas (núcleos atómicos) y las partículas ligeras (electrones). La constitución de las moléculas y el cociente entre las masas – del que depende la precisión de la aproximación– son todas propiedades objetivas que no dependen de la voluntad del investigador. En ese sentido, las aproximaciones son dictadas por la naturaleza, en el mismo sentido que lo son las propiedades cuánticas de las micropartículas. Estas aproximaciones reflejan la naturaleza tal como lo hacen las ecuaciones “exactas”, aunque de un modo diferente. Mientras que aquellas reflejan el lado más cualitativo de naturaleza, las

⁴⁶⁰ Para hacernos una idea de la importancia de esta cuestión recordemos la opción de Pauling por la interpretación de Schrödinger y su defensa del método aproximativo.

teorías más exactas tienden a reflejar aspectos cuantitativos, pero ambos lados son objetivos y no inventados por investigadores. Ejemplo de ello son las manifestaciones de aproximaciones Born-Oppenheimer evidentes en observaciones experimentales fuera de la química. Evidencias visibles de la separación (aproximada) Born-Oppenheimer del movimiento nuclear y electrónico como una característica de la naturaleza y no de una invención deseosa de los investigadores⁴⁶¹. Entonces ¿es posible descubrir la forma, la estructura de una molécula? ¿Puede atribuirse por medio de las aproximaciones una forma definida a una molécula? Para dar cuenta de estas cuestiones debemos acudir ahora al concepto de orbital.

Orbitales moleculares

Los orbitales se suelen definir en física como construcciones matemáticas que tratan de describir, de forma coherente con la mecánica cuántica, los estados estacionarios de un electrón en un campo eléctrico central⁴⁶². Esta imagen física, apoyada de forma matemática por medio de ecuaciones, ha resultado ser muy útil para desarrollar patrones explicativos de fenómenos físico-cuánticos y químico-moleculares. Sin embargo, más allá de su sentido estricto, los químicos se refieren a los orbitales como entes físicos más que como construcciones matemáticas⁴⁶³. Es entonces cuando aparece una contradicción que debe ser superada: aunque reconocen que se trata de una aproximación, el reconocimiento de los orbitales como entidades físicas por parte de los químicos supone la recuperación de la continuidad, ya que un hecho en un espacio de Hilbert es análogo en ese sentido a un hecho en un marco de coordenadas geométricas. Sin embargo, el mismo objeto de una teoría no puede fungir a la vez como un hecho, como un ente físico, y como una aproximación ¿cómo dar cuenta de esta contradicción?

Para dar respuesta a esta cuestión debemos dar una previa a otra. A saber, ¿en qué sentido podemos hablar de la existencia de los orbitales? Para autores como Ogilvie⁴⁶⁴ “no existe algo así como los orbitales”. Desde este punto de vista los orbitales tendrían que

⁴⁶¹ Tal y como sostiene Ostrovsky, finalmente uno podría estar de acuerdo con García-Sucre y Bunge: un artefacto (p. ej. la ciencia creada por seres humanos) realmente representa algunas propiedades importantes objetivas de naturaleza.

⁴⁶² Recordemos que el núcleo no se define de forma explícita.

⁴⁶³ Ejemplo de ello puede ser la utilización de expresiones "en un orbital caben dos electrones".

⁴⁶⁴ Ogilvie, J.F. (1.990)

entenderse simplemente como artefactos ideales, sin una existencia en la naturaleza del mismo modo que tampoco lo hacen las funciones de onda “exactas” de Schrödinger: en ambos casos se trataría, exclusivamente, tan sólo de creaciones de la mente humana. Visto así, los orbitales aparecerían como consecuencia de aproximaciones, al igual que las soluciones de las funciones de onda de Schrödinger, que nos proveen de unos resultados que permiten la comparación cuantitativa entre distintos experimentos. Sin embargo, debemos apuntar, los orbitales son de suma y amplia importancia por varios motivos; en primer lugar, reflejan algunos rasgos cualitativos importantes y proporcionan una idea intuitiva físico-química; en segundo lugar, aseguran descripciones cuantitativas razonablemente buenas; en tercer lugar, los orbitales sirven técnicamente como base para el posterior refinamiento cuantitativo de una teoría; y, en cuarto lugar, los orbitales, como aproximaciones, juegan un importante papel en la explicación científica de la tabla periódica de los elementos. Cierto es que no aportan un resultado teórico óptimo, pero sí dan una idea física del movimiento de los electrones. En ese sentido, hay que insistir, la imagen que ofrecen los orbitales proporciona una pauta útil para desarrollar los esquemas numéricos.

A. *La observabilidad y orbitales*

Vayamos a una cuestión relacionada con la inicial ¿pueden observarse los orbitales?⁴⁶⁵ Debemos tener presente que la pregunta por la observabilidad de los orbitales es una cuestión particular dentro de una problemática más general ¿pueden los artefactos ideales ser observados? Antes de dar una respuesta debemos señalar que para nuestros propósitos vamos a referirnos exclusivamente –entre los múltiples artefactos ideales⁴⁶⁶– a los *artefactos físicos ideales*. Hecha esta observación –y basándonos nuevamente en el texto de Valentin N. Ostrovsky⁴⁶⁷–, podemos adelantar que si consideramos que toda aproximación válida ha de estar basada en la naturaleza, la respuesta ha de ser afirmativa pero teniendo presente que se trata de una observación semidirecta ¿Qué queremos decir con esto? En nuestra vida cotidiana observamos efectos y fenómenos relacionados directamente con artefactos científicos ideales.

⁴⁶⁵ Si se pueden observar entonces se hace posible concebirlos como entes físicos.

⁴⁶⁶ Por ejemplo un centauro.

⁴⁶⁷ Ostrovsky, Valentin N.(2.005)

Considérese por ejemplo –propone Ostrovsky–, una sombra ¿existen realmente las sombras? Una sombra perfectamente definida sólo existe dentro de la óptica geométrica, que es una teoría basada en aproximaciones. Una teoría más avanzada de óptica, como la óptica ondulatoria, proporciona un mejor resultado pero termina por reconocer que no podemos delimitar perfectamente el contorno de una sombra como consecuencia de la difracción. Incluso, si queremos apurar un poco más el ejemplo, podemos hacerlo imaginando la sombra producida al iluminar un objeto con la luz monocromática producida por un láser⁴⁶⁸. Observaremos entonces que las franjas inferiores muestran el mismo fenómeno en el micromundo. Los fenómenos de difracción dependen de varios parámetros (la longitud de onda, el tamaño del objeto iluminado, la posición del observador), pero siempre están presentes. En otras palabras, es imposible definir las fronteras de una sombra rigurosamente, ya que las franjas de difracción aparecen cerca de las fronteras. La sombra es, por consiguiente, una aproximación en términos físicos. Si en la vida diaria observamos sombras y no tenemos problemas en identificarlas, es debido a la baja resolución de nuestro sentido visual. Esto demuestra claramente que una razonable, justificada aproximación puede usarse para describir algo real (dentro de los límites de su aplicabilidad) y puede ser percibido por observación directa. La esencia de este ejemplo – asegura Ostrovsky– no está tan lejos de la química como podría parecer ya que se refiere a la relación entre descripción geométrica clásica y las teorías más generales que incluyen características de la onda cuántica.

Llegados a este punto se hace oportuno detenernos un instante y preguntarnos qué queremos decir con observar, con ver. En primer lugar debemos tener en cuenta que el significado de las palabras cambia con el tiempo⁴⁶⁹ y que este cambio en el significado de una palabra conlleva el cambio en los significados de la familia de los conceptos asociados. En segundo lugar, debemos tener presente el tercer ídolo que señala Francis Bacon como responsable de la obstrucción de la mente humana: el ídolo del mercado. Para el pensador inglés las distorsiones que sobrevienen cuando el significado de las palabras queda reducido al mínimo común denominador del uso vulgar impiden la formación de conceptos y del mismo pensamiento científico. Ejemplo de ello son los conceptos de ver, de observación. Una persona madura tiende a ver el mundo y asumir que es tal y como lo ve. Esto puede ser resultado –

⁴⁶⁸ Este tipo de luz permite distinguir las franjas en los bordes de esta sombra macroscópica.

⁴⁶⁹ Pitt, Joseph (2.005)

afirma Joseph Pitt– de una predisposición negativa ante preguntas filosóficas tal como “¿estoy viendo realmente lo que hay?” Sin embargo, la reflexión nos lleva a constatar que ver es un proceso interpretativo en el que se ponen de manifiesto una gran carga de información y de experiencias previas. Pues bien, si esto ocurre en nuestra vida cotidiana en donde podemos considerar que nuestra relación con los objetos es “directa” ¿qué ocurre en la ciencia donde nuestras observaciones son semidirectas o indirectas? Es decir, en la actualidad los experimentos químicos no permiten una observación directa sino una mediada por instrumentos de investigación: el científico ya no contempla directamente la naturaleza, sino que lo hace a través de complejos instrumentos (microscopios electrónicos, telescopios espaciales, etc.). Por consiguiente, tenemos que hablar en la actualidad –como adelantábamos– de una observación semidirecta o indirecta. Pues bien, en el contexto en el se movía Pauling –y en el que sus trabajos cristalográficos son un claro ejemplo– la observación de la naturaleza, de las propiedades de la materia –entre ellas su estructura– se llevó a cabo también de forma indirecta. Por consiguiente, las imágenes generadas por un microscopio electrónico en la actualidad o las llevadas a cabo por un químico en su hoja de papel a partir de los datos obtenidos indirectamente a través de otros medios –como la cristalografía–, vendrían a ser una extensión metafórica de nuestra noción de sentido común.

Entonces, cuando estamos hablando de observación en química ¿a qué nos estamos refiriendo exactamente? A la obtención de una imagen entendida como una representación resultado de un intento de captura de las “facciones” externas de un objeto, una escena, un estado de ánimo, una idea,...., de una imagen que sabemos que es representacional. Pero, ¿cuándo sabemos que una presunta representación es una auténtica representación? Cuando contiene, cuando aporta información. Pero cuando decimos que una imagen debe contener información, ¿estamos demandando que la realidad esté siendo representada? ¿Qué la imagen presentada sea algo verdadero o puede ser imaginado? ¿Cuándo una imagen no es un imaginarse? La cuestión es entonces tanto epistemológica como ética. No vamos a entrar a desarrollar estos dos puntos –de suma importancia desde luego– sino que vamos a limitarnos a señalar lo sospechoso que es desde el punto de vista, por lo menos epistemológico, la defectuosa

suposición según la cual “el mundo se entiende mejor si simplificamos nuestras presentaciones sobre él”⁴⁷⁰.

Lo que ahora nos interesa señalar es que si aceptamos que las imágenes que en la actualidad produce un microscopio electrónico como una representación genuina y realista de aquello que realmente está ahí, no hay razón para no aceptar igualmente las representaciones de los orbitales. Veamos por ello, aunque sea muy por encima, cómo se produce esta representación.

En mecánica cuántica un sistema físico queda descrito por medio de una función de onda que puede ser representada de muchas formas, siendo la representación del espacio coordinado el más empleado junto a la representación del momento. Por medio de varios experimentos se ha podido medir directamente la distribución del momento del electrón, el cual se representa por medio de densidades de probabilidad en el espacio del momento. En muchos casos el espectro de energía provee las más convincentes y directas formas de describir un sistema físico. Como decíamos, hoy en día no se observa casi nada de forma directa en los experimentos físicos, sino que éstos se llevan a cabo por medio de complejos aparatos experimentales que proporcionan unos datos “crudos” que necesitan ser procesados. Por ello, no hay una razón fundamental que nos permita preferir una visualización basada en una representación de coordenadas a una observación basada en la representación del momento o la energía.

Para concluir este punto, tan solo cabe indicar que la observación experimental de orbitales no puede ser rechazada completamente desde el punto de vista filosófico basándonos exclusivamente en una crítica a la utilización de aproximaciones en la teoría cuántica.

⁴⁷⁰ Pitt, Joseph (2.005). Este mismo autor crítica en el mismo cómo “cuanto más complicada es la ciencia y cuando más simplificamos las explicaciones públicas, tendemos con mayor facilidad para aceptar sus fantasías”. Pone como ejemplo las imágenes producidas por ordenador a partir de los datos que aporta el telescopio espacial Hubble.

B. El estatus ontológico de los orbitales

Volvamos a una de las cuestiones iniciales ¿es posible concebir los orbitales como entes físicos? Como hemos visto, su observabilidad, la imagen que obtenemos de ellos a partir los experimentos, no garantiza su existencia física, pero tal y como sostiene en la actualidad Scerri “el hecho de que los orbitales tan solo puedan proporcionar una aproximación del movimiento de muchos sistemas polielectrónicos no es razón suficiente para la negación completa de que ellos o cualquier cosa relacionada con los orbitales pueda posiblemente existir”⁴⁷¹. Por consiguiente, no podemos negar la existencia de los orbitales basándonos única y exclusivamente en la utilización de las aproximaciones ni asegurar su existencia a partir de la imagen que de ellos obtenemos por medio de la experimentación; deberemos buscar otro tipo de argumentos. Estos los vamos a encontrar precisamente en sistemas filosóficos muy particulares.

La primera crítica filosófica sería la que encontramos entre aquellas disciplinas que niegan la existencia de un mundo material objetivo. Es obvio que desde esta perspectiva, la existencia de los orbitales como una entidad física, material es imposible. Otro tipo de negación vendría de la mano de aquellos sistemas en los que se lleva a cabo una radical distinción entre las propiedades y las cosas, o las propiedades y las sustancias. Desde esta perspectiva parece casi imposible oponerse a afirmaciones como “un orbital como tal no es observable, lo que son observables son sus propiedades”. Los experimentos físicos –se dirá– permiten la observación de muchas propiedades de los objetos de estudio, pero nunca del objeto mismo. Esta perspectiva nos sitúa ante un escepticismo, que si bien es legítimo en ciencia, nos lleva a dudar no sólo de la existencia de los orbitales, sino también de todo lo material, incluidas las moléculas. Un tercer tipo de objeción, también proveniente del escepticismo, nace tras constatarse la existencia de una presuposición física –que supone ya entre otras cosas la existencia de los orbitales– bajo la cual se diseñan y llevan a cabo muchos de nuestros experimentos. Ejemplo de ello lo encontramos en el cálculo de los niveles de energía del átomo de hidrógeno, donde ya se presuponen los estados estacionarios y los niveles de energía acordes con la ecuación de Schrödinger.

⁴⁷¹ Scerri, E.R. (2.001)

Vistas ya algunas de las cuestiones, de las alternativas que sobre la naturaleza ontológica así como el significado y valor epistemológico de los orbitales estaban presentes en el contexto bajo el cual Linus Pauling tuvo que desarrollar su obra, podemos afrontar la cuestión del valor epistemológico de las aproximaciones.

El valor epistemológico de las aproximaciones

En principio, podríamos convenir conforme a la teoría cuántica, que la función de onda contiene toda la información de un sistema físico y permite calcular algunos hechos químicos observables. Sin embargo, el conocimiento exclusivo de valores numéricos parece –en muchas ocasiones– insuficiente para una comprensión completa; la explicación en la mayoría de las ocasiones requiere términos que la vinculen de alguna forma con imágenes cualitativas obtenidas por medio de aproximaciones. Por ello, se hace oportuno detenernos un instante en el término “explicación”, ya que, en principio, parece poseer diversos significados. A menudo se utiliza para denotar una deducción de una teoría más general. Sin embargo, en estos casos parece más apropiado el término “predicción”. En términos cuánticos por “explicación” se entiende a menudo una suerte de líneas, trazas puestas a partir del punto de vista de un observador. Ahora bien, en muchas ocasiones parecería como si el investigador en mecánica cuántica desarrollara un tipo especial de “intuición cuántica” que le permitiera un entendimiento directo de los objetos cuánticos sin solicitar analogías clásicas.

Sin embargo, la ecuación “exacta” de los sistemas físicos más complejos proporciona tan solo una idea muy limitada. Pocos teoremas generales se pueden probar rigurosamente, tal como la conservación de la probabilidad por la ecuación de Schrödinger, haciéndose posible muchas veces solo imágenes y patrones cualitativos. Para nuestro propósito de exploración natural necesitamos ambas informaciones; cuantitativas y comprensiones cualitativas. Es inútil preguntar cuál de los dos es más importante, ambos aspectos son esenciales. Ahora bien, nosotros no podemos obtener ambos frutos desde un simple enfoque: cuando hacemos esquemas numéricos más y más sofisticados, el significado físico se hace menos evidente emergiendo –por ejemplo en la actualidad– únicamente números de las cajas negras de los ordenadores. En segundo lugar, los modelos aproximativos aportan una descripción cualitativa

y otra semi-cuantitativa, no de gran precisión. Incluso en nuestros días muchos de los investigadores modernos, tras obtener una ingente cantidad de resultados números gracias al uso de potentes ordenadores, necesitan darle un sentido físico a sus resultados. Es difícil proporcionar una definición completa, un significado al concepto de “sentido físico” más allá de la posibilidad que nos brinda de interpretar los resultados numéricos en términos de modelos simples e imágenes cualitativas provenientes de aproximaciones y modelos.

Éstas –las aproximaciones y los modelos– constituyen una parte completamente legítima de una teoría, y no solo una parte temporal, abominable y vergonzosa. Ejemplo de ello lo encontramos en los libros de texto de mecánica cuántica, en donde se incluyen muchos problemas simples. La razón de ello no está en la aportación de una descripción precisa de la naturaleza, sino en su capacidad para fomentar, desarrollar y permitir a los estudiantes entender importantes conceptos cualitativos. Las aproximaciones básicas y los simples problemas sobre modelos facilitan la comprensión de propiedades y el desarrollo de un lenguaje apropiado para el desarrollo de explicaciones en las situaciones más complicadas.

Si el objetivo de un investigador es la obtención de un resultado numérico mejor, entonces debe evitar las aproximaciones o limitarlas tanto como le sea posible en el curso de sus investigaciones. Ahora bien, las ecuaciones “exactas”, desnudas de cualquier sistema complejo proporciona significados limitados y constituyen un campo yermo de explicaciones. Los conceptos explicatorios de gran heurística potencial nacen de las aproximaciones. Son éstos los que inspiran una intuición que es un vehículo poderoso en el avance de la ciencia. Ya hemos mencionado cómo los conceptos clave de la química –tales como la forma molecular o los orbitales moleculares– emergen directamente de las aproximaciones. Esto, por supuesto, no significa necesariamente que el mismo juego de aproximaciones explicatorias o modelos pueda ser retenido para siempre. Los modelos pueden ser modificados o cambiarse completamente. Sin embargo, los modelos y aproximaciones dejan siempre una parte sustancial e inevitable de las explicaciones de los sistemas complejos, y no alguna deficiencia temporal.

Veamos ahora cómo el uso de las aproximaciones influyó en la noción de forma y estructura molecular.

1.4.2.4. Forma y estructura molecular

Habíamos visto como la aproximación de Born-Oppenheimer requiere sustituir primero el núcleo atómico por centros de fuerza fijados en el espacio y entonces resolver los problemas cuánticos de los electrones de la molécula variando los sistemas de coordenadas nucleares. Las soluciones obtenidas proporcionan una imagen potencial que depende paramétricamente de las coordenadas del núcleo atómico. El siguiente paso implicaba la localización de los posibles puntos de equilibrio del núcleo en una molécula. Era en ese momento de la aproximación en el que emergía una forma molecular definida.

El estatus de la forma molecular encierra un gran interés filosófico. Tal y como señala Ramsey⁴⁷² “se suele pensar que la forma es un atributo tan físico como químico del mundo”. El artículo de Ramsey contiene una discusión interesante, pero lo verdaderamente importante ahora es la declaración citada, que expresa el origen de muchos malentendidos filosóficos: cuando el término “atributo” se entiende para describir alguna característica o propiedad *indispensable* de la materia. Los ejemplos más claros son el espacio y el tiempo: la materia es descrita invariablemente en términos de espacio y tiempo, pero de ninguna manera esto se aplica a la forma: los cuerpos sólidos tienen una forma y un volumen fijo, los líquidos poseen sólo un volumen, pero ninguna forma definida y, los gases, no tienen ni una forma ni un volumen intrínseco, aunque llenan cualquier volumen disponible. Este contraejemplo trivial invalida clásicas declaraciones como “cada cosa física tiene una geometría u otra, pero en la teoría cuántica las nociones de estructura espacial, forma y tamaño parecen convertirse en algo inaplicable y nebuloso”. No es necesario recurrir a la física cuántica para descubrir que algunas entidades materiales (líquidos o gases) no tienen una forma propia, sino que las formas son dictadas por el ambiente (recipiente).

Por supuesto, la analogía es incompleta, ya que una molécula posee alguna (quizá oculta) forma propia mientras un gas o un líquido ninguna. Pero puesto que la forma no es un atributo, no es sorprendente que la forma molecular pueda permanecer latente en algunas situaciones (mientras gira libremente molécula) mientras que en otros contextos juegue un papel

⁴⁷² Ramsey, J.L. (1.997).

crucial fisicoquímico (por ejemplo, en el rayo X el análisis estructural de moléculas orientadas debido a alguna razón, por ejemplo, por el entorno en cristales). Descendamos, por ello, al nivel de las moléculas. Cuando nos encontramos con una molécula que gira libremente, la forma que se suele representar es un promedio de su campo, ya que la forma concreta no es manifiesta. Por ejemplo, hay moléculas dipolares (como H_2O) que rotan libremente y que no pueden poseer un ímpetu dipolar. Cuando aparece un campo externo, o se aproxima otra molécula, la primera de ellas se orienta en el espacio, y su forma o el ímpetu dipolar se manifiesta. El hecho de que la forma molecular se recupere solamente después de la perturbación por algún agente externo ha producido cierta vacilación –sobre todo entre algunos filósofos–, pero debemos tener presente que esta situación no es inusual ni siquiera en la física clásica elemental.

Ya que la forma es una característica (propiedad) transitoria en el macromundo, no hay ninguna razón para esperar (prever) que la situación sea diferente en el micromundo. Muchos fenómenos en la química se entienden en términos de estructuras rígidas, de átomos con formas definidas. Sin embargo, esta no puede ser la razón para tratar la forma como una característica (propiedad) absoluta en el reino de moléculas. La física muestra claramente la aplicabilidad limitada de la noción de forma en los sistemas de varias partículas cuánticas. Una forma surge si dos o más núcleos tienen masas mucho más grandes que las masas de los electrones; pues bien, es precisamente sólo en estos casos cuando la aproximación Born-Oppenheimer es válida. Así, la forma surge como resultado de una aproximación, situación muy común en la estructura de las ciencias “exactas”. Por ello, la fabricación –sin justificación– de conceptos absolutos a partir de aproximaciones es una trampa peligrosa, tanto desde el punto de vista práctico como filosófico. Por el contrario, el reconocimiento del carácter aproximado de los conceptos no los denigra a la par que nos recuerda la existencia de sus límites de aplicabilidad. Los conceptos de aproximación inducidos continúan iluminando y construyendo. En el caso de la química, las limitaciones se pudieron deducir de la física. Pero así como la física trata de dar cuenta de las propiedades básicas de la materia dentro de un radio de alcance muy amplio de condiciones, la química se ha de centrar en unas condiciones muy limitadas. Al concentrarse principalmente en el estudio detallado de la estructura y transformación de los compuestos, debemos tener presente que éstos –los compuestos químicos– no pueden existir bajo ciertas condiciones, por ejemplo, en el plasma caliente del interior de las estrellas. Por lo tanto, no debe sorprender que una

propiedad tal como la forma pierda gradualmente su significado en algunas situaciones y quede, por consiguiente, fuera del alcance de la química.

El estatus ontológico de los modelos moleculares

Vamos a acercarnos al estatus ontológico de la estructura molecular a través de un trabajo de Giuseppe del Re⁴⁷³, de una perspectiva realista –muy cercana como podremos constatar a la de Pauling– que nos va a dar la oportunidad de ver no sólo su posición, sino también poner de manifiesto algunos interrogantes pendientes y ciertos cuestionamientos pertinentes que podrían surgir desde una perspectiva escéptica.

Desde la posición realista de del Re –concretamente desde la aceptación del axioma de un realismo fuerte⁴⁷⁴– no existe conflicto alguno entre la mecánica cuántica y la realidad de la estructura y la forma molecular. Ésta ha sido considerada por los físicos y los químicos como un convencionalismo o un epifenómeno, interpretándose el formalismo matemático de la mecánica cuántica como un criterio esencial de realidad en el mundo submicroscópico⁴⁷⁵. No podemos negar que el realismo –y más el realismo fuerte– ha sido criticado por la filosofía desde su mismo nacimiento e incluso que en la actualidad se da en la ciencia un cierto enfoque idealista, fundamentado principalmente alrededor del papel del observador en los experimentos de la mecánica cuántica. No obstante –se defienden los realistas– es necesario llevar a cabo una cuidadosa distinción entre “observación” y “sujeto percipiente” por un lado y una clasificación doble de las entidades reales. Centrémonos en este segundo punto. En primer lugar debemos distinguir entre *entidades de primera clase* y *entidades de segunda clase*; las entidades de primera clase son aquellas que existen *per se* como un árbol o una molécula; las entidades de segunda clase vienen a ser aquellas que, aún presuponiendo un “portador”, pueden ser consideradas dentro de unos límites como entidades de primera clase, como la psique o el alma

⁴⁷³ Del Re, Giuseppe (1.998)

⁴⁷⁴ Acorde con el cual las cosas, eventos y procesos independientes de nuestra propia existencia pueden ser conocidas individualmente por nosotros dentro de los límites impuestos por nuestros sentidos y nuestro cerebro, existiendo y distinguiéndose de otros objetos.

⁴⁷⁵ Véanse Bohr, Heisenberg, Feynman.

de una persona o un perro⁴⁷⁶. Posteriormente debemos llevar a cabo una distinción a partir de la accesibilidad que tengamos a ellas a partir de la experiencia sensible; tenemos así entidades que pueden ser percibidas tal cual (R1), a través de la experiencia sensible directa o indirecta; y entidades que creemos que existen apoyándonos en evidencias analógicas y lógicas similares a las que encontramos en la naturaleza (R2).

Debemos a la sazón hablar de niveles de realidad, pero ¿Qué queremos decir entonces cuando hablamos del mundo físico? ¿Qué es lo que realmente existe o qué tipo de conocimiento tenemos sobre lo existente? La expresión tradicional “mundo físico” viene a cubrir todo aquello que puede ser percibido directa o indirectamente por los cinco sentidos. Sin embargo, las condiciones de existencia y la naturaleza de los objetos físicos, así como sus propiedades, no pueden depender únicamente de la simple suma de las propiedades correspondientes de sus partes. En otras palabras, la información sobre todos los posibles existentes es en parte *latente* – el problema sigue siendo saber qué características globales son posibles ya que no podemos seguir pensando en la mera suma de las características de las distintas piezas– o *no especificada únicamente* –el hecho de que un sistema específico de n partes dadas está formado por la selección de entre muchas posibilidades– por sus componentes.

Podemos resumir las conclusiones a las que llegan los realistas –como es el caso de Giuseppe del Re al que venimos siguiendo– afirmando que el criterio de existencia de una molécula viene dada por las leyes de construcción formuladas por la teoría de valencia. De este modo, el mundo físico hay que verlo como un conjunto de sistemas de diversos órdenes de tamaño y complejidad. Por ejemplo, una molécula vendría a ser una colección de electrones y núcleos que puede ser descrita tal cual. Sin embargo, debemos tener presente que una descripción a este nivel permite un gran número de posibilidades, ya que la forma en la que los electrones y núcleos se pueden combinar es importante siendo las conexiones dadas determinantes de las propiedades del conjunto.

Ahora bien, si prácticamente desde el amanecer de la filosofía se ha aceptado la realidad de la estructura molecular, tampoco es nueva nuestra la idea de que el conocimiento que poseemos de la misma es, en buena parte, una representación hecha por nuestra mente. Incluso

⁴⁷⁶ Ejemplos que pone el mismo Giuseppe del Re.

ahora, que la ciencia y la tecnología han llevado nuestro conocimiento más allá de los límites del acceso directo a la realidad, nuestras representaciones siguen correspondiéndose a las de objetos que se encuentran en un espacio al que tenemos un acceso directo. Vemos por consiguiente –tal y como tuvimos la oportunidad de constatar en el capítulo dedicado a los orbitales– cómo las analogías siguen desempeñando un papel fundamental. Volvamos al marco realista, para el cual debe aceptarse como conclusión que aquello que llamamos la *estructura de una molécula* es un principio (una entidad de segundo orden) inherente de la realidad molecular y, por consiguiente, verdadera. Además –apuntan– tenemos acceso cognoscitivo a la misma por medio de analogías con modelos macroscópicos –a los que se puede aplicar la noción de estructura fácilmente– otorgándole ciertas características presentes en el modelo por medio de operaciones lógicas y de la imaginación.

Antes de continuar, debemos llamar la atención sobre el hecho de que la cuestión de la existencia de las moléculas es diferente del interrogante por la existencia de la estructura de las moléculas. Para los físicos y los químicos las características de la estructura molecular dependen no sólo de la naturaleza de los átomos, sino también de la manera en la que están conectados. Por consiguiente, uno debe hablar de “propiedades de la estructura molecular” o de una “estructura dependiente de las propiedades de una molécula”. De una forma u otra –insisten los realistas– la existencia de la estructura molecular es una entidad de segunda clase que tiene una existencia por sí. Pero ¿qué significa “existencia” en éste caso? Para ser más precisos ¿Bajo qué argumentos podemos decir que existe la estructura de una molécula? El axioma realista fuerte que tomamos como base requiere que nuestra percepción nos diga algo sobre qué es una cosa, por lo menos en principio y después de un severo análisis crítico: este requisito es el que los físicos como Einstein y Bohr han enfatizado a lo largo de sus grandes avances de la física entre 1.899 y 1.937: aquello que podemos aceptar como real debe ser observable.

Volvemos otra vez al problema de la “observabilidad” ¿qué queremos decir con ello? Por ahora tan solo recordemos que la observación científica suele ser indirecta⁴⁷⁷. En el caso de una estructura molecular esta condición es satisfecha por un gran número y una gran variedad

⁴⁷⁷ En la actualidad se asume que se ha llevada a cabo una observación si hay una única cadena de argumentos que conducen desde el fenómeno realmente observado (opinión, la dislocación de un indicador, etc.) al valor o evento bajo consideración.

de observaciones. Para resumir –afirma del Re–, a menos que se rechace la noción de molécula de Dalton y Avogadro, la estructura molecular y las reglas de valencia dirigidas son hechos de la naturaleza pertenecientes a un nivel de complejidad donde los “objetos elementales” son los átomos de la tabla periódica.

Hasta ahora hemos insistido, nos hemos centrado, en el formalismo matemático y en la interpretación realista llevada a cabo principalmente por los físicos. Sin embargo, no podemos quedarnos ahí, sino que debemos llamar la atención sobre otra cara de la estructura molecular, sobre una perspectiva más química; su *cara geométrica*. De alguna manera este cariz ya está presente –retomando a del Re– en la propuesta de Kekulé y en las obras de Van’t Hoff y Le Bel, quienes hacían de la configuración espacial de las moléculas un tema directo para la reflexión. Para poder referirnos a una representación de la realidad no es suficiente con una descripción topología descrita por una fórmula escrita o la correspondiente gráfica, hace falta una representación geométrica de la estructura molecular. Frente a los más escépticos que podrían insistir en que realmente lo único que ofrece esta geometría es un modelo macroscópico de palillos y esferas, del Re se defienden apelando al rigor científico y la evidencia experimental. Se pregunta por ello “¿por qué todos los resultados de todos los experimentos que hacemos están de acuerdo con la demanda de que las moléculas tengan una estructura en el sentido visto?” Podríamos responderle fácilmente poniéndonos en la piel de un escéptico para quien los experimentos están –como vimos en su momento– diseñados presuponiendo esas estructuras. Como adelantamos en su momento, ya los padres de la mecánica cuántica habían considerado la estructura molecular como un hecho que se correspondía con un marco rígido (o casi-rígido) –llamado *Kerngerüst* en alemán– en dos de los sentidos apuntados anteriormente; topológico, como sistema de conexiones rígidas (o casi-rígidas) formando uno o más trayectorias continuas de cualquier átomo dado a cualquier otro; geométrico, en el sentido de que solamente las rotaciones sobre pares de átomos conectados uno por uno y no más que un enlace son permitidos.

Pero una pregunta sigue en el aire: “Si las partículas no son completamente localizables (dualismo onda-partículas), ¿cómo pueden los físicos cuánticos respetar el descubrimiento de los químicos de que las moléculas tienen una estructura correspondiente relativa a la posición fija de los núcleos y, consecuentemente, una forma? Born y Oppenheimer contestaron a la esta

cuestión a partir de la aplicación de la nueva mecánica cuántica, concretamente de las aproximaciones ya vistas y que, esencialmente, quedaban fundamentadas a partir de un teorema y un corolario:

- Teorema: en el marco de la mecánica cuántica una molécula puede ser tratada como una partícula clásica prácticamente en descanso en lo que concierne al movimiento electrónico.
- Corolario: La mecánica cuántica no está en conflicto con los modelos de la química de una molécula como un marco rígido de núcleos ligados por electrones compartidos.

Para probar este teorema Born y Oppenheimer mostraron que los movimientos nucleares son mucho más lentos que los movimientos de los electrones en campos de fuerzas equivalentes y que las dislocaciones de los átomos de sus posiciones de equilibrio son muy pequeñas con respecto a las distancias de enlace. Este teorema permitía dar cabida a nuevos efectos cuánticos especiales, particularmente en el caso de estados excitados. Fue así como se acostumbró finalmente a hablar de la aproximación Born-Oppenheimer cuando en el estudio de la mecánica cuántica de una molécula se asumía que sus núcleos eran puntos fijos dentro de un campo electrostático.

Giuseppe del Re concluye afirmando que la estructura molecular es un principio topológico y un orden geométrico que pertenece a la realidad de una molécula, y que permite ciertamente distinguir una molécula particular de cualquier otro grupo o moléculas que contienen los mismos átomos. Es un principio en el sentido de que es una entidad unitaria de segunda clase de la que dependen a su vez una gran variedad de propiedades moleculares observables. Sin embargo –reconoce–, sólo puede ser observada, como cualquier otra entidad de segunda clase, a través de estas propiedades que, como decíamos, dependen de él en cuanto que le son inseparables, desaparecen tan pronto como desaparece la estructura y todas ellas cambian de forma más o menos dramática al cambiar la estructura.

Ahora bien, a pesar de todas estas cuestiones que estaban en el aire o por resolver, debemos cerrar este capítulo apuntando –tal y como señala Peter J. Ramberg⁴⁷⁸– que después de 1.914 fueron muy pocos los químicos que se preocuparon por las cuestiones filosóficas relacionadas con la realidad de los átomos y moléculas, por la utilidad de las imágenes teóricas tridimensionales de la estructura molecular.

1.4.2.5. El concepto de resonancia

Una de las grandes aportaciones de Pauling fue la incorporación del concepto de resonancia proveniente –en principio– de la mecánica cuántica al campo de la química. Recién llegado de Europa en su intento por demostrar la forma en la que los nuevos métodos eran un desarrollo lógico de las ideas físicas de las que se habían originado, Pauling afirmaba que “era evidente que los factores responsables mayormente de la valencia química son el principio de exclusión de Pauli y el fenómeno de la resonancia Heisenberg-Dirac”⁴⁷⁹. Sin embargo en 1.956 Pauling defendió la relativa autonomía de la aplicación química de la resonancia:

La teoría de la resonancia química es correcta en el sentido de que su formulación fue llevada a cabo antes de que la mecánica cuántica fuera descubierta... es verdad que la idea de energía de resonancia fue probada entonces por la mecánica cuántica... pero la teoría de la resonancia había ido más allá de la región de aplicación que había sido hecha en cualquier cálculo preciso de la mecánica cuántica y, su gran extensión ha sido casi totalmente empírica a partir tan solo del valor y la guía efectiva de principios cuánticos fundamentales⁴⁸⁰

Lo importante ahora no es dar cuenta de la aparente contradicción entre una posición y otra –sobre todo porque esta no es tan grande– sino del de prestar atención al cambio de énfasis producido. ¿Por qué? ¿A qué se debe? En uno de los primeros artículos sobre mecánica cuántica Heisenberg había representado el estado de los dos electrones del átomo de helio como superposición de estados degenerados, cada uno de ellos correspondiente al estado de un solo

⁴⁷⁸ Ramberg, Peter J. (2.003)

⁴⁷⁹ Cita tomada de Hendry, Robin Findlay (2.003), p. 49.

⁴⁸⁰ Cita tomada de Hendry, Robin Findlay (2.003), p. 49.

electrón⁴⁸¹. Por su parte, Heitler y London habían tratado la molécula de hidrógeno de la misma forma, con una superposición de dos estados equivalentes en los que cada electrón era asignado a un orbital atómico de cada uno de los átomos. Pauling, por su parte, lo que hizo fue vincular estos estados de superposición a las estructuras electrónicas estáticas de Lewis⁴⁸². Gracias a ello la compleja noción mecánico-cuántica de resonancia se hizo fácilmente comprensible, incluso para aquellos químicos que no estaban familiarizados con los detalles matemáticos de la teoría. Sin embargo, debemos hacer notar que en su gran obra de 1.939 *La Naturaleza del Enlace Químico*, dirigida principalmente a lectores no matemáticos, Pauling se apoyó en reglas cualitativas y explicaciones cuantitativas que, una vez más, estaban tan sólo justificadas parcialmente por medio de derivaciones de la mecánica cuántica.

Por ello, a pesar de los esfuerzos de Pauling, su texto fue severamente criticado por algunos de los fundadores de la química cuántica. Ejemplo de ello es R. Mullikan, para quien Pauling era un mero “showman” cuyas aparentes explicaciones simples no eran sino “ordinarias” aunque “populares”⁴⁸³. No se trata esta de un simple intento por parte de un representante del método orbital molecular por impugnar el método rival de la valencia de enlace; lo inquietante es que la explicación de Pauling del enlace de valencia era excesivamente precipitada y amenazaba con poner a la nueva disciplina de la química cuántica de espaldas al apelar a características arbitrarias acudiendo a un esquema aproximado esencialmente matemático. El estatus explicativo de la resonancia fue incluso cuestionado por aquellos que habían propuesto el modelo de valencia de enlace al considerarlo un artefacto “hecho por el hombre”, un esquema particular, un método de aproximación *ad hoc*. Pero Pauling no estaba de acuerdo con que los enlaces y la resonancia pudieran estar separados en ese sentido. Ejemplo de ello lo encontramos en la tercera edición de la *Naturaleza del Enlace Químico* (1.960) –que incluye un nuevo capítulo titulado “Resonancia y su significado para la química”– donde Pauling enfatizaba la continuidad entre este concepto y la noción clásica de tautomerismo. De igual modo, en el artículo “Fifty Years of Progress in Structural Chemistry and Molecular Biology” (1.970), hace una clara defensa de la idea de la resonancia por medio de sus relaciones con la teoría estructural clásica:

⁴⁸¹ El término “resonancia” surgió de una analogía formal entre degeneración mecánico-cuántica y la interacción de un par de osciladores.

⁴⁸² Park, B.S. (1.999)

⁴⁸³ Park, B.S. (1.999), note 27, p. 28.

Podemos decir, apoyándonos en la evidencia experimental, que el ciclohexano es un sistema molecular que está conformado por seis núcleos de carbono, diez de hidrógeno y cuarenta y seis electrones. Además, también se puede demostrar experimentalmente que el ciclohexano tiene por distancias promedio entre sus núcleos 133 picómetros, 154 pm y otros valores pertinentes cuando la molécula se encuentra en su estado basal. No obstante no podemos sustentar mediante el experimento un modelo del ciclohexano que se base en un enlace doble de carbono-carbono, cinco enlaces simples de carbono-carbono y diez enlaces simples de carbono-hidrógeno; estos enlaces son artefactos teóricos, idealizaciones, que han ayudado a los químicos durante los últimos cien años a desarrollar la conveniente y muy importante teoría clásica estructural de la química orgánica. La teoría de resonancia es una extensión de esa teoría y se cimenta en las mismas idealizaciones de enlaces entre átomos tal y como lo hace la teoría estructural clásica, excepto que al describir a la molécula de benceno utiliza dos arreglos de enlaces en lugar de uno solo.⁴⁸⁴

Para Pauling, las estructuras clásicas en general, y el doble enlace en particular, estaban bien sustentadas por medio de una gran variedad de evidencias físicas y químicas siendo la teoría de la resonancia una extensión de éstas. Como base del enlace, la resonancia era un desarrollo directo de las teorías clásicas de valencia y, por consiguiente, era parcialmente independiente de la mecánica cuántica. De ahí, que la resonancia no pudiera ser considerada como un mero producto humano, sino como algo real. De no ser así y sin una rigurosa explicación mecánico-cuántica de los enlaces dobles, la química podía volver a perderse su cara explicativa⁴⁸⁵.

Críticas al concepto de resonancia: Coulson

Pero como veíamos, este concepto no estuvo exento de críticas. Una de las más patentes e importantes fue la llevada a cabo desde el modelo de orbitales moleculares por Coulson – principalmente– en su texto *Valence...*⁴⁸⁶. Si bien los trabajos de Coulson suelen ser muy específicos, en esta obra se muestra muy general y abarcante; incluye –aunque Pauling no había hecho algo parecido con la teoría orbital molecular en su texto *The Nature of Chemical Bond*– capítulos dedicados al método de enlace de valencia; incorporó comentarios del mismo Pauling en la segunda y posteriores ediciones; al igual que Slater, incluyó comparaciones entre los dos

⁴⁸⁴ Pauling, Linus (1.970), p. 999.

⁴⁸⁵ Lo que supondría quedar nuevamente reducida a ciencia descriptiva.

⁴⁸⁶ Coulson, C.A. (1.961)

métodos, pero a diferencia de éste, su ecumenismo no minó la autonomía explicativa de ambos modelos. Ambos esquemas –señaló en su momento–, introducen grandes aproximaciones compuestas por “limitaciones en la cantidad de cálculos que son valiosos” y cuyo valor está en “la comprensión cualitativa y no en el cálculo cuantitativo”. A pesar de su equivalencia en los límites de los cálculos sofisticados, las aplicaciones prácticas podían frecuentemente divergir, por ello, tan sólo en “aquellos casos en los que ambas teorías predican conclusiones similares, se podía creer que las conclusiones fueran correctas”⁴⁸⁷.

Como defensor y contribuidor de la teoría orbital molecular, podría esperarse de Coulson que llevara una fuerte crítica a la teoría del enlace de valencia. De hecho afirmó en muchas ocasiones que la resonancia no era un fenómeno real, sin embargo en 1.947 escribió un texto que se hizo muy popular y que, en términos muy generales, se mostraba muy comprensivo con la aplicación de explicativa de la resonancia⁴⁸⁸:

Surge un último interrogante: ¿la resonancia es un fenómeno real? La respuesta es un no contundente. Para ver por qué, supongamos al benceno con dos estructuras de Kekulé; no podemos afirmar que dicha molécula posea una estructura sobre otra, ni siquiera que oscila entre ambas. De hecho existe sólo el enlace aromático carbono-carbono, o, en términos matemáticos, hay una única solución a la ecuación de onda de Schrödinger que describe el movimiento de los electrones. La resonancia es una manera de desmenuzar ésta; debido a que la solución completa es demasiado complicada la resonancia es una manera –de entre otras posibles– de describir aproximadamente la solución. Es un mero “cálculo”, si por cálculo entendemos un método de cómputo que no tiene empero un significado físico real. La resonancia ha madurado como teoría porque los químicos se han acostumbrado demasiado a la idea de superponer diversas estructuras específicas cuyos elementos base son los enlaces simples o dobles que son fáciles de visualizar⁴⁸⁹.

Coulson admitía que la resonancia había sido muy utilizada para llevar a cabo correlaciones e incluso explicar y predecir un gran número y variado cuerpo de experiencias químicas. Al igual que Pauling, Coulson estaba de acuerdo en que el enlace químico era una noción teórica y vinculó la resonancia al enlace clásico, si bien no aceptó que tal vínculo pudiera utilizarse para salvar automáticamente la resonancia. Sin embargo –para concluir esta

⁴⁸⁷ Coulson, C.A. (1.961), note 45, p. 158. En Hendry, R.F. (2.003), p. 53.

⁴⁸⁸ Si bien sus conclusiones remarcaban un fuerte escepticismo que tendremos la oportunidad de ver.

⁴⁸⁹ Coulson, C.A. (1.947), p. 47. Cita extraída de Hendry, R.F. (2.003), p. 52.

pequeña contextualización–, debemos llamar la atención sobre el hecho de que muchas de las dudas presentes en Coulson son en gran medida injustificadas e inmotivadas. Y es que el escepticismo que muestra podría aplicarse igualmente a los electrones, átomos e incluso moléculas. Ahora bien, su escepticismo acerca del enlace no es solamente cuestión de detectabilidad u observabilidad, sino también de idealización, como defendió después de 1.970. Además, Coulson era menos optimista que Pauling sobre el papel del enlace en la teoría química, preguntándose muchas veces si la química podría ser demasiado pequeña para dar cuenta completa de este problema y si era necesario “algo más grande”⁴⁹⁰. En su obra *Valence* expone –valga para concluir esta pequeña contextualización–, en términos afines a la química, la explicación de la aproximación molecular, especialmente en el ámbito de la química orgánica, donde la propuesta del enlace de valencia había sido hasta ese momento más exitosa.

⁴⁹⁰ Hendry, R.F. (2.003), p. 53.

1.4.3. ATENEA FRENTE A ASCLEPIO

Filosofía de la biología y la medicina

1.4.3.1. Filosofía de la biología

Cuando Linus Pauling comenzó en la década de 1.930 sus investigaciones en el ámbito de la biología, las ciencias de la vida se veían salpicadas por importantes cuestionamientos internos que, desde el siglo anterior, venían exigiendo la toma de postura por parte del científico. Desde la primera formulación de la teoría celular de Schleiden y Schwann (1.838-39), hasta la aparición en *Nature* del artículo de Watson y Crick sobre la estructura molecular del ADN (1.953), la larga etapa de fundación de la biología contemporánea estuvo acompañada de un intenso cuestionamiento sobre su régimen filosófico. Dentro de los debates llevados a cabo –ligados en la mayoría de las ocasiones a la definición de la propia vida, la herencia (reproducción), la relación forma/función– se escucharon las voces de mecanicistas, vitalistas, irracionalistas, organicistas, reduccionistas, deterministas... Siendo el empirismo lógico – inspirado en el fenomenismo de Mach, el primer Wittgenstein, la teoría de la relatividad y la teoría cuántica– la voz hegemónica en la génesis de la *filosofía de las ciencias inductivas* y, por ello, en la *filosofía de la biología*.

Las cuestiones fundamentales ante las que el biólogo tenía que enfrentarse giraban en torno a la naturaleza de la vida y el papel que la biología en su explicación: *¿Qué es la vida? ¿En qué sentido puede considerarse la biología una ciencia? ¿Cómo explica la biología el mundo vivo? ¿Cuál es la validez de las explicaciones reduccionistas? ¿Qué papel sigue jugando el determinismo en la nueva biología?* Ante la primera de estas cuestiones se dieron – como señalara E. Mayr⁴⁹¹ – tres grandes respuestas; fisicista, vitalista y organicista.

⁴⁹¹ Mayr, Ernest (1.998)

Fisicismo. La agonía de una materia viva

Ante esta cuestión se dieron –como señalara E. Mayr– tres grandes respuestas, las dadas por los fisicalistas, los vitalistas y los organicistas. Aunque encontramos los primeros intentos de mecanización de la imagen del mundo en los filósofos griegos y el desarrollo tecnológico de finales de la Edad Media y comienzo del Renacimiento, su consolidación podemos situarla en la utilización de las matemáticas como instrumento de refuerzo de la explicación del cosmos – contribuyendo a la mecanización de la imagen del mundo– en las obras de Galileo, Kepler y Newton. En el ámbito biológico encontramos las más claras referencias en las obras de Descartes y La Mettrie. La aplicación a finales del siglo XIX del experimentalismo en biología –que tan buenos resultados mostrara en otros campos– había dado como resultado un notorio cambio en la visión de la realidad y la propagación de un materialismo filosófico que, una vez iniciado en el campo de la fisiología, se extendió por todo el campo de las ciencias de la vida. Esta nueva perspectiva vendría a sustituir a un idealismo que aún subsistía en la embriología, la taxonomía, la anatomía comparada y los estudios que sobre la evolución y la conducta animal entonces se realizaban.

Fue a mediados del siglo XIX cuando la concepción mecanicista de los fenómenos biológicos había asumido un papel importante dentro de la ciencia. Frente a las teorías vitalistas de la primera mitad del siglo, los químicos probaron experimentalmente la posibilidad de obtener de modo sintético un gran número de sustancias orgánicas. Ello significaba que éstas no tenían una naturaleza distinta a la de las sustancias orgánicas. Los fisiólogos, por su parte, fueron capaces de probar que el método experimental era tan posible y fecundo en su campo como en el de la física. Destacaron los nombres de fisiólogos como Franz Joseph Gall, François Magendie y Johannes Peter Müller, pero por encima de todos hay que señalar a Claude Bernard, autor de una de las más válidas obras de metodología de la ciencia de todo el siglo XIX. “Introducción al estudio de la medicina experimental”⁴⁹².

La nueva tendencia antivitalista se vio favorecida por el uso de aparatos cada vez más perfectos para el estudio de fenómenos fisiológicos y las concepciones formuladas por Mayer y

⁴⁹² Para quienes deseen adentrarse en la obra y filosofía de Claude Bernard se recomienda la lectura de la obra de Escarpa Sánchez-Garnica, Dolores (2.004).

Helmholtz sobre las transformaciones energéticas. Pero la teoría que coronó –y concluyó de algún modo– la interpretación mecanicista de los fenómenos biológicos fue la evolucionista, al constituir el principio unificador desde el que dichos fenómenos aparecerían como manifestación de un progresivo y grandioso proceso natural.

La contraargumentación vitalista

Si bien ya en el siglo XVII apareció un gran número de contraargumentaciones frente a diversos aspectos del fisicismo, fue en Alemania –donde más estudios biológicos se llevaban a cabo– donde apareció en el siglo XIX toda una serie de argumentaciones agrupadas bajo la etiqueta de vitalistas. Dicho rótulo resultaba válido en cuanto que las argumentaciones presentadas defendían la existencia de propiedades específicamente biológicas en los seres vivos, pero se mostraba insuficiente en cuanto que no permitía dar cuenta de la gran heterogeneidad existente. Muchas de estas contraargumentaciones quedaron invalidadas durante las primeras décadas del siglo XX a través del concepto de *programa genético*. E. Mayr señala cuatro razones y factores fundamentales del rápido decline del vitalismo en el siglo XX: el vitalismo se veía cada vez más como un concepto metafísico que científico; la creencia de que los organismos estaban formados por una sustancia especial fue perdiendo apoyo; todos los intentos por demostrar la existencia de una fuerza vital no material acababan fracasando; el desarrollo de nuevos conceptos biológicos que explicaban los fenómenos que solían citarse como pruebas del vitalismo (auge de la genética y el darwinismo).

Sin embargo, el fin del vitalismo entre los biólogos dio lugar a dos situaciones curiosas y muy relacionadas con la obra de Pauling. En primer lugar, mientras algunos de los físicos más importantes –como fue el caso de Niels Bohr y E. Schrödinger– empezaron a sugerir que los organismos podían estar regidos por leyes especiales que no se dan en la naturaleza inanimada, muchos biólogos empezaron a ver que ciertos principios recientemente descubiertos de la física –teoría de la relatividad, principio de la complementariedad, mecánica cuántica y principio de incertidumbre– permitían conocer mejor los procesos biológicos. Pues bien, aunque Pauling no era ni físico ni biólogo, debía adoptar una postura.

El organicismo como un mecanicismo no reduccionista

La caída del vitalismo no supuso la victoria completa del fisicismo, sino la aparición de un nuevo sistema explicativo. Haldame sintetiza muy bien el problema ante el que se enfrentaba el biólogo cuando señala que “debemos encontrar una base teórica diferente para la biología, basada en la observación de que todos los fenómenos vitales tienden a estar tan coordinados que expresen lo que es normal en un organismo adulto”⁴⁹³. Dicho modelo teórico, al que vendría a denominarse *organicismo* pone de manifiesto que las características exclusivas de los organismos vivos no se deben a su composición, sino a su organización. Ritter y Bailey definieron así el organicismo como aquel modelo en el que “los todos están relacionados con sus partes [y en el] que no sólo la existencia del todo depende de la cooperación ordenada y la interdependencia de sus partes, sino que el todo ejerce además un cierto grado de control determinista sobre sus partes”⁴⁹⁴.

Vemos así que el organicismo, más que oponerse al mecanicismo del fisicismo se opone a su reduccionismo. Para los reduccionistas⁴⁹⁵ el problema de la explicación se resuelve cuando se logra dar cuenta de los componentes más pequeños que conforman el sistema. De esa forma, en cuanto se ha hecho el inventario de los componentes últimos y se ha determinado la función de cada uno de ellos, se hace posible explicar fácilmente todo cuanto se observe en los niveles superiores de organización. Por su parte, los organicistas parten de la constatación de que los seres vivos poseen una organización, no son resultado del simple amontonamiento de caracteres o moléculas, por lo que su funcionamiento depende por completo de su organización y la interacción mutua entre sus partes. De esa forma, cuando incorporó los conceptos de *programa genético* y *emergencia*⁴⁹⁶, se convirtió en antirreduccionista sin dejar de ser mecanicista.

⁴⁹³ Haldame, J.S. (1.931). Cita extraída de Mayr, E. (1.998), p. 31

⁴⁹⁴ Ritter, y Bailey (1.928). Cita extraída de Mayr, E. (1.998), p. 31

⁴⁹⁵ Debido a la extraordinaria importancia que este concepto he tenido en el desarrollo e interpretación filosófica de la biología, vamos a dedicar en breve una sección exclusivamente a este problema.

⁴⁹⁶ “Concepto de emergencia: en todo sistema estructurado, en los niveles de integración superiores emergen nuevas propiedades que no se habían podido predecir por muy bien que se conocieran los componentes del nivel inferior “[Mayr, E. (1.998),p. 34]

La biología como disciplina científica

Uno de los problemas más importantes con los que ha tenido que enfrentarse la biología es el de su propia constitución como ciencia; su papel e imagen dentro del mundo científico, la singularidad epistemológica de la explicación biológica del mundo vivo y el tipo de causación que podemos encontrar en el ámbito de la vida. Como E. Mayr señalara, el esfuerzo por hacer de las ciencias biológicas auténticas disciplinas científicas ha tenido que enfrentar desde sus orígenes la necesidad de responder a fenómenos y estructuras en muchas ocasiones únicas, y en otras ilocalizables en el ámbito de los objetos inanimados. De ahí, que el acento puesto en el carácter irrepetible de muchos fenómenos o la reivindicación de la importancia de la historicidad de los seres vivos, hubiera hecho que fuera considerada una pseudociencia, empezando a ser tomada en serio sólo tras la extinción final del vitalismo ontológico y dogmático⁴⁹⁷. Por ello, fueron esenciales las aportaciones de Goudge (1.961), Hull (1.975), Nitecki y Nitecki (1.992) y otros autores al señalar el enfoque histórico-narrativo como el enfoque más oportuno científica y filosóficamente para explicar fenómenos únicos. De esa forma –proponen– la explicación biológica puede dar cuenta de la pluralidad de factores, la cadena causal que hace posible la inferencia retrospectiva de la causalidad, y la existencia de causas próximas y remotas que dan cuenta de un fenómeno biológico. Sin embargo, estas reivindicaciones autonomistas pueden resultar miopes si no consideramos el posterior desarrollo que en las últimas décadas han llevado a la biología a convertirse, tras dejar atrás una imagen provincialista –de la que participó Pauling–, en una disciplina con aires conquistadores.

De provincia a imperio

Alexander Rosenberg propuso en 1.985 un modelo de filosofía de la biología a partir del cual se hacía posible distinguir dos perspectivas básicas en torno al papel que la biología había ocupado dentro de las ciencias en el siglo XX. Se trataban de las perspectivas provincialistas y autonomistas. Sin embargo, el papel e influencia que la biología ha ido adquiriendo en las últimas décadas– y del que el trabajo de Pauling es responsable en gran medida –nos obligan a

⁴⁹⁷ Mayr, Ernest (1.982), p. 35

corregirla siguiendo la línea inaugurada por González Recio⁴⁹⁸, para quien debemos hablar de tres perspectivas básicas: el provincialismo, el autonomismo y el colonialismo. Tomadas las dos primeras como podemos ver de Alexander Rosenberg⁴⁹⁹, González Recio introduce la perspectiva colonialista para referirse “a un modo de entender la biología y sus dimensiones filosóficas que me parece identificable, activo e influyente, y que Elliot Sober⁵⁰⁰ ha definido como *extensiones* de la teoría de la evolución”⁵⁰¹. Este modelo –al igual que el de Rosenberg– nos permite situar muy bien a Pauling dentro de la primera de las tres perspectivas básicas bajo las que se desarrolló la filosofía de la biología durante el siglo XX: el provincialismo⁵⁰². Esta propuesta mejora la de Sarkar por varios motivos⁵⁰³, de los que destacamos especialmente la incorporación del problema del reduccionismo en la perspectiva provincialista. Bajo este modelo el biólogo o el filósofo –como es el caso de Pauling tal y como trataremos de demostrar– considera a la biología una provincia de la física. Así, su desarrollo depende de la aplicación de los métodos, patrones explicativos y sistemas teóricos de la física y la química orgánica. Por esa razón, la teoría biológica no debe sólo ser compatible con la física, sino reducible a ella: su profundidad y fertilidad científica, así como su valor de ciencia explicativo-predictiva dependerá del grado en el que sea capaz de aplicar y extender dentro de su campo las teorías de la física. Ejemplos de esta postura la encontramos en el positivismo de Hempel, en el realismo científico Schrödinger –de quien toma nota Pauling– y Crick quien vendría a decir que:

El fin último de la corriente moderna en biología es [...] explicar *toda* la biología en términos de física y química. Hay buenas razones para ello en la medida en que la química y partes importantes de la física, como la mecánica cuántica, nos proveen de un fundamento cierto sobre el que construir la biología.⁵⁰⁴

⁴⁹⁸ González Recio, José Luis (2.007), p. 5

⁴⁹⁹ Rosenberg, A. (1.985), pp. 13-36

⁵⁰⁰ Sober, E. (1.996), pp. 295-343

⁵⁰¹ González Recio, José Luis (2.006), p. 5

⁵⁰² La perspectiva provincialista de Pauling se pone de manifiesto al examinar sus trabajos en torno a las macromoléculas orgánicas. Sin embargo, cabe señalar, que el trabajo del químico estadounidense y su contribución a la consolidación de la biología hizo posible el despegue que vivió este campo durante la segunda mitad del siglo XX y, con ello, el desarrollo de las otras dos perspectivas biológicas.

⁵⁰³ De los que González Recio da cabida cuenta. Ver González Recio, José Luis (2.006), pp. 5-6

⁵⁰⁴ Crick, Francis (1.966), 10. Cita extraída de González Recio, José Luis (2.006), p.7

Vemos así como esta perspectiva provincialista reinó en el ámbito biológico durante el segundo tercio del siglo XX, justo cuando Pauling desarrollaba su obra en biología⁵⁰⁵ y medicina. Sin embargo, el éxito del mecanicismo fisicalista reintroducía –como ya apuntamos– un viejo problema epistemológico, el del reduccionismo. Aunque el organicismo vendría a dar solución en buena medida a este problema, éste seguía siendo una de las dificultades más importantes en el contexto bajo el cual Pauling llevó a cabo su obra. Cuestión a la que él mismo se tuvo que enfrentar como simpatizante de una postura mecanicista, fisicalista y provincialista de la biología.

El problema del reduccionismo

A la hora de habérselas con la materia biológica una de las primeras características que nos sorprende de la misma es su extraordinaria complejidad. Con una organización jerárquica que va de los átomos y las moléculas, pasando por las células, tejidos, organismos individuales, hasta las poblaciones y los ecosistemas, su estudio exige el desarrollo de distintas disciplinas que se concentren en uno o varios de estos niveles. El método analítico, que tanto éxito había tenido en el mundo físico, empezó a aplicarse –gracias al esfuerzo de investigadores como el mismo Pauling– al mundo de la biología con el fin de aclarar muchos de los fenómenos biológicos a nivel atómico y molecular. El éxito de este método, caracterizado por la biología molecular, llevó a muchos científicos a ver en el mismo la única investigación biológica esencialmente significativa. Sin embargo, frente a esta actitud reduccionista, muchos biólogos conservadores vieron en el método analítico una excelente forma de hacer buena física o química, pero algo poco práctica a la hora de atender los problemas biológicos más importantes. Ambas posturas extremas se presentan en la actualidad –como ya vimos– insuficientes para poder dar cuenta de los verdaderos problemas que la biología debe abordar. Sin embargo, ponen y pusieron de manifiesto ya entonces la existencia del llamado “problema del reduccionismo” en biología. A pesar de los esfuerzos de Pauling y otros investigadores por explicar el fenómeno de la herencia en términos físico-químicos, ¿son realmente los procesos y entidades físico-

⁵⁰⁵ Dentro del campo de la genética es oportuno destacar el trabajo de Woodger, quien intentó ofrecer ya una axiomatización de la genética clásica hacia 1.937 concibiendo el germen de lo que se entendería más tarde como modelo estándar de la reducción teórica.

químicas la base de todos los fenómenos vivientes? ¿Debemos buscar siempre explicaciones de cuanto acontece en el mundo biológico a partir del estudio de los procesos fundamentales en los niveles inferiores de complejidad? ¿Las teorías y leyes experimentales formuladas en un campo de las ciencias biomédicas pueden considerarse casos especiales de teorías y leyes formuladas en algún otro campo científico como la física o la química? Cada una de estas cuestiones, de estos interrogantes, corresponde a uno de los tres campos o niveles desde los cuales se llevaron a cabo las discusiones en torno al reduccionismo en biología: el ontológico, el metodológico y el epistemológico. De forma simple podemos caracterizar brevemente cada uno de estos campos en los siguientes términos.

La pregunta central en torno a la cual gira el debate en el campo ontológico vendría a ser: *¿Los procesos y entidades físico-químicas son la base de todos los fenómenos vivientes?* Para Dobzhansky la respuesta a esta cuestión es muy sencilla “la mayor parte de los biólogos... son reduccionistas [ontológicos] en tanto que ven la vida como un ejemplo de procesos físicos y químicos altamente complejos, esencial e improbable. Para mí, éste es el reduccionismo «razonable»”⁵⁰⁶. Frente a los vitalistas, para quienes la vida es el efecto de un principio o entidad inmaterial al que se suele denominar “fuerza vital”, “entelequia”, “élan vital”, “alma”, “energía radial” o similares, el reduccionismo ontológico vino a afirmar que las leyes de la física y la química se deben aplicar plenamente a todos los procesos biológicos a nivel de los átomos y las moléculas. El vitalismo, aún con cierta presencia cuando Pauling comenzó su carrera científica, se empezaba ya a ver, bajo el esquema del positivismo, como una vía sin salida en la fisiología de la biología; un principio inmaterial no puede ser objeto de estudio de la ciencia, ya que no permite desarrollar hipótesis científicas verdaderamente comprobables.

Desde una perspectiva metodológica, las cuestiones principales giraban en torno a la estrategia de investigación o a la adquisición del conocimiento mismo. Francisco Ayala señala que,

en el estudio de los fenómenos vitales, ¿hemos de buscar siempre las explicaciones investigando los procesos fundamentales a niveles inferiores de complejidad, y finalmente a nivel de átomos y moléculas, o debemos buscar una comprensión basada en el estudio de niveles de organización tanto inferiores como

⁵⁰⁶ Ayala, Francisco J. y Theodosius Dobzhansky (1.983, Eds.), p. 23

superiores? ¿Existen algunas respuestas generales a estas preguntas, o resultan apropiadas distintas respuestas en disciplinas biológicas distintas?⁵⁰⁷

Es precisamente en este nivel donde suelen darse las dos posturas extremas que hemos visto representadas anteriormente. Es decir, tanto los reduccionistas e irreduccionistas más extremos discuten principalmente en torno a la validez y extensión de las explicaciones físico-químicas en el ámbito de las ciencias biomédicas.

Finalmente llegamos al campo epistemológico, lugar donde encontramos precisamente uno de los debates filosóficos más importantes, influyentes y controversiales: *¿Las teorías y leyes experimentales formuladas en un campo de la ciencia pueden considerarse casos especiales de teorías y leyes formuladas en algún otro campo científico?* Si esto es así –señala Francisco Ayala⁵⁰⁸–, la primera rama de la ciencia queda reducida a la segunda. La ciencia, entendida como la organización sistemática del conocimiento que se tiene del universo sobre la base de hipótesis explicativas verdaderamente comprobables, ve en la integración de teorías científicas un camino de simplificación y aumento de su poder explicativo. Por ello, la reducción de distintas teorías en una más comprensible parece ajustarse al objetivo de la ciencia. De hecho, encontramos numerosos ejemplos en la historia de la ciencia de importantes y revolucionarias reducciones de toda una rama de la ciencia a otra. Podemos ver así, como varias ramas de la física y la astronomía fueron unificadas en gran medida reduciéndolas en unas pocas teorías muy generales, tal y como ocurrió con la mecánica cuántica y la relatividad. En el caso de la química, varias de sus ramas fueron reducidas y llevadas al campo de la física después de descubrirse que la valencia de un elemento guardaba una relación sencilla con el número de electrones del orbital externo del átomo. Por su parte, en el campo que ahora nos ocupa, el de la biología, muchas de las explicaciones dadas de los fenómenos observados han sido reducidas a la química, sobre todo tras el descubrimiento de la estructura y el comportamiento de ciertas moléculas como las proteínas –precisamente por Linus Pauling– el ADN, el ARN y ciertos enzimas⁵⁰⁹. Protagonista de este reduccionismo, así como del cambio

⁵⁰⁷ Ayala, Francisco J. y Theodosius Dobzhansky (1.983, Eds.), p. 11

⁵⁰⁸ Ayala, Francisco J. y Theodosius Dobzhansky (1.983, Eds.), p. 12

⁵⁰⁹ Si bien es cierto –tal y como señala K. Popper– que estos reduccionismos no tuvieron un éxito rotundo, sí que constituyeron algunos de los logros más notables de la ciencia.

orquestrado en la forma de investigar la herencia y la materia viva, el éxito de esta y otras reducciones, indican para Linus Pauling que el objetivo final de toda disciplina biológica es el de explicar sus teorías y leyes experimentales como casos especiales de leyes físicas y químicas.

Tal vez sea este, el del reduccionismo en sus tres formas o campos, el problema filosófico más importante que encontremos en la obra de Linus Pauling ligada tanto a la biología y la medicina como a la química. De hecho, algunos de los debates actuales, de la discusión filosófica que presenciamos en nuestros días parecen estar ligados a estos cuestionamientos. Si bien nos vamos a centrar en el contexto bajo el cual el químico estadounidense desarrolló su obra, no queremos dejar pasar la oportunidad de mostrar la relevancia que los debates entonces llevados a cabo, así como la postura de Pauling reflejada en su obra y algunas de sus declaraciones, tienen en la actualidad. De igual modo que el actual debate en torno a la posibilidad de encontrar unos fundamentos de la química más allá de la física centra la atención de grupos tan importantes como la *International Society for the Philosophy of Chemistry*⁵¹⁰, algo parecido ya se dio en los ámbitos de la biología y la medicina.

1.4.3.2. Las huellas del Centauro Quirón⁵¹¹

Las huellas que la reflexión filosófica dejó en la medicina decimonónica pronto pudieron sentirse en el siglo XX. Ligados en buena medida a los primeros pasos de la biología del nuevo siglo, la medicina debía hacer frente a antiguos y nuevos interrogantes relacionados frecuentemente con la definición de enfermedad. Especialmente significativa fue la extensión y dimensión que había alcanzado este concepto durante el siglo anterior debido, principalmente, a las conquistas bioquímicas alcanzadas. Entre éstas cabe destacar el descubrimiento de las

⁵¹⁰ Entendemos en ese sentido que es de gran importancia releer en nuestros días la obra de Pauling, ya que fue precisamente él uno de los científicos que con mayor éxito asentó los pilares sobre los que se levanta la actual química en la nueva física, llegando incluso a definir su disciplina como *un fenómeno cuántico*.

⁵¹¹ **Centauro Quirón** (o **Queirón**), hijo de Cronos y de Filira, fundador de la Medicina, famoso por su bondad, sabiduría, justicia y pericia. Sabio, prudente y de buen carácter, Quirón disfrutó de la protección y amistad de Apolo –razón por la que le fue confiado la educación de su hijo Asclepio– y en toda Grecia de una excelente reputación.

vitaminas⁵¹², los virus y la penicilina. Cabe destacar igualmente la influencia que tuvo el desarrollo –ya en los inicios del siglo XX– de la genética⁵¹³ como consecuencia de las investigaciones que sobre el evolucionismo se llevaron a cabo a partir, sobre todo, de la explicación teórica de las leyes de Mendel⁵¹⁴ y el desarrollo de las investigaciones de De Vries sobre las mutaciones. Posible gracias a la utilización sistemática de microscopios más avanzados, la aplicación de la coloración de células y el uso de aparatos de precisión de selección de células, se trataron de investigaciones cargadas de cuestionamientos epistemológicos, ontológicos y metodológicos. Interrogantes todas ellas ligadas en buena medida con el fin del espontaneísmo puesto de manifiesto en los trabajos de Louis Pasteur, la hipótesis de la selección natural y los debates en torno al mecanicismo.

Muchos de estos problemas, dimensiones y perspectivas de las que debía dar cuenta el médico e investigador se encuentran presentes en la obra de Linus Pauling. Como veremos en la sección dedicada a la obra del químico de Pórtland, la redefinición del concepto de enfermedad y la práctica médica e investigadora constituyeron una parte muy importante de su trabajo en el ámbito médico. En la presente sección vamos a ver algunas notas del contexto filosófico que marcaron el trabajo de Pauling en el ámbito de la medicina. Al igual que ocurriera en sus trabajos de química y biología, sus inicios en el ámbito de la medicina estuvieron marcados por el pensamiento positivista. Pero así como la perspectiva positivista que inundó la medicina se hizo patente en los trabajos de Pauling, su crisis también se hizo sentir. De ahí que sea necesario señalar no sólo cómo el positivismo influyó en el desarrollo de la medicina del siglo XX, sino también algunas de las alternativas que tras su caída se presentaron.

Medicina positivista

Aunque fue en el siglo XIX cuando la medicina alcanzó el estatuto *científico* conforme al modelo fisicalista de la ciencia moderna, algunos autores reconocen el famoso *Flexner' s Report* como su *partida de nacimiento* oficial. Orientadora de la medicina académica de buena

⁵¹² A partir de los trabajos de Casimir Funk.

⁵¹³ En cuyo posterior desarrollo participara años después Pauling.

⁵¹⁴ Por medio de la aplicación del cálculo estadístico al estudio de las posibles uniones entre los genes de células germinales femeninas y masculinas.

parte del siglo XX en su trípode de investigación, enseñanza y asistencia⁵¹⁵, la etapa Flexner supuso la edad dorada de la medicina, al darse durante la misma la constitución de la misma como ciencia natural aplicada (modelo biomédico). Caracterizado por un reduccionismo biológico y un realismo nosológico que considera el cuerpo humano como el objeto propio del conocimiento médico (iatrocentrismo somatológico), desde dicha perspectiva –bajo la cual se llevó a cabo la primera etapa de Linus Pauling– se apostaba por un *conocimiento científico-natural* desde el punto de vista gnoseológico y epistemológico. Este modelo tenía que enfrentarse –como señalamos– con uno de los problemas más importantes que se vivieron durante las últimas décadas del siglo XIX y las primeras del siglo XX: el concepto de enfermedad junto a las nociones y prácticas diagnósticas, clínicas y terapéuticas, necesitaban ser revisadas. Desde el punto de vista práctico, la *clínica (clíniké techen)* que había sido un arte para Hipócrates, una medicina de bibliotecas en el Medioevo, una medicina de hospitales durante la Ilustración, fue durante el paradigma positivista, ante todo, una medicina de laboratorio: la nueva medicina tenía que basarse en el empleo del método científico. Afín a la gnoseología de la nueva ciencia, la investigación médica debía ser analítica cuantificando, calificando y distinguiendo aquellos datos o estudios que ofrecieran la mayor seguridad gracias a la superioridad práctica que ofrecía el conocimiento estadístico. De ahí, que la medicina vista como un saber y una praxis fuera, ante todo, una tecnología. Una técnica usuaria del conocimiento científico que tenía como fin salvar vidas. De ahí, que aunque hiciera uso de ellas, su función principal no fuera la de encontrar regularidades o leyes científicas⁵¹⁶.

La crisis de la razón médica positivista

Pero uno de los problemas pendientes más importantes quedaba aún por resolver. El positivismo no alcanzaba a ofrecer una definición general compartida de enfermedad, un concepto que engarzase dentro de una teoría general de la salud haciendo uso de condicionantes

⁵¹⁵ Este reporte –cuyo estudio duró dieciocho meses– comprendía dos partes. En la primera de ellas Flexner llevaba a cabo una exposición histórica y una descripción del estado de la educación médica en ese momento en los EEUU. En la segunda parte, se presentaba una descripción y evaluación de cada una de las escuelas médicas estudiadas. Su aparición fue un parteaguas en la historia de la educación médica.

⁵¹⁶ Esta es, como veremos, una de las principales discrepancias que encontramos con la propuesta realista de Pauling.

lógicos y axiomáticos. Pronto, inspirada por lo ocurrido en el ámbito de la física cuántica, la nueva filosofía de la medicina abandonaba la idea de alcanzar un conocimiento completo de la realidad, una verdad objetiva o la comprensión de un orden natural inmutable. Este viejo sueño era reemplazado por una representación de nuestro conocimiento de esa realidad: *el conocimiento* –vendría a decir– *está en el ojo del observador*. De ese modo la medicina posmoderna se vuelve *comprensiva* (holística o integralista), *interpretativa* (hermenéutica) y *evaluativa* (normativista).

La filosofía de la medicina es una ciencia que considera a la medicina en su totalidad. Estudia su papel en la humanidad, en la sociedad, en el estado y en las escuelas médicas. Abarcando de un vistazo la totalidad de la historia de la medicina.⁵¹⁷

Fruto de la crisis de la razón positivista médica, que fue tanto teórica como práctica o moral, aparecieron nuevos modelos que intentaban dar respuesta a tres órdenes de problemas; ontológico, epistemológico y axiológico a través de tres ramas o áreas; la antropología, la epistemología y la ética. De ese modo, vendría a decir Temkin, “la filosofía de la medicina debe presentársenos con una lógica médica, una ética médica y una metafísica médica”⁵¹⁸. Encontramos así dos orientaciones predominantes, una más crítica, enfocada en el análisis conceptual y el lenguaje médico –por ejemplo salud y enfermedad– o el estatuto de las nosologías⁵¹⁹, y otra con una orientación más sistemática y especulativa centrada en el análisis fenomenológico del cuerpo (somatología), hermenéutico de la existencia humana y la experiencia médica (antropología filosófica). La medicina del siglo XX supo poner de manifiesto cómo el trabajo y la comprensión médica estaba condicionada por presupuestos de carácter epistemológico y ontológico, pero también por el contexto político y social. Resultado de ello fue la elaboración de diversos modelos que, a partir de posturas epistemológicas

⁵¹⁷ Szumowski, (1.949)

⁵¹⁸ Temkin, (1.956)

⁵¹⁹ **1. f. Med.** Parte de la medicina que tiene por objeto describir, diferenciar y clasificar las enfermedades (RAE)

distintas, proponían un replanteamiento de la metodología de investigación médica así como una redefinición del conocimiento científico y clínico ante la nueva realidad médica⁵²⁰.

La crisis del positivismo dio como resultado la aparición de nuevas corrientes y perspectivas. Podemos agrupar éstas bajo dos modelos que se corresponden con sendas etapas marcadas fuertemente por el contexto social y político⁵²¹ bajo el que se desarrollaron. El primero de estos modelos fue resultado principalmente de la creación en 1.946 de la Organización Mundial de la Salud (OMS) –un proyecto político-sanitario desde el que se asumía las denominadas ciencias sociomédicas (psicología, sociología, antropología) postulando un modelo biosocial– mientras que el segundo –con una perspectiva más humanista– fue fruto esencialmente del cambio de modelo sanitario que en la década de 1.970. Cambio que fomentó la transición desde una medicina curativa a una preventiva orientada a la comunidad (modelo humanista)⁵²². Estas dos etapas o perspectivas –con importantes implicaciones pedagógicas– intentaron poner de manifiesto y superar el empobrecimiento de la noción de realidad que el positivismo llevaba consigo: la realidad no es como la ciencia la presenta. La idea de que el conocimiento empírico de los hechos, la elaboración teórica y la manipulación de los mismos, son imprescindibles en la mejora de las condiciones de vida humana, es irreal, reduccionista y peligrosa.

⁵²⁰ Como tendremos la oportunidad de ver, ninguno de estos problemas fue ajeno al trabajo de Pauling. Su contribución en el nacimiento y posterior desarrollo de la medicina molecular y ortomolecular favoreció la reconceptualización de enfermedad así como un replanteamiento del análisis y la terapia clínica.

⁵²¹ Consideramos que la obra científica de Linus Pauling refleja en buena medida las tres etapas o modelos anunciados (positivista, científico-social y humanista). Sin embargo, hemos tratado con una extensión un poco mayor la primera de ellas, ya que es el paradigma desde el que Pauling partió –y que vemos reflejado con sus matices en todos los ámbitos por los que su obra transitó– y en donde se plantean de forma más clara cuestiones epistemológicas. De extraordinaria importancia son las otras dos al resaltar la multiplicidad axiológica implícita en la medicina. Sin embargo, un análisis más profundo de éstas nos alejaría en exceso de los objetivos de este trabajo.

⁵²² Encontramos en este giro hacia la previsión y orientada a la comunidad un reflejo de la posición que Pauling mantuvo durante sus últimos años de vida. La medicina ortomolecular, muy criticada por la medicina ortodoxa –donde aún reinaba el positivismo (y enormes intereses empresariales)– defendía un modelo de medicina preventivo y– como vemos en los programas radiofónicos que tan famoso le hizo– social.

CAPITULO II. QUÍMICA ESTRUCTURAL MODERNA

INTRODUCCIÓN

Tal y como señalamos en su momento este trabajo de investigación está dedicado al estudio de la obra, del trabajo científico que Linus Pauling desarrolló desde 1.927 hasta sus últimos días. En el capítulo que ahora nos ocupa, y al que hemos dado por título *Química estructural moderna*, vamos a analizar el trabajo del químico estadounidense en torno a dos de los problemas más importantes con los que tenía que vérselas la química de primera mitad del siglo XX: la estructura molecular y la naturaleza del enlace químico. Pauling consagró sus esfuerzos durante doce años –de 1.927 a 1.939– al desarrollo de una teoría que diera cuenta de ambos problemas. Gracias a ello vieron la luz durante esta etapa algunos de sus más importantes artículos y libros, obrándose paralelamente su consolidación dentro del mundo académico y la élite científica. La importancia de los trabajos realizados durante este periodo queda de manifiesto al constatarse la forma en la que éstos constituyeron la base sobre la que se levantaron posteriormente la moderna química estructural y buena parte de la biología y la medicina molecular.

Este periodo de investigaciones y trabajos en torno a la estructura molecular y la naturaleza del enlace químico comenzaron oficialmente con su retorno al Caltech tras el fin de su beca de investigación en Europa. Ciertamente es que sus inquietudes, su preocupación por ambos temas eran ya muy antiguas en su aún corta biografía. Sin embargo, la nueva forma en la que replanteó estos problemas era heredera directa de los conocimientos adquiridos, las cuestiones planteadas y las nuevas intuiciones surgidas durante su estancia europea, especialmente de sus primeros acercamientos a la mecánica cuántica.

2.1 PRIMEROS INTENTOS DE APLICACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA A LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS QUÍMICOS

Tal y como había sido programado antes de su partida de los EEUU, el fin de su viaje era –principalmente– perfeccionar la aplicación de la técnica de difracción de rayos X en la determinación de estructuras moleculares. Tras el descubrimiento en 1.922 de dicha técnica, su aplicación a la resolución de la estructura molecular de cristales había sido exitosamente aplicada por W.H. y W.L. Bragg, Wyckoff, Westgren, Goldschmidt, Dickinson y el mismo Pauling entre otros. Sin embargo, así como el avance conseguido en 1.926 en la determinación de estructuras cristalinas de sales simples había sido muy grande, eran aún muy pequeños los logros obtenidos en torno a la arquitectura de sustancias más complicadas. Pauling estableció entonces una decisiva relación con el físico Goudsmit, fruto de la cual vio la luz un libro⁵²³ y su convencimiento definitivo de la necesidad de desarrollar un nuevo tipo de química, basada en la mecánica cuántica, que permitiera dar cuenta de cómo la estructura molecular y el comportamiento químico –incluido el enlace químico– estaban íntimamente relacionados⁵²⁴.

Pero Pauling no era el único que tenía un profundo interés por aplicar los nuevos desarrollos de la física teórica al intento de solución de problemas químicos. A finales de la década de los 20, había otros dos jóvenes americanos –John Slater del MIT y Robert Mulliken de la Universidad de Chicago– que podían combinar una comprensión profunda de la nueva física con ese interés por solucionar cuestiones químicas. Afortunadamente para Pauling, él era quien contaba con una preparación más fuerte en química básica. Sin embargo, la competición directa en el intento de explicar el vínculo químico en términos mecánico-cuánticos venía – como ya hemos visto– del otro lado del océano: Walter Heitler y Fritz London, los dos jóvenes investigadores alemanes con los que había tenido la oportunidad de conversar durante su corta estancia en Zúrich. El trabajo cerca de Erwin Schrödinger había permitido a Heitler y London aplicar por primera vez las ecuaciones de onda de Schrödinger a la cuestión del vínculo químico más simple; la unión que se produce entre dos átomos de hidrógeno. Heitler y London se habían apoyado en la teoría de *energía de intercambio* propuesta por Heisenberg según la cual en el proceso de acercamiento entre dos átomos hay un punto en el que el electrón –con carga negativa– de uno de ellos se siente atraído por el núcleo positivo del otro, ocurriendo lo mismo

⁵²³ Pauling, L. and Goudsmit, S. (1.930).

⁵²⁴ Como veremos en breve, es precisamente en el artículo “The Shared-electron Chemical Bond” (en *Proceedings of National Academy of Science*, Vol. 14, No. 4, pp. 359-62) en donde muestra cómo la mecánica cuántica podía explicar no sólo el enlace químico sino también la configuración tetraédrica del carbón.

con el otro electrón y el otro núcleo. En un determinado momento los dos electrones comienzan a saltar hacia adelante y hacia atrás, entre los dos núcleos, produciéndose el intercambio del electrón en un índice de mil millones de veces por segundo, de tal manera que no puede decirse a qué núcleo pertenece cada uno de ellos. Los científicos alemanes calcularon –a partir de la ecuación de Schrödinger– el punto en el que la atracción que hace posible tal intercambio se equilibra con la repulsión que experimentaban ambos núcleos entre sí. De esta forma demostraban matemáticamente la existencia de un vínculo químico entre una longitud y una fuerza definidas para la molécula de hidrógeno. Evidentemente se trató de un gran triunfo, pero era tan sólo el primero en un campo potencialmente enorme y en el que tan sólo se había dado una respuesta a la molécula más simple posible. Había muchos otros problemas que solucionar, siendo Pauling una de las primeras personas en señalarlo y en comenzar con los intentos. En abril de 1.928 apareció el artículo de Pauling “The Shared-electron Chemical Bond”⁵²⁵ en donde el químico de Portland dibujaba la que llamó *teoría "simple"* de Heitler y London sobre el vínculo químico. Se trataba de un pequeño texto en el que realizaba importantes anotaciones al texto de los jóvenes investigadores alemanes. En estas notas observaba que "en los casos simples la teoría [de Heitler y London] era enteramente equivalente a la teoría del par de electrones compartidos de G. N. Lewis"⁵²⁶. Es decir, para Pauling, el trabajo de Heitler y London no aportaba nada nuevo y su modelo de la molécula de hidrógeno no tenía un gran valor. En el fondo, tanto Heitler como London eran físicos, no químicos, lo que había provocado que en sus trabajos no se reflejara –a juicio de Pauling– cómo el concepto de *intercambio de energía* se podía relacionar con los fenómenos químicos, de los que no sabían nada.

En este pequeño artículo, que supuso el inicio de la etapa científica americana de Pauling bajo su nuevo papel de *químico cuántico*, aparecieron junto a la revisión crítica del trabajo de Heitler y London algunas consideraciones propias de suma importancia. La más valiosa se encuentra en aquel párrafo en el que se hace un anuncio de significativo alcance: sus cálculos –vendría a decir– demostraban que la mecánica cuántica podía explicar la

⁵²⁵ Pauling, Linus (Abril, 1.928a). Ver copia del texto en Anexos.

⁵²⁶ *Ídem.*

configuración tetraédrica del carbono⁵²⁷. Fue este el primer escrito en el que muchos químicos vieron por primera vez alguna relación de la mecánica cuántica con su disciplina. La idea, el modelo propuesto por Pauling –basado en la energía de intercambio de Heisenberg al igual que habían hecho Heitler y London– resultaba atractiva, pero debía ir acompañada de una compleja formulación matemática. Debido a su extrema complejidad el mismo Pauling pospuso tácitamente el desarrollo de dicha formulación al siguiente número de la *Journal of the American Chemical Society*. Si bien dedicó gran parte de su trabajo de 1.928 a estos cálculos sumamente complejos la nota tardó casi tres años en aparecer. Para Pauling era evidente que cualquiera podía ver cómo la mecánica cuántica indicaba la naturaleza tetraédrica del átomo de carbono, pero las ecuaciones eran tan arduas que dudaba de ser capaz de poder presentar la formulación matemática de tal manera que pudiera convencer a alguien.

Pauling no era el único que tenía que hacer frente al problema matemático, si bien, a diferencia de otros, estaba convencido de que las matemáticas –lejos de ser un mero escollo– eran la clave para demostrar, sustentar sus primeras intuiciones. Por ello buscó atajos, hizo asunciones y *aproximaciones*, con el fin de simplificar en la medida de lo posible los desafíos matemáticos y poder dar cuenta de la validez de su modelo. Para ello, Pauling puso a Sturdivant –entonces un estudiante graduado que poseía una gran capacidad matemática– a solventar el problema de la estructura tetraédrica del carbono. Sin embargo, tras varias semanas de trabajo infructuoso, Pauling decidió dejar aparcado el problema de la estructura del carbono y centrarse en la resolución de la arquitectura de otros cristales. Desafortunadamente, el intento de solución de otras estructuras moleculares a través de la cristalografía radiográfica le condujo, nuevamente, ante el mismo problema: si la estructura sobre la que se estaba trabajando contenía un número considerable de átomos, se hacía casi imposible solucionar la misma atendiendo única y exclusivamente a los patrones radiográficos, ya que el problema matemático se hacía nuevamente presente. La dificultad se presentaba, concretamente, a la hora de intentar traducir los patrones registrados en las placas fotográficas en estructuras tridimensionales por medio de complejos cálculos matemáticos. Las dificultades se agravaban, por consiguiente, con el aumento en el número de átomos implicados en las moléculas a estudiar, ya que aumentaba la

⁵²⁷ La extraordinaria importancia de esta nota queda perfectamente de manifiesto si recordamos que aún en 1.928 uno de los principales interrogantes que enfrentaba a los físicos y a los químicos era la valencia del carbono; 2 para muchos de los primeros y 4 para los segundos.

complejidad de los patrones obtenidos y había que considerar más estructuras teóricamente posibles.

A medida que se iba solucionando la estructura de los cristales más sencillos a la vez que se intentaba hacer frente al problema matemático que se escondía detrás de las estructuras más complejas⁵²⁸. Había, no obstante, una intuición en el ambiente científico –compartido por el mismo Pauling con otros científicos– en torno a la posible existencia de una manera más fácil de enfrentarse al problema. Durante mucho tiempo, químicos de un lado y otro del océano habían visto y estudiado la forma en la que los patrones estructurales básicos se solían repetir en diversos cristales. A partir de estas observaciones y los conocimientos que por entonces Pauling ya poseía sobre mecánica cuántica, el tamaño de los enlaces iónicos, las estructuras cristalinas y los dictados de química, Pauling fue capaz de desarrollar un sistema que hacía posible indicar –a través de unas sencillas reglas– qué patrones moleculares básicos eran los más probables encontrar en cristales complejos. Su extraordinaria memoria le permitía almacenar una basta cantidad de información, construir un archivo de hechos de química, cristalografía, matemáticas y física. Pero en ese momento, además de recordar, era necesario saber organizar esa información para encontrar una respuesta lógica.

En 1.928 Pauling se dedicó a la resolución de la estructura compleja de una importante familia de minerales llamada silicatos, donde se encontraban el topacio, el talco y la mica. Supuso que probablemente estos minerales estaban compuestos por una repetición básica de unidades que incluyeran decenas de átomos, en un número excesivamente grande para poder ser resueltas directamente a través de la cristalografía. Afortunadamente, sabía qué átomos eran los que estaban involucrados, ya que los silicatos estaban compuestos en su mayor parte por átomos de silicio y oxígeno rodeados de átomos metálicos.

Ya antes de Pauling, y como resultado del incremento en el conocimiento efectivo del radio de varios iones cristalinos, W.L. Bragg había sugerido y aplicado exitosamente una teoría simple que permitía la selección de estructuras posibles de ciertos cristales complejos, entre ellos los silicatos. Su hipótesis fundamental vendría a decir: *si un cristal está compuesto por*

⁵²⁸ A pesar del primer intento fallido con Sturdivant, Pauling puso a trabajar a jóvenes brillantes y diligentes con el fin de que se ocuparan exclusivamente de llevar a cabo los cálculos matemáticos necesarios.

grandes y pequeños iones, su estructura estará determinada esencialmente por los iones grandes dando lugar a la formación de una disposición compacta con los iones pequeños ocupando los intersticios interiores. Ahora bien, en numerosas ocasiones no todas las posiciones son ocupadas por iones, dando lugar a estructuras abiertas⁵²⁹. La aplicación de esta teoría resultó compatible con los hallazgos de ciertas disposiciones compactas de iones cristalinos grandes cuyos radios se conocían. Para completar la estructura –vendría a decir Bragg–, el resto de iones debían colocarse posteriormente en aquellas posiciones que fueran posibles atendiendo a los datos aportados por los rayos x. Incluso, estas observaciones posteriores podían ser utilizadas para el intercambio –cuando fuera oportuno– de los iones grandes. Con la ayuda de este método Bragg y sus colaboradores habían hecho significativos avances ante el importante problema de la estructura de silicatos implicados en la determinación de estructuras de berilio ($\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$), crisoberilio (BeAl_2O_4), olivino [$(\text{Mg}, \text{Fe})_2\text{SiO}_4$], etc.

A pesar del éxito del *método de coordinación* –término con el que fue bautizada esta regla de Bragg– en la predicción de algunas estructuras seguía siendo necesaria la búsqueda de los principios que gobernaban la estructura de cristales iónicos más complejos: los químicos no podían pensar en los átomos como esferas aisladas que pudieran organizarse entre sí tal y como proponía Bragg, los átomos formaban enlaces entre sí en función de razones específicas. Fue precisamente Pauling, a partir de estudios empíricos de estructuras cristalinas conocidas y de consideraciones sobre la estabilidad que implica la energía cristalina, quien fue capaz de deducir algunas de ellas. Además, ya se sabía por entonces que el silicio era muy similar al carbono en muchos sentidos, incluyendo su habilidad para unirse a otros átomos. Los químicos llamaban a esa habilidad, a esa capacidad para unirse a otros átomos *valencia*. Ambos, carbono y silicio tenían valencia cuatro (4), lo que significaba que podían establecer cuatro enlaces estables con otros cuatro átomos. La estructura del enlace era una pirámide de cuatro caras llamada *tetraedro*, ocupando el átomo de carbono su centro y cada uno de los otros cuatro átomos las esquinas. El silicio debía tener –suponía Pauling– una estructura muy parecida. Pero el químico estadounidense también sabía que los átomos de oxígeno formaban en los cristales un octaedro o un cubo. En vez de pensar en algo parecido a unas canicas metidas en una caja, Pauling

⁵²⁹ En el caso de los silicatos, un cuerpo compacto vendría a ser algo así a una caja de canicas en donde los átomos de silicio, oxígeno y de otros metales –de distintos tamaños– se combinaban de tal manera que las esferas más pequeñas vendrían a ocupar los espacios libres que se creaban entre las más grandes.

pensaba en pirámides y cubos. Con estas formas básicas en la mente empezó a pensar en la forma en la que podían juntarse estos bloques –pirámides, cubos– y qué era lo que determinaba que un átomo estuviera en un lado, en una cara o constituyera un punto aislado.

Junto a Ava Helen se puso a dibujar, recortar, plegar y unir figuras de papel construyendo modelos que resultaron claves. A partir de una y otra combinación pudo ver por primera vez qué encajaba y qué no. Construyó modelos de acuerdo a un juego específico de reglas; el tamaño de los átomos e iones tenían un valor conocido; las distancias y posiciones de los enlaces entre los iones tenían una correlación razonable con lo que ya se sabía por medio de la cristalografía realizada en moléculas simples; las cargas eléctricas positivas y negativas de los iones vecinos estaban balanceadas; añadió además algunas reglas que él mismo había descubierto acerca de cómo muchos bloques podían encajar en una esquina o a lo largo de un lateral. Estas pautas le permitieron desarrollar un procedimiento que, paso a paso, y de forma relativamente sencilla, permitía eliminar aquellas estructuras cristalinas inverosímiles y afirmar las más probables. Todo parecía un juego pero a través de estas sencillas reglas se hacía posible la construcción de modelos teóricos de silicatos que se correspondían con los datos obtenidos por medio de la cristalografía. Se podría acusar al modelo de ser indirecto, de darle la espalda a la experiencia inmediata, pero era estrictamente conforme a cuanto se sabía de química y física. Además, las nuevas reglas descubiertas conferían perdurabilidad a las estructuras propuestas que no sólo eran lógicas, sino en muchos casos las únicas posibles. Esta combinación de reglas y modelos le permitieron resolver en muy poco tiempo la estructura de la mica, el talco, el topacio y otros minerales insolubles parecidos.

2.2 LAS REGLAS DE PAULING

La primera vez que estas reglas –desde muy pronto conocidas como “Reglas de Pauling”– vieron la luz fue a finales de 1.928⁵³⁰, en una contribución que Pauling hizo durante un homenaje a Sommerfeld en su sexagésimo cumpleaños. En dicho trabajo decía⁵³¹:

En el estudio de la estructura cristalina con rayos x el esfuerzo –realizado por muchos científicos, sobre todo en Estados Unidos– se ha concentrado en eliminar todas las posibles configuraciones atómicas que no sean compatibles con los datos experimentales, con el afán de dejar sólo aquella estructura que sea consistente, sin apelar a argumentos de factibilidad química basados en las distancias interatómicas supuestas. La importancia de este procedimiento descansa en la certeza que arrojarían sus resultados; desafortunadamente el trabajo que implica su aplicación a los cristales complejos se antoja infranqueable.

Las estructuras cristalinas complejas son de gran interés por lo que se torna deseable determinar su estructura aun a costa del rigor del método. El método que se ha aplicado en estos casos es el que sigue: se escoge uno de entre todos los arreglos atómicos y se evalúa la compatibilidad de sus predicciones teóricas con los datos experimentales. Si la concordancia es suficiente o total se asume que dicha estructura es la correcta. La dificultad principal que subyace en este procedimiento se encuentra en la elección de la configuración atómica.

Las sustancias iónicas simples, como los haluros alcalinos, tienen muy pocas opciones en cuanto a su arreglo atómico ya que existen escasas configuraciones estables correspondientes a la fórmula M^+X^- . Los diversos factores que influyen en dicha estabilidad han sido cotejados entre sí sin que ninguno de ellos resulte decisivo al optar entre una configuración de cloruro de sodio o una de cloruro de cesio. Para una sustancia compleja, por ejemplo la mica $KAl_3Si_3O_{10}(OH)_2$ o la zunyita $Al_{13}Si_4O_{20}(OH)_{18}Cl$, se pueden proponer muchas estructuras plausibles distintas que apenas difieren entre sí en su naturaleza o estabilidad por lo que parece razonable esperar que sólo la más estable de estas configuraciones, la que ha sido adoptada por la sustancia, podrá reflejar en sus características aquellos factores que son cruciales para determinar la estructura de un cristal iónico... [Pauling] pudo formular un conjunto de cinco reglas que se relacionan directamente con la estabilidad de los cristales iónicos complejos. Estas reglas fueron obtenidas tanto por inducción, a partir de las estructuras conocidas en 1.928, como por deducción, a través de las ecuaciones de la energía contenida en un cristal... Las sustancias a las que se les puede aplicar este conjunto de reglas deben de formar enlaces de naturaleza iónica, sus cationes deben ser pequeños y polivalentes y sus aniones deben ser grandes y bivalentes cuando mucho. Los aniones más importantes son el oxígeno y el flúor... Las reglas están basadas en el concepto de la coordinación entre aniones alrededor de cada catión en las esquinas de un tetraedro, octaedro o cualquier otro poliedro y se relacionan con las características de conectividad de estos cuerpos geométricos.

⁵³⁰ Pauling, Linus (1.928b). Estas reglas fueron desarrolladas de forma más detallada en Pauling, L. (1.929). En las próximas líneas vamos a acercarnos a estas reglas a través de este segundo trabajo. [Texto íntegro incluido en el anexo].

⁵³¹ Texto de Pauling extraído y traducido a partir de J.H. Strurdivant (1.968), p. 4.

2.2.1 “THE PRINCIPLES DETERMINING THE STRUCTURE OF COMPLEX IONIC CRYSTALS” (1.929)

En la segunda formulación, más extensa y desarrollada de 1.929 dice así⁵³²:

Es deseable un sistema de reglas simples, que no han de ser rigurosas en su derivación ni universal en su uso, con la ayuda de la cuales se puedan identificar las pocas estructuras relativamente estables entre la multiplicidad de las posibles para cada sustancia dada. Estas reglas se podrían utilizar en la predicción de la disposición atómica por comparación con los datos de los rayos x. También proporcionarían un criterio para la corrección de las estructuras sugeridas como probables pero no deducidas rigurosamente de las medidas experimentales. Finalmente, permitirían la comprensión intuitiva de la estabilidad de cristales en términos de interacciones visualizables interiónicas.

Estas Reglas constituyeron el primer gran éxito internacional de Pauling. Con 27 años se convirtió en alguien a respetar entre los cristalógrafos. Como el mismo W.L. Bragg señalara las Reglas de Pauling podían considerarse “el principio cardinal de la química mineral”⁵³³ ya que vinieron a simplificar un campo sumamente complejo y a mostrar a otros científicos un nuevo camino para resolver nuevas y más complicadas estructuras. Veámos con algún detalle estas reglas:

La primera de estas reglas –*I. La naturaleza del poliedro coordinado*– viene a decirnos que alrededor de cada catión se forma un poliedro de aniones coordinados que depende de la relación de los radios de los aniones, siendo la distancia catión-anión determinada por la suma de los radios y el número de coordinación –[es decir, el número de iones de signo contrario que tiene a su alrededor]– por la razón de los radios.

⁵³² Pauling, Linus (1.929), p. 10-11.

⁵³³ Cita extraída de Hager, Thomas (1.998), p. 49.

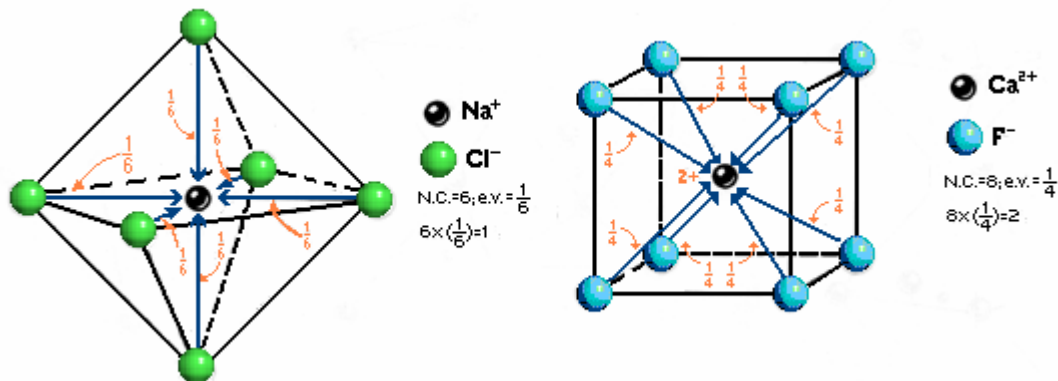


Fig. 2.1

En el caso de cristales que contienen cationes altamente cargados, el término más importante en la expresión de la energía cristalina es aquel que representa la interacción de cada catión y del anión adyacente. Los siguientes términos en importancia son aquellos que representan la interacción mutua entre los aniones. La energía negativa de Coulomb⁵³⁴ causa que cada catión atraiga hacia sí un número determinado de aniones, que se acerquen al catión hasta aquella distancia en la que la fuerza de atracción de Coulomb queda compensada por las fuerzas repulsivas del anión-anión característica. Esta distancia viene dada con una cierta exactitud por la suma de los radios cristalinos del catión y del anión.

Si son demasiados los aniones que se agrupan cerca de un catión, la repulsión anión-anión empieza a hacerse lo suficientemente fuerte como para evitar que los aniones se sigan acercando al catión. Cuando esto ocurre, y la distancia del anión-catión es superior a la determinada por la suma de los radios, la energía de Coulomb “excedente” hace que la estructura resultante sea algo más inestable.

⁵³⁴ **Ley de Coulomb:** La magnitud de cada una de las fuerzas eléctricas con que interactúan dos cargas puntuales es directamente proporcional al producto de las cargas e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que las separa.

En términos matemáticos, la magnitud F de la fuerza que cada una de las dos cargas puntuales q_1, q_2 ejerce sobre la otra separadas por una distancia r se expresa como:

$$F = K \cdot \frac{|q_1| \cdot |q_2|}{r^2}$$





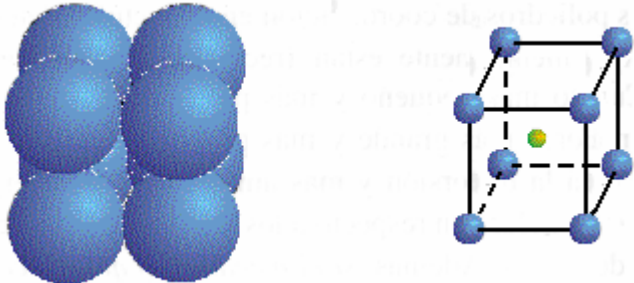
Los límites más bajos del cociente del radio –la relación o razón que se da entre el radio del catión y el radio del anión– conducen a una estructura estable, determinan el número de coordinación del catión y la naturaleza del poliedro de coordinación. Gracias a ello, podemos deducir la geometría del empaquetamiento a través de cálculos puramente geométricos. Esta relación existente –que encontramos en el texto de Pauling⁵³⁵– entre los cocientes mínimos de los radios y los poliedros tetraédricos, octaédricos y cúbicos correspondientes, viene dada en la siguiente tabla (I):

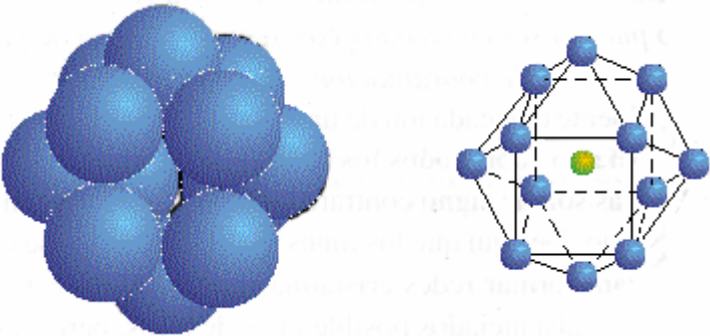
<i>TABLA I</i>		
<i>Poliedros geométricos</i>	<i>Número de Coordinación (N.C.)</i>	<i>Relaciones de radios mínima</i>
Tetraédrica	4	$\sqrt{3} / \sqrt{2} - 1 = 0,225$
Octaédrica	6	$\sqrt{2} - 1 = 0,414$
Cúbica	8	$\sqrt{3} - 1 = 0,732$

En la siguiente tabla (II) encontramos una relación más amplia entre esos radios mínimos y el número de coordinación, así como una representación geometría de las estructuras correspondientes.

⁵³⁵ Pauling, Linus (1.929), p. 1016.

TABLA II

Relaciones de radios mínima (Ra:Rx)	Número de Coordinación (N.C.)	Geometría del empaquetamiento	
< 0,155	2	Lineal	
0,155	3	Vértices de un triángulo equilátero (coordinación triangular)	
0,255	4	Vértices de un tetraedro (coordinación tetraédrica)	
0,414	6	Vértices de un octaedro (coordinación octaédrica)	
0,732	8	Vértices de un cubo (coordinación cúbica)	

1,0	12	Vértices de un cubo octaedro (empaquetamiento compacto)	
-----	----	---	--

Estas estructuras de máxima estabilidad se producen cuando la valencia de cada anión es igual a la suma de las fuerzas del enlace electrostático del catión adyacente. Es decir, en una estructura de coordinación estable la fuerza total de los enlaces de valencia que liga un anión con todos los cationes vecinos es igual a la carga del anión. La primera consecuencia de ello es que no se requieren cargas positivas de iones más distantes para compensar la carga del anión. Así, la neutralización de la carga de un anión en una estructura iónica se realiza de forma muy localizada. Gracias a ello podemos definir la fuerza de un enlace electrostático dividiendo la valencia del catión por su número de coordinación $f = n/z$.

Pero más importante es –según numerosos autores– el conocimiento del número de poliedros que tienen una esquina común. Este número puede ser determinado a partir del uso de una concepción extendida de la valencia electrostática. Siendo z la carga eléctrica de un catión y v su número de coordinación, entonces la *fuerza del enlace de valencia electrostática* se dirige a cada esquina del poliedro de aniones según la razón:

$$s = \frac{z}{v}$$

El *Principio de la valencia electrostática* (Regla II) señala que en una estructura de coordinación estable la carga eléctrica de cada anión tiende a compensar la fuerza del enlace de

valencia del catión que alcanza, desde el centro del poliedro, cada esquina⁵³⁶. Siendo ξ la carga del anión localizado en la esquina compartida entre varios poliedros:

$$\xi = \sum_i \frac{z_i}{v_i} = \sum_i S_i$$

Este *principio* indica –como venimos diciendo– el número de poliedros que comparten una esquina –un anión–, pero no predice el número de esquinas comunes entre dos poliedros; es decir, si comparten una esquina solamente, dos esquinas –lo que supone compartir un borde o arista– o tres o más esquinas una cara. Pauling pone el ejemplo del rutilo⁵³⁷, la brookita⁵³⁸ y la anatasa⁵³⁹, en donde cada ión de oxígeno es compartido por tres octaedros de titanio. Las diferencias entre unos y otros están en el número de bordes compartidos por un octaedro con octaedros colindantes. En el caso del rutilo el número es dos, tres en el de la brookita y cuatro en el de anatasa. En el corindón⁵⁴⁰, por su parte, cada octaedro de aluminio comparte una cara y 3 bordes con otros octaedros. El hecho de compartir una, dos, tres o más aniones no es baladí. La razón de ello la encontramos en la que constituye la tercera regla de Pauling.

III. La presencia de bordes compartidos, y particularmente de caras compartidas, en una estructura compartida disminuye su estabilidad; este efecto es grande para los cationes con valencia grande y número de coordinación pequeño, y es especialmente grande en caso de que el cociente del radio se acerque al límite más bajo de la estabilidad del poliedro⁵⁴¹. Esta reducción en la estabilidad se presenta en términos de fuerzas coulombianas. Cuando dos

⁵³⁶ En la justificación de este principio ha de ser precisado que se en los casos en los que los aniones poseen una carga negativa grande, estos son colocados en la posición de los potenciales positivos grandes; para la fuerza de enlace de un catión da aproximadamente su contribución del potencial positivo total en la esquina del poliedro – describiendo el factor $1/n$ la distancia más grande catión-anión y el número más grande de aniones adyacentes en el caso de cationes con un número de coordinación grande–, y la aplicación del principio requiere que la suma de esos potenciales sea grande en el caso de que la valencia del anión sea grande.

⁵³⁷ **Rutilo:** Mineral compuesto por dióxido de titanio que cristaliza de forma tetragonal distorsionada.

⁵³⁸ **Brookita:** Mineral idéntico al rutilo y la anatasa en términos de su composición química (TiO₂). No cristaliza de forma ortorrómbica.

⁵³⁹ **Anatasa:** Tercero de los tres minerales formados por dióxido de titanio. Aunque cristaliza igual que el rutilo de forma tetragonal, la diferencia entre ambos minerales está en la mayor longitud del eje vertical de la anatasa –que en griego significa “extensión”– lo que se traduce en notables diferencias en sus propiedades físicas (ej. Negatividad óptica y un brillo metálico más fuerte).

⁵⁴⁰ **Corindón:** (Del fr. *corindon* y este del sánscr. *kuruvinda*) 1.m. Piedra Preciosa, la más dura después del diamante. Es alúmina cristalizada, y hay variedades de diversos colores y Formas. *Real Academia Española*.

⁵⁴¹ Paulin, Linus (1.929), p. 1018.

tetraedros regulares comparten una arista, la distancia entre sus centros –cationes– se reduce a una distancia ligeramente superior –0,58 veces– a la mitad de la distancia con respecto a tetraedros que tan solo comparten una esquina. Pero si lo que comparten es una cara, la distancia decrece a un 0,33 del valor original⁵⁴² (Fig. 2.2). Es entonces cuando los términos positivos –energía de Coulomb– producen un gran aumento en la energía cristalina y producen una disminución en la estabilidad de la estructura, especialmente en aquellos casos donde los cationes tienen una gran carga⁵⁴³. En aquellos casos en los que la valencia era pequeña y el número de coordinación grande, se acudió a la observación de tetraedros de silicio, donde se constató que tan sólo compartía esquina con octaedros de aluminio, bordes con octaedros de manganeso (olivino, condrodita, humita, clinohumita) y con poliedros de circonio cuyo número de coordinación es 8 (circón⁵⁴⁴).

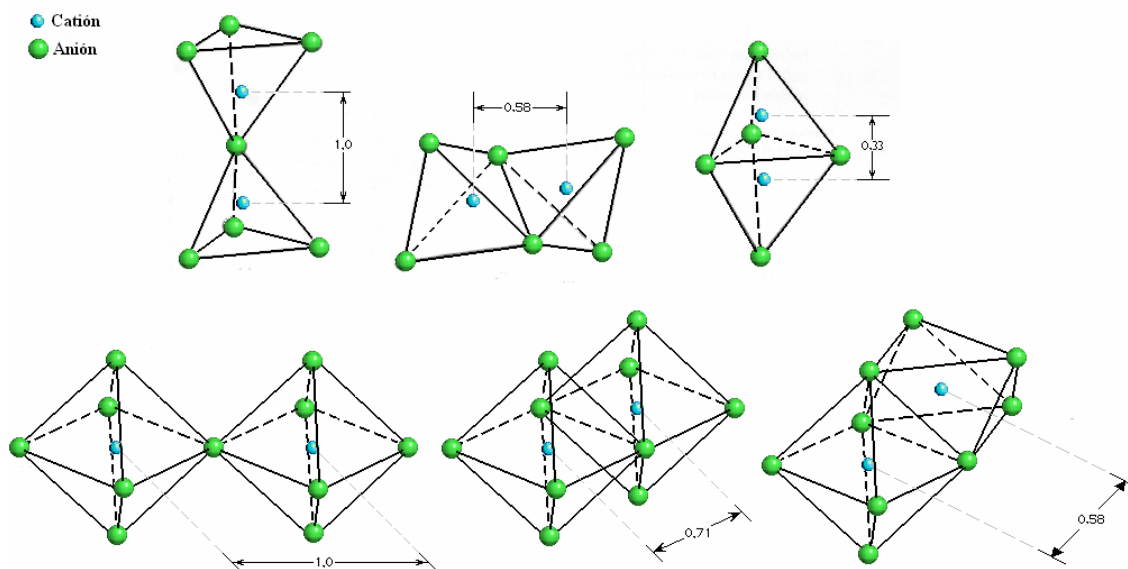


Fig. 2.2

⁵⁴² Pauling señala que estos cálculos son válidos solamente en caso de que los cambios en la estructura no sean compensados por la deformación del poliedro. Y lo cierto es que siempre se produce cierta deformación compensatoria; las reglas –que serán un poco más desarrolladas en próximas páginas– que gobiernan la deformación demuestran que ésta será pequeña en caso de que el cociente de las radios se acerque al límite más bajo de la estabilidad del poliedro, y aumenta con el cociente del radio.

⁵⁴³ El efecto no es tan grande para octaedros regulares, ya que la disminución de la distancia entre los cationes vendría a ser de un valor fraccionario de 0,71 para un borde compartido y 0,58 para una cara compartida.

⁵⁴⁴ Circón: (Del ár. hisp. *azzarqún*, este del ár. *zarqún*, y este del persa *zargun*, color de oro). 1. m. Silicato de circonio, más o menos transparente, blanco o amarillento rojizo, que difícilmente produce raya en el cuarzo y posee en alto grado la doble refracción. Se halla en cristales rodados entre los terrenos de aluvión de la India y se usa como piedra fina, con el nombre de jacinto.

La naturaleza de los poliedros contiguos viene condicionada –según Pauling– por la cuarta regla, que vendría a decir así: *IV. En un cristal que contiene diversos cationes, aquellos que poseen una valencia grande y un número pequeño de coordinación tienden a no compartir elementos del poliedro con ningún otro.* Esta regla se sigue directamente del hecho de que cationes con una gran carga eléctrica tienden a ser alejados tanto como sea posible, con el fin de reducir su contribución a la energía coulombiana del cristal. En el caso de los silicatos, los tetraedros de silicio no pueden compartir elementos con todos aquellos en los que la razón oxígeno-silicio es igual o mayor de 4. Esta regla sería de suma importancia a la hora de determinar la estructura de cristales donde estuviera presente el silicio ya que obligaba a que en el cumplimiento del *principio de valencia electrostática* las esquinas compartidas entre dos tetraedros de silicio no lo pudieran estar también con otros poliedros, como ocurre con el berilio.

El *principio de parsimonia* –quinta regla desarrolla por Pauling– nos viene a decir que *el número de clases esencialmente diferentes de constituyentes en un cristal tiende a ser pequeño.* Ello implica, en primer lugar, que los enlaces electrostáticos satisfechos por aniones químicamente similares deberían ser iguales⁵⁴⁵. Esto no significa que los aniones deban ser equivalentes cristalográficamente; la no equivalencia cristalográfica no implica una diferencia esencial desde el punto de vista de la teoría de la coordinación. De hecho, muchas de las reglas precedentes no permiten a menudo que todos los aniones –desde el punto de vista cristalográfico– sean semejantes. Pauling pone el ejemplo de los silicatos; en aquellos cristales en los que la razón oxígeno-silicio es mayor de 4, los oxígenos son necesariamente diferentes unos de otros y, sin embargo, el número de tipo de aniones distintos sigue siendo pequeño.

En segundo lugar, los poliedros circunscritos en torno a cationes químicamente idénticos deben ser, si es posible, similares químicamente y similares en su ambiente contiguo, es decir, en la forma de compartir esquinas, bordes y caras con otros poliedros. Tampoco en estos casos –según Pauling– se busca la equivalencia cristalográfica, ya que puede haber diferencias en ese sentido entre entornos alejados. Es lo que encontramos por ejemplo en el caso

⁵⁴⁵ El enlace podría darse con otra clase de anión químicamente equivalente. Que sean iguales químicamente no implica que tenga que estar presente el mismo tipo de anión. Lo que aquí se está diciendo es que debería ser el mismo tipo de anión el que aparezca en aquellos enlaces electrostáticos iguales.

del carborundo⁵⁴⁶. En este cristal son varias las clases diferentes de átomos de silicio – concretamente 5⁵⁴⁷ desde el punto de vista cristalográfico– las que hallamos en los tetraedros que estos átomos forman alrededor de los átomos de carbón.

Las reglas hasta ahora expuestas –señala Pauling– son suficientes para indicar la naturaleza de la estructura de un cristal dado. Dicha estructura es reconstruible a partir de poliedros regulares cuya simetría y dimensiones aproximadas vienen dadas por dichas reglas, puede compararse con los datos aportados por el análisis radiográfico. De este modo, una estructura puede ser identificada a partir de su disposición atómica correcta. Pero –tal y como apuntábamos páginas atrás– la disposición atómica real puede diferir considerablemente de este arreglo “ideal” conforme a poliedros regulares ya que ésta estructura puede verse afectada por importantes distorsiones. La investigación de la concordancia entre las intensidades observadas por medio de la reflexión radiográfica y los factores estructurales calculados para todas las disposiciones atómicas en donde aparecen disconformidades con respecto a la disposición ideal, es extremadamente laboriosa. Por ello –comenta Pauling–, podemos complacernos con poder predecir con una cierta exactitud la naturaleza y la cantidad de distorsión que se puede esperar para una determinada estructura. Sin embargo –apunta también el químico estadounidense–, en casos no excesivamente complicados la concordancia apuntada puede buscarse de manera teórica –por medio del uso de una expresión teórica del potencial de repulsión íter-iónico– a partir del hallazgo del mínimo de energía del cristal respecto a la variación de los parámetros que determinan la estructura. Tal cálculo se ha realizado con el rutilo y el anatase, dando como resultado que en cada caso los lados compartidos del tetraedro de titanio se acortaban a 2.50 Å., mientras que otros lados se alargaban para compensar tal comprensión⁵⁴⁸.

En general no es posible hacer tales cálculos debido al excesivo trabajo que ello implica. Sin embargo, se ha podido observar que la repulsión catión-catión acorta los lados compartidos y los lados de caras compartidas, siendo posible hacer un uso razonable de siguiente regla: en los poliedros de iones de oxígeno que se forman alrededor de cationes trivalentes y tetravalentes se produce una distorsión en la que los lados compartidos y los lados

⁵⁴⁶ m. QUÍM. Carbuero artificial de silicio que por su gran dureza, próxima a la del diamante, se usa para pulir.

⁵⁴⁷ Carborundo I.

⁵⁴⁸ Como afirma Pauling en el mismo texto, posteriormente dicha distorsión fue descubierta experimentalmente.

de caras compartidas se acortan hasta alcanzar una longitud de tan solo 2,50 Å. en casos como el del corindón y el Al_2O_3 , y a 2,55 Å. en casos como el de la hematita y el Fe_2O_3 .

Si bien en este trabajo aún no lo desarrolló, sí que adelanta que la repulsión catión-catión funciona en algunos casos desplazando los cationes de los centros de sus poliedros coordinados. Esta acción –señala Pauling– será grande tan sólo en aquellos casos en los que la razón de los radios esté cerca del límite más bajo de estabilidad, de tal modo que el tamaño del poliedro esté parcialmente determinado por las fuerzas repulsivas características anión-anión, siendo la distribución de cationes vecinos unilateral. Asimismo apunta –dejando para posteriores trabajos un mayor desarrollo– cómo la naturaleza y la cantidad aproximada de distorsión que se espera para otro tipo de casos podrán ser estimadas de manera semejante.

Como podemos ver, es posible predecir la estructura de un cristal a partir del uso de poliedros geométricos apoyándonos en los principios, en las reglas propuestas y en el reconocimiento de que las dimensiones observadas en las disposiciones atómicas están basadas, probablemente, en una distribución cerrada de iones. Tal y como el mismo Pauling apunta, fue así como se procedió en la determinación de la estructura del topacio. Si bien este procedimiento no fue suficiente para determinar –como reconoce Pauling– la posición de los aniones –por presentarse dos tipos de configuraciones cerradas viables; hexagonal simple y hexagonal doble–, sí que contribuyó considerablemente a la solución del problema y dando las pistas para que, posteriormente, se pudiera confirmar su estructura hexagonal por medio del método de coordinación. Algo muy parecido con la brookita, mas debe señalarse que en aquellas estructuras fácilmente derivables a partir de la teoría de la coordinación, como ocurre con la estructura del rutilo, la disposición aproximada de los aniones no se suele ajustar a esta estructura cerrada de iones.

Estos principios vistos constituyen –como se ha repetido en varias ocasiones– las famosas reglas de Pauling, que tenían como fin ayudar en la determinación de la estructura de cristales. Como ejemplo ilustrativo de la aplicación de estos principios en la predicción de estructuras por medio de la teoría de coordinación, así como algunas características de la teoría, Pauling lleva a cabo la muestra de algunas características de las estructuras de las tres formas de Al_2SiO_5 : cianita, andalucita y sillimanita.

Esta teoría requiere –tal y como señala Pauling casi al final del trabajo– de la no existencia de ningún silicato básico estable de metales bivalentes y que en los silicatos de aluminio de metales alcalinos, haya por lo menos un ión de aluminio para cada ión alcalino. Las estructuras de los silicatos de aluminio de los metales bivalentes, que son los más simples desde el punto de vista de la coordinación, se muestran acordes con las fórmulas $R_3^{++}Al_2Si_6O_{18}$, que incluyen a los minerales más importantes de esta clase, los granates y el berilio.

Tras la publicación de estas reglas, el éxito de las mismas no se hizo esperar. Tan sólo un año más tarde –entre 1.929 y 1.930– Pauling fue capaz de resolver la estructura de la mica y el talco, así como la de otros grupos de silicatos como las zeolitas, capaces de absorber algunos gases⁵⁴⁹. Pero aún quedaba un reto pendiente: la estructura tetraédrica del carbono.

⁵⁴⁹ Como el vapor de agua.

2.3 LA ESTRUCTURA TETRAÉDRICA DEL CÁRBONO

Desde la publicación del artículo “The Shared-electron Chemical Bond”⁵⁵⁰ Pauling no pudo cesar en la búsqueda del sentido matemático de los enlaces tetraédricos del carbono. Encontró en Oppenheimer una estimable ayuda en esta búsqueda, pero el final de la amistad que les unía dejó a Pauling algo desorientado en la exploración de un sistema de atajos, de aproximaciones a los términos de la ecuación de onda que simplificara lo suficiente las matemáticas como para permitir un progreso, pero sin producir una excesiva distorsión de los resultados. En repetidas ocasiones, Pauling intentó durante 1.929 enfrentarse con el problema matemático, pero sin obtener resultados satisfactorios. Decidió entonces volver a Europa, visitar viejos amigos en Múnich, varios laboratorios de cristalografía y escuchar algunos consejos en torno al problema del carbono. Linus, Ava Helen y el joven Linus Jr. aterrizaron en mayo de 1.930 en Inglaterra. Después de visitar varios laboratorios británicos se dirigieron a Alemania, donde Pauling tuvo la posibilidad de compaginar las visitas a sus viejos amigos con el examen de los últimos progresos realizados en el viejo continente. Durante su estancia en Múnich, tuvo también la oportunidad de trabajar durante casi tres meses en el uso de la ecuación de onda al vínculo químico, con la ayuda incluso de Sommerfeld, pero sin conseguir un gran avance.

Pauling no estaba sólo en esta búsqueda, Heitler y London también estaban interesados en extender su propia teoría, aunque se encontraban detenidos por sus limitados conocimientos químicos. Fue no obstante el joven físico John C. Slater quien, en 1.930 encontraría una primera clave, una forma de simplificar la ecuación de onda de Schrödinger, permitiendo de ese modo dibujar mejor los cuatro electrones del carbono. Según Slater, los orbitales no eran esferas perfectas, sino que se levantaban desde el núcleo del átomo con una forma parecida al brazo de un sillón⁵⁵¹.

Estimulado por el trabajo de Slater, tras su regreso a Pasadena a finales de ese mismo año, Pauling volvió a insistir en el problema del átomo de carbono. Tomó su pluma y comenzó a hacer nuevamente cálculos. Para poder emparejar la visión de los químicos del tetraedro del carbón con el de los físicos era necesario romper y mezclar de alguna forma los dos sistemas de subniveles electrónicos de los últimos. El principal problema estaba en encontrar las

⁵⁵⁰ Pauling, Linus (1.928a).

⁵⁵¹ Hemos visto que en inglés se suele definir “like stubby arms” pero hemos encontrado en español con mayor asiduidad la traducción presentada.

aproximaciones matemáticas apropiadas de la función de la onda y los atajos que harían manejables las ecuaciones para combinar las funciones de onda de los subniveles. Pauling trabajó por semanas en ello sin que ninguno de los atajos funcionara ¿cuál era el problema de fondo? El carbono tiene seis electrones, dos de ellos al poder estar, según las leyes de la física cuántica, apareados en el orbital más cercano al núcleo quedaban invalidados para toda reacción. Los otros cuatro electrones se podían encontrar repartidos en distintos orbitales; dos de ellos más cerca del núcleo y los otros en los orbitales en forma de brazo tal y como Slater había señalado. Así, los cuatro electrones podían formar enlaces con otros cuatro átomos. Pero por encontrarse en dos tipos de orbitales diferentes, era de esperar que los enlaces fueran diferentes. Los químicos, ahora bien, sabían que el carbono a menudo solía formar cuatro enlaces idénticos dando lugar a un tetraedro perfecto ¿cómo se podían formar estos cuatro enlaces idénticos cuando los físicos habían demostrado que los electrones del carbono no eran iguales? Pauling encontró finalmente la solución: la energía obtenida de uno de los intercambios de electrones parecía ser suficiente para poder arrancar el electrón del carbono de su nivel original de energía y combinarse bajo una nueva forma que diera cuenta de la forma tetraedral. Llamó a esta nueva forma mixta orbitales híbridos.

Esta idea era en principio buena, pero necesitaba de una base matemática. Como vimos Pauling ya había estado por meses buscando atajos, simplificaciones, aproximaciones pero sin éxito. Una noche de diciembre de 1.930, en un nuevo intento de simplificación matemática, optó por omitir una parte de la ecuación de onda que asumía que era aproximadamente igual para todos los orbitales. Es decir, lo que hizo fue combinar las funciones de onda de los subniveles y prescindir de la función radial –factor común en todos los orbitales–, obteniendo una simplificación permitida tanto desde el punto de vista matemático como físico. Al apartar esa capa de complejidad, Pauling quedó sorprendido al encontrar que "el problema se convertiría en algo absolutamente simple desde el punto de vista matemático"⁵⁵². De este modo y partir de los coeficientes correctos era posible combinar la función de onda de los dos subniveles del carbono de los físicos en una descripción matemática de una nueva forma híbrida: cuatro orbitales iguales orientados exactamente hacia los ángulos de un tetraedro. Pero no sólo eso, los nuevos orbitales híbridos se alejaban muchos más del núcleo, pudiendo traspasar los orbitales

⁵⁵² Al menos para un físico cuántico entrenado por Sommerfeld.

de otros átomos. Y he aquí donde se escondía un elemento básico: cuanto mayor era el solapamiento de orbitales entre dos átomos, más intercambio de energía se creaba y más fuerte era el enlace. La energía de Pauling era, aquella noche, desbordante. A partir de los principios y ecuaciones de la mecánica cuántica había sido capaz de formar un átomo de carbono tetraédrico en el que los ángulos calculados entre los enlaces eran correctos así como las longitudes de enlace. Del mismo modo, constataba cómo la energía requerida para cambiar el electrón de subnivel orbital quedaba cubierta por la energía del intercambio del electrón. Pauling había resuelto una paradoja, la reconciliación de los puntos de vista de los físicos y los químicos en torno al carbono.

Guardó el trabajar por horas y, a partir del mismo acercamiento básico, vio que podía agregar más electrones a sus cálculos y derivar las características de moléculas cada vez más y más complejas. La habilidad de cruzar los subniveles de los físicos por hibridación en nuevos orbitales, abrió las puertas a la explicación de estructuras de un gran número de moléculas.

2.4 THE NATURE OF THE CHEMICAL BOND

Durante los dos meses siguientes Pauling trabajó duramente puliendo y ampliando estos resultados. El producto final de tantos esfuerzos fue la publicación en *Journal American Chemistry Society* en febrero de 1.931 de uno de los artículos más importantes de la historia de la química: “*The Nature of the Chemical Bond*”. Antes de entrar de lleno en este trabajo, se hace oportuno rescatar algunos elementos claves de los dos artículos citados páginas atrás y sin los cuales no puede entenderse por entero éste tercero⁵⁵³. Se trata de los artículos de 1.928 “*The Application of the Quantum Mechanics to the Structure of the Hydrogen Molecule and Hydrogen Molecule-Ion and to Related Problems*”⁵⁵⁴ y “*The Shared-electron Chemical Bond*”⁵⁵⁵.

2.4.1 ANTECEDENTES AL ARTÍCULO DE 1.931

En el segundo de los textos de 1.928 indicados⁵⁵⁶ Pauling había desarrollado un tratamiento unificado para la aplicación de la mecánica cuántica a dos sistemas biatómicos –la molécula de hidrógeno y el ión molecular de hidrógeno–, acentuando la importancia de la función de resonancia en la estabilización de una molécula y declarando que “*la energía de intercambio de un electrón se corresponde en general con la energía de un enlace químico no polar o un enlace químico por compartición de un electrón*”. En este mismo artículo señalaba también que la dirección de las energías constituía un elemento clave en la solución del problema general del enlace químico. Este trabajo supuso además, casi como fruto de una obsesión personal, el inicio de un gran esfuerzo por hacer los resultados de la mecánica cuántica accesibles y familiares a los químicos no entrenados en la nueva química teórica, fusionando para ello los resultados con la fundamentación de la química teórica.

En el breve artículo de abril de 1.928⁵⁵⁷ Pauling analizó por primera vez el papel dominante de los cambios en la cuantización o hibridación de los orbitales en la producción de enlaces estables en los compuestos químicos ordinarios. Había percibido que la cuantización de

⁵⁵³ Asimismo, adelantaremos algunas notas generales que nos faciliten una comprensión y reflexión más oportunas en torno a los contenidos del famoso trabajo de 1.931.

⁵⁵⁴ Pauling, Linus (1.928c).

⁵⁵⁵ Pauling, Linus (1.928a).

⁵⁵⁶ *Ídem.*

⁵⁵⁷ *Ídem.*

los niveles electrónicos desarrollados por los físicos interesados en el espectro atómico era inadecuado para la distinción de compuestos químicos estables y, que las perturbaciones que incidían en la aproximación de átomos, podría producir orbitales atómicos dirigidos cuyos solapamientos determinarían los enlaces a ser formados. Pero no fue hasta el artículo de 1.931 cuando Pauling, basándose en las ecuaciones de la mecánica cuántica, obtuvo los primeros resultados con un significado químico que iba más allá del obtenido a partir de las anteriores teorías de valencia electrónica. El trabajo requirió de la extensión del concepto de mecánica cuántica a sistemas mucho más complejos desde el punto de vista de la discusión matemática rigurosa, pero mucha más rica, ya que permitía llegar hasta las cuestiones más importantes y esenciales de la química; *la naturaleza del enlace químico*. Encontramos así en este artículo de 1.931 seis reglas para el enlace de par de electrones (covalente). Las tres primeras fueron inferidas a partir de las reglas de Lewis, Heitler y London y la aplicación de la mecánica cuántica a los átomos de helio, hidrógeno y litio:

1. El enlace por par de electrones está formado por medio de la interacción de un electrón desapareado de cada uno de los dos átomos.
2. Tras la formación del enlace los spins de los electrones son siempre opuestos, de tal manera que no pueden contribuir a la susceptibilidad paramagnética de la sustancia.
3. Los dos electrones que forman un par compartido no pueden tomar parte en la formación de un par adicional.

Los otros 3 postulados, esencialmente nuevos, constituían la base sobre la cual Pauling llevaba a el análisis de los orbitales atómicos en el enlace covalente.

4. Los términos de intercambio del electrón hacen referencia tan solo a una función de onda para cada uno de los átomos.
5. Los electrones disponibles en los niveles más bajos de energía, dan lugar a la formación de los enlaces más fuertes, dicho de otro modo, solamente los orbitales atómicos estables pueden dar lugar a enlaces estables; el orbital $1s$ para el hidrógeno, los orbitales $2s$ y $2p$ para la primera fila de átomos,...
6. De los dos orbitales de un átomo, aquel que puede solapar más el orbital del otro átomo formará el enlace más fuerte haciendo que el enlace tienda a dirigirse hacia la zona del orbital concentrado. De esta forma se hace posible la predicción y el cálculo de los ángulos de enlaces así como las estructuras moleculares.

A partir de estas reglas Pauling fue capaz de derivar, con el uso de principios mecánico cuánticos generales, toda clase de propiedades relacionadas con la valencia directa, como la

fuerza de los enlaces, la configuración geométrica de las moléculas y la relación de ésta con sus propiedades magnéticas⁵⁵⁸. Desde los principios de la mecánica cuántica fue capaz de derivar todo: desde las fuerzas y disposiciones de los enlaces, hasta una teoría completa del magnetismo en las moléculas e iones complejos. Más aún, usando el nuevo sistema Pauling también era capaz de predecir la nueva estructura electrónica y las propiedades de los átomos. La mecánica cuántica, en otras palabras, no confirmaba aquello que ya se sabía, sino que señalaba un nuevo tipo de entendimiento.

2.4.1.1 *La naturaleza del enlace químico (artículo de 1.931)*

El mejor resumen del estado del problema hasta ese momento y descripción de los objetivos que Pauling perseguía con este trabajo los encontramos en la misma introducción, donde el químico estadounidense señala:

Durante los últimos 4 años el problema de la naturaleza del enlace químico ha sido acometido por los físicos teóricos, especialmente Heitler y London, por medio de la aplicación de la mecánica cuántica. Este trabajo ha permitido un cálculo teórico aproximado de la energía de formación y de otras propiedades de moléculas muy simples, como el H₂, y ha provisto también una justificación formal de las reglas establecidas en 1.916 por Lewis para el enlace por par de electrones. En este artículo se muestra que se pueden obtener muchos más datos de relevancia química a partir de las ecuaciones de la mecánica cuántica, permitiendo la formulación de un extensivo y poderoso juego de reglas para el enlace de par de electrones que supla a aquellas de Lewis. Estas reglas proveen información respecto a la fuerza relativa de los enlaces formados por diferentes átomos, los ángulos entre los enlaces, la rotación libre o la carencia de la rotación libre en los cruces de enlaces, la relación entre los números cuánticos de unión de electrones, el número y disposición espacial de los enlaces, etc. También se desarrolla una teoría completa del momento magnético de moléculas e iones complejos y se muestra que para muchos elementos compuestos envueltos de los grupos de transición esta teoría junto con las reglas para el enlace de par de electrones permiten una asignación única de las estructuras de los electrones así como la determinación definitiva de los tipos de enlaces involucrados.⁵⁵⁹

⁵⁵⁸ Asimismo, estas reglas permitieron posteriormente postular de una forma razonable y simple las bases de un gran número de reglas de estereoquímicas.

⁵⁵⁹ Pauling, Linus (1.931*b*), p. 1367

Como podemos observar, Pauling trata a través de este artículo superar las viejas leyes de Lewis en torno al enlace por par de electrones basándose en para ello en la aplicación de las ecuaciones de la mecánica cuántica. Para tal fin mostró cómo los exámenes de la ecuación de onda aplicada a la molécula de hidrógeno llevados a cabo por Heitler y London por un lado y Sugiura y Wang por otro, habían dado como resultado dos modos distintos de interactuar entre dos átomos normales de hidrógeno; por un lado, podía producirse una repulsión entre los dos átomos y no darse finalmente la formación de ninguna molécula; por otro lado, se podía producir la atracción y la formación de una molécula estable. La posibilidad de darse una u otra opción dependía de la identidad de los dos electrones. El característico fenómeno de la resonancia de la mecánica cuántica –responsable de la estabilidad del átomo en la molécula de hidrógeno– se da siempre ante la presencia de dos electrones, aún cuando los núcleos a los cuales se unen sean diferentes. De ese modo, la energía de un sistema estable es la misma, cuando cada átomo tiene un electrón, que cuando se intercambian los electrones. Por esa razón, podemos esperar encontrar a menudo enlaces del electrón-par donde los electrones se encuentren intercambiados.

Sin embargo –tal y como los experimentos habían mostrado–, la interacción de átomos con más de un electrón no daba siempre como resultado la formación de una molécula. Un átomo normal de helio y un átomo normal de hidrógeno interactúan solamente en un camino; repulsión. De igual modo ocurre entre dos átomos normales de helio, quienes se repelen mutuamente excepto cuando se encuentran a grandes distancias, cuando la atracción es muy débil. Por su parte, dos átomos de litio pueden interactuar de dos formas; presentando un potencial repulsivo o un potencial atractivo, alteración que se corresponde con la formación de una molécula estable. En estos casos parece que solamente cuando cada uno de los dos átomos iniciales posee un electrón desapareado se forma una molécula estable. La conclusión general es que un enlace por par de electrones se forma a partir de la interacción de un electrón desapareado de cada átomo. Como consecuencia de ello la energía de los enlaces es resultado principalmente de la resonancia o intercambio de dos electrones. Esta energía depende principalmente de fuerzas electrostáticas entre los electrones y el núcleo, y no es debido a las interacciones magnéticas, aunque los spins de los electrones determinen si son potenciales atractivos o repulsivos, o ambos.

Es a partir de estos análisis –principalmente los llevados a cabo por Heitler y London– de los que Pauling deduce las tres primeras características⁵⁶⁰ ya adelantadas en párrafos anteriores del enlace por medio de un par de electrones. A ellas se unen otras reglas basadas en consideraciones cualitativas en torno a los factores que influyen en las energías en enlace. Si bien ya hemos adelantado antes en qué consistían dichas reglas, en el texto dice Pauling concretamente⁵⁶¹:

4. Los términos de intercambio del electrón implican tan solo una función propia (orbital) para cada uno de los átomos.
5. De dos orbitales con la misma dependencia de r , aquel que tenga el valor más grande en la dirección del enlace dará lugar al enlace más fuerte, y para un orbital dado el enlace tenderá a formarse en la dirección con el valor más grande de la función propia.
6. De dos orbitales con la misma dependencia en θ y φ , aquel que tenga el valor medio más pequeño de r , es decir, aquel al que se corresponde con el nivel de energía más bajo del átomo, dará lugar al enlace más fuerte.⁵⁶²

Debido a la extrema complejidad y al formidable arsenal de símbolos y ecuaciones que se requerirían para llevar a cabo una justificación formal, incluso en los casos más simples, Pauling optó por mostrar algunas de las líneas principales sobre las que debería construirse una prueba completa antes de abordar la naturaleza y características de los orbitales s y p .

Pero, ¿por qué era tan importante el estudio de estos orbitales? Porque a partir de este conocimiento era posible la construcción de la nueva química estructural. Si las propiedades de la materia dependen de su estructura interna, entonces se hace urgente conocer los principios a partir de los cuales se levanta su arquitectura. Es decir, la forma, el intercambio de energía y la disposición espacio-temporal en la que se llevan a cabo los enlaces químicos. Por ello, en este artículo Pauling intenta dar cuenta –entre otras cosas– de la valencia de los átomos, la estructura de las moléculas simples, el tipo de enlace implicado en los orbitales d y el momento magnético de los nuevos complejos formados a partir de un enlace covalente. A lo largo de las próximas

⁵⁶⁰ El enlace por par de electrones está formado por medio de la interacción de un electrón desapareado de cada uno de los dos átomos; tras la formación del enlace los spins de los electrones son siempre opuestos, de tal manera que no pueden contribuir a la susceptibilidad paramagnética de la sustancia; los dos electrones que forman un par compartido no pueden tomar parte en la formación de un par adicional.

⁵⁶¹ En donde los orbitales hacen referencia a las funciones de un electrón en un átomo, y donde r , θ y φ son las coordenadas polares de el electrón, siendo el núcleo el origen de coordenadas del sistema.

⁵⁶² Pauling, Linus (1.931*b*), p. 1369

páginas vamos a ver cómo Pauling abordó el análisis de cinco de los problemas más importantes a los que la nueva química debía dar una respuesta; la naturaleza y las características de los orbitales s y p ; la llamada –por parte de Pauling– *transición desde el enlace de valencia al enlace iónico* y enlace de hidrógeno; la resolución del problema del átomo de carbono tetraédrico y –brevemente– los problemas de la rotación y los ángulos de los enlaces.

Naturaleza y características de los orbitales s y p

Los estudios llevados a cabo en torno a los orbitales s y p permitieron ver que éstos no son –en un átomo con el mismo número cuántico– muy diferentes en cuanto a sus valores medios de r (el nivel s tiende a decrecer debido a la mayor penetración de los niveles internos), de tal modo que la regla 6 no permite esperar grandes diferencias en cuando al poder del enlace en formación. Sin embargo, señala Pauling, su dependencia con respecto a θ y φ sí es muy diferente. Pongamos

$$\left. \begin{aligned} \psi_{n0}(r, \theta, \varphi) &= R_{n0}(r) \cdot s(\theta, \varphi) \\ \psi_{n1}(r, \theta, \varphi) &= R_{n1}(r) \cdot \left. \begin{aligned} p_x(\theta, \varphi) \\ p_y(\theta, \varphi) \\ p_z(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{para el orbital } s \\ \text{para el orbital } p \end{array}$$

Teoría enlace de valencia
(Pauling): La fuerza de un enlace depende de la distribución angular de las funciones orbitales

Las partes s , p_x , p_y , p_z de los orbitales dependen de θ y φ normalizada a 4π son:

$$\left. \begin{aligned} s &= 1 \\ p_x &= \sqrt{3} \cdot \cos \theta \cdot \cos \varphi \\ p_y &= \sqrt{3} \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ p_z &= \sqrt{3} \cdot \sin \theta \end{aligned} \right\}$$

Pauling representó los valores absolutos de s y p_x en un plano xz tal y como los que encontramos en las figuras I y II. En dichas figuras observamos cómo el orbital s tiene una simetría esférica, con un valor 1 en todas las direcciones. El valor $|p_x|$ consiste en dos esferas

(el eje de x es un eje infinito de simetría) con el valor máximo $\sqrt{3}$ a lo largo del eje x . Algo similar ocurre con $|p_y|$ y $|p_z|$, para quienes los valores máximos son también $\sqrt{3}$ a lo largo de los ejes y y z respectivamente. Pues bien, a partir de la regla 5 Pauling concluye que los electrones p pueden formar enlaces más fuertes que los electrones s y que los enlaces formados por los electrones p en un átomo tienden a orientarse en ángulos perpendiculares unos a otros.

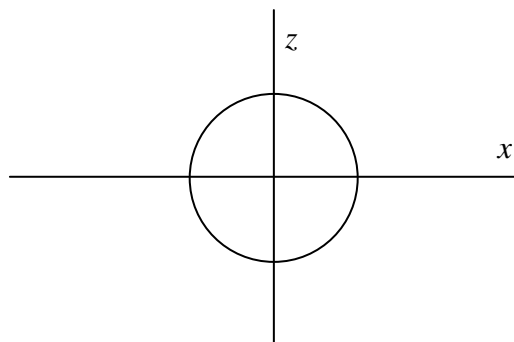


Fig. 1. Representación del orbital s en un gráfico polar de 1 en el plano xz

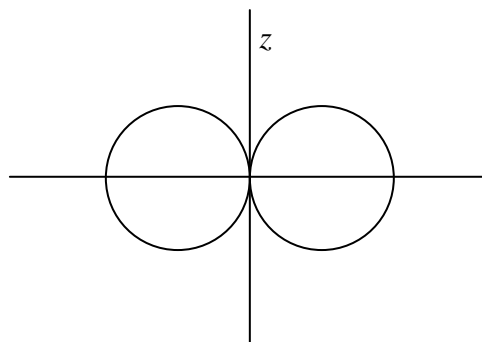


Fig. 2. Gráfica polar de $|\sqrt{3} \sin \theta|$ en el plano xz representando el orbital p_z .

A partir de la segunda conclusión Pauling consiguió explicar varios hechos interesantes. El oxígeno normal, en el estado $2s^2 2p^4 3p$, contiene dos electrones p desapareados. Cuando un átomo de oxígeno se combina con dos de hidrógeno, da como resultado una molécula de agua en la que los tres átomos forman 90° (generalmente se trata de un ángulo un poco más grande debido a la interacción de los dos átomos de hidrógeno). Ya se sabía desde hacía tiempo que las moléculas de agua tenían un momento eléctrico más grande que el que cabría en principio esperar de la simple disposición de sus átomos. Para explicar este hecho se habían llevado a cabo serias tentativas –que habían resultado insatisfactorias– basadas en una estructura iónica donde la polarización del anión del oxígeno era muy fuerte. Esta simple explicación era la consecuencia directa de asumir una estructura constituida a partir de enlaces de valencia y la presencia de propiedades armónicas.

Así como podía predecirse que H_2O_2 –donde la estructura $\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ implicada presenta enlaces de los electrones p –, debía tener una estructura molecular en forma no lineal, de igual

modo en el caso del nitrógeno –en estado normal $2s^2 2p^2 4s$ y con tres electrones p desapareados– debía formar 3 enlaces con tres átomos de hidrógeno formando un ángulo cercano a los 90° , la molécula de amoniaco, por su parte, con una estructura piramidal, también debía presentar un gran momento eléctrico.

Si bien se asumía en la discusión previa que el tipo de cuantización no había cambiado, y que los orbitales s y p conservaban su identidad, Pauling lleva a cabo posteriormente una discusión sobre los efectos del cambio de cuantización en los ángulos de enlace.

Transición desde el enlace de Valencia al enlace iónico. El enlace de hidrógeno.

Ahora bien, ya se había observado –como tuvimos la oportunidad de ver en el capítulo dedicado al contexto científico– que había otros enlaces además del de valencia, como el enlace iónico ¿cómo saber cuándo se da uno u otro? En el caso en el que la forma simétrica de una molécula se pueda obtener igualmente a partir de un enlace de valencia que de un enlace iónico, se hace difícil –reconoce Pauling– decidirse entre ambas posibilidades, ya que la estructura podría tender hacia cualquiera de los dos caminos. El orbital de orden cero para ambos electrones del enlace de una molécula MX (HF ó NaCl) con un enlace de valencia simple podría

$$\text{ser } \psi_{MX} = \frac{\psi_M(1)\psi_X(2) + \psi_M(2)\psi_X(1)}{\sqrt{2 + 2S^2}}$$

En el que $S = \int \psi_M(1)\psi_X^*(1)dr_1$. El orbital para un estado iónico puro podría ser $\psi_{M^+X^-} = \psi_X(1)\psi_X(2)$

En ciertos casos uno de estos podría aproximarse al orbital correcto muy estrechamente. En otros casos, ahora bien, podría ser necesario considerar combinaciones de los dos, a saber

$$\psi_+ = a\psi_{MX} + \sqrt{1-a^2}\psi_{M^+X^-}$$

y

$$\psi_- = \sqrt{1-a^2}\psi_{MX} - a\psi_{M^+X^-}$$

Para una molécula dada y una separación intermolecular dada a podría haber un valor determinado, por ejemplo el nivel de energía para ψ_+ tiende a ser tan bajo como sea posible. Si sucede que a está cerca de 1 se trata de un enlace de valencia; si a está cerca de cero, podría ser llamado un enlace iónico. Esta definición es algo insatisfactoria en cuanto que no depende de cantidades fácilmente observables. Por ejemplo, un compuesto iónico por la definición anterior puede disociarse adiabáticamente en átomos neutros. HF es un ejemplo de un compuesto así. Es evidente, como se verá más abajo, que la molécula normal se aproxima a un compuesto iónico; con todo disociaría adiabáticamente en átomos F y H neutros.

Pero pueden obtenerse muchas evidencias directas sobre el valor de a . El enlace de hidrógeno, descubierto por Huggins y por Latimer y Rodebush, había sido usualmente considerado como un enlace de valencia producido por un átomo de hidrógeno. Tiempo después, se pudo precisar que tal idea no era compatible con las reglas de la mecánica cuántica, ya que el hidrógeno tan sólo podía tener un electrón desapareado 1s, y las órbitas externas son tan estables que no era posible la formación de enlaces tan fuertes. Con una estructura iónica, ahora bien, podríamos esperar que H^+F^- se polemizara y que se agregara a un F^- , dando lugar a $H_6F_6 [F^-H^+F^-]$; por otra parte, la coordinación número 2 observada es exactamente la misma a la predicha a partir del cociente 0 del radio. Por lo tanto la observación del enlace formado con el flúor apoya una estructura iónica para el HF. Los enlaces de hidrógeno no se forman con el cloro, el bromo y el yodo, sino que los enlaces en HCl, HBr, y HI han de ser considerados como enlaces de Valencia.

Los enlaces de hidrógeno están formados en muchas ocasiones por oxígeno ((H₂O), hielo, etc.) y quizás también en algunos casos por nitrógeno. La estructura electrostática para el

enlace de hidrógeno explica que solamente estos átomos de alta afinidad formen tales enlaces, un hecho para el que la antigua concepción no daba explicación.

El átomo de carbono tetraedral

Como hemos venido observando, uno de los principales problemas a resolver para Pauling era el átomo de carbono tetraedral. Ya había anunciado dicha estructura, pero faltaba su comprobación matemática, la cual exigía dar cuenta anteriormente de un importante fenómeno: los cambios en la cuantización de los orbitales de enlace⁵⁶³. De ese modo Pauling podía derivar que un átomo en el que tan solo sus orbitales *s* y *p* contribuyen a la formación de un enlace y en el que la cuantización en sus coordenadas polares se encuentra quebrada, puede formarse uno, dos, tres o cuatro enlaces equivalentes dirigidos a las cuatro esquinas de un tetraedro regular (Fig. 2.2). Este cálculo provee de una justificación mecánico-cuántica del átomo de carbono tetraédrico de los químicos, presente en el diamante, en todos los compuestos alifáticos del carbono, los átomos tetraédricos del nitrógeno, del fósforo –como en los compuestos fosfónicos–, del boro –como en B₂H₆– y muchos otros átomos.

Rotación libre o restringida

Con respecto a la rotación de los enlaces, Pauling ha de distinguir los enlaces sencillos, dobles y triples. Con respecto a los primeros muestra cómo cada uno de estos orbitales del enlace tetraédrico son simétricos cilíndricamente alrededor de su dirección de enlace. De ahí que la energía del enlace sea independiente de la orientación sobre esta dirección y de modo que se de una rotación libre sobre un solo enlace, siempre y cuando la rotación no sea obstaculizada por la interacción de otros átomos o grupos de átomos presentes.

⁵⁶³ Con el fin de no perder el hilo conductor que vertebra este capítulo y poder centrarnos en el problema de la estructura tetraédrica del carbono, se ha decidido incluir en los Anexos un capítulo en el que se muestra de forma algo desarrolla la propuesta de Pauling en torno a este importante fenómeno.

En cuando a los enlaces dobles y triples señala que estos se comportan de forma diferente. Para los enlaces dobles introduce dos nuevos elementos en el octante xyz y $\bar{x}\bar{y}\bar{z}$ de cada átomo, usando el orbital de enlace ψ_{111} y $\psi_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}$. Los dos orbitales pueden formar un doble enlace con con cualquier otro grupo. Ahora ψ_{111} y $\psi_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}$ no son cilíndricamente simétricos respecto el eje x u otra dirección. De ahí que la energía del doble enlace dependa de la orientación relativa de los dos átomos de carbono tetraédricos, siendo máxima cuando los dos juegos de orbitales tienen el máximo número de puntos en común. Esto ocurre cuando los dos átomos comparten un borde. De esta manera podemos derivar –tal y como habían señalado tiempo atrás otros los químicos– que nos encontramos con que son dos estados estables –un estado *cis* y una *trans*– los que se encuentran involucrados en el enlace doble que se da en los compuestos simples. Estos dos estados difieren entre sí en la orientación 180° no siendo posible que se de una rotación libre sobre el enlace doble. Con respecto a los enlaces triples, los tres orbitales que pueden tomar parte en la formación de los dos átomos han de estar simétricamente dirigidas hacia el eje del triple enlace, no habiendo camino para verificar los resultados de la rotación libre alrededor del mismo.

Los ángulos entre los enlaces

Con respecto a los ángulos entre los enlaces Pauling señala que los ángulos del enlace en H_2 y el NH_3 deben medir entre 90° y $109^\circ 28'$, correspondiendo el más cercano a 90° para la molécula de hidrógeno y $109^\circ 28'$ para el amoníaco. Pauling señala así mismo que deben aplicarse estos mismos límites a otros átomos cuya última capa tenga ocho electrones (sea fruto de compartir o no pares de electrones). Pauling se basa en este punto en los datos de la estructura cristalina de los cristales no iónicos dada en Tabla I⁵⁶⁴. Cada uno de los ángulos dados en esta tabla depende de uno o más parámetros que han sido determinados experimentalmente.

⁵⁶⁴ Pauling, Linus (1.931b), p. 1380. [Dicha tabla se puede consultar en el texto íntegro que se encuentra en los ANEXOS].

2.4.1.2 Polémica con Slater

Este artículo, a pesar de su extraordinaria importancia científica, no estuvo libre de polémicas. El 1 de marzo de 1.931 –dos semanas después de que Pauling hubiera enviado su nuevo trabajo, pero un mes antes de que fuera publicado– apareció un artículo de Slater⁵⁶⁵ en *Physical Review* en el que abordaba muchos de los puntos tratados por Pauling; la idea de que un mayor solapamiento de la función de onda daba lugar a un enlace más estable; una discusión sobre la relación entre el enlace iónico y el covalente; una descripción de cómo, en compuestos donde hay muchas maneras de dibujar el enlace de valencia, era probable que “la situación real fuera ... una combinación de varias posibilidades, y a causa de la resonancia de energía ésta fuera más baja que si fuera de otra forma” y, lo más importante, una explicación del enlace tetraédrico del carbono.

Al principio todo parecía indicar que Slater había batido a Pauling. Pero después de leerlo varias veces Pauling encontró muchas diferencias importantes con respecto a su trabajo. El artículo de Slater, por ejemplo, era más descriptivo que cuantitativo, sin aportar además ninguna forma de conseguir los valores de las fuerzas y las longitudes de los enlaces. Pauling escribió rápidamente una nota⁵⁶⁶ a *Physical Review* en la que llamaba la atención de los lectores haciéndoles saber que en su próximo artículo pronto a aparecer en *Journal American Chemistry Society* encontrarían un “tratado cuantitativo muy simple pero de una poderosa aproximación a las fuerzas del enlace”. Asimismo, llevaba a cabo un breve bosquejo de sus seis reglas y sostenía que él había sido el primero en proponer un acercamiento mecánico-cuántico a la disposición tetraédrica del carbono en 1.928 y presentaba una rápida revisión crítica del trabajo de Slater, señalando finalmente la manera en la que sus ideas iban más lejos que las propuestas por el físico.

Algunas semanas antes de que saliera a la luz cualquiera de los dos artículos, Slater había ofrecido a Pauling un puesto como profesor de tiempo completo de física, química o cualquier combinación que quisiera en el MIT. Pauling le hizo saber que ya le habían prometido su puesto como profesor de tiempo completo en el Caltech. No obstante, le hacía llegar su

⁵⁶⁵ Slater, John C. (1.931)

⁵⁶⁶ Pauling, Linus (1.931a)

agradecimiento y le hacía saber que no había físico teórico cuyo trabajo le interesara más que el suyo. La aparición de ambos artículos no complicó la relación entre los dos científicos. Lejos de ello, ambos se mostraron sumamente respetuosos y alabaron el trabajo del otro. Después de leer el artículo de Pauling en *Journal American Chemistry Society*, Slater le escribió haciéndole saber de su alegría al ver cómo ambos habían coincidido al preparar de forma independiente y simultánea ideas tan parecidas. Si bien –reconocía Slater en la misma carta– aún no le había dado tiempo a revisar detenidamente el artículo de Pauling, a primera vista se mostraba muy de acuerdo con las ideas generales expuestas en el mismo. El compromiso entre ambos científicos fue tan bueno, que durante un simposium organizado por Pauling en Pasadena sobre el enlace químico, Slater le propuso comparar sus notas con el fin de no repetir las mismas ideas por la similitud de sus propuestas: los dos jóvenes científicos se habían interesado por los mismos problemas y habían llegado a conclusiones similares, por lo que terminaron compartiendo crédito, ya que la teoría propuesta fue llamada –durante algún tiempo– *teoría de Heitler-London-Slater-Pauling (HLSP) del enlace químico*⁵⁶⁷. Sin embargo, la polémica no quedó zanjada completamente, se trataban de dos mentes y de dos formas de hacer ciencia muy diferente e incompatible. Mientras que el científico del MIT era perseverante, podía trabajar sobre una idea durante años, confiaba en el cálculo y no tanto en la intuición, Linus Pauling era por su parte intuitivo, brillante e “incapaz” de detenerse por mucho tiempo en un mismo problema. Serafini⁵⁶⁸ define a éste último como un místico hindú o un intuicionista al viejo estilo del medieval Meister Eckhart, mientras que Slater sería un formalista cartesiano o spinoziano, convencido como pocos del poder de las matemáticas en la resolución de complejos problemas físicos.

2.4.1.3 *The Nature of Chemical Bond (1.931-1.939)*

Tras la publicación de este artículo en 1.931 sobre la naturaleza del enlace químico, Pauling puso fin al desarrollo de las bases matemáticas de sus ideas. Los químicos –pensaba–

⁵⁶⁷ Tiempo después, fue rebautizada como *teoría del enlace de valencia*, contando con la aprobación por parte de Slater y Pauling en cuanto a que ambos habían alcanzado al mismo tiempo y de forma independientemente casi las mismas conclusiones.

⁵⁶⁸ Serafini, A. (1.989), p. 58-9.

no estaban entrenados para apreciar las complicadas matemáticas de la física cuántica. Por ello, desarrolló su propio estilo y durante los siguientes años presentó una serie de artículos novedosos –aunque también titulados *The Nature of Chemical Bond*– sobre la naturaleza del enlace químico. Novedosos con respecto al primero en cuanto que en ellos Pauling rechazaba las rigurosas pruebas matemáticas de aquel, confiando esta vez más en explicaciones y comprensiones intuitivas provenientes tanto del campo de la física como de la química. Fue así cómo desarrolló su propio estilo usando y combinando lo mejor de la teoría de la mecánica cuántica con firmes datos de la estructura molecular provenientes de la cristalografía. Escribió sus artículos sin complicadas ecuaciones, confiando en la aplicación de cuestiones que él sabía que los químicos conocían. Presentó sus ideas de forma natural para un químico, usando ejemplos de la vida real y tomando prestado libremente aquello que había aprendido acerca de la estructura de las moléculas para probar sus teorías y puntos de vista.

La aproximación *semi-empírica* de Pauling implicaba en términos observacionales, que ni la pura teoría ni la simple ordenación de los datos provenientes del laboratorio eran suficientes. Su propuesta fue tremendamente exitosa y Pauling fue capaz de contestar a grandes interrogantes sobre la naturaleza de las moléculas, mostrar qué enlaces químicos eran posibles y reconstruir la química desde un nuevo fundamento proveniente de la mecánica cuántica. De todos los científicos del mundo, tan sólo Linus Pauling era capaz en la década de 1930 de reunir todas las piezas del puzzle; cuando tenía una nueva idea sobre el enlace químico, podía inmediatamente probarla comparándola con sus estructuras teóricas y luego con la experimentación en el laboratorio de cristalografía; cuando un cristalógrafo proponía una nueva estructura, Pauling podía ver si era acorde con las reglas de la mecánica cuántica. Constantemente revisaba y corregía todas sus nuevas ideas teóricas frente a los nuevos conocimientos que se producían sobre las propiedades de las moléculas, sus puntos de fusión y ebullición, reactividad y comportamiento termodinámico. Su guía de trabajo fue siempre una ferviente creencia en que las funciones moleculares eran explicables a partir de su estructura, su gran motor un enorme afán por ser el primero en describir tantas de esas estructuras como le fuera posible de tal modo, que se pudiera alcanzar una nueva comprensión sobre su comportamiento.

Los historiadores –tal y como señala Thomas Hager⁵⁶⁹– darían crédito posteriormente a Heitler, London, Slater y Pauling como los creadores de este desarrollo del enlace químico –al que se llamaría provisionalmente como vimos teoría HLSP–, pero muchos químicos sólo recordaron a Pauling. No sólo porque fuera quien aplicara la teoría a más moléculas que ningún otro, sino también porque era el único químico por entonces capaz de comunicar sus resultados de forma que lo entendieran los químicos.

Sin embargo, el interés de Pauling parecía empezar a girar poco a poco hacia otros ámbitos. Como tuvimos la oportunidad de ver en la biografía, tras la muerte de Noyes y su nombramiento como director de la división de química del Caltech, tuvo que asumir responsabilidades administrativas y representativas que ocuparon gran parte de su tiempo. Si bien tales compromisos no le apartaron completamente de la investigación, su relación –y en cierto modo deuda personal– con Weaver, le fueron acercando al estudio de elementos relacionados cada vez más con sustancias biológicas. Sin embargo, antes de adentrarnos de lleno en el estudio de su obra desarrollada en el ámbito de las ciencias de la vida –biología molecular, medicina molecular y medicina ortomolecular– debemos cerrar este capítulo de la vida científica de Linus Pauling dedicando unas líneas a su publicación más importante e influyente. Nos referimos, efectivamente, a su libro de 1.939, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals*. Como vimos en su momento, este texto fue el resultado de la corrección y extensión de las notas que preparara para las *Lecturas Baker*. En dicho texto la química era explicada por primera vez en la historia la química no como una colección de hechos puestos juntos y vinculados a por medio de prácticas en el laboratorio, sino como un campo unificado por medio de una teoría física subyacente: las ideas mecánico-cuánticas de Pauling acerca del enlace químico. En esta obra Pauling fue capaz de mostrar al lector paso a paso cómo la nueva física explicaba el enlace químico, cómo estos enlaces explicaban la estructura de las moléculas y cómo estas estructuras explicaban su comportamiento. Pauling hizo posible –tal vez inspirándose en el pensamiento del Premio Nóbel Max Perutz– que la “química pudiera ser entendida antes que memorizada”.

⁵⁶⁹ Hager, Thomas (1.998), p. 55

La respuesta de los lectores y la academia fue inmediata y entusiasta. Desde muy pronto muchos profesores recomendaron su lectura a sus estudiantes graduados y las ventas fueron todo un éxito aumentando durante las siguientes décadas y llevándose a cabo varias reimpresiones y tres ediciones⁵⁷⁰. Veinte años después de su publicación, *The Nature of the Chemical Bond* se había convertido en un verdadero clásico.

⁵⁷⁰ El motivo de las distintas ediciones, sobre todo la segunda, no respondieron completamente a cuestiones científicas sino de derechos de autor. Pauling no podía cobrar, tal y como estaba estipulado, ninguna regalía como concepto de derechos de autor por la primera edición que apareció como un número de la serie de *Lecturas Baker*. Por esa razón, tras ver el éxito de su texto, llevó a cabo una segunda edición con cambios mínimos pero los suficientes como para poder cobrar dichos derechos.

CAPITULO III. CIENCIAS DE LA VIDA

INTRODUCCIÓN

Aunque en sus inicios la disposición de Pauling fuera algo dubitativa, vacilante ante el estudio de complejas sustancias biológicas –sobre todo por que su estudio era fruto de la presión e intereses de Warren Weaver– una vez que decidió atacar por voluntad propia algunos problemas relacionados con la química orgánica y la estructura de las moléculas biológicas, lo hizo con toda su usual energía e imaginación. Desde el punto de vista teórico el nuevo proyecto suponía todo un reto al tener que extender sus ideas sobre el enlace químico, la resonancia y la estructura molecular a importantes compuestos orgánicos; desde el punto de vista práctico fue, por momentos, una pesadilla. Para empezar, había un problema de tamaño. Comparados con las estructuras inorgánicas hasta entonces estudiadas, moléculas biológicas como la hemoglobina, la fibrina y otras proteínas resultaban auténticos gigantes. Además, se hacía evidente la existencia de otras fuerzas de unión distintas al clásico y familiar enlace covalente. Ejemplo de ello lo encontramos en el enlace de hidrógeno, un tipo de conexión intermolecular una décima parte –aproximadamente– menos fuerte que el enlace covalente ordinario, pero con una extraordinaria importancia en las moléculas de la vida.

Los inicios de Pauling en el ámbito de las ciencias biomédicas llegaron de la mano – como tuvimos la oportunidad de ver en capítulos anteriores– del estudio de la hemoglobina. Sea ésta una premonición, una casualidad o un original determinante, la hemoglobina constituye un perfecto ejemplo del cariz que los posteriores trabajos de Pauling adquirieron: siempre a medio camino entre la biología y la medicina. Este hecho, unido a la simultaneidad en el desarrollo de los trabajos llevados a cabo, las implicaciones metodológicas y epistemológicas mutuas presentes en sus trabajos de investigación biológica y médica, parece aconsejar una exposición unificada del trabajo de Pauling en el ámbito de las ciencias biomédicas. Sin embargo, razones expositivas nos fuerzan a distinguir dos bloques que –reconocemos– pudieran parecer en principio forzados. Pero –entendemos–, así como los trabajos de biología tienen sus fundamentos últimos en los estudios llevados a cabo anteriormente en el ámbito de la química estructural, los desarrollados en el ámbito de la medicina lo están en los trabajos realizados en el ámbito biológico: las investigaciones inmunológicas y sobre la anemia falciforme están basados en la extensión y aplicación de los conocimientos obtenidos sobre la estructura de las proteínas.

Por ello, a la hora de exponer la obra de Linus Pauling en torno a las ciencias biomédicas debemos distinguir dos partes. La primera de ellas está dedicada a aquellos estudios sobre la estructura de las proteínas que contribuyeron por un lado al nacimiento de la biología molecular, la segunda a sus investigaciones en el campo de la medicina molecular y ortomolecular. De esa forma, la primera parte estará dedicada a los trabajos realizados en torno al fenómeno de la desnaturalización de las proteínas, la complementariedad, la estructura hélice alfa de las proteínas y la hipótesis de la triple hélice de los genes. En la segunda parte vamos a ver aquellos trabajos de Linus Pauling relacionados directamente con la aplicación de esos conocimientos al ámbito de la inmunología, la anemia falciforme –la primera enfermedad descrita molecularmente– y a la formulación de la medicina ortomolecular.

3.1. BIOLOGÍA MOLECULAR

3.1.1. PRIMEROS TRABAJOS SOBRE LA HEMOGLOBINA

Tal vez la primera cuestión a resolver sea por qué Pauling comenzó con el estudio de la hemoglobina, una sustancia tan compleja. La elección no fue fortuita o casual. Como señalamos en su momento la hemoglobina era atractiva por varios motivos. La primera razón, y tal vez la más importante, tenía que ver con el deseo de Pauling de comenzar sus trabajos en este ámbito con el estudio de las moléculas más importantes que habían sobre la Tierra: las proteínas, y la hemoglobina era una de ellas. A principios de la década de 1.930 nadie sabía cómo funcionaban las proteínas y el descubrimiento de sus secretos se había convertido en el punto más importante de la agenda del “Science of Man”⁵⁷¹. Pero el estudio de las proteínas era mucho más complicado que cualquiera de los otros a los que se había tenido que enfrentar el químico de Pórtland. Al gran reto que suponía el estudio de una molécula con una cantidad tan grande de partículas implicadas, había que sumar el proceso de desnaturalización que las proteínas sufren. A pesar de este problema común a todas las proteínas –del que daremos cuenta con mayor detenimiento en próximas páginas–, la hemoglobina era un buen candidato a estudiar ya que, a la enorme ventaja que daba el hecho de que pudiera conseguirse fácilmente en grandes cantidades y de forma casi pura –a partir de los glóbulos rojos del ganado vacuno y de ovino–, había que sumar la capacidad que había mostrado para cristalizarse. Eso significaba que la hemoglobina tenía una estructura regular, repetitiva y que podía ser estudiada por medio del método de difracción. Esta tercera cualidad hacía a la hemoglobina sumamente atrayente. Se trataba, por consiguiente, de una proteína conjugada, una proteína unida a otras estructuras, a un tipo de anillo llamado *porphyrin* que, al unirse a un átomo de hierro, hacía posible la adhesión de oxígeno. Pauling había estado interesado en el estudio del *porphyrin* desde 1.929 cuando, visitando Harvard, James Bryant Conant le había mostrado los trabajos que había estado realizando sobre el mismo. Esta subunidad molecular era interesante por lo inusual de su forma –parecía un anillo hecho a partir de pequeños anillos en su interior– y por constituir uno de los fundamentos últimos de la naturaleza viva: era la responsable de conducir el oxígeno en la clorofila de las plantas al igual que hacía en la hemoglobina de los animales. El *porphyrin* parecía personificar la biología molecular al mostrar su presencia y jugando siempre un papel

⁵⁷¹ Warren Weaver, su “mecenas”.

muy parecido ahí donde había vida. A su vez, el *prophyrin* estaba hecho de cuatro subunidades, llamadas *pyrrolles* que, al unirse, formaban el anillo. Cada *pyrrole* era un anillo de átomos unidos por enlaces sencillos y dobles alternativamente. Un tipo de estructura llamado “conjugado” y que Pauling había descrito en uno de sus artículos sobre la naturaleza del enlace químico. Así, el *pyrrole* se mostraba como el nivel idóneo para comenzar el “ataque” al estudio de la hemoglobina. Desde ahí, el científico de Portland podía ir viendo cómo iba aumentando la complejidad de las estructuras; cuatro *pirroles* juntos hacían un anillo *porphyrin*; un anillo *porphyrin* más un átomo de hierro formaban un *hemo*; cada *hemo* unido a una proteína globular hacía una unidad *hemo-globin*; cuatro *heme-globin* juntos hacían una molécula de hemoglobina. La estructura final era una masa casi esférica compuesta por miles y miles de átomos. Pauling concluyó que se trataba de una estructura demasiado complicada como para atacarla directamente –aunque algunos investigadores británicos lo estuvieran intentando⁵⁷²– con la cristalografía. Él creía que sería más fácil intentar romper la molécula de hemoglobina en sus piezas componentes, estudiar las subunidades y volver a unirlo todo.

Para ello, Pauling empezó a leer todo cuanto pudo encontrar sobre la hemoglobina y cómo esta molécula se unía al oxígeno. Antes del verano de 1.935 publicó un artículo⁵⁷³ en el que, a partir de una ecuación en donde se recogían los datos descritos ya por autores anteriores, era posible llevar a cabo un análisis matemático de las relaciones espaciales entre los cuatro grupos *hemos*. Según este trabajo, la orientación que parecía adoptar estos grupos era hacia las cuatro esquinas de un cuadrado. Aunque se demostró tiempo después que se trataba de una propuesta errónea, Pauling introducía por primera vez en el campo de la biología una nueva forma de mirar, de atacar las estructuras de las sustancias biológicas. Pero las novedades metodológicas introducidas por Pauling en el estudio de la hemoglobina no acabaron ahí. En el otoño de ese mismo año introdujo otra a la hora de estudiar dicha proteína: llevó a cabo un estudio basado en sus propiedades magnéticas.

⁵⁷² Sostenidos por el dinero de la Fundación Rockefeller, tres centros estaban estudiando la cuestión de la estructura precisa de las proteínas. Los dos primeros, británicos y dirigidos por dos físicos –Astbury y Bernal– trabajaron a partir de la premisa de que el secreto de la estructura de las proteínas sólo podía ser descifrado a partir del análisis cristalográfico. El tercero, en Pasadena, permitió a Pauling empezar a buscar aproximaciones teóricas y atajos basados en una comprensión de la química estructural.

⁵⁷³ Pauling, Linus (1.935)

Los datos obtenidos por medio de investigaciones previas indicaban que al unirse el oxígeno con la hemoglobina disminuía el paramagnetismo –una cualidad de las moléculas con uno o más electrones desapareados– del conjunto. De ahí, suponía Pauling, que el enlace producido fuera covalente. Sin embargo, eso debía demostrarse. Para tal fin era necesario medir con mayor precisión el cambio de paramagnetismo que se producía cuando el oxígeno se une a la hemoglobina. Siguiendo este razonamiento se puso a trabajar con Charles Coryell –por entonces aún un estudiante graduado– desarrollando un experimento bastante simple: se ponía en un pequeño tubo de cristal sangre de vaca suspendida entre los polos de un imán unido al brazo de una balanza sensible. De esa forma, cuando el imán se encendiera la sustancia paramagnética debería ser atraída en una dirección y la balanza podría medir el grado de cambio magnético. Mediante la oxigenación y desoxigenación de sangre de forma controlada, intentaron demostrar que la predicción de Pauling era correcta. Esto supuso un gran avance, ya que demostraba, a pesar de lo que otros científicos habían anticipado⁵⁷⁴, que la absorción de oxígeno se daba de forma muy específica. El descubrimiento de ésta y otras características estructurales de la hemoglobina vieron la luz en un artículo en marzo de 1.936⁵⁷⁵. Entre otras características sorprendentes de la hemoglobina, los experimentos de Pauling y Coryell habían mostrado cómo el átomo de hierro mostraba grandes cambios cuando se unía al oxígeno: los enlaces de sus *porphyrin* pasaban de ser iónicos a covalentes. En ese sentido, Pauling vendría a decir “It is interesting and surprising that the hemoglobin molecule undergoes such an extreme structural change on the addition of oxygen” y “Such a difference in bond type in very closely related substances has been observed so far only in haemoglobin derivatives”⁵⁷⁶.

Este texto de Pauling y Coryell no sólo aportaron ideas muy valiosas para la resolución de viejos problemas, sino que proporcionó también un claro ejemplo de cómo un químico físico podía trabajar exitosamente en el campo de la bioquímica.

⁵⁷⁴ Antes de estos trabajos los científicos creían simplemente que la unión se producía a partir de la poca diferencia de propiedades magnéticas, pero para Pauling afirmar tal cosa era casi como defender que era posible cambiar las propiedades magnéticas del imán de un niño dejándolo calentarse al Sol.

⁵⁷⁵ Pauling, L. y Ch. Coryell (1.936)

⁵⁷⁶ Citas extraídas de Hager, Thomas (1.995), p. 193.

3.1.2. LA ESTRUCTURA DE LAS PROTEÍNAS

3.1.2.1. El proceso de desnaturalización de las proteínas

Hemos visto que Pauling decidió comenzar sus investigaciones en el ámbito de las ciencias biomédicas a través del estudio de la hemoglobina, ya que ésta era una de las proteínas más asequibles, oportunas e importantes de las que disponía. Sin embargo, esta molécula –como cualquier sustancia biológica– presentaba un importante inconveniente a la hora de ser estudiada: su extraordinaria complejidad, la gran cantidad de átomos que las componen y, sobre todo, la afectación de la desnaturalización que en ellas se observaba. Entonces, ¿Por qué empezar sus investigaciones en el campo de la biología y la medicina a través del estudio de una proteína? ¿En qué consiste la desnaturalización? ¿Qué papel jugó Pauling en su estudio?

Los pelos y uñas, músculos y piel, la mayor parte de los nervios y los cromosomas, las enzimas, anticuerpos y la hemoglobina están hechos de proteínas. Por ello, muchos de los científicos –entre ellos Pauling– veían en el estudio de las mismas el camino para alcanzar el conocimiento del secreto de la vida, pero su estudio podía convertirse en una pesadilla para el científico. Con diferentes tamaños, formas y propiedades, algunas proteínas podían estar compuestas por decenas de miles de átomos, una magnitud muy superior a la que Pauling había manejado hasta ese momento. Pero había otra dificultad –como mencionábamos– aún mayor a la hora de estudiarlas: la facilidad que las proteínas presentaban para romperse o cambiar. Un poco de calor, la presencia de un ácido o alcaloide así como la agitación mecánica parecían alterar sus propiedades y actividades. Se trataba de un proceso llamado *desnaturalización*.

Pero así como la desnaturalización supuso al principio una dificultad para su estudio, su comprensión resultó decisiva para el posterior desarrollo de la biología al abrir una puerta a la comprensión de la estructura de las proteínas. La lectura de los trabajos de dos científicos del Instituto Rockefeller –Alfred Mirsky y Mortimer Anson– le había permitido a Pauling saber que muchas proteínas desnaturalizadas por medio de un suave calentamiento –habían perdido su configuración y propiedades iniciales como era el caso de la hemoglobina– podían, si se volvían a enfriar correctamente, recobrar su forma y actividad original. Sin embargo, si se calentaban

más o de forma rápida las proteínas parecían romperse y la desnaturalización producida era irreversible. Estas relaciones entre estructura y función, destrucción y posibilidad de reconstrucción de formas y funciones, llamó la atención de Pauling y le sugirió una idea: los dos tipos de desnaturalización observados –uno reversible y otro irreversible– podían ser señales de la presencia de dos tipos de enlaces químicos; el primero de ellos, relativamente débil, fácil de romper y reversible; el segundo, un enlace fuerte, difícil de romper e imposible de reconstruir. Pauling tenía una corazonada acerca de los enlaces más débiles. Había leído algo sobre los enlaces de hidrógeno, un enlace muy débil en el que un átomo de hidrógeno actúa como puente entre otros dos átomos. El trabajo original se había llevado a cabo con moléculas de agua, sin que nadie viera en el mismo una posible aplicación a otros casos. Pero Pauling vio que la fuerza estimada del enlace de hidrógeno coincidía con los datos obtenidos en el primer tipo –también se habla del primer paso– de desnaturalización. Fue entonces cuando empezó a pensar en la forma en la que el enlace de hidrógeno podría estar presente en las proteínas.

Por su parte, el químico orgánico Emil Fischer⁵⁷⁷ había demostrado que las proteínas contenían enlaces covalentes fuertes que si se rompían, provocaban que la proteína quedara deshecha en sus partes. Hacía falta mucha fuerza para romper esos enlaces, pero una vez conseguido era muy difícil reformarlos. Fue entonces cuando Pauling pensó que este enlace podía representar el segundo tipo de desnaturalización.

Para probar sus ideas Linus Pauling invitó a Alfred Mirsky –uno de los científicos del Instituto Rockefeller mencionados anteriormente– a Pasadena para trabajar con él en una serie de estudios diseñados con el fin de medir cuidadosamente la energía necesaria para cada tipo o nivel de desnaturalización. A Mirsky le gustaron las ideas de Pauling, ya que encajaban muy bien con la teoría de Fischer para quien las proteínas estaban hechas a partir de una gran cadena de aminoácidos. Para el químico alemán, en la formación de la serie proteínica cada uno de estos segmentos⁵⁷⁸ se une a otro emitiéndose una molécula de agua y formándose un tipo de enlace al que llamó *enlace peptídico*. La idea de Pauling era que estas largas cadenas –llamadas también polipeptídicas– adquirirían su configuración final rizada o helicoidal a partir de la

⁵⁷⁷ Ver referencias a los trabajos de Emil Fischer en el capítulo dedicado al contexto científico, “Las ciencias de la vida: biología y medicina”.

⁵⁷⁸ Aminoácidos.

formación de enlaces débiles de hidrógeno entre diferentes partes de la cadena. Y era precisamente la ruptura de estos enlaces lo que producía el primer tipo de desnaturalización.

Estos trabajos llevados a cabo por Pauling y Mirsky quedaron recogidos en el artículo de 1.936 "On The Structure of Native, Denatured, and Coagulated Proteins". En dicho trabajo formularon una nueva teoría basada en un razonamiento que vendría a decir así:

Nuestra concepción de una molécula de proteína nativa (viendo sus propiedades específicas) es la siguiente... la molécula consiste en una cadena polipeptídica continua sin interrupciones a lo largo de la molécula (o, en ciertos casos, de dos o más cadenas); esta cadena está doblada únicamente en una configuración definida.⁵⁷⁹

De esa forma ambos científicos constataban cómo todas las proteínas están hechas a partir de secciones de aminoácidos formando cadenas polipeptídicas, posiblemente de la misma forma en la que Astbury había pensado para la keratina. Con fuertes enlaces peptídicos que sobreguardaban la cadena como una pieza, pero con débiles enlaces de hidrógeno entre las distintas secciones que le dan su estructura final, esta teoría permitía entender la cadena se podía enderezar y líar como un hilo suelto en una caja de costura. Siempre que la cadena permanezca de una pieza –y bajo ciertas condiciones– los enlaces de hidrógeno pueden volver a reformarse y la proteína a recuperar su forma y actividad original. Sin embargo, la ruptura de las mismas cadenas y la desfragmentación de los enlaces peptídicos dan lugar a una desnaturalización irreversible de la proteína.

Este trabajo⁵⁸⁰ fue rápidamente reconocido como un importante avance en este campo. De una pincelada, el entendimiento de Pauling del enlace químico había unificado y provisto de una simple explicación una gran variedad de observaciones realizadas en torno a la desnaturalización y la actividad de las proteínas.

⁵⁷⁹ A. E. Mirsky y L. Pauling (1.936). Cita original: "Our conception of a native protein molecule (showing specific properties) is the following... The molecule consists of one polypeptide chain which continues without interruption throughout the molecule (or, in certain cases, of two or more such chains); this chain is folded into a uniquely defined configuration, in which it is held by hydrogen bond..."

⁵⁸⁰ A. E. Mirsky y L. Pauling (1.936).

3.1.2.2. La estructura de la hélice alfa

Pauling había dado así con la explicación completa de la estructura externa de las proteínas, pero ¿cómo era la estructura de la cadena misma? ¿Cómo se unían los aminoácidos entre sí? Pauling quería ser el primero en publicar la estructura precisa de una proteína y tenía para ello una nueva candidata: la keratina. En Inglaterra ya se habían realizado buenos trabajos sobre esta proteína a partir de los rayos x. Se había comprobado que el pelo estaba formado a partir de moléculas muy largas con una estructura que se repetía cada 510 picómetros⁵⁸¹. La mayoría de los investigadores ingleses –y el mismo Pauling– pensaban que los datos aportados por los rayos x indicaban que la keratina tenía varios tipos de pequeñas estructuras en forma de zig-zag que le daban la habilidad –entre otras– de extenderse cuando se mojaba y contraerse cuando se secaba. A partir de estas ideas, los descubrimientos llevados a cabo en torno a la estructura de los aminoácidos, la naturaleza del enlace peptídico y sus ideas acerca del enlace de hidrógeno, Pauling empezó a construir un “modelo mental” de la keratina. Sin embargo este intento se vino abajo cuando, durante su visita a Inglaterra a principios de 1.948, conoció otro tipo de acercamiento: los investigadores británicos afirmaban que la keratina y otras proteínas podrían tener una estructura molecular más parecida a una espiral o hélice. Estando aún en el viejo continente Pauling tuvo que guardar cama durante unos días como consecuencia de una seria infección nasal. Fue entonces cuando dio con la solución.

Tras dos días aburridos postrado en la cama Pauling empezó a pensar en nuevas formas de atacar el problema de la estructura de las proteínas. Recordó cómo en 1.937 le había impresionado el hecho de que los aminoácidos que podíamos encontrar en la cadena polipeptídica de una proteína pudieran ser cualquiera de los 20 tipos existentes. Eso sólo era posible –pensó Pauling– si se asumía que todos los aminoácidos eran estructuralmente equivalentes a la hora de plegarse en la cadena polipeptídica. Recordó entonces un teorema que ya le había llamado la atención 25 años atrás durante un curso de matemáticas al que había asistido con el profesor Harry Bateman. Este teorema establecía que las operaciones más generales que convierten a un objeto asimétrico en un objeto asimétrico equivalente (tal como

⁵⁸¹ El picómetro es una unidad de longitud del SI que equivale a la billonésima parte de un metro ($1 \text{ pm} = 1 \times 10^{-12} \text{ m}$). Normalmente se emplea para medir distancias de escala atómica, aunque es más común usar el anström (Å).

un amino ácido L en otra molécula del mismo amino ácido L) es un movimiento de rotación-traslación, es decir, una rotación en torno a un eje combinado con una traslación a lo largo del mismo. La repetición de esta operación –vio entonces Pauling– producía una hélice. Por consiguiente, era posible pensar que la cadena polipeptídica fuera resultado de la rotación sucesiva de distintos grupos aminos, teniendo presente que éstos son planos. Pidió entonces a su esposa que le diera papel, un lápiz y una regla. Comenzó a esbozar una cadena de aminoácidos cuidándose de guardar las proporciones tanto como le era posible, indicando los enlaces peptídicos con líneas dobles para señalar dónde los átomos estaban unidos rígidamente. Dispuso los aminoácidos de tal manera que ninguna cara pudiera mirar hacia dentro, hacia el centro de la molécula. Empezó entonces a plegar el papel a lo largo de líneas paralelas de tal manera que la cadena de aminoácidos dibujada formara una espiral. Fue entonces cuando vio ante sí dos estructuras que satisfacían las suposiciones previas. Allí en donde se encontraban presentes los enlaces peptídicos planos, se mantenían ángulos razonables para otras conexiones y fácilmente se formaban los enlaces de hidrógeno entre cada piso de la espiral. Una de estas estructuras era la hélice alfa –con 4.6 aminoácidos por vuelta– y la otra la hélice beta. Con ayuda de la regla empezó a medir la distancia existente entre cada sección de la espiral, entre las unidades repetidas a lo largo del eje de la fibra. Vio que la estructura no se repetía sino después de 18 aminoácidos, cada 5 vueltas, con una distancia de 27.0 Å, lo que correspondía a 5.4 Å por vuelta. Este valor no era acorde con los valores experimentales que arrojaban un arco meridional de 5.1 Å. Intentó encontrar otras formas que la distancia de 5.4 Å se fuera acercando a 5.1 Å, pero no era capaz. El sentimiento de Pauling hacia la hélice alfa era algo ambiguo; por un lado estaba satisfecho con ella, ya que sentía que era una forma aceptable de representar el modo en el que se podía plegar la cadena polipeptídica, lo único que necesitaba era el apoyo experimental para llevar a cabo los últimos reajustes; por otro lado estaba muy preocupado por la discrepancia existente entre el valor experimental de 5.1 Å y los 5.4 Å que daba su modelo. Por ello decidió volver a la cama, no decir ni publicar absolutamente nada acerca de la hélice alfa hasta que comprendiera la razón de tal discrepancia.

Una vez recuperado de su convalecencia aprovechó su estancia en Oxford para hablar con Perutz acerca de sus experimentos sobre la función de distribución de la densidad del electrón en la hemoglobina. Le pareció entonces que podía ver en esos diagramas evidencias de

la presencia de la hélice alfa, pero “I was troubled so much by the 5.10 Å value”⁵⁸², por lo que no dijo absolutamente nada acerca de la hélice alfa hasta que regresó a EEUU. A su regreso a Pasadena con el inicio del semestre de otoño de 1.948 Pauling habló con Corey y Herman Branson (que entonces estaba en el Caltech como profesor invitado) sobre la hélice alfa. Branson repasó los cálculos de Pauling constatando que estaban bien y que él no podía encontrar una tercera estructura viable. Un año más tarde W.L. Bragg, J. Kendrew y M. Perutz⁵⁸³ publicaron un artículo en *Proceedings of the Royal Society of London* donde describían cerca de 20 estructuras posibles para las proteínas. En dicho trabajo, concluían que ninguna de estas distribuciones parecía satisfactoria para la alfa-keratina. Ahora bien, ninguna de ellas coincidía con el modelo de Pauling ni tenían en cuenta su suposición de que los grupos peptídicos fueran planos. A pesar de los esfuerzos infructuosos de un año y medio intentando entender la discrepancia entre los 5.4 Å de su modelo y los 5.10 Å observados experimentalmente, Pauling y Corey decidieron publicar una descripción de las hélices alfa y beta. Este trabajo apareció en el *Journal of American Chemical Society* en otoño de 1.950⁵⁸⁴. En el mismo se anunciaba que habían ideado “una configuración espiral” conforme a los datos empíricos. Las ideas y conceptos que habían emergido jugando con papel plegado en 1.948 eran ya una realidad⁵⁸⁵. Este trabajo fue seguido en 1.951⁵⁸⁶ por uno más detallado con Branson como coautor y por una serie de artículos menores sobre el plegamiento de la cadena polipeptídica. Empezaba a quedar claro que la hélice alfa era la forma en la que se plegaban las cadenas polipeptídicas de la keratina pero, tal vez lo más importante de los trabajos de Pauling y Corey era que, por primera vez, se demostraba que muchos de los materiales de la vida tenían forma de espiral⁵⁸⁷. Reportaron entonces tres propuestas detalladas de estructuras planas:

⁵⁸² Pauling, Linus “The Discovery of the Alpha Helix”, unpublished paper written in 1.982, on file at LPI. Cita extraída de Marinacci, Barbara, ed. (1.995), p. 127.

⁵⁸³ Lawrence Bragg, J. C. Kendrew y M. F. Perutz (1.950)

⁵⁸⁴ Pauling, Linus y Robert B. Corey (1.950)

⁵⁸⁵ En sus conferencias llamadas “baby toy” Pauling y Corey utilizaban una especie de burbujas plásticas de varios colores, tamaños y formas para demostrar sus últimas teorías.

⁵⁸⁶ Pauling, Linus, Robert B. Corey y H. R. Branson (1.951)

⁵⁸⁷ Un importante acontecimiento para la futura consolidación del modelo de Pauling y Corey fue la publicación de las fotografías obtenidas por investigadores en Courtauld de fibras polipeptídicas sintéticas –concretamente *poly-gamma-methyl-L-glutamate*– por medio de rayos x. Estas imágenes mostraban claramente que la distancia de pseudo repetición a lo largo del eje de las fibras era 5.4 Å más que 5.1° Å

1. *Rippled sheet*, en la que participan amino ácidos de dos tipos diferentes, ninguno de los cuales puede ser un L-amino ácido, pero puede ser un aminoácido glicina.
2. *Antiparallel-chain pleated sheet*).
3. *Parallel-chain pleated sheet*).

Según sus cálculos, alrededor del 85% de los amino ácidos en la mioglobina y hemoglobina estaban en segmentos con una estructura hélice alfa, con las otras formas implicadas en los extremos de la cadena. En otras proteínas globulares la hélice alfa, la *parallel-chain pleated sheet*, y el *antiparallel-chain pleated sheet* constituían estructuras igualmente importantes. Así, estas tres formas de plegarse la cadena polipeptídica constituían las estructuras secundarias más importantes de todas las proteínas.

Como el mismo Pauling se encargaría de señalar tiempo después, estos trabajos llevados a cabo en la división de química e ingeniería química del Caltech, primero con la recolección de información experimental acerca de la estructura de las moléculas, luego con el desarrollo de principios estructurales y finalmente con la aplicación de esos principios al descubrimiento de la hélice alfa y el *pleated sheets*, mostraron la extraordinaria importancia que podía tener la química estructural en el campo de la biología molecular.

Pero ¿por qué muchos científicos –principalmente ingleses– no creían en la hélice alfa? La razón fundamental era que contradecía la creencia generalizada de que la naturaleza tendía a organizarse de forma simple, bajo patrones simétricos. Esta creencia no estaba, de hecho, basada en principios científicos establecidos, sino que reflejaba el gusto estético de los químicos y físicos punteros de ese tiempo. Es irónico que fuera precisamente la cuestión de la simetría lo que ponía en dudas su modelo. Así, la comunidad de biólogos británicos atacaban la hélice alfa por violar la simetría mientras que Pauling, solo ante todos los bioquímicos, sostenía que la hélice alfa podía tener un número de vueltas o repeticiones asimétricas, no lineal, de aminoácidos a lo largo de la cadena helicoidal. Esta idea era inaceptable para muchos: la regularidad de los patrones que daba la cristalografía obligaba a asumir que el número de aminoácidos debía ser exacto incluso en cada vuelta completa, por lo que no podía finalizar –se pensaba– a mitad de un aminoácido: sólo Pauling vio que esta asunción no era necesariamente

real⁵⁸⁸. Sin embargo, la defensa de su modelo se vio complicada por cuestiones políticas. Como vimos durante la biografía introductoria, sus inclinaciones políticas y su lucha por el cese del desarrollo de armas nucleares le llevaron a ser protagonista de uno de los episodios de la “caza de brujas” más bochornosos del siglo XX. Impotente ante la negativa de las autoridades para extenderle el pasaporte y la posibilidad de presentar y defender su modelo en la *Royal Society*, Pauling decidió organizar una conferencia sobre la estructura de las proteínas en Pasadena. Así, en Septiembre de 1.953 acudieron a California las más importantes figuras del momento: Perutz, Astbury, Kendrew, Bragg,... Sin embargo, la presagiada batalla entre Pauling y los científicos ingleses finalmente no se dio: Max Perutz –el decano de los investigadores británicos– ya había aceptado antes del viaje las ideas de Pauling. Había tenido la oportunidad de estudiar detenidamente los datos y la propuesta del químico estadounidense quedando convencido de que dichas ideas eran correctas. Así, la atención de la comunidad empezó a redireccionarse del estudio de la estructura de las proteínas a la pregunta por el ADN.

3.1.3. LA CARRERA HACIA LA ESTRUCTURA DEL ADN

Pauling ya había mostrado tiempo atrás un interés creciente por las moléculas biológicas responsables de la reproducción. Ejemplo de ello lo encontramos en el artículo que presentó en 1.948 titulado “Molecular Architecture and the Process of Life” en la *Nottingham Lecture*. En dicho trabajo Linus Pauling afirmaba que

El mecanismo detallado por medio del cual un gen o una molécula viral produce replicas de sí mismo aún no es conocido. En general, el uso de un gen o virus como una plantilla podría conducir a la formación de una molécula no con una estructura idéntica, sino con una estructura complementaria. Podría pasar, desde luego, que una molécula pueda ser idéntica a la plantilla sobre la cual fue moldeada. Ahora bien, este caso parece demasiado improbable para ser válido en general. Si la estructura que sirve como una plantilla (el gen o la molécula viral) consiste en, digamos, dos partes, que son complementarias en la estructura, entonces cada una de estas partes puede servir como el molde para la reproducción de una réplica de la otra parte...⁵⁸⁹

⁵⁸⁸ Afortunadamente, muchos otros aspectos de la hélice alfa novedosos introducidos por Pauling no encontraron ninguna controversia, como el descubrimiento de que el enlace peptídico entre dos aminoácidos debían darse en un plano. Esto facilitaba mucho las cosas, ya que de ese modo el número de posibles formas que la hélice podía adoptar quedaba muy reducido.

⁵⁸⁹ Pauling, Linus (1.948, 28 de Mayo), p. 10. Texto completo en Anexos.

De esa forma un virus o un gen –indicaba Pauling– pueden reproducirse a partir de una escisión tal, que cada una de las nuevas secciones sea complementaria de la otra y pueda dar lugar a una molécula enteramente nueva, copia completa y exacta de la primera original⁵⁹⁰. Sin embargo, Pauling aún estaba muy lejos de los términos bajo los cuales se resolvió la carrera por el descubrimiento de la estructura molecular más importante del mundo: aquella en la que debía esconderse el secreto de la vida, de la herencia. Hacía falta aún que abandonara la tradicional interpretación del “dogma central” que sugería que la información de la transferencia genética estaba localizada en las proteínas. Pero, tal y como él mismo diría al respecto tiempo después:

Durante la Guerra estaba llevando a cabo algunos trabajos con polisacáridos de neumococo y sabía del material hereditario en el ADN. Pero no lo acepté; yo estaba encantado con las proteínas... pensaba que las proteínas eran probablemente el material hereditario, antes que los ácidos nucleicos.⁵⁹¹

Pauling no era el único en sostener esta perspectiva. Como señalamos en el capítulo dedicado al contexto científico, eran muchos los investigadores que aún se guiaban por esa interpretación. Por ello, podemos señalar el artículo de Avery, MacLeod y M. McCarty de 1.944 como un trabajo clave para el inicio de una carrera que, nunca reconocida por sus protagonistas, marcó definitivamente el nacimiento y posterior desarrollo de la biología molecular. En dicho trabajo Avery y sus colaboradores señalaban por primera vez lo que otros sólo sospechaban: las moléculas de ácido desoxirribonucleico podrían ser las responsables de transferir la información genética. El exhaustivo informe que Avery presentó al *Journal of Experimental Medicine* demostraba que los genes estaban prácticamente compuestos de ADN; sin embargo, optó por atajar todo tipo posible de entusiasmos:

La sustancia inductora, conforme a sus propiedades químicas y físicas, parece ser una forma de desoxirribonucleato [ADN] de sodio muy polimerizada y viscosa (...) Si los resultados del presente estudio se confirman, entonces se deberá considerar que los ácidos nucleicos poseen una especificidad biológica cuya base química aún está por determinarse.⁵⁹²

⁵⁹⁰ Aunque muchos de los detalles fueron revisados y corregidos más tarde, la historia ha aceptado sus ideas generales como correctas.

⁵⁹¹ Citado en Olby, R. (1.974), *The Path to the Double Helix*, p. 366. Cita extraída de Serafini, A. (1.989), p. 152.

⁵⁹² Avery, O. T., C. M. MacLeod y M. McCarty (1.944), pp. 137-158.

Este trabajo fue importante no sólo por su contenido, sino porque inspiró y animó a muchos científicos a adentrarse y continuar trabajando sobre la cuestión de la molécula de la vida y estimuló a repensar qué debía entenderse por “dogma central”. Frente a la versión extendida que sugería que la información de la transferencia genética estaba localizada en las proteínas –y que Pauling como venimos diciendo seguía– debía plantearse la posibilidad de que fueran los ácidos nucleicos los que llevaran el mensaje esencial de la vida de una generación a otra.

Tan sólo cinco años más tarde, y ya en plena carrera, Pauling y Corey publicaron bajo esta nueva interpretación un artículo que llevaba por título “A Proposed Structure for the Nucleic Acids”. En las primeras líneas de este texto encontramos ya una actitud muy diferente ante la importancia de los ácidos nucleicos en la transmisión de los caracteres hereditarios:

Los ácidos nucleicos, como los componentes de los organismos vivos, son comparables en importancia a las proteínas. Hay pruebas de que ellos están implicados en los procesos de división de la célula y el crecimiento, que participan en la transmisión de caracteres hereditarios y que son componentes importantes de los virus. Un entendimiento de la estructura molecular de los ácidos nucleicos puede ser de gran valor en el esfuerzo por entender los fenómenos fundamentales de vida.⁵⁹³

En dicho artículo, Pauling y Corey definieron los ácidos nucleicos como moléculas gigantes compuestas por unidades complejas. Cada unidad consistía en la unión de un ión fosfato (HPO_4^{--}), un azúcar (ribosa en el ácido ribonucleico y desoxirribosa en el ácido desoxirribonucleico) y una purina o pirimidina (adenina, guanina, timina, citosina, uracil, 5-metilcitosina). A partir de estos datos, de los obtenidos por medio de fotografías que ellos mismos habían tomado y de la información que pudieron extraer de las fotografías tomadas por Astbury y Bell, sugirieron que la estructura del ADN debía ser muy parecida a la configuración de las cadenas polipeptídicas de proteínas. Es decir, debía ser algo muy parecido a la hélice alfa.

Una configuración común de las cadenas polipeptídicas en muchas proteínas es la hélice α . En esta estructura las unidades de aminoácidos son equivalentes (a excepción de las diferencias en las cadenas laterales); hay solamente un tipo de relación posible entre cada unidad y las unidades vecinas, una operación que convierta un aminoácido en la unidad siguiente. Con el uso continuado de esta operación, una traducción de rotación, la hélice α aumenta. No parece

⁵⁹³ Pauling, Linus y Robert B. Corey (1.953), p. 84.

improbablemente que una sola operación general esté también implicada en la construcción de los ácidos nucleicos, polinucleótidos, de sus unidades asimétricas fundamentales, las unidades nucleótidas. La operación general implicada sería una reflexión de rotación, y su uso conduciría a una estructura helicoidal. Asumimos, en consecuencia, que la estructura para ser formulada sea una hélice. La molécula gigantesca así sería cilíndrica, con un corte transversal aproximadamente circular.⁵⁹⁴

El modelo presentado era, sobre todo, un intento de aplicación de la metodología y solución propuesta en su momento a la resolución de la estructura de las proteínas, pero con una variante muy importante: no se trataba de una hélice, sino de una triple hélice:

La estructura que nosotros proponemos es una estructura de tres cadenas, donde cada cadena es una hélice con una traducción fundamental igual a 3.4 Å, y cada una de las tres cadenas está unida a una de las otras (a excepción de diferencias en las bases del nitrógeno) a través de operaciones en torno a un eje triple.⁵⁹⁵

A pesar de los intentos de Pauling y Corey por mostrar la pertinencia del modelo, el artículo presentaba graves errores. Entre las objeciones rápidamente detectadas por otros autores cabe destacar, por un lado, que la estructura molecular interna propuesta no se correspondía, técnicamente, con la de un ácido y, por otro, que el modelo carecía del poder explicativo que cualquier buena hipótesis científica requiere. Sin embargo Pauling se negaba a aceptar las críticas. Pauling no llegó a mostrarse completamente convencido de la validez de dichas críticas, incluso –tal y como afirmara posteriormente Schomaker en una entrevista concedida a Anthony Serafini⁵⁹⁶– después de la publicación del modelo de Watson y Crick. Ejemplo de ello lo encontramos en dos históricas cartas firmadas por el químico estadounidense. En la primera de ellas, enviada a Watson el 5 de marzo de 1.953, vino a decir:

Le estoy escribiendo para recordarle sobre la conferencia sobre las proteínas... Pienso que también deberíamos discutir sobre la estructura de los ácidos nucleicos de la misma forma en como lo hicimos con las proteínas... y espero por ello que usted llegue a tiempo... También, Delbruck dijo que usted había encontrado una nueva y hermosa estructura de los ácidos nucleicos... El profesor Corey y yo no sentimos que se haya probado que nuestra estructura sea correcta, aunque estamos inclinados a pensar que sí.

⁵⁹⁴ Pauling, Linus y Robert B. Corey (1.953), p. 86

⁵⁹⁵ Pauling, Linus y Robert B. Corey (1.953), p. 87.

⁵⁹⁶ Serafini, A. (1.989), p. 155

Puedo mencionar que hemos hecho una pequeña revisión de ella... El profesor Verner Schomeker...precisó que podía hacer una significativa mejora rotando el tetraedro del fosfato sobre sus hachas verticales, unos 45 grados...Actualmente pienso que es necesario realizar este pequeño cambio en nuestra estructura propuesta. Aún estoy comprobando si es necesario realizar algún otro cambio.⁵⁹⁷

Igualmente interesante y esclarecedora de la actitud de Pauling, de su resistencia a desistir en la lucha por la validez de su modelo, fue la carta que enviara al mismo Watson y a Crick el 27 de marzo de 1.953, en donde dice:

Estoy muy contento por su carta del 21 de marzo y ver la propuesta que usted ha enviado a *Nature*.

Pienso que es bueno que haya ahora dos estructuras propuestas para el ácido nucléico y espero con impaciencia averiguar qué decidirá cuál es la incorrecta. Sin la duda los datos del King's-College eliminarán uno u otro.

Nosotros hemos cuidado el problema que plantean los enlaces demasiado pequeños de van der Waals en nuestra estructura haciendo girar los grupos de fosfato. No pienso que el problema de la repulsión entre los fosfatos cargados sea uno importante. No digo, sin embargo, que yo sienta más fuertemente que nuestra estructura es correcta antes que la suya.⁵⁹⁸

Pero como decíamos, a pesar de los intentos de Pauling, la invalidez del modelo propuesto quedó patente muy pronto convirtiéndose la doble hélice de Watson y Crick en el centro de las miradas de todos los investigadores. Sin embargo, la deuda de estos dos investigadores, como la de muchos otros, con Pauling fue ampliamente reconocida. En sus conversaciones diarias Watson y Crick señalaron en más de una ocasión su completo convencimiento de que el descubrimiento de L. Pauling de la hélice α había sido posible gracias, por un lado al uso del sentido común y no sólo de las matemáticas, por otro lado, a la confianza que Pauling había depositado en las leyes de la química estructural y el empleo de modelos moleculares como instrumento de trabajo. Watson y Crick intentaron seguir la senda abierta por Pauling y centrar su trabajo en el nuevo enfoque estructural de las moléculas biológicas que había desarrollado el químico de Pórtland. A partir de los estudios de difracción de los rayos X y la introducción del método propuesto por Pauling de elaboración de modelos con trozos de

⁵⁹⁷ Carta de Pauling enviada a J.D. Watson el 5 de marzo 1.953. Cita extraída de Serafini, A. (1.989), p. 156.

⁵⁹⁸ Carta de Pauling enviada a J.D. Watson y F.H.C. Crick el 27 de marzo 1.953.

papel y otros materiales que representaran las moléculas, Watson y Crick fueron capaces de elaborar su famoso modelo de la doble hélice⁵⁹⁹.

⁵⁹⁹ Ejemplo gráfico de la deuda de Crick y Watson con la metodología desarrollada por Pauling la encontramos en la famosa fotografía de los dos científicos en la que posan junto a su modelo estructural de la doble hélice.

3.2. MEDICINA

3.2.1. INMUNOLOGÍA

Como tuvimos la oportunidad de ver en el capítulo dedicado al contexto científico, cuando Pauling comenzó a interesarse por la inmunología ya se sabía que los anticuerpos podían combatir miles y miles de sustancias diferentes, incluyendo algunos químicos artificiales. Aunque se habían producido importantes avances había muchas cuestiones aún por contestar: ¿cuál es la estructura y cómo funcionan los anticuerpos? ¿Cómo pueden las moléculas proteínicas como los anticuerpos “ver” –por ejemplo– la diferencia entre un antígeno y otro? ¿Cómo puede el cuerpo producir una cantidad tan grande de anticuerpos observados y con tal precisión? ¿Cómo podría el cuerpo saber cómo crear proteínas con el fin de atacar directamente blancos sintéticos ante los cuales nunca antes había estado expuesto? Como Landsteiner – entonces uno de los mayores expertos en inmunología– le había comentado, los anticuerpos eran un intrincado rompecabezas. Aunque todos están hechos a partir de proteínas y una mezcla muy parecida de aminoácidos, con un tamaño y una forma muy parecidos, cada uno de ellos mostraba una gran especificidad a la hora de unirse a una molécula o antígeno. Landsteiner había comprobado, además, que un solo animal podía producir miles de anticuerpos diferentes, incluyendo nuevos a partir de químicos sintéticos no presentes en la naturaleza. Por ello, quería que el químico estadounidense le ayudara a explicar cómo era posible, desde el punto de vista químico, dar cuenta a estos y otros interrogantes ligados, principalmente, con la cuestión de la especificidad que mostraban los anticuerpos. Podemos considerar este primer contacto con Landsteiner como el primer acercamiento serio de Pauling con la inmunología, así como la lectura que llevó a cabo del que por entonces era el último libro del inmunólogo en donde leyó:

Las características morfológicas de plantas y especies animales constituyen el principal tema de las ciencias naturales descriptivas y son los criterios para su clasificación. Pero recientemente se ha reconocido que en los organismos vivos, como en el reino de cristales, las diferencias químicas son paralelas a la variación en la estructura.⁶⁰⁰

⁶⁰⁰ Hager, Thomas (1.998), p. 236

Pauling estaba fascinado con la forma en la que Landsteiner había sido capaz, en apenas dos sentencias, de unir la biología, la química y la cristalografía así como el modo en el que había expuesto la forma en la que el sistema inmunológico permitía a cada animal individual reconocer las diferencias químicas entre él y los demás. Intuía ya –siguiendo su línea normal de pensamiento– que la estructura molecular de las sustancias presentes debía estar implicada en ello, así como en la forma en la que los anticuerpos podían determinar su especificidad⁶⁰¹. De gran importancia fue el hecho de que Pauling dedicara gran parte de su tiempo a la investigación inmunológica mientras concluía con Mirsky su teoría sobre la desnaturalización de las proteínas. La unión de los conocimientos obtenidos sobre la desnaturalización y el desarrollo de la vieja idea de finales del siglo XIX de la complementariedad⁶⁰² fueron claves para sus trabajos sobre inmunología. Fruto de estos trabajos en junio de 1.940⁶⁰³ vio la luz en *Journal American Chemistry Society*, un artículo teórico que tardó bastante en sacar por falta de experimentos que lo apoyaran⁶⁰⁴. Debido a la extensión y complejidad del campo de la inmunología –señala Pauling al principio del artículo– así como de las observaciones experimentales llevadas a cabo

⁶⁰¹ Aunque no encontramos ningún texto de esa época donde Pauling explique qué entiende por especificidad biológica, sí que lo hacemos en textos posteriores. En dichos trabajos el químico estadounidense mostraba cómo por entonces entendía la *especificidad biológica* en términos de función. Utilizando un ejemplo suyo, al hablar de genes decimos de éstos que son específicos en sus funciones. Las moscas de la fruta tienen dos alas, pero una mutación en uno de sus genes puede producir una mosca de cuatro alas; el color de los ojos es determinado por el gen; una mutación puede causar un cambio en el color o incluso la ausencia de pigmentación. Además, un huevo de mosca de la fruta fertilizado produce otra mosca de la fruta, no una mosca común. Aparte de encontrar ejemplos de especificidad biológica en el campo de la genética, podemos hacerlo en muchos otros campos, como es el caso de las enzimas. Éstas, que actúan causando reacciones biomédicas muy rápidas, son fuertemente específicas hasta el grado de producir tan sólo un determinado tipo de reacción ante la presencia de una determinada sustancia.

⁶⁰² Antes de terminar su artículo sobre anticuerpos Pauling había leído, por recomendación de Delbrück, el último artículo de Pascual Jordan sobre la forma en la que moléculas idénticas, por motivo de la resonancia mecánico-cuántica, tendían a unirse. Esto le podía ayudar, según el investigador alemán, a explicar la habilidad de algunas moléculas para replicarse y dar lugar a copias exactamente iguales de sí mismas. Pauling advirtió rápidamente que las ideas de Jordan estaban “equivocadas” y, días más tarde, se presentó ante Delbrück para hacerle saber que había escrito un artículo –cuya autoría quería compartir con él– con el título “The Nature of the Intermolecular Forces Operative in Biological Process”. En dicho texto demolía la idea de Jordan sobre la atracción entre moléculas idénticas –y por consiguiente la formación de ese modo de estructuras complementarias– como consecuencia de la resonancia. Si bien Pauling especial hincapié en la importancia del concepto en aquellos casos en donde las moléculas hacen copias de sí mismas y “complementariedad e identidad podrían coincidir”, señalaba explícitamente que “We... feel that complementariness should be given primary consideration in the discussion of the specific attraction between molecules and the enzymatic synthesis of molecules” [Pauling, Linus (1.940). Cita extraída de Hager, Thomas (1.995), p. 242]. A partir del concepto de formas complementarias se hacía posible dar cuenta de la especificidad en la biología. Sin embargo, y a pesar de su extraordinaria importancia, más allá del partido que el mismo Pauling pudo extraerle, esta nota se difuminó entre la literatura existente como un simple murmullo. Solamente años después el texto fue rescatado y aclamado por los historiadores de la ciencia como uno de los documentos fundadores de una nueva ciencia: la biología molecular.

⁶⁰³ “A Theory of the Structure and Process of Formation of Antibodies”

⁶⁰⁴ Linus Pauling vendría luego a decir que se trataba de un artículo teórico y que, después de todo, debía verse como una guía para producir experimentos, no una última palabra.

–lo cual hacía imposible la formulación de una teoría de la estructura de los anticuerpos a partir de material observacional– el químico propuso como método alternativo intentar dar respuesta a la siguiente cuestión:

¿Cuál es la estructura más simple que puede ser sugerida sobre la base de la extensa información ahora disponible en torno a las fuerzas intramoleculares e intramoleculares⁶⁰⁵, para una molécula con las propiedades observadas en los anticuerpos y cuál es el proceso razonable más simple de formación de tal molécula?⁶⁰⁶

Pauling propuso entonces que cada molécula-anticuerpo que emerge de una célula productora de anticuerpos, se encuentra formada por una especie de cadena desnaturalizada sin puentes de hidrógeno que la doten de una forma específica. Al entrar en contacto con la molécula extraña la mitad de la cadena comienza a plegarse y enrollarse en torno al antígeno por medio de enlaces débiles –fuerzas de atracción electrostáticas y de van der Waals– dando lugar a algo parecido a una forma esférica. Como una arcilla suave que es presionada sobre una moneda, el anticuerpo va tomando la forma complementaria del antígeno. De esa forma la suma de todos los enlaces débiles son lo suficientemente fuertes como para que el anticuerpo y el antígeno se mantengan juntos. Posteriormente, el otro lado de la cadena podría atacar otro antígeno repitiendo la operación y creando la estructura anticuerpo-antígeno bivalente observada. Así, una molécula anticuerpo bivalente, con cada extremidad complementaria a un área de la superficie de un antígeno, era suficiente y necesario para explicar la reacción de precipitación. Esta era una forma elegante y sencilla de explicar cómo una miríada de anticuerpos podían atacar a un antígeno específico, cómo podían formarse a partir de un simple patrón proteínico⁶⁰⁷, cómo se formaban los precipitados, cómo los anticuerpos podían ser provocados por químicos sintéticos y, por supuesto, cómo un sistema de fuerzas débiles no específicas podían combinarse a partir de formas complementarias que permitieran explicar cómo los anticuerpos atacan a los antígenos.

⁶⁰⁵ See, for a summary of this information, L. Pauling, “The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals,” Cornell University Press. Ithaca, New York, Second Editic., 1.940 (Nota al pie de página en el original)

⁶⁰⁶ Pauling, Linus (1.940), p. 1.

⁶⁰⁷ Ver nota sobre complemetariedad

El artículo fue acogido con mucho entusiasmo. Escrito con la claridad y confianza características de Pauling, su autor se encontraba encantado y sorprendido al ver su idea suplantar otros esquemas y a destacar como la explicación más seguida a la hora de dar cuenta de la formación de los anticuerpos. Estaba deslumbrado al encontrarse con centenares de peticiones para su reimpresión, más de las que había recibido por ningún otro artículo. Otra vez había entrado en un nuevo campo, mostrando el poder de la química estructural y constatado el éxito de su nueva perspectiva en el ámbito de las ciencias de la vida. Pero, aunque se trataba – como sostiene Thomas Hager⁶⁰⁸ – de una teoría maravillosa, estaba en parte equivocada. La idea de que los anticuerpos eran creados como proteínas desnaturalizadas cuya forma específica le permitía adaptarse de forma directa a los anticuerpos era errónea, pero el concepto subyacente de la complementariedad como llave y cerradura que hacen de un antígeno específico era cierto. Durante quince años, hasta la aparición de una nueva y más poderosa teoría de la formación de anticuerpos, la idea de Pauling dirigió el campo de la inmunología, expandiéndose nuevamente su reputación como maestro de varios campos.

A pesar de los errores existentes, este trabajo, la teoría y el método empleado por Pauling fue clave para las investigaciones posteriormente llevadas a cabo y los avances obtenidos. La razón de ello lo encontramos en dos importantes implicaciones –una práctica y otra metodológica– que llevaba consigo. Desde el punto de vista práctico, si la teoría era correcta –al menos en lo que a la complementariedad se refería–, entonces sería posible la creación de anticuerpos artificiales en el laboratorio por medio de la desnaturalización de globulinas ordinarias y su re-naturalización ante la presencia de antígenos. A partir del uso de suero procedente de globulinas animales y humanas, sería posible de forma fácil, limpia y barata la producción de anticuerpos a gran escala.

Desde el punto de vista metodológico, como el mismo Pauling reconoció muy pronto, su forma de aproximarse, de acercarse e interrogarse sobre la naturaleza y la ciencia –en este caso a la inmunología– era muy distinta a la de Landesteiner. Según el mismo Pauling, Landsteiner podría buscar, a la hora de hacer ciencia, algo así: “¿A qué nos fuerza creer esas observaciones experimentales sobre la naturaleza del mundo? Sin embargo, a la hora de hacer ciencia, el mismo Pauling reconoce que vendría a interrogarse en los siguientes términos: “¿Qué imagen

⁶⁰⁸ Hager, Thomas (1.998), p. 73

del mundo más simple, general e intelectualmente satisfactoria podemos construir que den cuenta de estas observaciones y no sea incompatible con ellas? Como venimos observando, uno de los objetivos de este trabajo es el de señalar precisamente la dimensión metodológica, la forma de entender y hacer ciencia para Pauling. Por ello, este punto que ahora señalamos será desarrollado con mayor detenimiento durante las conclusiones.

3.2.2. EL NACIMIENTO DE LA MEDICINA MOLECULAR. LA ANEMIA FALCIFORME

Pauling había empezado a interesarse –tal y como ya señalamos en su biografía– por la estructura de los anticuerpos y la naturaleza de las reacciones serológicas entre 1.936 y 1.939. La relación que desde entonces mantuvo con Kart Landsteiner⁶⁰⁹ constituyó el prólogo en el inicio de un nuevo tipo de medicina: la medicina molecular. El nacimiento oficial de esta disciplina podemos situarlo en 1.949, cuando apareció en *Science* el artículo de Linus Pauling “Sickle-cell Anemia, a Molecular Disease”. La relevancia de esta publicación en la comunidad biomédica queda de manifiesto al constatarse el crucial papel que jugó en el nacimiento no sólo de la medicina sino también en la consolidación de la biología molecular. En este trabajo Pauling y su equipo mostraron cómo en los pacientes con anemia sus moléculas de hemoglobina tenían una carga eléctrica distinta a la que poseían las moléculas de hemoglobina de personas sanas. En aquel momento ya se sabía que la hemoglobina de adultos y fetos era electroforéticamente distintas, y que muchas enfermedades estaban relacionadas con la estructura alterada de las proteínas sanguíneas. Entonces ¿Por qué fue tan importante y novedoso el artículo de Pauling? Por un lado era la primera vez que se demostraba que una enfermedad podía estar provocada por una alteración en la estructura molecular; por otro, el hecho de que esta enfermedad fuera hereditaria –algo que se sabía desde hacía tiempo–, permitía deducir que los genes determinaban la estructura de las proteínas. Repasemos, algunos de los trabajos previos llevados a cabo por otros investigadores así como los realizados por el mismo Pauling y sus colaboradores con el fin de poder ver con mayor claridad en qué

⁶⁰⁹ Del *Rockefeller Institute for Medical Research*.

consistieron sus hallazgos y el papel decisivo que jugó la obra del químico estadounidense en el nacimiento y desarrollo de la medicina molecular.

Durante el primer cuarto del siglo XX la química tuvo una profunda influencia en el desarrollo de la medicina. Tal y como señalara el mismo Pauling⁶¹⁰ muchas de las investigaciones médicas llevadas a cabo en este ámbito habían estado condicionadas por los últimos desarrollos realizados en el de la química. Un ejemplo de ello lo encontramos en las investigaciones realizadas en torno al uso de sustancias químicas en tratamientos médicos. Estos primeros trabajos fueron, desde el punto de vista metodológico, no muy ortodoxos; la investigación era oscura y el progreso lento. Afortunadamente este escenario empezó a cambiar a finales de la década de 1.940 y los químicos comenzaron a considerar de forma más seria la posibilidad de hacer significativos progresos en el desarrollo farmacológico y en la práctica médica, así como en la comprensión de las bases moleculares de la actividad químico-terapéutica. Para conseguir este fin era necesaria la investigación en torno a tres aspectos fundamentales:

- *La estructura molecular detallada de las sustancias químico-terapéuticas (chemotherapeutic).*

- *La estructura molecular detallada de muchos de los constituyentes de los organismos directamente implicados (bacterias, anticuerpos, virus) y del organismo humano, con los cuales aquellos agentes entraban en contacto.*

- *La naturaleza de las fuerzas implicadas en las interacciones intermoleculares entre las sustancias y los organismos.*⁶¹¹

Así, empezaron a verse significativos progresos en el desarrollo de métodos de investigación sobre la estructura de las moléculas –tal y como vimos al tratar el tema de la cristalografía–, el progreso de la química orgánica y el desarrollo de fórmulas estructurales de muchos compuestos orgánicos, que ayudaron a entender cómo los átomos se unen en moléculas como la penicilina. Ahora bien, el conocimiento de la estructura molecular de los organismos vivos era, debido a su complejidad, mucho más lento. El paso más importante fue la determinación detallada –como también vimos– de la estructura de algunas proteínas. En ese

⁶¹⁰ Pauling, L., (December 7, 1.949).

⁶¹¹ *Idem*, p. 4.

sentido, debemos destacar el trabajo realizado por Robert Corey y sus colaboradores, quienes trabajaron sobre la estructura cristalina de aminoácidos y pépticos simples. Estos trabajos mostraron la importancia del enlace de hidrógeno y la fuerza de este enlace en la configuración de la estructura de una cadena polipeptídica y el que se producía entre moléculas adyacentes. Poco a poco fue aumentando la importancia de los conocimientos que de las proteínas y las fuerzas entre grandes moléculas se obtenían; la configuración, el orden de los aminoácidos en una cadena polipeptídica, la naturaleza de las fuerzas entre átomos y otras moléculas, así como la naturaleza de las fuerzas entre las macromoléculas, se volvieron las principales cuestiones a resolver.

El principal modelo en el que se inspiró para llevar a cabo la explicación de la interacción entre las moléculas de un agente químico-terapéutico y las proteínas de los organismos era la interacción entre agentes y anticuerpos. H. Campbell, David Pressman y otros científicos habían llevado a cabo muchos experimentos en este campo en los laboratorios de Pasadena. Habían encontrado datos cuantitativos acerca de los efectos inhibitorios que se habían observado en una precipitación de antígenos y anticuerpos, así como la formación de enlaces entre el agente y el anticuerpo. Además, ya había sido observado por varios científicos –con la ayuda del microscopio– el proceso mismo en el que las células enfermas adquirían forma de hoz, distinguiéndose incluso aquellas células anémicas completamente falciformes de aquellas que tan sólo presentaban ciertos rasgos. Se sabía además que los eritrocitos de las personas enfermas comenzaban su proceso degenerativo justo cuando bajaba la presión parcial de monóxido de oxígeno o de carbono. De hecho, las células enfermas aparecían con mayor frecuencia en las venas que en la sangre más oxigenada de las arterias. Se había observado igualmente que en tales circunstancias la hemoglobina comenzaba a concentrarse en uno o varios puntos de la célula provocando el derrumbamiento de la membrana celular. Los eritrocitos se deformaban y se volvían absolutamente rígidos⁶¹². Pero, también se había observado que al agregar monóxido de oxígeno o de carbono la célula recuperaba su forma original. Se hacía necesario por consiguiente distinguir entre las dos formas: la forma de los eritrocitos normales –denominada *promeniscocyte*– y la forma *meniscocyte* de la célula enferma falciforme.

⁶¹² En muchas ocasiones esta rigidez era la responsable de las obstrucciones, de los coágulos observados en los pacientes.

Pauling sabía que los glóbulos rojos eran esencialmente minúsculas bolsas con hemoglobina, por lo que parecía lógico pensar que la hemoglobina fuera lo que estuviera alterado. Los experimentos realizados *ad hoc* empezaron a indicar que, efectivamente, la anemia era resultado de cambios físicos acontecidos en la hemoglobina: las observaciones realizadas mostraban que la hemoglobina se concentraba, se plegaba y enrollaba de forma extraña en ciertas regiones de la célula. Por consiguiente, los científicos tenían una tarea pendiente: "debían conocer aquellos procesos implicados en el cambio de la estructura de la hemoglobina": ¿qué era lo que producía ese plegamiento, la concentración de la hemoglobina en regiones específicas y la deformación de la célula? Era pertinente pensar –propondría Pauling– que una parte de la superficie alterada de la hemoglobina fuera complementaria de otra.

A partir de estas ideas Pauling comenzó a trabajar con Itano y en enero de 1.949 publicaron un primer artículo, "A Rapid diagnostic test for sickle cell anemia". En dicho artículo la anemia falciforme era definida como un "tipo de anemia hemolítica crónica congénita caracterizada hematológicamente por el desarrollo de eritrocitos con forma de avena u hoz"⁶¹³. El objetivo principal de este trabajo era el de desarrollar un método que permitiera de forma fácil y rápida diagnosticar la enfermedad. A finales de ese mismo año, en noviembre, apareció en *Science* "Sickle Cell Anemia, a Molecular Disease". El propósito del artículo era "examinar las características físicas y químicas de la hemoglobina de individuos cuyas células tienen rasgos falciformes y células anémicas, y compararlas con la hemoglobina de individuos normales para determinar si se pueden observar algunas diferencias significativas"⁶¹⁴. Los trabajos experimentales demostraron –como ya adelantamos– que había una diferencia significativa en la movilidad electroforética entre la hemoglobina de individuos normales y la de aquellos que tenían anemia falciforme. Fue verificado asimismo que el *carbonmonoxyhemoglobin* de una célula con anemia falciforme se movía como ión positivo, mientras que el compuesto normal lo hacía como un ión negativo ¿Cuál era la razón de esta diferencia? Las divergencias entre ambas hemoglobinas no se encontraban en el peso o en la forma. Había que buscar por otro lado. Los experimentos sugirieron que la diferencia podría estar o bien en el número o bien en el tipo de grupos ionizables que se encuentran en ambas hemoglobinas.

⁶¹³ Itano, Harvey A. y Linus Pauling (1.949, enero)

⁶¹⁴ Pauling, Linus, Harvey A. Itano, S.J. Singer e Ibert C. Wells (1.949, noviembre)

Solamente los grupos *carboxyl* en el *heme*, y el *carboxyl, imidazole, amino, oxhidrilo phenolic*, y los grupos del *guanidino* en el *globin*, eran los grupos capaces de formar los iones en el *carbonmonoxyhemoglobin*. A partir de estas pistas, poco a poco los científicos pudieron dibujar el mecanismo mediante el cual la célula enferma podía adquirir la configuración falciforme. Los experimentos señalaban la región *globin* como el área que debía ser investigado. Se pudo observar que en dicha región de la molécula enferma hay una zona que no existía en la molécula normal. Esta zona era –efectivamente complementaria a la misma zona de la otra molécula⁶¹⁵. De ahí que las moléculas de hemoglobina se pudieran empezar a unir, al bajar la presión parcial de monóxido de oxígeno o de carbono, produciéndose de ese modo una alineación parcial de moléculas, y provocando de ese modo el cambio de forma y la rigidez característica de la célula enferma.

Aunque algunos detalles de este proceso seguían siendo en algunas ocasiones meras conjeturas, el mecanismo propuesto se mostraba compatible con los experimentos. Lo más importante fue que era la primera vez que se hacía evidente que una enfermedad estaba provocada por una alteración en la estructura molecular. A partir de estas breves notas podemos empezar a hacernos cargo del extraordinario papel que el texto de Pauling jugó en el origen de la medicina molecular, en la comprensión por primera vez de una enfermedad molecular. Pero, ¿qué ocurría con la biología? Desde el principio los científicos habían intentado dar una base genética a al problema de la anemia falciforme. Taliaferro y Huck habían sugerido la posible implicación de un gen dominante. Desafortunadamente la distinción entre la anemia falciforme y las células con rasgos falciformes no estaba aún muy clara. A eso hay que añadir que la literatura existente hasta 1.949 sobre la naturaleza del mecanismo implicado seguía siendo aún muy confusa. Solamente Neel había hecho varios experimentos poco antes de que Pauling publicara “*Sickle-cell Anemia, a Molecular Disease*”. Las investigaciones de Neel indicaban que el gen responsable de la característica falciforme debía estar en condiciones

⁶¹⁵ Este proceso sucede cuando baja la presión parcial del monóxido del oxígeno o de carbono, por lo que dicha zona debía estar cercana a un átomo del hierro.

*heterocigóticas*⁶¹⁶ en individuos cuyas células tenían rasgos falciformes, y *homocigóticas*⁶¹⁷ en aquellos individuos con la anemia⁶¹⁸.

Pauling señaló que sus investigaciones habían arrojado las mismas conclusiones antes de que Neel publicara su artículo. Adelantando asimismo que si el mecanismo propuesto era correcto, entonces se hacía posible identificar el gen responsable. Pues bien, los datos obtenidos por Pauling en sus investigaciones eran compatibles con la hipótesis de los dos genes responsables del mecanismo. Esto fue de suma importancia, ya que tales investigaciones revelaron, en primer lugar, que un cambio en una molécula proteínica estaba causado por un cambio en un gen implicado en la síntesis. Y en segundo lugar, pero de igual importancia, estas investigaciones abrían las puertas a la investigación de los eritrocitos de otras anemias hemolíticas, con el fin de encontrar la presencia de otras hemoglobinas anormales. Por esa razón, el famoso artículo concluía señalando tal posibilidad y afirmando “*This we propose do*”. Y este propósito tuvo sus resultados. Dos nuevos tipos de hemoglobinas fueron descubiertas muy pronto. La segunda hemoglobina anormal, la hemoglobina *c* (las letras *a* y *b* se aplicaron a la hemoglobina normal y a la responsable de la anemia falciforme respectivamente) fue descubierta por Itano y Neel⁶¹⁹, mientras que la hemoglobina *d* fue descubierta por el primero⁶²⁰. Después de estos descubrimientos (hemoglobina *a*, *b*, *c* y *d*) se descubrieron los siguientes 7 tipos de combinaciones genéticas:

Aa → individuos normales

Ab → individuos con rasgos falciformes

Bb → pacientes con anemia falciforme

Ac → individuos con hemoglobina anormal *c*

Bc → pacientes con un nuevo tipo de enfermedad, fruto esta de la herencia de un alelo de la anemia falciforme y un alelo del segundo tipo de hemoglobina anormal, *c*.

Ad → portadores de la tercera hemoglobina anormal, *d*

⁶¹⁶ Tener los dos genes diferentes para una característica.

⁶¹⁷ Tener los dos genes idénticos para una característica.

⁶¹⁸ Pauling, L. (1.949, 25 de noviembre), p. 547.

⁶¹⁹ Itano, H.A. y J.V. Neel (1.950).

⁶²⁰ Itano, H.A. (1.951).

Bd → pacientes con un segundo nuevo tipo de enfermedad, fruto esta de la herencia de un alelo de la anemia falciforme y un alelo del tercer tipo de hemoglobina anormal, *d*.

Mientras algunos científicos estudiaban las diversas combinaciones posibles, otros analizaban la enfermedad relacionada. Podemos observar así cómo la medicina molecular y la biología molecular eran ya –a finales de los 40 y comienzos de los 50– una realidad y cuál fue el extraordinario papel que la física y la química jugaron en su desarrollo. El progreso de estas dos nuevas corrientes o disciplinas fue tan espectacular que solamente 10 años después de la publicación de este artículo⁶²¹ Pauling confirmaba en una conferencia titulada “*Molecular Disease*”⁶²² el descubrimiento de 20 tipos de hemoglobinas humanas anormales asociadas a diversas enfermedades. Lo más importante –desde el punto de vista que ahora nos reúne– era la corroboración de la naturaleza molecular de estas enfermedades: “*About two percent of viable children born have gross physical or mental defect because of their inheritance of defective genes. Many more suffer from minor hereditary defects*”⁶²³. Por este motivo, Pauling demandó constantemente la necesidad de aumentar los esfuerzos para entender la naturaleza molecular de estas enfermedades, convencido de que la comprensión de la estructura molecular de las mismas podía arrojar luz para el desarrollo de terapias eficaces.

Hasta este momento hemos llevado a cabo una breve revisión histórica y descriptiva del trabajo de Linus Pauling y hemos señalado algunas de las influencias del mismo en los orígenes y posterior desarrollo de la medicina y la biología molecular. Ahora bien, como hemos venido anunciando durante todo este trabajo nuestro propósito principal es el de dar cuenta de las cuestiones epistemológicas, ontológicas y metodológicas que estaban en juego. Por ello, vamos a centrar nuestra atención en el siguiente capítulo, en la sección de las reflexiones finales dedicada a los trabajos biomédicos de Linus Pauling, principalmente en dos cuestiones; una primera de carácter ontológico y epistemológico, el problema del espacio continuo y del espacio tridimensional; la segunda centrada en el desarrollo y aplicación del método estocástico a la ciencias de la vida.

⁶²¹ “Sickle-cell Anemia, a Molecular Disease”

⁶²² Pauling, L., (1.959, 29 demarzo)

⁶²³ Pauling, L. (1.959, 29 de marzo), p. 4

3.3. MEDICINA ORTOMOLECULAR

(1.954-1.994)

INTRODUCCIÓN

A pesar de la notoria bajada en la intensidad y repercusión inmediata que, tras la concesión del premio Nobel de química sufrieron los trabajos de Pauling, no podemos hablar del fin de su vida científica e intelectual. Por el contrario, debemos señalar que así como en años anteriores había centrado su atención en la resolución de problemas relacionados con el enlace químico y la estructura de las proteínas, comenzaba entonces una nueva etapa caracterizada por un renovado interés en la exploración de áreas especulativas de la medicina no muy ortodoxas. Etapa ésta protagonizada por los trabajos y polémicas surgidas en torno a la vitamina C. Si bien los primeros pasos significativos en este nuevo ámbito se desarrollaron en torno a las bases de las enfermedades mentales –colaborando otra vez en el nacimiento y constitución de una nueva rama de investigación y desarrollo clínico– sus últimos años estuvieron dedicados a la búsqueda y defensa de terapias basadas en la ingestión de megadosis de vitamina C para la prevención y tratamiento de resfriados, enfermedades cardiovasculares y cáncer entre otros.

3.3.1. LA SENDA HACIA LA CURA DE ENFERMEDADES MENTALES

Los estudios sobre la química del cerebro fueron un desarrollo natural de los trabajos que había realizado anteriormente sobre las proteínas. En principio estos estudios presentaban los mismos problemas bioquímicos, pero poco a poco se fue constatando que eran infinitamente más difíciles y desafiantes. Mientras él había hecho esenciales descubrimientos en la estructura fundamental de las proteínas de tejidos como pelos y huesos, la microarquitectura y el estudio de las propiedades de las células cerebrales eran aún un territorio desdibujado. Los tejidos cerebrales estaban compuestos por proteínas más difíciles de comprender estructural y funcionalmente que los estudiados hasta entonces. Muchos colegas ya conocían desde hacía tiempo su interés por estudiar la posible relación existente entre la nutrición y las enfermedades mentales. Pero –como hemos visto durante la biografía– motivos presupuestarios y un interés centrado por entonces en la estructura de las proteínas, le habían impedido dedicarse a un

estudio riguroso de las enfermedades mentales que comenzaría finalmente con su abandono de los laboratorios del Caltech.

Pocos psiquiatras actuales que se dedican a la investigación creen que las enfermedades mentales tengan un origen exclusivamente psicológico, pero hablar como lo hizo Pauling de la existencia de una relación entre desequilibrio químico, nutrición y enfermedad mental era algo poco ortodoxo en la década de los 60. El principio fundamental del que partía el trabajo de Pauling era elegante y simple: el cerebro tiene un entorno bioquímico óptimo y si la concentración molecular de algunos de los químicos presentes se perturba, pueden aparecer toda clase de perturbaciones psicológicas. En muy pocos años Pauling fue capaz de extender todas estas ideas y mostrar cómo la Niacina o vitamina B₃ era absolutamente crítica para un funcionamiento mental sano.

Tras su salida del Caltech, Linus Pauling fue en 1.967 al campus de San Diego (UCSD) donde comenzó a trabajar con Arthur B. Robinson. Ambos investigadores estaban fascinados con el nuevo equipo de diagnóstico computerizado que les permitía realizar un número considerable de experimentos aislando, identificando y midiendo diferentes sustancias presentes en fluidos y tejidos humanos. La combinación de un software especial con un sofisticado equipo de laboratorio hizo posible aspirar a la identificación y análisis de cientos de marcas bioquímicas en fluidos corporales humanos, incluso en compuestos volátiles presentes, por ejemplo, en el aliento y en el vapor de la orina. Además –aventuraban los investigadores–, los nuevos métodos de laboratorio podían servir como herramientas de diagnóstico y proveer importantes datos bioquímicos que permitieran determinar los niveles de sustancias vitales – especialmente vitaminas y minerales– cuyo exceso o defecto estuvieran afectando negativamente la salud de un paciente.

Es en su famoso y polémico artículo de 1.968 “Orthomolecular Psychiatry”⁶²⁴, donde encontramos a un Linus Pauling apostando claramente por un cambio en los tratamientos hasta entonces seguidos con pacientes con enfermedades mentales. El químico estadounidense diría:

⁶²⁴ Pauling, Linus (1.968b)

Los métodos principalmente usados hasta ahora para el tratamiento de pacientes con enfermedades mentales son psicoterapéuticos (psicoanálisis y esfuerzos relacionados a disminuir la tensión ambiental), químicos (principalmente el uso de poderosas drogas sintéticas, tales como la clorpromazina⁶²⁵, o poderosos productos naturales como el Reserpine⁶²⁶) y terapias convulsivas o de shock (terapia electroconvulsiva o terapias de shock con insulina o Pentilinetetrazol). Yo he llegado a la conclusión, a través de los argumentos resumidos en los siguientes párrafos, que otro método general de tratamiento, el cual podría ser llamado terapia ortomolecular⁶²⁷, puede ser fundado y resultar de gran valor, pudiendo llegar a ser el mejor método de tratamiento para los pacientes.⁶²⁸

Si bien Pauling reconoce que el término usado –ortomolecular– puede ser criticado como un híbrido greco-latino, reconoce que no ha encontrado ninguna otra palabra que exprese tan bien la idea “las moléculas correctas en la cantidad correcta”⁶²⁹. Así, vendría a resumir su propuesta en los siguientes términos:

Las funciones del cerebro humano son afectadas por la concentración molecular de muchas sustancias que están normalmente presentes en el cerebro, tales como L (+) - ácido glutámico, ácido nicotínico y muchas otras vitaminas. Muchas de estas sustancias no son tóxicas. La concentración óptima para una persona puede ser muy diferente de la concentración provista por su dieta normal y la mecánica bioquímica genéticamente determinada⁶³⁰. Se sabe que la terapia masiva con L (+) - ácido glutámico beneficia muchos retrasos mentales y que la terapia masiva con ácido nicotínico o nicotiamín, junto con ácido ascórbico, beneficia a muchos esquizofrénicos y a otras personas con enfermedades mentales. Argumentos bioquímicos y genéticos sustentan la idea de que la terapia ortomolecular, la provisión a cada persona de concentraciones óptimas de importantes constituyentes normales del cerebro, puede ser el tratamiento preferible para muchos pacientes, especialmente aquellos con un severo retraso mental o psicosis crítica. Yo sugiero que esta terapia, exitosa, puede suponer el estudio minucioso de y atención al

⁶²⁵ **Clorpromazina:** medicamento neuroléptico descubierto por el francés Paul Charpentier que actúa como tranquilizante sin sedar. El hecho de que permitiera mantener la conciencia permite utilizarla no sólo como antihistámico –que fue su primer uso– sino también con pacientes sicóticos, esquizofrénicos agitados y embotados a los que hace falta activar (Diccionario en línea Babylon)

⁶²⁶ **Reserpine:** Fármaco de potente acción sedante que interfiere el almacenamiento de varias monoaminas neurotransmisoras en las vesículas sinápticas. Normalmente se utiliza como remedio para tratar los problemas de presión alta y la ansiedad (Diccionario en línea Babylon)

⁶²⁷ Subrayado del original.

⁶²⁸ Pauling, Linus (1.968b), p. 265

⁶²⁹ Pauling, Linus (1.968b), p. 265

⁶³⁰ Como tendremos la oportunidad de ver más adelante, Pauling se refería a la capacidad que poseen muchos animales de producir por sí mismos estas sustancias imprescindibles. En el caso del ser humano esto no ocurre debido a mutaciones ocurridas millones de años atrás y que le han acompañado a lo largo de su posterior evolución.

individuo, tal como es habitual en psicoterapia (psicoanálisis), pero no en terapias químicas convencionales.⁶³¹

Durante los últimos años dedicados a los estudios psiquiátricos, Linus Pauling notó, apoyándose inicialmente en las observaciones clínicas llevadas a cabo por otros colegas, que la sangre y la orina de muchos pacientes con problemas mentales mostraban niveles bajos de vitamina C y varios tipos de vitamina B⁶³². Asimismo, se hacía evidente una pobre absorción, un incremento en su consumo o demanda de los mismos acompañados de errores metabólicos. Por alguna razón fisiológica esas deficiencias estaban asociadas con un mal funcionamiento del cerebro que afectaba a la percepción, el pensamiento, las emociones y la conducta. Ahora bien, esto mostraba también que los síntomas de desorden mental y angustia emocional se aliviaban en muchas ocasiones por medio de la aplicación de megadosis de determinadas vitaminas.

Pauling estaba reuniendo trabajos de laboratorio y estudios clínicos acerca de diferentes vitaminas y minerales. A partir de los mismos concluyó que muchos de los desordenes fisiológicos y psíquicos tenían un origen bioquímico y fisiológico, por lo que muchos problemas de salud –tanto mentales como físicos– podían ser tratados exitosamente a través de la administración de una combinación particular de micronutrientes y de una dieta regulada. Lo que Pauling hacía era extender la lógica y práctica que desde hacía dos décadas venía realizando Thomas Addis –su médico personal cuando sufrió la llamada *enfermedad de Bright*– con sus pacientes con problemas renales. El problema entonces a solucionar era el siguiente: si cada persona requiere de una dieta y una combinación de micronutrientes personalizada, hacía falta desarrollar un método que permitiera conocer las necesidades de cada paciente. Fue entonces cuando Pauling comenzó a interesarse por el trabajo del bioquímico nutricional Roger J. William y su teoría de la individualidad bioquímica, a la vez que percibía la necesidad de extender este tipo de análisis a otros ámbitos y problemas de la medicina.

⁶³¹ Pauling, Linus (1.968), *Summary*.

⁶³² Principalmente Niacina (B₃), Piridoxina (B₆) y Cobalamina (B₁₂)

3.3.2. MEDICINA ORTOMOLECULAR SOMÁTICA

Ciertamente el interés de Pauling en torno al desorden psiquiátrico continuó, si bien empezó a ver las funciones mentales de otra forma, siempre conectadas directamente con la química de la fisiología corporal. Una vez que Pauling decidió dirigir sus esfuerzos hacia la comprensión y exposición de los principios de la *medicina ortomolecular somática* junto a Robinson y sus colaboradores, comenzaron a ver la luz toda una serie de libros, artículos científicos y presentaciones –en la mayoría de las ocasiones conferencias y entrevistas– que dejaron ver no sólo sus más recientes descubrimientos, sino también los proyectos realizados y a desarrollar.

El éxito obtenido durante la década de 1.960 con el desarrollo de la medicina ortomolecular ligada al estudio de las enfermedades mentales tuvo su continuidad en la siguiente década. Aquellos trabajos habían partido de la idea de que muchas de las enfermedades mentales eran producto de un desequilibrio bioquímico del cerebro y que la recuperación de la armonía perdida podía conseguirse por medio de la administración de grandes dosis de vitaminas. El éxito de sus propuestas le había llevado a adelantar ya entonces que este tipo de análisis debía extenderse en torno a una medicina molecular más generalizada. Pues bien, dicha generalización que empezó a llevar a cabo a finales de los años 60 y principios de los 70 junto a Robinson y sus colaboradores, tenía como piedra angular la siguiente idea: el equilibrio, el balance ortomolecular adecuado era producto de una alimentación rica en macronutrientes –proteínas, carbohidratos, grasa– pero también de otros factores nutricionales importantes como lo eran los micronutrientes; vitaminas, minerales, aminoácidos y otras sustancias vitales utilizadas en la formación enzimática, el metabolismo y miles de sustancias fisiológicas complejas imprescindibles para la vida. Todos estos nutrientes esenciales han de venir –vendría a sostener Pauling– de fuera, se adquieren a través de la comida y, en casos necesarios, pueden obtenerse por medio de suplementos alimenticios especiales. Pronto se demostró que algunos de estos elementos son más importantes que otros, por lo que era necesario inventar, desarrollar nuevas técnicas y equipamientos que permitieran estudiar fluidos corporales con el fin de determinar niveles óptimos y deficitarios ortomoleculares, y que nos mostraran cómo los desbalances y disfunciones intervienen en la aparición y desarrollo de

enfermedades degenerativas. El fin último era conseguir un método de análisis, prácticas y hábitos alimenticios que nos permitieran alcanzar en cada caso lo que él llamó *optimum health*.

Sin embargo, Pauling se encontró con un importante obstáculo. Era el momento en el que las investigaciones y desarrollos farmacológicos estaban expandiendo sus indagaciones hacia la creación y comercialización de poderosos componentes sintéticos con el fin de estabilizar o revertir diferentes enfermedades físicas y mentales. Mientras, Pauling dirigía su atención –e intentaba que los demás hicieran lo mismo– hacia las sustancias biológicas. Había que atender –proponía el químico estadounidense– a las sustancias naturales que encontramos en el cuerpo humano para encontrar las soluciones; un punto de vista que mantuvo el resto de su vida. De ahí, que su inicial e intenso interés por la creación de enzimas artificiales para el tratamiento de enfermedades moleculares desapareciera y Pauling se convirtiera en el profeta de la vitamina C. El resto de sus días se dedicó a hablar a quien se le ponía por delante, ya fueran políticos, periodistas, médicos o ciudadanos de la calle –quisieran o no– de las propiedades de ésta y otras vitaminas. Vemos así a un Pauling que transfirió mucha de su pasión casi evangelizadora por la promoción de la química y la paz a profetizar en nombre de la medicina molecular y, sobre todo, de la vitamina C.

3.3.3. FRENTES ABIERTOS EN TORNO A LA VITAMINA C

3.3.3.1. Vitamina C y resfriado común

Podemos destacar de esta última etapa científica de Linus Pauling cuatro libros y varios artículos –algunos de los cuales comentaremos posteriormente– que dan cuenta de la defensa que llevó a cabo de la vitamina C en el tratamiento y prevención de enfermedades como el resfriado común, problemas cardiovasculares y el cáncer entre otros. Ejemplo de ello lo encontramos en *Vitamin C and the Common Cold*⁶³³ donde Pauling propone que el consumo de 1.000mg de vitamina C al día reduce la incidencia del resfriado común en un 45%.

⁶³³ Pauling, Linus (1.970)

Recolocado en Stanford, Pauling, Robinson y otros investigadores, continuaron desarrollando pruebas y equipos de laboratorio que permitieran identificar marcas bioquímicas claves que dieran cuenta de las condiciones de salud particular. Pauling anticipó que muchas o casi todos estas indicaban la presencia última de manifestaciones de desorden genético y enfermedades degenerativas que podían ser corregidas o controlados a través de ajustes ortomoleculares. Aunque atento y comprometido a cuanto ocurría con la guerra de Vietnam, desde el punto de vista científico estaba volcado con su promoción de la vitamina C. Su entusiasmo bebía de dos fuentes; por un lado, su confianza venía no sólo de los reportes que leía, sino también de su experiencia directa; por otro lado, estaba totalmente convencido que el bajo coste y la facilidad para la obtención de estos micronutrientes que resultaban tan importantes para la conservación o recuperación de la salud, haría que en un futuro estuviera disponible para todos los seres humanos.

Tras la creación en 1.973 del ILP, Pauling revisó y extendió el texto de 1.970 con el nuevo nombre *Vitamin C, the Common Cold and the Flu*⁶³⁴. En el nuevo prefacio hacía hincapié en el gran potencial que presentaba la vitamina C para combatir infecciones virales y señalaba la necesidad de incrementar aún más la CDR de ácido ascórbico. Sin embargo, debemos señalar que Pauling nunca dijo que la vitamina C pudiera prevenir o cuidar todos los resfriados: podía ayudar en un momento determinado a que bajara la probabilidad de contraer la enfermedad y a la cura una vez contraída. A su vez, proponía basándose en investigaciones llevadas ya a cabo, que la toma de 1gr por hora de vitamina C ante los primeros síntomas de resfriado producía frecuentemente la derrota del virus.

Con 90 años Pauling continuó hablando en entrevistas y audiencias públicas de su conversión a las megadosis de vitamina C. Así, en su texto de 1.992 “My Love Affair with Vitamin C”⁶³⁵ podemos observar una nueva reformulación de la Cantidad Diaria Recomendada (CDR) de vitamina C basándose en el trabajo de Irwin Stone *Hypoascorbate, a Genetic Disease*⁶³⁶. De dicho trabajo Pauling destacó la forma en la que Stone mostraba la extrema necesidad que todas las especies de animales tienen de las vitaminas. Presumiblemente –

⁶³⁴ Pauling, Linus (1.976)

⁶³⁵ Pauling, Linus (1.992, Otoño)

⁶³⁶ Publicado en 1.966 su título completo era “Hypoascorbemia, the Genetic Disease Causing the Human Requirement for Exogenous Ascorbic Acid”

sostenía Stone– los primeros animales obtenían de las plantas la cantidad suficiente de vitaminas para satisfacer sus necesidades, por lo que durante el proceso evolutivo pudieron perder su habilidad para producirlas ellos mismos. Sin embargo, la vitamina C constituye una excepción. El ácido ascórbico es necesario para llevar a cabo las reacciones de oxidación celular, siendo uno de las más importantes aquella que permite la conversión del procolágeno en colágeno, la principal proteína estructural de los animales y que Pauling ya había estudiado detenidamente –como vimos– años atrás. Por ello, tal y como podemos comprobar, muchos animales –Stone pone el ejemplo de los perros, gatos, vacas y elefantes– han seguido hasta la actualidad sintetizando el ácido ascórbico. Una posible razón de ello puede ser la gran cantidad diaria que necesitan para mantener una buena salud, cantidad que sobrepasa la que pudieran obtener de su alimentación a partir de plantas. Y es que –vendría a decir Stone–, un animal que dependa de las plantas como fuente de expedición de vitamina C, podría sufrir –como es el caso del humano– una carencia de esa vitamina.

En 1.972 Stone había afirmado en su obra *The Healing factor: Vitamin C Against Disease*:

Podemos conjeturar que la producción de ácido ascórbico (vitamina C) fue un logro temprano del proceso de la vida debido a su amplia distribución en casi todos los organismos vivientes actuales. Se produce en cantidades comparativamente grandes en las plantas más simples y en las más complejas; se sintetiza en las especies animales más primitivas así como en las más altamente organizadas. Excepto posiblemente en ciertos microorganismos, aquellas especies de animales que no pueden elaborar su propio ácido ascórbico son las excepciones y lo requieren en su comida si quieren sobrevivir. Sin él, la vida no puede existir.⁶³⁷

De ahí –destaca Pauling del trabajo de Stone– que la cantidad de ácido ascórbico que producen los animales sea tan grande: un número proporcional al peso de su cuerpo que, de darse en el ser humano, supondría una cifra que estaría entre los 2.000 y los 20.000 miligramos por día. De ahí, que el ser humano con una dieta normal en donde el consumo de vitamina C rondara los 60mg/día tal –y como recomendara entonces la FDA– sufra de hipoascorbemia, al ser entre 30 y 300 veces menor que la concentración encontrada en otros mamíferos.

⁶³⁷ Cita extraída de http://www.bit-bites.com/healthy_vitc.htm, (14 de Octubre de 2.007)

Pauling estableció una buena relación de trabajo con I. Stone cuyas propuestas venía defendiendo y discutiendo una y otra vez desde hacía varios años. Encontramos referencias muy claras de ello en sus artículos de 1.970 “Evolution and the Need for Ascorbic Acid”⁶³⁸ y 1.974 “Good Nutrition for the Good Life”⁶³⁹. Al igual que Stone, Pauling sustentaba la idea de que los primeros animales, a pesar de vivir en entornos en donde podían adquirir fácilmente vitaminas A, B₁, B₂ y B₆ a través de la comida, producían ellos mismos las vitaminas que necesitaban. Pues bien, fue dentro de este ambiente –vendría a decir Pauling– en el que un antecesor común al ser humano, los gorilas, chimpancés y otros primates sufrió una mutación hace alrededor de 25 millones de años que impidió a su descendencia llevar a cabo la síntesis de vitaminas. Afortunadamente los primeros sucesores vivían en un entorno tropical donde la fruta era especialmente rica en vitamina C. Sin embargo, durante las posteriores migraciones hacia regiones subárticas tan sólo encontraron comida con un bajo contenido en vitamina, apareciendo o multiplicándose el número de casos de escorbuto⁶⁴⁰ y resfriado común.

En 1.986 Pauling publicó un libro que, para sorpresa de muchos, se terminó convirtiéndose en un bestseller; *How to Live Longer and Feel Better*⁶⁴¹. En dicho texto Pauling vendría a decir que las megadosis de vitaminas pueden mejorar la salud, aumentar el disfrute de la vida y ayudar en el control de enfermedades cardíacas, el cáncer y otras enfermedades así como en el retraso del proceso del envejecimiento⁶⁴².

3.3.3.2. Vitamina C y enfermedades cardiovasculares

Esta relación constante entre vitaminas y salud permitió el encuentro en la década de 1.980 entre Matthias Rath y Linus Pauling. Rath había descubierto en 1.987 que la lipoproteína(a), una lipoproteína de baja densidad rodeada de una película adhesiva, era la responsable del depósito de colesterol y otras grasas que encontramos en las paredes arteriales

⁶³⁸ Pauling, Linus (1.970b)

⁶³⁹ Pauling, Linus (1.974c)

⁶⁴⁰ Pauling, Linus (1.974c), pp. 7 y 8.

⁶⁴¹ Pauling, Linus (1.986)

⁶⁴² Pauling continuó dando pláticas y desarrollando técnicas de diagnóstico que permitieran señalar deficiencias de micronutrientes y proteínas anormales en sangre y orina, así como el exceso de sustancias como hierro y otros metales. Incluso llegó a llamar la atención sobre las consecuencias de fumar.

de personas con problemas en el sistema circulatorio. Este depósito –descubrió– sólo se produce normalmente cuando la lipoproteína(a) se encuentra debilitada por una deficiencia de vitamina C y el organismo tiene que repararla. Pronto Pauling y Rath empezaron a colaborar y en 1.991 presentaron un trabajo conjunto⁶⁴³ que revolucionó a la comunidad científica internacional. En dicho texto mostraron cómo la causa primaria de la mayoría de las enfermedades cardiovasculares se encuentra en la deficiencia de ácido ascórbico que lleva a la deposición de lipoproteína(a) en las paredes vasculares. Tan sólo un año más tarde, en la que sería la última comparecencia pública de Linus Pauling, trataron de mostrar cómo, a partir de la administración adecuada de vitamina C era posible prevenir un gran número de enfermedades cardíacas. Nuevamente, los médicos hicieron oídos sordos y el mundo farmacéutico se echó encima⁶⁴⁴.

3.3.3.3. Vitamina C y Cáncer

Pero el conflicto más fuerte que se produjo entre Pauling y la comunidad médica en torno a la utilización de megadosis de vitamina C en el tratamiento de enfermedades se dio –y se está dando aún en la actualidad⁶⁴⁵– en el campo de la oncología. En 1.971 Ewan Cameron escribía a Pauling para hacerle saber de los excelentes y esperanzadores resultados que había obtenido de una serie de estudios que había llevado a cabo en el *Vale of Leven Hospital* sobre la eficacia de la vitamina C en el tratamiento del cáncer. Muy pronto se estableció una fructífera colaboración científica que se reflejó en el diseño y realización de un segundo estudio. El primer estudio de Cameron había sido muy criticado, entre otras razones, por el uso de controles “históricos”, ya que éstos siempre dejan una puerta abierta a la posibilidad de que otros factores puedan influir en los resultados del estudio. Por ello, Pauling y Cameron fueron muy rigurosos en la aplicación del método científico a través de toda su experimentación, cuidándose mucho de que los pacientes tratados con vitamina C tuvieran el mismo tipo de tumor, fueran del mismo sexo y tuvieran una edad parecida. Fruto de estos trabajos Pauling y Cameron publicaron en

⁶⁴³ Rath, Matthias y L. Pauling (1.991b)

⁶⁴⁴ Ejemplo de ello lo encontramos primero en el intento que llevaron a cabo las multinacionales farmacéuticas para que las vitaminas fueran consideradas en Estados Unidos "medicamentos" y después en la campaña lanzada en 1.955 para declarar ilegal toda la información relacionada con las vitaminas y con las terapias naturales no patentables.

⁶⁴⁵ Ejemplos de la continuidad de los estudios de Pauling en este ámbito lo encontramos en las obras de Hoffer A y Matthias Rath.

1.973⁶⁴⁶ el artículo "Ascorbic Acid and the Glycosaminoglycans: An Orthomolecular Approach to Cancer and Other Diseases"⁶⁴⁷.

En 1.972 Pauling publicó su libro más polémico de esta etapa: *Vitamin C and Cancer*. En este trabajo en el que Pauling aborda la naturaleza y causas del cáncer, su prevención y tratamiento, presenta la efectividad que el consumo de grandes dosis de vitamina C muestra en la lucha contra el cáncer. Este texto, lejos de acallar las críticas y polémicas, las redobló. Debemos hacer notar que la mayoría de estas críticas se dirigieron directamente a los primeros estudios llevados a cabo por Cameron, ya que éstos seguían constituyendo la base sobre la que se sustentaba el tratamiento con megadosis de vitamina C en casos de cáncer. La crítica más dura vino de Charles Moertel y su grupo en el *Mayo Clinic*. Los experimentos llevados a cabo en la *Mayo Clinic* y sus resultados fueron publicados en 1.979 en *New England Journal of Medicine*. En sus conclusiones se señala cómo a partir de las pruebas realizadas no es posible observar un beneficio terapéutico en el tratamiento del cáncer a partir de altas dosis de vitamina C. A este artículo le siguió otro presentado en una reunión organizada por la *American Society of Clinical Oncology* en Nueva Orleans y en donde se mostraban las mismas conclusiones. La *Mayo Clinic* tenía ya por entonces un gran prestigio y credibilidad, por lo que Pauling y Cameron tenían razones para estar preocupados. Además, los experimentos llevados a cabo estaban mejor diseñados que los primeros llevados a cabo en *Vale of Leven Hospital*. Sin embargo Pauling hizo notar que el sistema inmunológico de los pacientes tratados en la *Mayo Clinic* había sido prácticamente inutilizado como consecuencia de la intensa quimioterapia a la que habían sido tratados. Y si –como Pauling sostenía– la vitamina C trabaja para vigorizar el sistema inmunológico, entonces la vitamina C fallaba en su cometido simplemente porque dicho sistema se encontraba diezmado. Pauling tenía razón y en una carta enviada a Moertel le hacía saber que la *Mayo Clinic* tenía que volver a hacer sus estudios buscando pacientes que no hubieran sido tratados con quimioterapia. De paso, Pauling le invitaba a publicar una nota al respecto. A pesar del educado intercambio de cartas que se dio al principio, el resultado final fue una desagradable permuta de acusaciones e imputaciones que no quedaron en privado. Las críticas a la terapia con altas dosis de ácido ascórbico continuaron y aparecieron nuevos

⁶⁴⁶ Este artículo había sido enviado un año antes a la revista *Proceedings of the National Academy of Science*, sin embargo esta rechazó su publicación originándose posteriormente una seria polémica.

⁶⁴⁷ Cameron, Ewan y Linus Pauling (1.973)

personajes. En 1.984 el testigo lo cogió Thomas Jukes, quien señaló que los estudios de Cameron habían sido realizados con pacientes que presentaban una extremada deficiencia alimenticia. Si eso era verdad –indicaba Jukes– los primeros experimentos de Cameron podrían demostrar tan sólo que la vitamina C podía ser efectiva con pacientes con una gran deficiencia en esta vitamina, sin que eso significara que megadosis de ácido ascórbico pudieran ayudar con pacientes que tuvieran una dieta adecuada.

Respuestas, críticas, nuevos estudios y reinterpretaciones de los resultados han ido apareciendo desde entonces. Con el fallecimiento de Pauling en 1.994 –como consecuencia precisamente de un cáncer de colon– la polémica no terminó. Sus trabajos, línea de investigación, análisis clínico y modelo terapéutico que abrió aún siguen en pie al igual que sus detractores. En este momento se hace imposible dar cuenta enteramente de la validez de la propuesta de Pauling y de la importancia que para la ciencia tienen sus trabajos sobre vitamina C y cáncer. El debate sigue abierto en nuestros días y encontramos así importantes estudios que intentan avalar por un lado y desmontar por otro la propuesta del químico estadounidense. Las puertas a nuevas investigaciones filosóficas están completamente abiertas. Pero estimamos que dichos trabajos deberán ir acompañados por estudios sociales de la ciencia más abarcentes que superan las pretensiones de este trabajo.

**CAPÍTULO IV. RUPTURAS Y
CONTINUIDADES EN LA OBRA DE LINUS
PAULING**

Siguiendo escrupulosamente el esquema presentado durante la introducción, hemos ido analizando a lo largo de este trabajo el contexto personal, científico y filosófico bajo el cual Linus Pauling llevó a cabo su labor investigadora. Asimismo, hemos examinado su obra científica más importante en los ámbitos de la química y las ciencias biomédicas. Todo ello con una intención: ver si tras las continuas rupturas, los continuos saltos que encontramos en su legado científico hay una continuidad ontológica, epistemológica y metodológica constante que le de unidad. Tal y como nos cuestionábamos en la introducción: ¿podemos encontrar un hilo conductor que, a pesar de las constantes rupturas y continuidades que observamos, le dé coherencia interna a toda su obra bajo una determinada concepción de la Naturaleza, del papel de la ciencia y del método científico? De ser afirmativa la respuesta, ¿cuál sería esta posición epistemológica, ontológica y metodológica que subyace bajo las investigaciones químicas y biomédicas de Pauling que hemos ido examinando en páginas previas? ¿Cuáles serían entonces los fundamentos metodológicos en los que están basados dichos estudios? ¿Cuáles serían sus limitaciones?

La obra de Linus Pauling ha sido definida en numerosas ocasiones como el producto de un científico heterodoxo, provocador e impaciente, de un investigador conocido por sus continuas rupturas y saltos siempre en el límite, en los intersticios entre distintos campos de investigación. Sin embargo, tras el estudio atento de su obra podemos decir que ésta, lejos de constituir un mero agregado de distintas investigaciones y trabajos dispares, conforma una unidad de investigación –a pesar de la diversidad de temáticas y problemáticas tratadas– en torno a una determinada concepción de la Naturaleza, del papel de la ciencia y del método científico. A lo largo de las siguientes páginas vamos a mostrar la existencia –basándonos en las investigaciones recogidas hasta aquí– de una posición epistemológica, ontológica y metodológica que guió toda su investigación científica desde sus primeros trabajos en cristalografía, pasando por la química cuántica, la biología y la medicina molecular, hasta llegar a sus últimos trabajos en medicina ortomolecular sobre la vitamina C.

Aunque Pauling siempre mostró –como ya vimos– una actitud poco cercana a la filosofía, su constante preocupación por la finalidad de la ciencia, por el tipo de conocimiento que obtenemos a través de ella y su interés por el método científico, colocan al científico

estadounidense dentro de un contexto intelectual que, durante los dos primeros tercios del siglo XX, mostró una particular preocupación por las implicaciones filosóficas de la nueva ciencia. Ejemplo de ello lo encontramos en la segunda edición de su libro *Química General* donde “hace hincapié en conceptos filosóficos íntimamente ligados con la física y la química de nuestros días; relación entre teoría, predicción y descubrimiento; realidad y explicación de los fenómenos; niveles energéticos; interdependencia de la química, la física y las matemáticas, etc.”⁶⁴⁸. A estas cuestiones generales Pauling fue añadiendo aquellos interrogantes filosóficos que fue encontrando en los distintos ámbitos científicos por los que su obra y vida transitaron. Algunas de estas cuestiones, al menos las más importantes, han ido apareciendo a lo largo de los capítulos previos. Las últimas páginas de este trabajo están dedicadas a mostrar la respuesta, la posición que Pauling adoptó ante las mismas y, para tal fin, hemos dividido el presente capítulo en dos partes:

En la primera de ellas daremos respuesta a los distintos interrogantes, preguntas que se fueron formulando a lo largo de los capítulos previos y que dejamos pendientes para este momento. Empezaremos por aquellas cuestiones generales que, habiendo surgido de su contacto con la mecánica cuántica, influyeron en toda su obra posterior. La razón de ello la encontramos, como el mismo Pauling pone de manifiesto, en el hecho de que el punto de partida, el fundamento último a partir del cual sustentó sus investigaciones en los ámbitos de la química, la biología y la medicina se hallara en la mecánica cuántica⁶⁴⁹. Pero estas respuestas iniciales no sólo condicionaron las que luego daría ante el resto de disciplinas⁶⁵⁰, sino que son responsables en buena medida de la unidad de la que hemos venido hablando. Por ello, tras señalar la posición que Pauling adoptó ante las cuestiones epistemológicas y ontológicas que la nueva física planteaba, comprobaremos cómo esas respuestas iniciales se vieron reflejadas en sus trabajos de química, biología y medicina.

La segunda parte de este último capítulo estará dedicada a presentar unas conclusiones finales, un resumen final que dé cuenta del hilo conductor que guió y dio continuidad a todo el trabajo científico de Pauling. Este apartado –y con ello el presente trabajo– finalizará con una

⁶⁴⁸ Pauling, Linus (1.963), Prólogo del traductor a la tercera edición en español (José I. Fernández Alonso)

⁶⁴⁹ Ducho ejemplo de ello lo encontramos cuando lleva a cabo una interpretación de la química como un fenómeno cuántico.

⁶⁵⁰ Ejemplo del reduccionismo que veremos sobre todo en los apartados dedicados a la biología y la medicina.

síntesis en la que se señalaran los puntos más significativos de su concepción de la ciencia, la realidad y del método científico.

4.1 PERSPECTIVAS EPISTEMOLÓGICAS, ONTOLÓGICAS Y METODOLÓGICAS

4.1.1 EL DEBATE EPISTEMOLÓGICO Y ONTOLÓGICO DE LA MECÁNICA CUÁNTICA EN LA NUEVA QUÍMICA

Como ya mencionamos, la aparición en escena del cuanto de acción de Planck hizo necesaria la revisión de las convicciones y supuestos fundamentales sobre los que se basaba el nuevo pensamiento científico. Se trataron principalmente de dos tipos de cuestiones filosóficas estrechamente relacionadas entre sí: una cuestión *epistemológica* en torno a la posibilidad de considerar las teorías científicas como conjuntos de enunciados verdaderos o falsos, y una cuestión *ontológica* en torno al tipo de realidad que cabe atribuir a las entidades extralingüísticas designadas por los términos de las teorías (átomos, células, radiación, etc.). La forma en la que Pauling hizo suyos estos problemas y los abordó estuvo marcada por su primera estancia europea en 1.926. Fue entonces cuando pudo conocer de primera mano no sólo el desarrollo de la misma mecánica cuántica, sino también la interpretación que de ella llevaban a cabo los mismos físicos. Alineados en torno a dos grandes bloques de respuesta –las llamadas “Interpretación de Copenhague” y los “Caballeros del Continuo”– los físicos se enfrentaron en una dura batalla interpretativa en torno a la naturaleza de los objetos atómicos. Esta lucha tuvo su reflejo en la actitud y obra del mismo Pauling.

Como vimos en la biografía inicial, Pauling pasó la mayor parte de su primera estancia europea en el Instituto Sommerfeld. Cuando el químico estadounidense llegó en 1.926 a Munich, el Instituto era un hervidero de noticias en torno a los nuevos modelos atómicos de Werner Heisenberg y Erwin Schrödinger. Pauling tuvo la fortuna de asistir a la primera presentación que realizó Schrödinger de su modelo ondulatorio en Munich y a algunos de los debates que se produjeron entre los partidarios de un modelo y otro. Muy pronto, el joven científico se mostró especialmente interesado por la obra de Schrödinger, ya que consideraba su método mucho más simple y sus ideas le permitían conservar una imagen física del átomo⁶⁵¹. Esto era muy importante para un químico como él, entrenado para ver los átomos y las moléculas como entidades reales, con tamaños y formas particulares. Pero Pauling se decidió entonces no sólo por la teoría de Schrödinger; también lo hizo por la posición que guardaron los

⁶⁵¹ En el modelo de Schrödinger, aunque las órbitas de los electrones alrededor del núcleo habían sido sustituidas por ondas también circundantes, aún quedaba un rastro físico.

llamados “caballeros del continuo”⁶⁵² en torno a las cuestiones ontológicas y epistemológicas que estaban en juego. Cuestiones que, aunque vieron la luz en el seno de la mecánica cuántica, con el tiempo alcanzaron otros ámbitos del conocimiento humano como el de la química⁶⁵³. De ahí, que las respuestas, la posición epistemológica y ontológica que observamos en la obra de Pauling –incluso su concepción de ciencia– esté fuertemente marcada por las respuestas de Schrödinger y Einstein.

4.1.1.1 La concepción pitagórica de la ciencia en Linus Pauling

Encontramos un claro ejemplo de lo que el químico estadounidense pensaba en torno a la naturaleza y el papel de la ciencia en la introducción de la primera conferencia que dio en la Universidad de Cornell –Ithaca, Nueva York– como *George Fisher Baker Nonresident Professor of Chemistry*. En octubre de 1.937 Pauling comenzaba su primera lectura formal –titulada “The Significance of Structural Chemistry”– ante la asamblea de la facultad, estudiantes y amigos de la Universidad, con las siguientes palabras:

Tras revisar los anteriores libros publicados de las *Baker Lecturers* he podido ver que en muchas ocasiones los conferencistas habían elegido como tema introductorio alguna cuestión filosófica, económica o política. Después de mucho pensar abandoné la idea de hacer esto. En parte porque no he podido encontrar algún asunto en torno al cual me sintiera capaz de hacer una contribución significativa. Al recordar, no obstante, la declaración de Aristóteles “los hombres maduros deben ser políticos, los hombres jóvenes matemáticos”, he decidido hablar sobre la química estructural, a la cual he dedicado la mayor parte de mi atención profesional en los últimos 15 años.

En su *Mathematical Theory of Relativity*, Eddington afirmó que “la investigación del mundo externo por parte de la física es más una búsqueda de la estructura que de la sustancia”. Esto es cierto no sólo para los físicos, sino para todo investigador científico... Sobre una escala logarítmica se muestran trazadas las

⁶⁵² Posición desarrollada en el capítulo del contexto filosófico dedicado a la física.

⁶⁵³ Recordando lo que vimos en el contexto filosófico, las cuestiones más importantes que estaban en juego vendrían a ser:

1. ¿Existen de hecho las realidades básicas de la física atómica, tales como los electrones, fotones e incluso los mismos átomos, con independencia de los seres humanos y de sus observaciones?
2. Si la respuesta a la pregunta anterior es afirmativa, ¿es posible comprender la estructura y la evolución de los objetos atómicos y sus procesos, en el sentido de formarse imágenes mentales que estén en correspondencia con la realidad?
3. ¿Deberían formularse las leyes físicas de tal manera que cualquier efecto observable tuviese al menos una causa?

dimensiones de las cuales se ocupan los seres humanos. El esfuerzo científico para concebir los objetos de una determinada región viene dado en términos de entidades de la región inferior. Así el astrónomo concibe el universo en su totalidad en términos de universos-isla, en términos de estrellas y Sistema Solar; la Tierra se concibe en términos de rocas y otros objetos de dimensiones ordinarias, y éstos en términos de moléculas; el químico concibe la estructura de moléculas en términos de átomos, los físicos la estructura de átomos en términos de núcleos y los núcleos, ahora, en términos de protones, neutrones, etc. ...Vemos que las grandes magnitudes estudiadas por el astrónomo son, si bien interesantes, de poca importancia práctica; mientras que, al contrario, la cosmología que investiga la física y la química en la región de magnitudes pequeñas posee una gran significación práctica, al ocuparse de la estructura que nos rodea.

Es en la región entre 10^{-7} y 10^{-8} centímetros es donde nosotros nos encontramos. Esta es ahora la región de la química estructural, incluyendo en su alcance moléculas relativamente simples.⁶⁵⁴

En esta pequeña introducción encontramos importantes aportaciones a la definición del significado y finalidad de la ciencia. El científico, incluido por supuesto el químico, ha de encargarse según Pauling no tanto del estudio y definición de “sustancias”, sino que ha de buscar la estructura del universo teniendo muy presente la escala de sus objetos de estudio y, por consiguiente, la escala logarítmica que ha de manejar. Como vimos durante el capítulo dedicado al contexto científico, el paradigma químico bajo el cual Pauling había sido educado era el de una química descriptiva. “En el pasado –diría Pauling–, el curso de química general tendía necesariamente a ser un conglomerado de química descriptiva y de ciertos principios teóricos”⁶⁵⁵. El alumno y futuro químico debía aprender, memorizar y reconocer las distintas propiedades de cada elemento y compuesto químico⁶⁵⁶. Frente a esta noción “esencialista” de la química –ya que la atención estaba centrada en las sustancias– la obra de Pauling estuvo marcada por una temprana intuición estructuralista:

La química –diría Pauling– es la ciencia que estudia las sustancias: su estructura, sus propiedades y las reacciones que las transforman en otras... Las propiedades de la materia se conocen y comprenden más fácil y claramente cuando se relacionan con su estructura, en función de las moléculas, átomos y partículas todavía más pequeñas. Por estructura hay que entender la disposición de los átomos que constituyen toda materia y

⁶⁵⁴ Pauling, Linus (1.937), “The Significance of Structural Chemistry”. Cita extraída de Marinacci, Barbara (1.995), pp. 86-7.

⁶⁵⁵ Pauling, Linus (1.963), p. IX (Prólogo del autor a la primera edición)

⁶⁵⁶ Obviamente Pauling se está refiriendo a la química descriptiva en la que había sido educado durante su estancia en la *Oregon Agricultural College* y no a la química estructural cuyo legado luego heredaría.

que, mediante las interacciones de unos con otros, dan individualidad y variedad a la misma.⁶⁵⁷

Influido por la química estructural del siglo XIX⁶⁵⁸ Pauling diría que el fin de la ciencia –del químico en particular– es la del estudio de las propiedades de la materia en función de sus átomos y moléculas, de la *relación geométrica real* que se da entre sus distintas partes. Como ya hemos señalado, podemos relacionar esta concepción de Pauling con la química estructural del siglo anterior, o remontarnos hasta la física-geométrica de Galileo. Sin embargo, las primeras referencias a esta concepción de la ciencia son de vieja raigambre pitagórica. Frente a una filosofía de la materia desarrollada por los jonios, los pitagóricos definieron una filosofía de la forma:

[L]as nociones de orden, proporción y medida, es decir, que daban la mayor importancia a las diferencias *cuantitativas*. Cada cosa particular es lo que es, no por sus elementos naturales (que son los mismos en todas) sino por la proporción en que estos elementos se combinen, y puesto que es por dicha proporción por lo que una clase de cosas difiere de otras, afirmaban que esto, o sea la ley de su estructura, es la cosa esencial que hay que descubrir para comprenderlas. La importancia pasa de la materia a la forma, la estructura es lo esencial, y esa estructura puede ser expresada numéricamente, en términos de cantidad.⁶⁵⁹

Desde una orientación pitagórica lo *real* es la armonía matemática que está presente en la naturaleza, residiendo en el conocimiento de este orden la comprensión de la estructura formal del universo. De esa forma, las relaciones matemáticas a las que se ajustan los fenómenos constituyen la explicación *causal* y no sólo *descriptiva* o *instrumentalista*⁶⁶⁰. Es no obstante en Platón donde podemos encontrar una exposición más clara de un tipo de pensamiento que, heredero del pitagorismo, estableció las bases de un tipo de pensamiento que llegaría hasta Pauling⁶⁶¹. La necesidad de encontrar las regularidades, armonías, orden,

⁶⁵⁷ Pauling, Linus (1.963), p. 3

⁶⁵⁸ La química estructural del siglo XIX fue descrita en el punto 1.3.1.1 La química estructural dentro del capítulo 1.3. Contexto e influencias científicas.

⁶⁵⁹ Guthrie, William K.C. (2.005), p. 50

⁶⁶⁰ Un juego matemático-geométrico que nos permita salvar las apariencias, hacer mejores predicciones.

⁶⁶¹ Con una clara influencia pitagórica, Platón estableció las bases de un tipo de pensamiento que llegará hasta nuestros días. Tras la ejecución de Sócrates, Platón había emprendido toda una serie de viajes que le permitieron entrar en contacto con el pitagorismo, principalmente con Arquitas, discípulo de Filolao. A su regreso a Atenas Platón escribió el *Timeo*, texto en el que encontramos algunas de las bases más importantes de su teoría del

simplicidad y simetrías ocultas en la Naturaleza que propone Platón, guió la obra heliocéntrica de Copérnico, la física de Galileo, las leyes del movimiento planetario de Kepler, así como la química estructural del siglo XIX, hasta alcanzar la obra de Linus Pauling. Pero, ¿cómo conocer la Naturaleza? ¿Cómo dar cuenta de su regularidad, simetría y orden? La clave está – como diría Galileo– en las matemáticas:

La filosofía está escrita en este gran libro –me refiero al universo– que permanece continuamente abierto a nuestra contemplación, pero que no puede ser comprendido a menos que se aprenda primero a comprender el lenguaje y a interpretar los caracteres en los que está escrito. Está escrito en el lenguaje de la matemática, y sus caracteres son triángulos, círculos y otras figuras geométricas, sin los cuales es humanamente imposible comprender una sola palabra de él.⁶⁶²

4.1.1.2 El paradigma positivista en la obra de Linus Pauling

Educado científicamente bajo el paraguas del positivismo, la obra de Pauling refleja en buena medida algunos de sus presupuestos más importantes⁶⁶³. Ejemplo de ello lo encontramos en la preocupación y gran esfuerzo que dedicó –tal y como vimos en el capítulo dedicado a la *Naturaleza del enlace químico*– al intento, por un lado, de establecer los fundamentos de la nueva química en la mecánica cuántica y, por otro, de hacer los resultados de la misma

conocimiento y que más se aproximan a Pauling. En dicho texto Platón se pregunta cómo es posible alcanzar auténtico conocimiento, conocimiento *verdadero* y no solo el verosímil que parece arrojarse del mundo sensible. Si la verdad es atemporal –vendría a decir– *¿Cómo es posible entonces obtener conocimiento universalmente válido de objetos en constante cambio?* Todo cuando existe se encuentra o bien en el *Mundo de las Ideas* –en donde éstas son inteligibles, eternas e inmutables– o en el *Mundo Sensible* –donde los objetos que lo conforman son perceptibles, temporales y están en perpetua transformación. Si la *ciencia es el conocimiento estricto (universal y necesario) de lo absoluto, de lo eterno (que identificaba con las Ideas), se ha de tratar de una tarea eminentemente racional*. Por consiguiente, tan sólo cabe ciencia de lo inteligible. Por ello lo que hay que buscar tras el ámbito de lo visible es alguna huella de lo inteligible, es decir, hay que encontrar elementos racionales en un contexto sensible. Ello va a suponer que la comprensión no es sino la creación de cierto orden en las impresiones sensibles. Pero, ¿qué entender por *ordenación*? Ser partícipe de algunos signos distintivos del Mundo de las Ideas. El Mundo Inteligible es un mundo jerarquizado que posee en su cúspide las Ideas de Bien y de Belleza. Por ello, es un mundo regido por el orden, la armonía, la simplicidad, la proporción, la simetría. Esta belleza del Mundo Inteligible contagia en parte el Mundo Sensible⁶⁶¹ aportándole cierta racionalidad, armonía, regularidad, simetría y belleza.

⁶⁶² Galilei, Galileo (1623), vol. VI, 232

⁶⁶³ Ejemplo de ello lo encontramos en la influencia que el positivismo ejerció en su concepción de ciencia a la que siempre la consideró –principalmente al hacer referencia al método científico– como el *paradigma de la objetividad y de la racionalidad*. En su famoso libro de texto *Química General* Pauling reconoce incluso que el método científico “puede ser valioso no sólo en el campo de la ciencia, sino también en otras actividades: mercantiles, jurídicas, sociológicas, etc.”[Pauling, Linus (1.963), p. 15]

accesibles y familiares a los químicos no entrenados en la nueva química teórica⁶⁶⁴. En este esfuerzo vemos algo muy próximo al intento llevado a cabo por el Círculo de Viena al intentar construir una gran ciencia unificada que abarcara todos los conocimientos proporcionados por las diferentes ciencias; desde la física y el resto de las ciencias naturales, hasta llegar a las ciencias sociales. Este fisicalismo suponía que toda ciencia que quisiera considerarse tal –como era el caso de la química– debía ser axiomatizada total o parcialmente. Es decir, la química ya no podía ser explicada en términos de representaciones gráficas sino en un lenguaje afín al de las ecuaciones de Schrödinger⁶⁶⁵. De otra parte, este intento del Círculo de Viena significaba hacer fenomenista toda ciencia. Inspirados en la concepción de Ernst Mach –para quien los fenómenos son lo únicamente accesible– había que abandonar toda referencia metafísica y –como diría Pauling– comenzar por la búsqueda de “algunos hechos por observación y experimentación”⁶⁶⁶. Sin embargo, esta axiomatización y fenomenalización tienen un precio: hay que renunciar a los enunciados generales, universales, así como a la noción de ley universal⁶⁶⁷. Si los fenómenos son lo único alcanzable, la ciencia no se puede mover entre parámetros de verdad y falsedad, ya que no tenemos acceso a los objetos mismos, sólo a los fenómenos. Así, la ciencia es un instrumento útil a través del cual se logra la adaptación biológica del hombre. Para Pauling el conocimiento no es un elemento puramente cognoscitivo o contemplativo, por el contrario siempre tiene una dimensión pragmática, dirigida a la transformación de la realidad. Para el químico estadounidense la ciencia es un instrumento útil

⁶⁶⁴ Se ve de forma especial en su artículo de 1.928 “The Shared-electron Chemical Bond”.

⁶⁶⁵ De forma un poco más desarrollada podemos decir que la axiomatización de una disciplina supone –siguiendo la *versión inicial estándar* de Frederick Suppe (perteneciente ya a la Concepción Heredada)– que sus teorías queden formuladas según una lógica matemática de primer orden con identidad L , en la que los términos no lógicos o constantes de L se dividan en tres clases disjuntas llamadas vocabularios; un *vocabulario lógico* que se compone de constantes lógicas (incluidos términos matemáticos); un *vocabulario observacional* Vo , que contiene términos observaciones; y un *vocabulario teórico* Vt , que contiene términos teóricos. Los términos de Vo se interpretan como referidos a objetos físicos o a características de los objetos físicos directamente observables. Es decir, se deben referir a hechos –como el mismo Pauling también sostiene– observados. Por otro lado hay un conjunto de postulados teóricos T , cuyos únicos términos no lógicos pertenecen a Vt . Pues bien, se da una *definición explícita* de los términos de Vt en términos de Vo mediante *reglas de correspondencia* C . Es decir, para cada término de “ F ” de Vt debe darse una definición de la siguiente forma: $\forall x (Fx \rightarrow Ox)$, donde “ Ox ” es la expresión de L que contiene sólo símbolos de Vo y posiblemente del lenguaje lógico. Así, las teorías científicas muestran una primera estructura cuyas componentes principales vendrían a ser; lógico-matemática, teórica, observacional y de intercorrespondencia. En el caso de Linus Pauling, el componente lógico-matemático vendría dado por el nuevo lenguaje de la mecánica cuántica y los componentes teórico, observacional y de intercorrespondencia vendrían dados por los fundamentos de la nueva química cuántica.

⁶⁶⁶ Pauling, Linus (1.963), p. 15. Veremos esta pequeña cita más desarrollada en el capítulo dedicado al método científico.

⁶⁶⁷ En seguida vamos a ver cómo Pauling también lleva a cabo tal exigencia.

que nos permite aspirar a construir un mejor mundo: *un mundo en el que cada ser humano pueda tener una buena vida*⁶⁶⁸. Entonces, ¿la ciencia ha de quedar reducida a un puro conocimiento instrumentalista? Lo que encontramos en nuestra experiencia cotidiana es una dualidad entre apariencia y realidad, entre fenómeno y esencia. Detrás de lo que se presenta está la esencia que es lo que realmente constituye al objeto. Pero, ¿por qué lo que conocemos no es exactamente la realidad? Nuestro conocimiento se da a través de medios, de elementos que introducen mediaciones. En primer lugar nos encontramos con mediaciones sociales finas, como el lenguaje y la misma ciencia. En segundo lugar, la esfera de la realidad a la que tenemos acceso se encuentra determinada y condicionada por nuestros sentidos. Por ello, más que reproducir la realidad, más que una “teoría del reflejo” debería hablarse de “re-figurar” la realidad. Pero, ¿eso no supone tener que renunciar a una concepción realista de la ciencia? ¿Qué posición ontológica y epistemológica hay que tener ante las teorías y entes teóricos? Al igual que el positivismo lógico, Pauling se ve tentado a renunciar a la posibilidad de un conocimiento completo de la realidad, a la posibilidad de enunciar leyes generales con validez universal, pero ello no significa renunciar a la existencia de un mundo real y a la posibilidad de alcanzar cierto grado de conocimiento. Aunque la realidad conocida es para Pauling independiente del sujeto, éste puede conocer parte de la misma con una cierta finura. Frente a la convicción positivista de que no tenemos acceso cognoscitivo al mundo que pudiera estar detrás o más allá de los fenómenos, al mundo según es en sí mismo, ni incluso parcialmente, Pauling se vuelve hacia posturas más cercanas al pitagorismo y el platonismo. A pesar de reconocer el extraordinario papel que juega la observación en el método científico, hay que tener presente –señala– las mediaciones sociales, del lenguaje e incluso científicas que pueden condicionar nuestras percepciones. Si bien los sentidos nos engañan, es posible alcanzar la “esencia”, aquello que se esconde tras lo aparente –que vendría a ser la estructura interna que soporta las propiedades que vemos–, a través de la razón matemática: las conexiones lógico-geométricas que se dan entre las unidades últimas de la materia y que vienen dadas por la física cuántica. Así, diría Pauling, es posible el conocimiento, hay una posibilidad de conexión entre el sujeto y los objetos. De ahí que, a pesar de que las distintas culturas y personas vean distintas cosas, la ciencia funcione y

⁶⁶⁸ Este es precisamente el título de un pequeño artículo que, como muchos otros escritos de Pauling, refleja la necesidad que el químico sintió por iniciar un movimiento que llevara a la construcción de un mundo mejor para todos. En todos ellos, como es el caso, señala el decisivo papel que en dicha construcción tendrían la ciencia y la ética jugarían. Debido a su extraordinario valor humano, hemos creído oportuno incluir en los anexos la traducción del mismo.

tenga que defenderse un realismo gnoseológico⁶⁶⁹. Pero ¿cómo es posible entonces superar la contradicción filosófica profunda que significa ser positivista y neopitagórico al tiempo? Como hemos podido observar, Pauling acepta toda una serie de ingredientes asumidos de hecho por los neopositivistas, pero sin que ninguno de ellos sea en sí mismo esencial al positivismo; apuesta por el método inductivo o hipotético-deductivo (Popper); destaca el extraordinario papel que juega la observación en el método científico; manifiesta un claro respeto por las aportaciones de la nueva lógica y por la axiomatización de teorías; apuesta por el ideal de la ciencia unificada. Pero como decíamos, se tratan de elementos perfectamente compatibles con una posición realista. Así, de forma más o menos inconsciente Pauling supera dicha contradicción identificándose con aspectos que acompañan al positivismo que le rodea histórica, contextualmente, pero que no son en absoluto tesis positivistas centrales. Pero, ¿Cómo se produce ese acceso cognoscitivo al mundo que esta detrás o más allá de los fenómenos? ¿Al mundo según es en sí mismo? ¿Qué grado de confianza podemos tener de él? La mejor manera de ver la forma en la que Pauling aborda estas cuestiones es a través de su definición de método científico⁶⁷⁰.

4.1.1.3 El método científico⁶⁷¹

Es en su famoso libro de texto *Química General* donde encontramos una pequeña definición del método científico:

[E]l método científico consiste, en parte, en la aplicación de los principios del razonamiento riguroso que se ha desarrollado en las Matemáticas y en la Lógica a la deducción de conclusiones ciertas a partir de una serie de postulados aceptados. En cualquier rama de las Matemáticas, los postulados básicos se aceptan como axiomas, y después todo lo demás se deriva de estos postulados. En la ciencia y en otros campos de la actividad humana, los postulados básicos (princi-

⁶⁶⁹ José Martínez, Francisco (2.002)

⁶⁷⁰ Es importante recordar que la definición del “método científico” como criterio de demarcación era otra de las grandes exigencias del positivismo lógico.

⁶⁷¹ En este apartado vamos a mostrar la concepción de “método científico” que Linus Pauling pareció manejar en sus trabajos sobre química, sobre todo en aquellos fundamentados en la mecánica cuántica. Para ello nos basamos tanto en sus trabajos de esta época como en la definición que de “método científico” da en su famoso libro de texto *Química General*. Entendemos que es importante hacer esta aclaración ya que sus trabajos de biología y medicina parecen estar basados en mayor medida en “métodos indirectos” y la construcción de estructuras tridimensionales. Nos haremos cargo de esta segunda metodología en el apartado dedicado a la biología y la medicina

pios, leyes) no se conocen, sino que deben ser descubiertos. El proceso de descubrimiento se llama *inducción*. El primer paso para aplicar el método científico consiste en buscar algunos hechos por observación y experimentación; en nuestra ciencia, estos hechos corresponden a la Química descriptiva. El paso siguiente comprende la clasificación y agrupación de los hechos por medio de una relación. Si ésta es tan general que incluya en sí misma un número grande de hechos, se llama *ley*, a veces *ley de la Naturaleza*.⁶⁷²

En este pequeño fragmento encontramos varias referencias que confirman una nueva aproximación de Pauling a los preceptos básicos del positivismo lógico. En primer lugar vemos una concepción inductiva-deductiva del método científico muy cercana al positivismo lógico. En segundo lugar, Pauling señala la necesidad de que cada ciencia lleve a cabo sus inferencias adaptándose a las formalizaciones de la lógica matemática, así como la existencia de una separación radical entre dos tipos de ciencias: las llamadas ciencias formales como las matemáticas (“cuyos postulados básicos hay que aceptarlos como axiomas”) y las ciencias con contenido empírico, cuyos postulados básicos hay que descubrir y confirmar por la experiencia. Sin embargo, debemos señalar que se trata de una concepción más cercana a la de Popper que a la concepción heredada. Pauling consideraba que todas las proposiciones químicas debían formar parte de un sistema axiomático, a imagen de lo que era un ideal de la física: pero apostó por la universalidad de las leyes científicas⁶⁷³ que permiten no sólo describir el mundo sino también explicarlo:

Cuando se halla, en principio, que una descripción o una ecuación matemática correlaciona o explica un cierto número de hechos empíricos, se acepta la descripción o ecuación, que representa una conjetura provisional, como una *hipótesis*, la cual se somete a ensayos posteriores, comprobando experimentalmente las consecuencias que se deducen de ella. Si continúa la concordancia con los resultados experimentales, la hipótesis se eleva al rango de *teorema* o *ley*.⁶⁷⁴

Por otro lado, Pauling señalaba –en los mismos términos que Popper– la dificultad lógica que presentan las inferencias inductivas, ya que “el método inductivo nunca puede realizarse de un modo completo”⁶⁷⁵. Aparece así un problema ¿cómo superar ese límite?

⁶⁷² Pauling, Linus (1.963), p. 15

⁶⁷³ Concepción realista

⁶⁷⁴ Pauling, Linus (1.963), p. 20

⁶⁷⁵ Pauling, Linus (1.963), p. 16

¿Cómo puede progresar la ciencia a pesar del problema que presenta la inducción? ¿Qué tipo de conocimiento es el que nos ofrecen los experimentos particulares? Aunque Pauling nunca llegó a dejar evidencias de este tipo de cuestionamientos a un nivel filosófico⁶⁷⁶, su respuesta estuvo muy cerca de la que encontramos en su amigo Bertrand Russell:

Si el experimento fuera la *única* fuente de verdad, ningún experimento podría enseñar algo fuera de sí mismo. Para que así sea, el resultado del experimento ha de implicar otras proposiciones; y esta implicación, a la larga, no puede ser probada enteramente por el experimento. Hablamos de leyes generales que son probadas por la experimentación; pero el mero hecho de su generalidad muestra que no son probadas *enteramente* por la experimentación, puesto que toda experiencia es experiencia de cosas particulares. Cuando el experimento prueba una ley general, ésta es meramente seleccionada por el experimento entre otras varias, que son consideradas *a priori* como las únicas leyes posibles...la uniformidad de la naturaleza y otros principios fundamentales no pueden ser *probados* por el experimento.⁶⁷⁷

Pauling estaba convencido de esa uniformidad, de la regularidad de la Naturaleza, de la existencia de una organización geométrica de las partes constituyentes de la materia –fuera ésta animada o inanimada– que daba cuenta de sus propiedades. Pero para encontrarlas era necesario desarrollar una metodología que estuviera más allá de la pura experimentación. Había que definir un método que combinara varias estrategias de tal manera que el científico pudiera conocer la estructura interna real de la materia. Pauling halló la respuesta en el desarrollo de una metodología indirecta –inspirada en gran medida en la química estructural del siglo XIX– en la que se combinaba un profundo conocimiento teórico, el uso de *aproximaciones sucesivas* y la construcción de modelos (ya fueran simples esquemas o estructuras tridimensionales), junto con un fuerte aparato matemático.

⁶⁷⁶ En *Química General* se limita a presentar el problema y plantear que la solución se encuentra en el uso del método de las aproximaciones sucesivas.

⁶⁷⁷ Russell, Bertrand (1.972), pp. 108-09

El uso de las aproximaciones sucesivas

En *Química General*, tras plantear el problema de la inducción, Pauling define las aproximaciones sucesivas en los siguientes términos:

Se hacen algunas medidas con cierta precisión, tales como de composiciones de sustancias, con una exactitud de un 1 %, y se formula una ley aproximada que comprenda a todas ellas. Puede entonces suceder que, cuando se hacen medidas más precisas se encuentre que existen desviaciones de la primera ley. Una segunda ley más exacta, pero más complicada, se formula entonces incluyendo estas desviaciones. Este procedimiento puede realizarse varias veces a lo largo de la formulación de una ley natural, sobre cada una de las formas últimamente aceptadas.⁶⁷⁸

La referencia al uso de aproximaciones en ciencia no es baladí o teórica en el caso de Pauling. Como pudimos ver en su trabajo sobre la estructura del átomo de carbono, los importantes obstáculos matemáticos que se presentaban le llevaron a buscar aproximaciones y atajos que permitieran superar parte de aquellas dificultades. Estos trabajos sobre la estructura de las moléculas pusieron de manifiesto dos de sus principales talentos, aquellos que más le facilitaron sus conquistas científicas: su gran capacidad para simplificar las cosas y una fabulosa memoria. Pero también mostraron su extraordinaria confianza y apego a las matemáticas. Si bien él no era el único que tenía que hacer frente al problema matemático, a diferencia de otros químicos estaba convencido de que las matemáticas –lejos de ser un mero escollo– eran la clave para demostrar, sustentar sus primeras intuiciones⁶⁷⁹. Así, la resolución de la estructura tetraédrica del átomo de carbono fue producto de una aproximación matemática. Pero como tuvimos también la oportunidad de ver en el capítulo dedicado al contexto de la filosofía de la química, el método de las aproximaciones en ciencia –concretamente en el ámbito de la química– arrastra tras de sí importantes consecuencias e implicaciones ontológicas y epistemológicas que alcanzaron la obra de Pauling: *¿son las aproximaciones necesarias o pueden ser evitadas para hacer una ciencia realmente exacta? ¿Son estos “artefactos” arbitrarios y subjetivos? ¿Cómo pueden estar ligados a algo observable?*

⁶⁷⁸ Pauling, Linus (1.963), pp. 16-17

⁶⁷⁹ Recordemos que por entonces Pauling lo que intentaba demostrar era la estructura tetraédrica del carbono.

La clave estaba en la aplicación de la mecánica cuántica. Como vimos en el capítulo II⁶⁸⁰, muchos químicos vieron en el artículo de Linus Pauling (1.928a) la primera aplicación de la mecánica cuántica a su disciplina. Sin embargo, como se constató entonces y se seguiría corroborando en posteriores trabajos, la aplicación de la mecánica cuántica a la química llevaba consigo una formulación matemática tan compleja, que si la estructura a estudiar contenía un número considerable de átomos, los patrones radiográficos y los cálculos matemáticos resultaban insuficientes: el número de estructuras teóricamente posibles se disparaba.

Metodologías indirectas. La construcción de modelos

Como entonces mencionamos, había en el ambiente científico una intuición compartida: parecía darse una repetición de los patrones estructurales básicos. A partir de esta intuición, de la observación de muchos casos y del conocimiento de la mecánica cuántica y la química –unido a su extraordinaria memoria–, Pauling fue capaz, basándose en estructuras geométricas básicas⁶⁸¹, gracias a la ayuda de Ava Helen, de hacer estructuras de papel que permitían descubrir la estructura de varios silicatos. A pesar de haber sido obtenidas de forma indirecta, las estructuras conseguidas a partir de la consideración del tamaño de los átomos e iones, de las distancias y posiciones de los enlaces entre iones, de las cargas eléctricas de iones vecinos y otras regularidades que Pauling había ido observando, eran conformes con cuanto se sabía de física y química.

Estas reglas –conocidas muy pronto como vimos como *reglas de Pauling*–, basadas en los principios de la mecánica cuántica y la química, permitían predecir la estructura de cristales simples a partir del uso de poliedros geométricos. Se trataba por consiguiente de arreglos “ideales” que, debido a la existencia de distorsiones, presentaban diferencias con respecto a la disposición real de los átomos. Aun cuando los resultados obtenidos podían compararse con los derivados del análisis radiográfico, Pauling reconocía que se trataba de predicciones con cierta exactitud. Es decir, aunque permitían arrojar luz sobre la estructura real de los cristales, no dejaban de ser aproximaciones. De forma paulatina, a medida que se obtenían nuevos resultados

⁶⁸⁰ “2.1. Química estructural moderna”

⁶⁸¹ Que vendrían a coincidir en gran medida con las formas geométricas básicas de Platón

y las investigaciones avanzaban, era posible según el químico estadounidense irse acercando al conocimiento y comprensión de la naturaleza de la estructura *real* de los cristales⁶⁸².

4.1.1.4 Estatus cognoscitivo y ontológico de las entidades teóricas

Cierto es –diría Pauling– que las teorías y leyes tienen un gran valor para la simplificación de la ciencia y que su conocimiento nos permite hacer predicciones seguras acerca del comportamiento de un sistema⁶⁸³. Sin embargo, lejos de defender una postura puramente instrumentalista, para Pauling la ciencia nos permite acceder a un conocimiento muy aproximado de la estructura real de la materia. Como hemos venido señalando, cercano al viejo pitagorismo y heredero de la química estructural del siglo XIX, para Linus Pauling la misión del químico estructural es la de buscar las relaciones matemáticas –geométricas– que se dan dentro de la molécula. A pesar de la aparente relación caótica que parece darse entre los átomos, el químico ha de encontrar un orden que de cuenta de las propiedades que observamos en la molécula. Para ello necesita un lenguaje apropiado, que es el que le da la nueva lógica-matemática, y un nuevo objeto material de estudio, el átomo de la mecánica cuántica. Así, “el químico discute la estructura de moléculas en términos de átomos, los físicos la estructura de los átomos en términos de núcleos y los núcleos, ahora, en términos de protones, neutrones, etc.”⁶⁸⁴. Pero ¿cómo pasar de los átomos a las moléculas? ¿Cómo el conocimiento de su estructura puede arrojar luz sobre su comportamiento y propiedades? En el capítulo dedicado a la obra de Linus Pauling sobre química estructural (capítulo II) analizamos precisamente su trabajo en torno a la estructura molecular. Fue entonces cuando mostramos cómo la clave se hallaba para Pauling en la noción de *enlace químico*: si las propiedades de la materia dependen de su estructura interna, entonces hay que conocer los principios a partir de los cuales se levanta su arquitectura. En *La Naturaleza del enlace químico*⁶⁸⁵ Pauling presentó por primera vez –como pudimos ver– la forma en la que se lleva a cabo el intercambio de energía y la disposición espacio-temporal en la que se produce el enlace químico a partir de las matemáticas y las leyes de la mecánica cuántica.

⁶⁸² Carrera entre Pauling, Heitler y London así como Slater por la explicación matemática de la estructura tetraédrica del carbono.

⁶⁸³ Pauling, Linus (1.963), p. 20-21.

⁶⁸⁴ Pauling, Linus (1.963)

⁶⁸⁵ Pauling, Linus (1.931)

Ya antes, en el artículo “The Shared-electron Chemical Bond”⁶⁸⁶ la aplicación de la mecánica cuántica a dos sistemas biatómicos –la molécula de hidrógeno y el ión molecular de hidrógeno– había permitido dar cuenta del importantísimo papel que la resonancia jugaba en la estabilización de una molécula. Ello permitió no sólo descubrir la estructura de cristales simples, sino también aventurar la de muchos otros cristales, así como dar cuenta de sus propiedades. Definitivo fue –vimos– el artículo de 1.931. En dicho trabajo Pauling mostraba el enlace covalente como resultado de la interacción de un electrón desapareado de cada átomo, es decir, del solapamiento de dos orbitales. De ahí, señalaba, que fuera imprescindible llevar a cabo un análisis riguroso –como tuvimos la oportunidad de ver– de la naturaleza y características de los orbitales. Tal estudio, la extensión de la mecánica cuántica a sistemas más complejos y la formulación de las seis reglas del enlace covalente, permitieron la derivación de algunas de las propiedades de los cristales relacionadas con su valencia. Pero junto a ellas, nacía una nueva forma de entendimiento de la química y las ideas de estabilidad y equilibrio. Fundamental en el antiguo pensamiento pitagórico⁶⁸⁷, la idea de *equilibrio* permitía a Pauling dar cuenta de la estabilidad de los estados cuánticos de átomos y de moléculas. De esa forma, estas estructuras estables no sólo pueden ser consideradas como productos de la imaginación del científico, como meras fórmulas que permiten salvar las apariencias dando cuenta de las propiedades que observamos de la materia, también pueden ser vistas como algo real. Sin embargo, el realismo no puede ignorar –tal y como pusieron de manifiesto tanto Einstein como el mismo Pauling– que la ciencia es una creación del intelecto humano en su intento por comprender el mundo físico. Sin embargo, el científico teórico –diría Einstein– considera los productos de su imaginación como realidades dadas y no sólo como meras creaciones del pensamiento. De esa forma, aunque las regularidades matemáticas de la ciencia sean en principio una creación del intelecto humano en su intento por comprender el mundo material, pueden facilitarnos una descripción real de cuanto hay: *el pensamiento puede captar la realidad*. Pero para que sea posible la interpretación realista de la ciencia, deben concederse a las entidades teóricas una existencia real. Pues bien, ese es precisamente el caso de Pauling, para quien los átomos, las moléculas y demás entidades teóricas existen realmente. Ejemplo de ello lo encontramos cuando afirma: “Hoy se acepta como una realidad la existencia de los átomos...

⁶⁸⁶ Pauling, Linus (1.928a)

⁶⁸⁷ Sobre todo en las teorías de la vida que desarrollaron autores como Alcmeón de Crotona y que revisaremos más detenidamente cuando hablemos en este capítulo de la medicina.

[y] se tiene un conocimiento preciso de muchas propiedades de los átomos y las moléculas, de tal suerte que ya no pueden ser considerados como imaginarios”⁶⁸⁸. Más aún, la existencia de estos entes teóricos puede demostrarse a partir de un examen de sus propiedades. Por ejemplo, las propiedades que observamos en los átomos ¿les pertenecen realmente a ellos o tan sólo están en la mente del científico? En su momento señalamos que el físico lo que pretende conocer es un *sistema* (campo eléctrico, punto masa, átomos), el *estado de un sistema*. Pero, ¿cómo se puede llegar a determinar el estado de un sistema determinado? Vimos cómo a partir de ciertas variables observables, de un número mínimo de propiedades observables, se hacía posible el conocimiento del estado del sistema. De ahí, que fuera necesario reconocer la existencia de una relación directa entre el sistema, el estado del mismo y sus propiedades observables. Ahora bien, estas propiedades no debían ser sólo observables, sino también medibles (magnitudes). Pero, ¿qué relación guardan las propiedades –las magnitudes– con el sistema al que pertenecen? Para Linus Pauling se trata de una relación sustantiva: los sistemas –en su caso los cristales y moléculas– tienen propiedades al margen de los procesos de medida: toda propiedad es de algo, y ese algo tiene esas propiedades⁶⁸⁹. Es en este planteamiento realista, clásico de la expresión de sustancia y propiedades en donde los sistemas, los objetos –los átomos, electrones, etc.– han de concebirse como el soporte de las propiedades. De ahí que las propiedades que observamos en la materia –ya sean físicas o químicas como la densidad, solubilidad, etc.⁶⁹⁰– pertenezcan a la materia y no se encuentren sólo en la mente del científico. Vemos cómo Pauling vuelve a coincidir nuevamente con el planteamiento de físicos realistas como Schrödinger⁶⁹¹ o Einstein. Así, para el químico de Pórtland los sistemas poseen de forma individual (aunque luego hagamos promedios) propiedades continuamente, no sólo cuando los observamos. Las propiedades observadas, así como las estructuras cristalinas deducidas son reales, pertenecen al sistema. De ese modo se hace posible recuperar no sólo la concepción de una realidad física

⁶⁸⁸ Pauling, Linus (1.963), p. 21.

⁶⁸⁹ Y recordemos que el fin del científico es el de encontrar precisamente esas propiedades.

⁶⁹⁰ Pauling define las propiedades físicas y químicas en los siguientes términos:

– *Propiedades físicas de las sustancias.*- *Las propiedades de las sustancias son sus cualidades características (formación de caras, aristas y vértices, fractura, gusto, solubilidad, densidad);* (la densidad, solubilidad, punto de fusión, conductividad eléctrica y térmica son propiedades específicas y pueden medirse con precisión y expresarse numéricamente). Otras propiedades no tan sencillas son la maleabilidad, ductilidad y dureza así como el color [Pauling, Linus (1.963), p.13-14].

– *Propiedades químicas de las sustancias.*- Las propiedades químicas de una sustancia son aquellas que se refieren a su comportamiento en las reacciones químicas. Reacciones químicas son los procesos por los cuales unas sustancias se transforman en otras. [Pauling, Linus (1.963), (p. 14)]

⁶⁹¹ Concretamente deberíamos decir con el grupo que se oponía a la *Interpretación de Copenhague*.

independiente del observador, sino también una interpretación física que permite llevar a cabo representaciones espacio-temporales y pictóricas de los sistemas cuánticos. De ahí que los objetos cuánticos, como los electrones, los átomos, tengan para Pauling una existencia real y, aunque su conocimiento –subraya– se corresponde a una aproximación ideal, a una aproximación imperfecta, la mella en este conocimiento no se encuentra en los objetos mismos, sino en las limitaciones de nuestro entendimiento.

Ligada a la nueva forma de comprensión alcanzada y al método científico desarrollado, la obra de Pauling puso de manifiesto otro gran problema –y una nueva solución– con el que ha de enfrentarse la ciencia: la comunicación de los descubrimientos llevados a cabo. Como hemos señalado en varias ocasiones, una de las mayores preocupaciones personales de Pauling fue la de introducir en los químicos –tanto veteranos como de las nuevas generaciones– el nuevo lenguaje de la mecánica cuántica. Sin embargo, tras la publicación del artículo “La Naturaleza del enlace químico” en 1.931, Pauling comprobó que la comunidad química no estaba preparada para la aplicación directa de la matemática cuántica. De ahí que en los artículos que le siguieron entre 1.931 y 1.937 –así como en *Química General*– podamos observar cierto rechazo al uso de pruebas matemáticas rigurosas, apostando en su lugar por la introducción de explicaciones más intuitivas. Combinando la teoría cuántica con datos obtenidos de la cristalografía y el desarrollo de un nuevo lenguaje –basado en conceptos como hibridación, resonancia y electronegativad–, Pauling supo crear un estilo propio que permitía, por medio de aproximaciones semi-empíricas, salvar las insuficiencias que el uso exclusivo de la teoría o la mera ordenación de datos de laboratorio presentaban.

Vemos cómo Pauling fue capaz de construir a partir de una temprana intuición –*el conocimiento del mundo se hace más fácil y claro cuando se conoce la estructura de cuanto hay en función de los elementos últimos que lo componen*– y una vieja concepción del hombre de ciencia –*el hombre de ciencia es aquel que descubre los secretos de la naturaleza a través de las matemáticas*– una concepción personal de la química así como una forma de desarrollarla y comunicarla. Concepción ésta que, marcada por una posición realista cercana a la de Schrödinger y los ecos de un claroun neopitagorismo basado en la matemática y la noción de átomo, encontró continuidad –a pesar de las notorias diferencias existentes entre ambos campos– en los trabajos llevados a cabo en el ámbito de las ciencias de la vida.

4.1.2 EPISTEMOLOGÍA, ONTOLOGÍA Y METODOLOGÍA EN LA BIOLOGÍA Y MEDICINA DE LINUS PAULING

Aunque Pauling se mostrara crítico con el texto de Schrödinger *¿Qué es la vida?*⁶⁹², debemos destacar en su obra la presencia de un fisicalismo y un reduccionismo cercanos a los propuestos por el físico austriaco. Su invitación a ver al gen como un cristal *aperiódico* y extender la metodología utilizada en física al ámbito de las ciencias biológicas fueron –tal y como señalaron algunos de los protagonistas de la temprana biología molecular⁶⁹³– claves en el desarrollo de una nueva perspectiva sobre la vida. En el caso de Pauling, estas ideas y la utilización del “método indirecto” presentes en la nueva química estructural tuvieron su reflejo en sus trabajos de biología y medicina. Con respecto al neopitagorismo, éste se vio revitalizado en el ámbito de la medicina al describir algunas enfermedades como resultado de la variación en la concentración de sustancias vitales⁶⁹⁴, es decir, en el horizonte de los conceptos de equilibrio y homeostasis.

4.1.2.1 La biología de Linus Pauling

Fisicalismo y reduccionismo en las ciencias de la vida

Cuando en la década de 1.930 Linus Pauling comenzó a desarrollar sus primeros trabajos en el ámbito de la biología, el positivismo ya señalaba al vitalismo como una vía sin salida: *un principio inmaterial no puede ser objeto de estudio de la ciencia*. A ello se debe el que la investigación biológica se tuviera que centrar –como fue el caso de Linus Pauling– en el estudio de los fenómenos biológicos a nivel atómico y molecular, inspirándose para ello en el método analítico que tan buenos resultados había dado en la física. Como vimos en el capítulo III dedicado a los trabajos que Pauling desarrolló en el ámbito de las ciencias biomédicas, sus primeras investigaciones requirieron la extensión de las ideas de enlace químico, resonancia y

⁶⁹² “Cuando leí por primera vez este libro, hace cerca de 40 años, estuve decepcionado. Entonces, e incluso ahora, creo que Schrödinger no hizo ninguna contribución a nuestra comprensión de la vida” [Pauling, Linus (1.987)]

⁶⁹³ M. Delbruck, G. Stent, J.F. Watson, M.F. Wilkins y S. Benzer entre otros.

⁶⁹⁴ Pauling, Linus (1.968b)

estructura molecular desde la química a sustancias biológicas como la hemoglobina. De ahí que –como venimos señalando– dichos trabajos no supusieran una gran fractura con respecto a su trabajo anterior. A pesar del gran giro que adentrarse en el ámbito de las ciencias de la vida suponía, debemos hablar por ello de una continuidad en lo que respecta a su perspectiva metodológica, ontológica y epistemológica: aunque las sustancias cambiaran, aunque las motivaciones y problemas fueran en principio otros, las respuestas finales seguían estando dentro del mismo orden: el descubrimiento de la estructura de las moléculas, las fuerzas que intervienen, sus propiedades y funcionamiento desde el punto de vista químico. Se trata por consiguiente de un acercamiento reduccionista al problema de la vida. Pero ¿qué tipo de reduccionismo encontramos en la obra biológica y médica de Pauling? Tal y como ya señalamos en el capítulo I.3 dedicado al contexto filosófico, debe señalarse la existencia de tres niveles o tipos de reduccionismo⁶⁹⁵ y ver en qué medida éstos se encuentran presentes en el trabajo de Pauling. Para el químico estadounidense –al igual que para Schrödinger– las unidades funcionales últimas a partir de las cuales hay que explicar los fenómenos y procesos biológicos los encontramos en los niveles atómico y molecular. Así, las explicaciones biológicas deben estar basadas en las leyes de la física y la química⁶⁹⁶. De ese modo, las teorías y leyes experimentales formuladas en biología o medicina pueden considerarse casos especiales de las teorías y leyes enunciadas en la química y, finalmente, la física. De nuevo, el planteamiento epistemológico de Pauling viene a coincidir con el de Schrödinger para quien la pregunta a la que ha de responder la ciencia vendría a ser: “¿Cómo pueden la Física y la Química dar cuenta de los fenómenos espacio-temporales que tienen lugar dentro de los límites espaciales de un organismo vivo?”⁶⁹⁷. Frente a la incapacidad que entonces estas disciplinas mostraban para explicar los fenómenos biológicos, cabían dos tipos de respuestas: aquellas que apuntaban hacia

⁶⁹⁵ Reduccionismos ontológico, epistemológico y metodológico.

⁶⁹⁶ Recordemos que la relación entre Warren Weaver, cabeza de la división de ciencias naturales de la Fundación Rockefeller –y llamado por algún historiador como “el principal banquero de la ciencia estadounidense” [Hager, Thomas (1.998), p. 58]– y Linus Pauling comenzó a partir del proyecto del primero de llevar a cabo una revolución en el ámbito de la biología similar a la que había vivido la física a principios de siglo. Consciente de que la vieja biología había expirado, Weaver fue el responsable económico de la introducción de un nuevo rigor intelectual y nuevas técnicas experimentales que se enfocaran hacia el funcionamiento molecular de los cuerpos. Si las moléculas y reacciones que hacen posible la vida –vendría a sostener– podían ser descritas y controladas, sería posible obtener no sólo un mejor conocimiento de la naturaleza biológica, sino también de controlarla y modificarla hasta el punto de crear una raza humana superior, más racional e inteligente. De hecho fue el quien en 1.938 acuñó el término *biología molecular* y describió el campo que intentaba fundar como “visión molecular de la vida” [Claros, Gonzalo (2.003), p. 170].

⁶⁹⁷ Schrödinger, Erwin (1.944), p. 15

la existencia de leyes biológicas que estaban más allá de la física y la química, y aquellas respuestas que, como la de Schrödinger, indicaban que “la evidente incapacidad de la Física y la Química actuales para tratar tales fenómenos no significa en absoluto que ello sea imposible”⁶⁹⁸. La misión de la ciencia debía consistir entonces en extender el lenguaje, la matemática y la metodología de la física cuántica al estudio de las estructuras básicas de la biología.

La postura de Pauling se hace evidente desde la elección inicial del material a observar. A pesar de la enorme complejidad de la molécula de la hemoglobina –recordemos que fue la primera proteína biológica que estudió–, ésta ofrecía una gran ventaja; la capacidad de cristalizarse. Ello tenía dos importantes implicaciones –una ontológica y otra epistemológica– y una gran ventaja metodológica; desde el punto de vista ontológico y epistemológico hablaba de una estructura regular y repetitiva, de un orden interno resultado de la disposición regular de los átomos y de una interacción predefinida. Por ello, la comprensión de los fenómenos biológicos debía partir del descubrimiento de dichas estructuras regulares: ¿cómo podía llevarse a cabo tal comprensión? Por tratarse de un cristal, de una estructura regular repetitiva, era posible extender la metodología que se había estado empleando en el estudio de los cristales inorgánicos a la biología. De ese modo, Pauling contribuyó a la construcción de una nueva forma de mirar, de atacar las estructuras de las sustancias biológicas. Es decir, las explicaciones había que buscarlas en los niveles inferiores de complejidad, en el nivel atómico y molecular. Al igual que ocurriera en el ámbito de la química, Pauling combinó distintas estrategias a la hora de resolver la estructura de las formas moleculares biológicas más complejas.

La utilización del “método indirecto” en biología

Como hemos podido observar en el capítulo dedicado a su obra científica, así como la resolución de la estructura tetraédrica del carbono fue posible gracias a la realización de numerosos dibujos y aproximaciones matemáticas, la resolución de la estructura de moléculas más complejas –principalmente biológicas– requirió otra utilización del papel y la pluma: la construcción de sencillas estructuras tridimensionales. Inspirado en los modelos desarrollados

⁶⁹⁸ Schrödinger, Erwin (1.944), p. 15

en el siglo XIX por químicos como Dalton⁶⁹⁹, Pauling fue capaz de encontrar la estructura de muchas moléculas a partir de rudimentarias maquetas de papel y otros materiales simples. La reunión de datos químicos, físicos, matemáticos y una extraordinaria memoria le permitió –a través de la construcción de estas sencillas estructuras tridimensionales– la resolución⁷⁰⁰ de complicadas estructuras.

Así, frente al intento por parte de investigadores británicos –especialmente por parte de Bernal y su equipo– de construir modelos para la estructura de las proteínas por medio de modelos de difracción obtenidos gracias a la cristalografía de rayos X, Pauling –al igual que Carl Niemann– se inclinó por un método indirecto basado en los principios de la química cuántica. La nueva senda abierta por el químico estadounidense con el planteamiento de un nuevo enfoque estructural en el estudio de las moléculas biológicas fue clave en el desarrollo de la biología del siglo XX. Como tuvimos la oportunidad de ver, uno de los mejores ejemplos de ello lo encontramos en el papel que desempeñaron los estudios de difracción de los rayos X y la introducción de su método indirecto⁷⁰¹ en el descubrimiento por parte de Watson y Crick de la doble hélice del ADN.

4.1.2.2 Medicina y Linus Pauling

Así como en el ámbito de la biología existe una gran continuidad con las investigaciones llevadas a cabo en el campo de la química, lo mismo ocurre con las desarrolladas en medicina. Debemos señalar, no obstante –como hemos venido haciendo a lo largo de todo el presente trabajo–, la existencia de dos perspectivas o etapas en sus investigaciones médicas relacionadas directamente con uno de los problemas más importantes de la filosofía de la medicina: la

⁶⁹⁹ Quien construyó modelos de madera para ilustrar las combinaciones entre los átomos.

⁷⁰⁰ En la década de 1930 Pauling describió su acercamiento a Karl Darrow quien en una carta fechada el 23 de mayo de 1932 le hacía saber que ese método ya tenía un nombre: método estocástico. En dicha carta Darrow señalaba que en un texto de química de 1909 el autor utilizaba este término tomado del griego pudiéndose traducir como “adivinar la verdad por conjetura”. Pero la forma en la que Pauling llevó a cabo sus conjeturas no resultó ser un simple juego de suposición y creación de estructuras, había que saber mucha física y mucha química para llevar a cabo dichos planteamientos. Esta capacidad le permitió ver antes que nadie la solución de algunos de los problemas químicos más espinosos. Aunque varias de las propuestas de Pauling fueron erróneas –una de las más famosas fue su modelo de tres hélices del ADN– este método le reportó sus triunfos más importantes.

⁷⁰¹ Principalmente la elaboración de modelos con trozos de papel y otros materiales que representarían las moléculas.

definición de enfermedad. Como vimos en su momento, cada etapa estuvo marcada por una concepción distinta –podríamos decir incluso complementaria– y el desarrollo de un tratamiento clínico diferente de las enfermedades. Durante una primera etapa, dedicada a la medicina molecular, Pauling demostró cómo algunas enfermedades –la anemia falciforme por ejemplo– eran resultado de una malformación en la estructura de una determinada molécula. Ligada a la química estructural y la genética –Pauling demostraba la relación existente entre dichas malformaciones y la herencia– nacía una nueva perspectiva en la investigación médica en la que el método analítico –nacido en el ámbito de la física y que tan buenos resultados había dado ya en el biológico–, aplicado ahora a la medicina, adquiriría una nueva dimensión atómica y molecular. Pero al igual que ocurriera en el campo de la biología, la introducción de un lenguaje y un tratamiento físico de las enfermedades llevó consigo la aparición de nuevos cuestionamientos ontológicos y epistemológicos. El reduccionismo que introducía hacía necesario replantearse cuestiones ontológicas y epistemológicas que venían arrastrándose desde el ámbito de la física. Si bien no encontramos en Pauling reflexiones al respecto, su obra nos da las respuestas.

El capítulo dedicado a las investigaciones que llevaron a Linus Pauling y sus colaboradores a describir la anemia falciforme como una enfermedad molecular fue, principalmente, una exposición histórica y descriptiva. Sin embargo, como entonces adelantamos y ahora recordamos, el análisis de estos trabajos pone de manifiesto la presencia de importantes cuestiones epistemológicas, ontológicas y conceptuales. Entre otras debe destacarse un problema que salpicó todo el trabajo de Pauling y del resto de sus colegas: el problema del espacio continuo y tridimensional. En medicina y biología molecular los científicos han hecho uso comúnmente de la representación pictórica. Por ejemplo, la noción de complementariedad –indispensable para entender el mecanismo de la anemia falciforme y el funcionamiento del ADN– precisaba de una representación pictórica tridimensional. Era necesario, por consiguiente, contar con una representación de la molécula de la hemoglobina y del ADN que permitiera entender su funcionamiento y sus problemas. Ahora bien, debemos recordar que gran parte de los fundamentos últimos sobre los que se basan la biología y la medicina molecular se

encuentran en el ámbito de la física⁷⁰². Como tuvimos la oportunidad ver en el capítulo dedicado a los cuestionamientos filosóficos que se dieron en el seno de la nueva física, el espacio continuo y la posibilidad de representaciones pictóricas debían –según la interpretación más extendida, es decir, la de Copenhague– desaparecer. El mundo cuántico era un mundo discontinuo donde no era posible llevar a cabo representaciones pictóricas tridimensionales. Pero entonces, ¿cómo se hacía posible pasar del ámbito de los átomos –discontinuo e irrepresentable– al mundo de las moléculas? ¿Debía hablarse de dos espacios ontológicamente diferentes, o tan sólo hay un único espacio y un único patrón espacial mientras que el otro tiene tan sólo una naturaleza, una existencia puramente pragmática? Estos problemas ontológicos y epistemológicos que nacieron en el ámbito de la física cuántica terminaron por alcanzar –como vemos– también el campo de la biología y la medicina. Fue precisamente en este ámbito, en el de las ciencias biomédicas⁷⁰³, en donde se produjo un intenso debate, no reconocido por sus protagonistas, en el que N. Bohr y E. Schrödinger participaron. La postura de Pauling ante el mismo suponía nuevamente una continuidad con la adoptada en el ámbito de la física y la química. Frente a la concepción defendida por la interpretación de Copenhague, el químico estadounidense se alineaba con la postura física de Schrödinger. De manera consciente o inconsciente, voluntaria o involuntariamente, Pauling jugó un papel decisivo al extender hasta los ámbitos de las ciencias de la vida los presupuestos epistemológicos y ontológicos de Schrödinger –y que él mismo defendió como vimos cuando definió su postura en el ámbito de la química–, al recuperar un espacio continuo, las descripciones tridimensionales, el desarrollo de una nueva metodología y fomentar una nueva visión de la vida acorde con la nueva mecánica cuántica.

La segunda etapa de la investigación médica de Pauling, dedicada a la medicina ortomolecular, presenta por su parte una continuidad con la concepción neopitagórica desarrollada en el ámbito de la química. La concepción de enfermedad como un conjunto de anomalías bioquímicas y de concentraciones no deseables de distintas sustancias –normalmente presentes en el cuerpo– lleva consigo pareja la idea de equilibrio y desequilibrio. Al igual que en elviejo Alcmeón de Crotona, la apuesta por el equilibrio para entender la salud y el

⁷⁰² Recordemos una vez más que la unidad funcional última de su estudio lo encontramos en el átomo y la molécula.

⁷⁰³ Principalmente en el de la biología.

desequilibrio como causa de la enfermedad, el énfasis en la estructura y la proporción matemática, hacen de Pauling nuevamente un pitagórico moderno. Pero no sólo desde el punto de vista de la definición de enfermedad, sino también desde el punto de vista de la práctica clínica y terapéutica. Conforme a la concepción de la enfermedad que propusieron primero los médicos pitagóricos y la terapia que desarrollaron después los hipocráticos con la teoría humoral –su bioquímica– el doctor del siglo XX –propone Pauling– debe llevar a cabo ante cualquier sospecha un análisis de los niveles de aminoácidos, ácidos orgánicos, vitaminas y minerales, hormonas, etc. e incluso del estado del sistema gastrointestinal⁷⁰⁴. La utilización de métodos y análisis –propios hasta entonces de los laboratorios de investigación– en el análisis clínico permitiría según Pauling encontrar indicadores químicos que nos hicieran saber cuál es el estado de salud del paciente. De ahí que una vez descubiertos los desequilibrios químicos que le aquejan, la terapia tenga que consistir en la recuperación del equilibrio perdido por medio de la administración al enfermo de las cantidades óptimas de las sustancias que se crean oportunas. Así, la idea de equilibrio que habíamos visto en el ámbito de la química reaparece en el médico. Aquel equilibrio, relacionado con un estado cuántico estable entre los átomos que conforman la molécula, se ve reflejado en la medicina por un equilibrio relacionado directamente con la salud y el desequilibrio como causa de la enfermedad. De ese modo, Pauling recupera para la medicina una concepción relacional de la organización biológica y química, una noción de equilibrio, estructura, proporción matemática como algo real y no como meras fórmulas del hombre de ciencia.

⁷⁰⁴ El análisis del estado del sistema gastrointestinal es fundamental, ya que de este estado depende en gran medida los niveles de las distintas sustancias presentes en el cuerpo.

4.2 CONCLUSIONES FINALES

La obra de Linus Pauling y todo cuanto se ha escrito sobre él han contribuido a crear una imagen del científico estadounidense caracterizada por la discontinuidad y la fragmentación. Ciertamente es que se trató de un autor que lejos de desenvolverse en un solo campo de estudio, y regirse por la ortodoxia que el paradigma oficial imponía, prefirió rebasar los límites, las fronteras interdisciplinarias preestablecidas e ir de un ámbito a otro, de un problema a otro, utilizando información de distintos campos con el fin de hallar respuestas válidas. De la cristalografía a la química cuántica, de ésta a la biología, de la biología a la medicina convencional y de ésta a la medicina "ortomolecular", el repaso de la obra de Pauling refleja la vida de un científico con constantes rupturas y cambios de intereses. Como muchos historiadores y científicos han puesto de manifiesto –así como él mismo reconoció– pocos temas de carácter científico no ocuparon su mente y llenaron sus horas de reflexión. Sin embargo, bajo toda esa aparente diversidad debemos señalar la existencia de una profunda continuidad, de una posición epistemológica y ontológica realista fuertemente interiorizada, que guió toda su investigación. Neopitagórico en un contexto cuántico, seguidor de Platón, Schrödinger y Einstein, Pauling defendió siempre los métodos inductivo o hipotético-deductivo (Popper), hizo una valoración expresa del papel de la observación en el método científico, respetó claramente las aportaciones de la nueva lógica y la axiomatización de teorías, comulgando asimismo con el ideal de la ciencia unificada. A pesar de la aparente contradicción, éstos últimos eran ingredientes –como vimos– asumidos por los neopositivistas, sin que ninguno de ellos constituyera en sí mismo una tesis. Por el contrario, se trataban de posturas perfectamente compatibles con una posición realista.

El punto de partida, el primer axioma a partir del cual Linus Pauling construyó toda su obra científica, fue su convicción de la existencia de una uniformidad, de una regularidad de la Naturaleza, de la existencia de una organización geométrica de las partes constituyentes de la materia –fuera ésta animada o inanimada–, que daba cuenta de todo cuanto nos rodea. Nada ocurre en la Naturaleza de forma aleatoria o caótica; todo tiene un porqué que nosotros podemos encontrar⁷⁰⁵. El universo –vendría a decir– está constituido *por sustancias (formas de materia) y energía radiante*. De ese modo, lo que debemos buscar en

⁷⁰⁵ En clara oposición al escepticismo positivista.

la Naturaleza es la unidad última que constituye el universo material –los átomos de la mecánica cuántica–; y las relaciones que se producen entre ellos –los enlaces que se dan entre los átomos–, la razón primera de todo cuanto hay. La realidad y las propiedades de cuanto existe no son producto de la mera reunión de sustancias. Las propiedades que observamos en la materia –*ya sean físicas o químicas y que pertenecen a la materia no estando sólo en la mente del científico*– son resultado de la disposición e interacción real que se da entre los átomos que constituyen la materia, es decir, de su estructura interna. Y es que, a la hora de hablar de la estructura de la materia, debemos distinguir, tal y como señala el químico estadounidense, dos niveles estructurales últimos: el atómico y el molecular. Ciertamente, el átomo constituye la unidad estructural última que permanece cuando tienen lugar las reacciones químicas, encontrándose además siempre presente en todos los sólidos, líquidos y gases. Sin embargo, el universo no está constituido a partir de átomos aislados, sino unidos, formando estructuras geométricas regulares responsables de las propiedades que observamos en la materia. De ahí, que dichas propiedades no dependan sólo de los átomos que conforman la materia; también lo hacen de la relación geométrica que se da entre sus partes, es decir, de la naturaleza del enlace químico que se da entre los átomos que conforman la materia.

De ese modo, si el fin de la ciencia es facilitar una descripción real de la Naturaleza a partir de variables –magnitudes– observables, el fin de la química es el estudio de las sustancias, sus propiedades y las reacciones que transforman unas en otras: es decir, el examen de las propiedades de la materia en función de sus átomos y moléculas, de la relación geométrica real que se da entre sus distintas partes. Por ello, el conocimiento del universo tiene que pasar por la comprensión inicial de esas relaciones que se dan entre sus partes elementales, de las relaciones geométricas que, basadas en la nueva mecánica cuántica, den cuenta de la naturaleza del enlace químico.

De ese modo –tal y como hemos podido ir viendo a lo largo de este trabajo– la obra científica de Pauling estuvo construida sobre una concepción realista –tanto ontológica como epistemológica– muy cercana a la de Schrödinger; ontológica, en cuanto que a las entidades extralingüísticas designadas por los términos de las teorías (átomos, células, radiación,...) les concedía una existencia real: los átomos, las moléculas son los componentes últimos de la materia, que mantienen entre sí una relación geométrica justifica la organización química y

biológica que observamos en la Naturaleza; desde el punto de vista epistemológico, consideraba las teorías como enunciados verdaderos, resultado de la “aplicación de los principios del razonamiento riguroso que se ha desarrollado en las Matemáticas y en la Lógica a la deducción de conclusiones ciertas a partir de postulados aceptados”⁷⁰⁶. Al igual que Schrödinger, no concibió las matemáticas como una simple herramienta o instrumento, sino como clave real para desentrañar los secretos –en su caso– de la química. Así, el conocimiento de la estructura interna real de la materia se hacía posible, como ya hemos mencionado, gracias en buena medida a la nueva matemática de la mecánica cuántica. Ésta ya no permitía sólo el conocimiento de la estructura interna del átomo, también –gracias a Pauling– del enlace químico responsable de la estructura molecular, del equilibrio y de la estabilidad del estado cuántico que observamos presente en los átomos que conforman la molécula. Podemos ver así a Pauling como a un pitagórico transportado a la era de la química cuántica, en donde las relaciones geométricas han de entenderse como relaciones reales y donde juega un papel principal –tanto en el dominio de la química como en los de la biología y la medicina– la idea de equilibrio.

El salto al ámbito de las ciencias biomédicas significó una continuidad de esta concepción realista, marcada por una fuerte perspectiva reduccionista. Inspirándose en el método analítico que había desarrollado en sus investigaciones previas y apoyándose en los descubrimientos que había hecho de estructuras cristalinas y en la naturaleza del enlace químico, Linus Pauling contribuyó al nacimiento y desarrollo de una nueva forma de estudiar los fenómenos biológicos a nivel atómico y molecular: la biología molecular. La metodología desarrollada y las respuestas finales dadas en función de estructuras moleculares, fuerzas presentes, propiedades y funcionamiento desde el punto de vista químico, obligan a hablar de una continuidad metodológica, ontológica y epistemológica. En el ámbito médico, las ideas de estructura, equilibrio y proporción, junto a sus conocimientos químicos, le permitieron redefinir los conceptos de enfermedad –de forma muy parecida a como lo hicieron primero los médicos pitagóricos y después los hipocráticos con la teoría humoral–, de práctica clínica y terapéutica, así como introducir métodos y análisis exclusivos hasta entonces de los laboratorios de investigación.

⁷⁰⁶ Pauling, Linus (1.963), p. 15.

Cierto es, reconoce Pauling, que nuestra comprensión de esas estructuras reales no es completo. Partiendo del método inductivo del positivismo y del hipotético-deductivo de Popper podemos ir creando modelos que se acerquen a la configuración real de la estructura de la materia. Sin embargo –señaló–, los problemas lógicos que presenta la *inducción* a la hora de establecer la verdad de los enunciados generales legitiman la búsqueda y utilización de otras metodologías. Es por medio de aproximaciones sucesivas como pueden irse construyendo modelos basados en los datos obtenidos en el laboratorio y el conocimiento teórico. Pero eso no significa –como señalábamos– que los objetos cuánticos y las estructuras apuntadas sean irreales y que tan sólo se encuentren en la imaginación del científico. Para Pauling, tienen una existencia real y, aunque su conocimiento sea imperfecto, tan sólo una aproximación ideal, la dificultad de su entendimiento se encuentra en nuestras limitaciones. De ahí que el fin de la ciencia no sea la mera construcción de modelos que “permitan salvar las apariencias” sino la construcción de aproximaciones matemáticas sucesivas y modelos tridimensionales que se acerquen lo más posible a la estructura real de la materia. La ciencia nos permite describir la estructura última y las causas reales de la arquitectura del mundo y sus propiedades, nos dice cómo y por qué las cosas son como son.

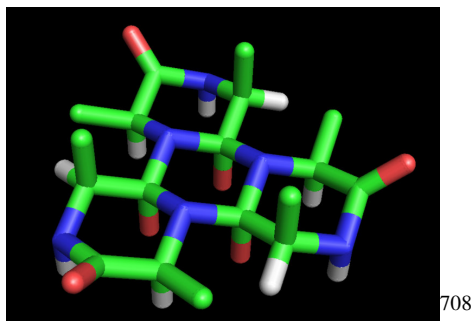
ANEXOS

ADICIONES

A.1 Un episodio desafortunado: Linus Pauling Vs Dorothy Wrinch

Mientras Pauling y Corey pasaban noche tras noche en el laboratorio *Gates* intentando ver los errores de sus modelos, Wrinch presentaba su propia concepción de la estructura de las proteínas⁷⁰⁷. En 1.937 la química de las proteínas era desmesuradamente compleja y el hecho de encontrarse a penas en pañales facilitó la emergencia de conflictos y la competitividad entre distintas teorías. Pero el choque que se produjo entre Wrinch y Pauling no sería uno más, sino que se terminó convirtiendo en una clásica y encarnizada batalla entre dos poderosos intelectos de la historia de la biología estructural, dos antagonistas tercios y, lo más importante, entre dos teorías que, en ese momento, eran igualmente creíbles. De hecho, algunas de las primeras reacciones ante las ideas de Wrinch fueron muy positivas. La propuesta de Wrinch, como ya apuntamos conocida como la teoría del “cyclol”, mantenía que los aminoácidos podían estar “enganchados” entre sí de una forma más complicada de lo que se había estado suponiéndose hasta entonces. En la teoría de la cadena proteínica los aminoácidos estaban unidos por medio de enlaces químicos –como los coches de un tren– uno detrás de otro formando una serie. Sin embargo, para Wrinch los aminoácidos estaban unidos cara a cara. De esa forma podían formarse un patrón regular de hexágonos que al replegarse sobre sí formaban una especie de celda.

⁷⁰⁷ Dorothy Wrinch se había educado en el *Girton Collage*, Cambridge, y en las universidades de Londres, Paris y Viena. Finalizó primero sus estudios de matemáticas y después estudió biología y química con profesores tan notables como I. Langmuir. Desafortunadamente su actitud abrupta y agresiva bloquearon sus esfuerzos por ser reconocida como una gran científica [Serafini, A. (1.989), p. 75]



Este modelo ofrecía ciertas ventajas. La más significativa era el atractivo estético, la geometría y simetría que llevaban consigo estas celdas era muy importante. Tales consideraciones, lejos de ser superficiales, eran de extrema importancia a la hora de decidirse sobre el valor o validez de una teoría científica.

A pesar de la idea mantenida por Sibilla E Kenedy para quien Pauling prácticamente quitaba toda importancia a la simetría y la geometría⁷⁰⁹, para el químico estadounidense éstas siempre fueron determinantes. A pesar de la necesidad de recurrir a conceptos como violación de paridad, otros como los de atractivo estético, simetría y simplicidad tenían aún su lugar entre la mayoría de los expertos en física ya que los consideraban decisivos a la hora de dar cuenta sobre la competencia de las distintas teorías. Por su parte, entre los filósofos de la ciencia la simetría y la belleza no son solamente características omnipresentes en el universo, sino que son figuras importantes a la hora de aceptar o no una teoría. El universo entero, desde el más pequeño objeto hasta las galaxias y el cúmulo de galaxias muestran un diseño, un orden y una simetría (Serafini p. 77)

El conflicto que se produjo entre Wrinch y Pauling venía dado, precisamente, por el hecho de que la simetría no es simplemente una característica más. Se sabe, por ejemplo, que hay ecuaciones que muestran una determinada simetría mientras que sus soluciones son de una simetría inferior. Dorothy Wrinch apostaba por una gran simetría donde la energía sería menor y mayor la estabilidad. Sin embargo Pauling apostaba por una simetría más baja, ya que sostenía que una simetría más grande implicaba la presencia de una mayor energía y, por consiguiente,

⁷⁰⁸ <http://en.wikipedia.org/wiki/Cyclol>

⁷⁰⁹ Kenedy, Sibilla E. (1.983), "Dorothy Wrinch and the Rockefeller Foundation Grants", paper presented at the National History of Science Meeting, Norwalk, Conn. 28 october 1.983. Cita extraída de Serafini, Anthony (1.989), p. 37.

de una menor estabilidad. Investigaciones posteriores dieron la razón a Pauling: una menor simetría era más estable que la predicción de Wrinch. El modelo de Pauling de una baja simetría, baja energía y mayor estabilidad era en buena medida –pero no completamente–, análogo al descubrimiento de la violación de la paridad en física: las consideraciones estéticas y simétricas jugaban un importante papel en física y, lo que era verdad en física, lo era con mayor razón en química ya que ésta era considerada un caso especial o una aplicación –tal y como el mismo Pauling definió, lo cual vimos en su momento– de las leyes y principios de la física.

Pero para que su teoría llegara a ser aceptada por la comunidad científica ésta debía pasar –como cualquier otra– por su constatación directa a partir de evidencias experimentales. Ante la ausencia de suficientes datos que permitieran inclinar la opinión hacia su teoría de la cadena polipeptídica, Pauling y Corey decidieron intentar solventar problemas más pequeños antes de abordar aquellos más abstractos y complejos. La idea era abordar primero la estructura de aminoácidos claves cuyos rasgos fueran más evidentes. Así, dada la simplicidad de los aminoácidos estudiados, comparado con la molécula proteínica completa, los resultados llegaban de forma rápida. En 1.938 Corey solucionó la estructura de algunos de los más simples dipéptidos (cadenas de proteínas con sólo dos aminoácidos) siendo *diketopiperazine* uno de los más importantes. Su estructura mostraba evidencias de la presencia de resonancia incluso en los aminoácidos más simples. Pero quizás lo más importante de estos estudios es que ponían de manifiesto que los enlaces peptídicos tenían que ser planos. Con esta información Pauling pudo constatar muy pronto que la hélice alfa de las proteínas tan solo podía adquirir unas pocas estructuras posibles. El químico estadounidense percibió entonces que la estructura completa de la molécula proteínica no podía continuar por mucho tiempo oculto. Fue entonces cuando atacó el problema por medio de su método “estocástico”. Pauling usó este término no en un sentido especial sino para aludir a una suposición fundamentada de la estructura basada en los rasgos conocidos de la sustancia en cuestión. Pauling y Corey atacaron entonces el problema de una cadena polipeptídica completa en la que a way that podría directamente con los datos de los rayos x sobre las proteínas estudiadas. El camino hacia la hélice alfa estaba emergiendo desde las sombras. Sin embargo, el enfrentamiento teórico y personal entre Wrinch y Pauling tuvo implicaciones incluso en la Fundación Rockefeller. Pauling había conseguido una importante subvención para sus investigaciones de dicha institución la cual, a su vez, patrocinaba buena parte de los trabajos de Wrinch. Quien más comprometido se veía era, precisamente, Wearen:

los dos se dedicaban a la biología molecular y los dos eran importantes para la Fundación. Por ello, muchas veces animaron a que ambos se conocieran personalmente y pudieran hablar.

El encuentro tuvo lugar en enero de 1.938 en Ithaca y marcó el fin de toda posible relación futura. Antes del encuentro éste estaba ya roto. Pauling estaba muy preocupado ante la posibilidad de que Wrinch pudiera tener razón: si ella estaba en lo cierto él podría perder su lugar como el mayor químico de la proteína en la historia. Por ello, el cara a cara hizo cambiar sustancialmente la actitud de Pauling. Después del encuentro, su escepticismo se convirtió en una hostilidad evidente. Cartas cruzadas entre los distintos protagonistas –que no fueron sólo Wrinch y Pauling–, declaraciones, artículos y malos modos se hicieron presentes. Una fecha clave fue la del 19 de Julio de 1.939. En el artículo titulado “The Structure of Proteins” aparecido en el *Journal of the American Chemical Society*, Pauling y Nieman intentaban dar un golpe casi definitivo a la teoría de Wrinch. El argumento principal era que la estructura cyclol era demasiado inestable para existir en la naturaleza. De aparecer en alguna proteína –indicaban– ésta estructura pronto se rompería. Como resultado de este artículo muchos científicos interesados en el tema de las proteínas –sobre todo entre quienes no se habían decidido aún por un modelo– optaron por el modelo de Pauling. Pero el artículo también promovió una respuesta más enardecida entre quienes apoyaban el modelo de Wrinch y entre aquellos que vieron ciertas anomalías en su publicación. Muchos autores sostienen –como es el caso de Serafini⁷¹⁰– que, aunque muchos de los argumentos anti-cyclol estaban sólidamente fundamentados, contruidos a partir de juicios objetivos, tal vez Pauling puso ir más allá del puro deber científico en sus críticas. Incluso algunos hablan de juego sucio, como es el caso de David Harper “Pauling no era todo oro; creo que utilizó su influencia con las revistas para evitar que ella publicara su trabajo”⁷¹¹. Esta opinión, así como la indignación y controversia producidas quedan patentes en la carta que Langmuir envió en 1.940 al *Journal of the American Chemical Society* y su editor A. B. Lamb, con copia a Pauling y Nieman en la que decía “Creo que el artículo de Pauling and Niemann era excesivamente injusto y que la *Journal American Chemistry Society* nunca debería haber aceptado publicarlo de esa forma”⁷¹². Debe reconocerse que la publicación de dicho artículo fue excesivamente apresurado ya que en el mismo

⁷¹⁰ Serafini, A. (1.989), p. 89

⁷¹¹ Conversación telefónica entre A. Serafini y David Harper del 12 de octubre de 1.984. Cita extraída de Serafini, A. (1.989), p. 89

⁷¹² Serafini, A. (1.989), p. 90

encontramos, tal y como se encargó de señalar la misma Wrinch, varias razones por las que no debería haber visto la luz. Entre otras razones destacó la matemática y bióloga un error matemático que el mismo Pauling tuvo que admitir tiempo después.

La historia decidió finalmente a favor de la teoría de la cadena peptídica y Linus Pauling ganó la batalla con Wrinch⁷¹³. Si embargo, en 1.951 ante incredulidad de la comunidad científica, cierta perplejidad de Pauling y la satisfacción de Wrinch, fue hallada la estructura *cyclol* en un tipo de proteína primitiva llamada *ergot alkaloids*.

A.2 Cambios en la cuantización de los orbitales de enlace

Un átomo normal de carbono en el estado $2s^2 2p^2 3p$ contiene solamente dos electrones desapareados, por lo que tan solo puede formar dos enlaces simples o uno doble (como en CO, formado por un átomo normal de carbono y un átomo normal de oxígeno). Pero con la sola aplicación de una energía cercana al 1.6 v.e. se puede excitar y llevar al átomo de carbono al estado $2s^2 2p^2 5s$. De este modo el átomo contaría con cuatro electrones desapareados, pudiendo formar cuatro enlaces. De este modo Pauling pasa a describir fácilmente la forma en la que se lleva a cabo la formación de un sustituto del metano ($CRR'R''$). Nos viene a decir que los radicales R , R' y R'' , que poseen cada uno un electrón desapareado, forman un enlace covalente con los tres electrones p del átomo de carbono⁷¹⁴. Por su parte, el cuarto radical R''' forma un enlace poco cargado con el electrón s , probablemente formando un ángulo de 125° con cada uno de los otros enlaces. En principio se podría esperar una estructura asimétrica, con enlaces no equivalentes. De hecho, esta aparente ambivalencia había sido objeto de considerables debates entre varios autores teniendo muy presente la diferencia existente entre los dos enlaces s y p de los electrones del átomo de carbono. Sin embargo ese tratamiento

⁷¹³ Cabe señalar no obstante, que la actitud de Pauling ante Wrinch no estuvo motivada por ningún tipo de machismo, la relación que mantuvo con su propia esposa y otras mujeres demuestra –según muchos autores– el respeto que siempre mostró por la inteligencia y la competencia profesional. Un análisis atento nos permite ver cómo el choque con Wrinch fue consecuencia de un excesivo “territorialismo” académico. Los académicos suelen tender al exclusivismo y proteccionismo de su propio terreno. El poco respeto por los estudios humanísticos como la filosofía y su hostilidad por la química orgánica son –según A. Serafini (1.989, p. 95)– ejemplos de ello. Hostilidad que el mismo Pauling sufrió por parte de la comunidad médica en su momento.

⁷¹⁴ Estos 3 nuevos enlaces forman entre sí 90° .

precedente era engañoso ya que tal y como sostiene Pauling, *los 4 enlaces formados por un átomo de carbono son equivalentes y están dirigidos hacia las esquinas de un tetraedro.*

La importancia que los orbitales s , p , d y f pueden llegar a jugar en un átomo o ión simple es el fruto de la interacción que se da entre uno de los electrones con el núcleo, ya que de ese modo los otros electrones pueden ser representados aproximadamente por un campo central no coulombiano y la ecuación de ondas puede ser separada en coordenadas polares r , θ y ϕ ⁷¹⁵. La profundidad de penetración del electrón s en las capas más profundas le hace estar más limitado que los electrones p con el mismo número cuántico. Si un átomo se aproxima a otro átomo, formando un enlace con él, la interacción entre los dos puede ser considerada como una perturbación. El primer paso a la hora de aplicar la teoría de la perturbación para un sistema degenerado era intentar encontrar el orbital correcto de inicio de la perturbación, aquel orbital que permita la mayor energía de perturbación negativa. Este será 1 con el mayor valor a lo largo de la dirección del enlace. Si la perturbación es pequeña, el orbital s no puede cambiar, y la única combinación que podrá ser hecha con el orbital p será equivalente simplemente a una rotación en cruz. Pero en el caso de que la energía de interacción de los dos átomos sea mayor que la diferencia en la energía que hay entre el electrón s y el electrón p (o, si hay originalmente dos electrones s presentes, como en el caso de un átomo de carbono normal), el orbital del enlace de hidrógeno s y p se deberán agrupar para formar el estado degenerado original, y la interacción de los dos átomos junto con la derivación del campo atómico de un coulombio se deberá considerar como una perturbación, la forma predominante. El orbital de enlace correcto será el agregado lineal ortogonal y normalizado de las funciones propias de s y de p que darían los enlaces más fuertes según la regla 5.

Un criterio aproximado para saber si la cuantización ha cambiado de una coordinación polar a un orbital de enlace más fuerte es comprobando si la energía de enlace posible es mayor que la separación s - p (o si el orbital de está también involucrado, s - d o p - d). Este criterio es satisfecho por el carbono cuativalente. La diferencia de energía de los estados $2s^2 2p^2 3p$ y $2s 2p^3$ del carbono es 9.3 v.e., con un valor de alrededor de 200,000 calorías por mol independientemente del átomo a lo largo de toda la primera hilera del sistema periódico. La energía de un enlace simple es del orden de 100,000 calorías por mol. De ahí que un átomo de

⁷¹⁵ Ver ecuación 1.

carbono formando cuatro enlaces podría ciertamente haber cambiado su cuantización, de tal modo que cuando la energía del enlace deba ser dividida entre dos átomos, como en el caso de un diamante, el criterio se satisface suficientemente. El mismo resultado sirve para el nitrógeno cuatrivalente, un ión nitrógeno en el estado $N^+ 2s 2p^3 \ ^5S$ (sic) formando 4 enlaces, como en $(NH_4)^+$, $N(CH_3)_4^+$, etc. Pero para el oxígeno bivalente hay disponible solamente cerca de 200,000 calorías por mol de energía de enlace, y la separación de dos electrones s se corresponde aproximadamente a 400,000 calorías por mol, de ahí que sea muy probable que el orbital del enlace de oxígeno en H_2O , por ejemplo, sea el orbital p , como se asumió en una sección previa. El nitrógeno trivalente es un caso extremo; la energía de enlace de cerca de 300,000 calorías por mol es suficientemente cerrada para la energía $s-p$ de 400,000 calorías por mol permitiendo al orbital ser cambiado un tanto, pero no tanto como en el caso del carbono y el nitrógeno cuatrivalente.

Puede apreciarse que la separación entre $s-p$ en los átomos de la misma columna de la tabla periódica es casi constante, cerca de 200.000 calorías por mol para un electrón s . La energía del enlace decrece a medida que aumenta el número atómico. Así, la energía del enlace de los compuestos H_2O , H_2S , H_2Se y H_2Te calculados a partir de los datos termoquímicos y las líneas espectrales, son 110.000, 90.000, 73.000 y 60.000 calorías por mol respectivamente. De ahí concluimos que si la cuantización en coordenadas polar no se rompe por un átomo ligero en la formación de un compuesto, no se romperá por un átomo pesado en la misma columna del sistema periódico. Las moléculas H_2S , H_2Se y H_2Te deben por consiguiente también tener una estructura no lineal, con ángulos de 90° o ligeramente superior.

Así –sostiene Pauling– podemos determinar el orbital inicial a partir del cual formar los enlaces más fuertes para los casos en los que la cuantización $s-p$ se rompe. La dependencia de r de los orbitales del enlace de hidrógeno s y p no es muy diferente, y parece probable que el efecto del campo no coulombiano disminuiría la diferencia para los átomos reales. Podemos asumir por consiguiente que $R_{n0}(r)$ y $R_{n1}(r)$ son efectivamente iguales en la formación del enlace correspondiente, ahora que el problema de determinación del orbital de enlace reduce a una discusión de los orbitales θ , φ de la ecuación 1. Arbitrariamente el conjunto de orbitales θ , φ formados por s , p_x , p_y y p_z es dado por las expresiones

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= a_1s + b_1p_x + c_1p_y + d_1p_z \\ \psi_2 &= a_2s + b_2p_x + c_2p_y + d_2p_z \\ \psi_3 &= a_3s + b_3p_x + c_3p_y + d_3p_z \\ \psi_4 &= a_4s + b_4p_x + c_4p_y + d_4p_z \end{aligned} \right\}$$

En las que los coeficientes a_1, a_2 , etc., son restringidos solamente por los requisitos de la ortogonalidad y la normalización. De la regla 5 se desprende que el mejor orbital de enlace será aquel que tiene el valor más grande en la dirección del enlace. Esta dirección se puede elegir arbitrariamente para un enlace simple. Tomándolo a lo largo del eje x, se encuentra que el mejor orbital del enlace simple es

$$\psi_1 = \frac{1}{2}s + \frac{\sqrt{3}}{2}p_x$$

Con un valor máximo de 2, considerablemente mayor que 1,732 para un orbital p. En la figura 3 se muestra un gráfico de esta función.

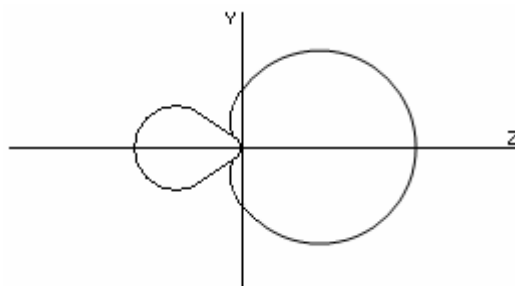


Fig. 3. Gráfica polar de $\left| \frac{1}{2} + \frac{3}{2} \sin \theta \right|$ en el plano zx , representando un orbital tetraedral, el mejor orbital de enlace que puede ser formado a partir de los orbitales s y p .

Un segundo enlace puede ser introducido en el plano. El mejor orbital para este enlace viene dado por $\psi_2 = \frac{1}{2}s - \frac{1}{2\sqrt{3}}p_x + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}p_y$

Este orbital es equivalente a y ortogonal a ψ_1 , y tiene su máximo valor de 2 en $\theta = 10^\circ 28'$, $\varphi = 180^\circ$, que es, en el ángulo de $109^\circ 28'$ con el primer enlace, *el cual es justo el ángulo entre las líneas dibujadas desde el centro a dos esquinas de un tetraedro regular*. El tercer y cuarto orbitales de enlace

$$\psi_3 = \frac{1}{2}s - \frac{1}{2\sqrt{3}}p_x - \frac{1}{\sqrt{6}}p_z + \frac{1}{\sqrt{2}}p_y$$

Y

$$\psi_4 = \frac{1}{2}s - \frac{1}{2\sqrt{3}}p_x - \frac{1}{\sqrt{6}}p_z + \frac{1}{\sqrt{2}}p_y$$

Son también equivalentes a los otros, y tienen su máximo valor de 2 a lo largo de las líneas que se dirigen hacia las otras dos esquinas de un tetraedro regular. Un juego equivalente de cuatro orbitales tetraédricos sería

$$\psi_{111} = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z)$$

$$\psi_{1\bar{1}\bar{1}} = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z)$$

$$\psi_{\bar{1}1\bar{1}} = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z)$$

$$\psi_{\bar{1}\bar{1}1} = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z)$$

Éstos se diferencian de los otros solamente por una rotación de los átomos en su totalidad.

TEXTOS

Carta de Pauling a Sommerfeld (1.925)

October 20, 1925

Professor A Sommerfeld
University of Munich,
Munich, Germany,) also to N. Bohr, asking
about Summer 1927.

Dear Sir:

~~I should like~~
I am planning on studying in Europe during
the next year, ~~probably as a Fellow of the International Education Board.~~
~~I should like very much to work~~
in your ~~the~~ Institute (?), if it is convenient for you.

The nature of the non-polar ^{valence} bond seems to me
to merit theoretical investigation. ~~and I~~
~~accordingly I intend to study certain~~
~~orbital motions of two electrons about two~~
~~nuclei.~~ A large number of chemical facts have
led me to the opinion that the non-polar
bond consists in the motion of two electrons in
orbits about two atomic nuclei, and I accordingly
wish to make a study of some configurations
of this type.

Would it be possible for me to find
accommodations in the University for two semesters,
the summer semester in 1926 and the 1926-27 winter
semester? I should like very much to have
you direct my investigation.

Since your visit here in 1923 I have ^{been} married. I am enclosing a snapshot
of my wife and baby and of me.

Yours respectfully,
Luis Pauling

Carta de Goudsmit a Pauling (1.927)

Ann Arbor, Nov. 21, 1927

Dear Linus:-

Many thanks for your reprint and especially for your letter. I shall first of all answer your most important question. I am really awfully glad that you want to translate my theses. First because it is YOU and secondly because I think we can make a nice monograph out of it.

In New York we found Oppenheimer, who was an excellent guide for us. He had already an Hotel for us, so we did not go to the Prince George. In two days and a half he showed us as much of New York as possible, thus I had not time even to think on Physics, though I thought on you. We did not go afterwards to the Prince George, thus I never got your note. You know that we like big cities extremely much, thus we enjoyed New York especially and felt there quite at home in those very few days. We hope to go back there as soon as possible.

Here in Ann Arbor too we like it very well. The first few weeks were difficult, due to the very different living conditions. But now we feel quite at home here, because the people here are all very nice to us and help us through all our beginner difficulties.

My work is not so easy as yours. I have an undergraduate quiz section in elementary physics for sophomore engineers. It are three hours a week, but it does not take very much time. It just makes me get up early. I cannot help that I must confess you that I think those engineers to be extremely stupid. Most of them don't know any algebra an many even don't know ~~math~~ arithmetic!! Only four out of twenty five are ~~it~~ pretty good. Now, I think you know that yourself still better than I do.

Then I am doing a little bit of research work in Termzoology with two students. Only one of them is not so bad. Next month I hope to annexate a good one, who is now working with Laporte.

I give here a lecture on spectral theory, what they seem to like very much, four hours each week. (How is it possible to quatsch four hours a week on this stuff. The visitors must be totally dried out at the end of the semester!) This lecture contains just the things I have written in my dissertattion, thus I know now exactly, what is wrong in that book and what may be useful. I lecture very slowly and try to explain all details as clear as possible. Randall himself and Sawyer visit this lecture too, thus you comprend that I try to do it as good as I can.

This lecture now has learned me exactly, which parts of termzoology are difficult to understand for beginners. Therefor I think that it will be necessary to rewrite my theses for the greater part. You know, that I had to write the whole book during the short time that I was in Copenhagen. That also made, that it is not as good as it ought to be. You will find especially, that the paragraphs themselves often are clear enough, but that they are not arranged in the right order. It also was a mistake, that I had not divided the book into chapters. ~~Then~~ The beginning was written more in detail than the end, for with the last part I was in a hurry to get it ready in time. Thus especially the second half has to be expanded.

We further must introduce some more things. I forget for instance to tell something about the Starkeffect. And as I have written already, the end is too compact and does not contain enough. I have only one page about Roentgenspectra.

In the mean time there have appeared also some new things. I should like to tell also a few words about that Bismuth nucleus for instance. And, just three days ago I solved completely our Slater mystery we were working on in Copenhagen. You know, that problem with all those vectors and why the Roentgendoublets obey the relativity formula and why some complicated multiplets do too. Do you remember? Such things like

$$\sum a_i l_i s_i \overline{\cos(l_i s_i)} = \text{????}$$

I solved it in a quite other way than we tried to do it in Copenhagen, and I do not understand, why I did not find it already two years ago. It opens a totally new field of the zoology and seems to be very fruchtbar = fertile???

I should like to have you here and discuss it with you. I enjoyed so very much to work with you damals in Kjøbenhavn. I will write it down within a few days and send the manuscript to you with some extra explanations. I have no time now to write it in this letter.

I have not very much worked on Bismuth. I should not advise you to work on it farther, to explain those intensity anomalies in the Zeeman effect. I think it will be more difficult than useful at the present moment. I have convinced myself, that those anomalies must be mainly due to deviations from the interval rule and not from the fact that the field is not strong enough to give a complete Paschen-Back effect. This was also the idea of Bohr, but I did not believe it at that time. This result means however that it is of no use to try any calculations on it. On the other hand the problem of the absolute magnitudes of those hyper fine structures is still very interesting, but I have not yet advanced with it. I expect new measurements from Back in a few weeks. Oh, how far away is Tuebingen!!

Again on the dissertation. I have one very great wish; I should like that it will be done as quick as possible. I know it can be done within half a year.

I think a more complete introduction is necessary. Can you write that?

I propose that I shall write the new things and those of which I think that ~~they~~ have to be expanded. For you there, however no restrictions. You may change and drop what you like. You know better what is wanted than I. I shall especially pay attention to the parts of which I know that they are very bad in my theses.

If you have a better proposition, please write me as soon as possible. I like to start at once. Cannot we meet somewhere Christmas? I think that would be very useful. But I will need than I suppose, an advance of the editor!!!

I am sure we shall agree about all such matters as the payment. Have you any idea of the order of magnitude??? $\times = \times$

Now, Linus, you see that I was very glad with your letter. How is Mrs. Pauling and how did you find little Linus back?? My wife likes it here very much too, I think Mrs. Pauling will enjoy that we like her country and we haven't yet even seen California!!!

Please answer soon and start soon. Please remember me to Prof. Millikan, whenever you see him. I don't think he will recognize me. Remember me also to other spectroscopists in Pasadena and to the movie stars.

With kindest greetings from us both to your three

Yours,
Sam Poudmit.

(OVER)

Carta de Noyes a Pauling (1.927)

CALIFORNIA INSTITUTE OF TECHNOLOGY
PASADENA

GATES CHEMICAL LABORATORY

November 29, 1927

Dear Pauling:

I was glad to see Goudsmit's letter.

In view of the fact that the monograph will be used by students and researchers in physics even more than by those in chemistry, it is probably unwise to publish it as a Chemical Monograph if another publisher can be promptly secured. I am not at all sure, however, that it will be much used as a class text-book. Probably it would be mainly bought by individual advanced students in physics and physical chemistry and by investigators in those fields and in astrophysics. Books on small parts of a science, such as radioactivity, spectroscopy, photochemistry, are seldom used even by graduate classes, who commonly want the whole of a subject (such at least as sub-atomic physics and chemistry) presented concisely in a single book. I have rather hoped our C.I.T. group might get out such a sub-atomic text-book, using Goudsmit's treatment as an integral part of it, but it is perhaps too difficult to arrange.

I do not know whether MacMillan is the best publisher for a book of this kind; but have no better suggestion to make. He isn't keen after new books, as the McGraw-Hill Company are; and he is likely to make considerable delay. They will want to see the final manuscript before they will agree to publish it.

I hope Goudsmit's presentation is really clear and intelligible - not written like Hund's book for people who know half the subject already.

The only possibility I see of getting him out here would be during next summer, in view of his Ann Arbor position.

Yours sincerely,

Arthur A. Noyes.

N/M

Carta de Pauling a Goudsmit (1.927)

November 16, 1927

Dear Sam:

I hope you are enjoying yourself in Ann Arbor, and that you like America. It is too bad that we didn't meet in New York. Did you get the note we left for you in the Prince George Hotel?

We are nicely settled here. I am teaching a class in quantum mechanics, two lectures a week. That is all I have to do, except that I direct the experimental research of four men. I have been kept busy, though, and as yet I haven't got around to the bismuth hyper-fine structure.

You remember that in Copenhagen you spoke to me, saying that you would like to publish your thesis in English. Have you made arrangements to do so? If not, perhaps you would be interested in a proposal I shall make you. I am writing an

elementary discussion of spectra for a book (a text book covering many subjects), and I have found your thesis very clear and satisfactory. I should like to translate it, if you will consent. Then if you would suggest additions, I should like to rewrite it and expand it to about twice the size, always avoiding complicated mathematics and retaining a clear and elementary presentation. Professor Noyes has assured me that it will be accepted by a publisher, to appear in book form as a monograph of the American Chemical Society (which published Foote and Mohler's book, for example). They pay good royalties, and the books sell well. On the other hand, it might be that the book could be got out by some other publisher in text book form, and perhaps it would be adopted in universities.

It is proposed that the book be more lucid than Hund's book. In particular it is desirable that it be

self sufficient, so that those unfamiliar with the subject can work through it and not have to refer to earlier works. The book in English should be much in demand.

If you have already made other arrangements, I shall look forward to seeing the thesis in English. If you feel that I can not contribute enough by rewriting and expanding the thesis to merit being a collaborator, then perhaps I could merely put the thesis directly into English and appear as the translator.

I am sure that we understand each other, and that we can adjust everything and remain on friendly terms, so write frankly to me.

Would you tell me something of your work? Could you get away in the Spring for a couple of weeks or a month, or next summer, maybe? Possibly it would be desirable for you to come here for a while - I don't know whether it could be arranged or not.

Give my best regards to ~~Uhlenbeck~~ Uhlenbeck,
Dennison, and Laporte. My wife greets you,
and we both send our best wishes to your
wife.

Sincerely,

Linus Pauling

Invitación de Harvard (1.929)

20 OXFORD STREET
CAMBRIDGE
MASSACHUSETTS

Feb. 20,

Dear Dr. Pauling,

We are hoping that you are going to be able to come on and visit the Harvard department of chemistry for a few days in the near future. Mrs. Conant and I would like to have you stay with us during the time of your Cambridge visit. Our house is right next door to the new laboratory and I think

you would find it a convenient
headquarters for your tour of inspection.

Just let us know when you
will arrive. We have plenty of rooms
and will consider it a great
pleasure if you will arrange to
stay with us.

I hope to be able to tell
you in person how ~~the~~ anxious I
am to have you join the staff.
In spite of all the claims on your
heart of California and Cal. Tech,
I think you will find much of
interest here and much to convince you
that there is a rather unusual
opportunity for ^{your} scientific work here at
Harvard.

Very sincerely,
James B. Grant

Nota manuscrita de Pauling del tetraedro de carbono (1.930)

Calculations such as these are simplified by the fact that for a complete orthogonal transformation the sum of the squares of the coefficients for a given initial eigenfⁿ is unity. ③

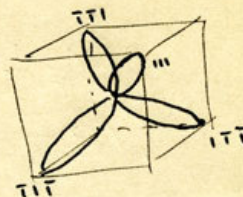
Four equivalent bonds from p³.

$$\psi_{\text{max}} = \frac{1}{2}(s + x + y + z) \quad \text{Max. value.} \quad \underline{\underline{2}}$$

$$\psi_{\text{min}} = \frac{1}{2}(s + x - y - z)$$

$$\psi_{\text{max}} = \frac{1}{2}(s - x + y - z)$$

$$\psi_{\text{min}} = \frac{1}{2}(s - x - y + z)$$



We can point one ψ along the z axis, say.

$$\psi_1 = \frac{1}{2}s + \frac{\sqrt{3}}{2}z$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2}s - \frac{1}{2\sqrt{3}}z + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}x$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2}s - \frac{1}{2\sqrt{3}}z - \frac{1}{\sqrt{6}}x + \frac{1}{\sqrt{6}}y$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2}s - \frac{1}{2\sqrt{3}}z - \frac{1}{\sqrt{6}}x - \frac{1}{\sqrt{6}}y$$

The coeff. of s is $\frac{1}{2}$ to make the ψ 's equivalent. Then the coeffs. of z are fixed for norm. & orth.

tetrahedral angles. But if R_s stretches out farther than R_p (which it actually does for same Zeff.), then things are different. Let us assume $\text{Max } s = \text{Max } p = 1$. Then

$$\frac{d}{da}(a + \sqrt{1-a^2}) = 0, \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad \text{Maximum possible} = \sqrt{2} = 1.414$$

Two bonds, Max value

$$\sigma_+ = 1.414$$

$$\sigma_- = 1.414$$

Three equal bonds: 1.392

Four equal bonds: 1.366

In this case two strong bonds will be oppositely directed (linear molecule), three will lie in a plane, four towards tetrahedron corners.

It may be significant that we get 4 tetrahedrally-directed bonds, each with the maximum possible strength (assuming $R_s = R_p$). This means that if R_s happens to equal R_p , two bonds or three bonds will be strongest when at

The Nature of Chemical Bond (1.931)⁷¹⁶ [Fragmento]

1380

LINUS PAULING

Vol. 53

should lie between 90 and 109°28', closer to 90° for the first and to 109°28' for the second compound. The same limits should apply to other atoms with an outer 8-shell (counting both shared and unshared electron pairs). Direct evidence on this point is provided by crystal structure data for non-ionic crystals, given in Table I. Every one of the angles given in this table depends on one or more parameters, which have been determined experimentally from observed intensities of x-ray reflections. The probable error in most cases is less than 5°, and in many is only about ±1°. It will be observed that quadrivalent carbon and nitrogen and trivalent nitrogen form bonds at tetrahedral angles, whereas heavier atoms forming only two or three bonds prefer smaller bond angles. The series As, Sb, Bi is particularly interesting. We expect, from an argument given earlier,

TABLE I
ANGLES BETWEEN BONDS, FROM CRYSTAL STRUCTURE DATA^a

Compound	Atom	Number of bonds	Angles between bonds
C ₂ N ₄ H ₁₂	C	2 C—N, 2 C—H	112° between C—N bonds
C ₂ N ₄ H ₁₂	N	3 N—C	108°
(NH ₄) ₂ CO ^b	C	2 single C—N 1 double C=O	115° between single bonds
As	As	3	97°
Sb	Sb	3	96°
Bi	Bi	3	94°
Se	Se	2	105°
Te	Te	2	102°
FeS ₂ ^d	S ⁺⁺	1 S—S 3 S—M	103° between S—S and S—M bonds 115° between two M—S bonds
MnS ₂			
CoS ₂			
NiS ₂			
MoS ₂ ^e	S ⁺	3 S—Mo	82°
Co ₃ (As ₄) ₃	As ⁻	2 As—As	90°
CaSi ₂	Si	3 Si—Si	103° between Si—Si bonds
HgI ₂	I ⁺	2 Hg—I	103°
GeI ₄	Ge	4 Ge—I	109.5°
SnI ₄	Sn	4 Sn—I	109.5°
As ₄ O ₆	As	3 As—O	109.5°
Sb ₄ O ₆	O	2 O—As	109.5°
	O	2 O—Sb	109.5°
NaClO ₃ ^e	Cl ⁺⁺	3 Cl—O	109.5°
KClO ₄	Cl ⁺⁺	3 Cl—O	109.5°
KBrO ₃	Br ⁺⁺	3 Br—O	109.5°

^a Data for which no reference is given are from the *Strukturbericht* of P. P. Ewald and C. Hermann. ^b R. W. G. Wyckoff, *Z. Krist.*, 75, 529 (1930). ^c W. H. Zachariasen, *ibid.*, 71, 501, 517 (1929). ^d The very small paramagnetic susceptibility of pyrite requires the presence of electron-pair bonds, eliminating an ionic structure Fe⁺⁺S₂⁻. Angles are calculated for FeS₂, for which the parameters have been most accurately determined. The parameter value (correct value $\mu = 0.371$) and interatomic distances for molybdenite are incorrectly given in the *Strukturbericht*.

⁷¹⁶ Pauling, Linus (1.931b)

Carta de Pauling a Warren Weaver (1.935)

January 25, 1935

Dr. Warren Weaver,
The Rockefeller Foundation,
49 West 49th Street,
New York City.

Dear Dr. Weaver:

I need hardly say that I am very happy to learn from you that the Rockefeller Foundation will provide support (in addition to that of the California Institute) for my researches for three more years. I have delayed answering your letter for two weeks in order that I might be able to tell you that we had already begun the experimental investigation of hemoglobin; we have met with some difficulties in obtaining pure substances, however, and so the investigation is not yet under way. As I have read about the problems of biochemistry I have become more and more enthusiastic about the possibilities of the application of our methods.

Dr. Noyes has told me that he heard that you would come West this spring; if so, I hope to see you here, and if not, I shall probably call on you in New York at about the time of the Washington meetings, which I hope to attend.

Very sincerely yours,

The significance of Structural Chemistry (1.937)

THE SIGNIFICANCE OF STRUCTURAL CHEMISTRY

by Linus Pauling.

Introductory lecture of the George Fisher Baker Lectureship in Chemistry, Cornell University. 8:15 P.M., Tuesday, October 12, 1937
Also used at Pomona, 8 P.M. March 10, 1938, under the title "THE STRUCTURAL CHEMISTRY OF BLOOD".

President Day, ladies and gentlemen: Before beginning the discussion of the topic for the evening, "The Significance of Structural Chemistry", I wish to thank the University and especially the members of the Department of Chemistry for their kindness in extending to me an invitation to present the George Fisher Baker Lectures for the present academic year. It is indeed a great honor and privilege to speak and work in this wonderful laboratory, as well as a great pleasure to spend some months on this beautiful campus.

I have seen on looking over the books published by earlier Baker Lecturers that in most cases the Lecturer has chosen for the topic of his introductory address some philosophical, economic or political question. After much thought I have abandoned the idea of doing this, in part because I have been unable to think of any such topic to which I feel I could make a significant contribution. Remembering, however, the statement of Aristotle, "~~the~~ Old men should be politicians, young men mathematicians", I have decided to speak about the subject of structural chemistry, to which I have devoted most of my professional attention for fifteen years.

In his "Mathematical Theory of Relativity" Eddington wrote "The investigation of the external world in physics is a quest for structure rather than substance." This is true in the main not only for physicists but for all scientific

Carta de Pauling a Bush (11-1-1.945)

REPRODUCED AT THE NATIONAL ARCHIVES

CLW

Report to Bush
2

CALIFORNIA INSTITUTE OF TECHNOLOGY
PASADENA

4

GATES AND CRELLIN LABORATORIES OF CHEMISTRY

January 11, 1945

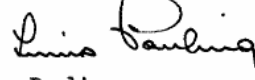
Dr. V. Bush, Director
Office of Scientific Research and Development
1530 P Street NW.
Washington, D. C.

Dear Dr. Bush:

I am very pleased to accept the appointment mentioned in your letter of January 5 as a member of the special committee which will devote its attention to the question of the future of medical research in this country.

If the committee holds many meetings, it may not be possible for me to attend all of them, because of the distance from California to Washington. I shall, however, do my best to be helpful to the committee.

Sincerely yours,



Linus Pauling

LF:fh

cc - Palmer - Richards - Smith

Carta de Pauling a Fajans (1.948)

May 13, 1947

Prof. Kasimir Fajans
Department of Chemistry
University of Michigan
Ann Arbor, Michigan

Dear Professor Fajans:

I am glad, in answer to your letter of April 24, to add the additional comment that seems to be necessary in order to clarify the calculation on page 71 of the second edition of my book on "The Nature of the Chemical Bond." This calculation is made and described in the upper half of page 71, and it had not occurred to me that anyone could fail to follow it.

The statement is made that the O-H bond has 39% ionic character. The discussion also says, "If the bonds were independent, the structures would make the contributions indicated to the normal state of the molecule, the completely covalent structure making a contribution of 37%, each of the half-and-half structures contributions of 24%, and the completely ionic structure a contribution of 15%." Your letter and the earlier letter both refer to the way in which these numbers, 37%, 24%, and 15%, are obtained.

The bond between oxygen and one of the hydrogen atoms, which we might call the first hydrogen atom, has 39% ionic character. If the bonds were independent, the ionic character of the bond to the second hydrogen atom would also be 39%, independently of the ionic or covalent state of the bonds to the first hydrogen atom. The probability that the water molecule would have ionic bonds to both the first hydrogen atom and the second hydrogen atom would thus be 0.39×0.39 , which is 0.1521, or to the reliability of the calculation, 15%. The probability

Carta a Watson y Crick (27-3-1.953)

27 March 1953

Dr. J. D. Watson
Mr. F.H.C. Crick
Cavendish Laboratory
Froes School Lane
Cambridge, England

Dear Dr. Watson and Mr. Crick!

I am very glad to have your letter of 21 March, and to see the letter that you are sending off to NATURE.

I think that it is fine that there are now two proposed structures for nucleic acid, and I am looking forward to finding out what the decision will be as to which is incorrect. Without doubt the King's-College data will eliminate one or the other.

We have taken care of the trouble of too small van der Waals contacts in our structure by rotating the phosphate groups. I do not think that the matter of repulsion between the charged phosphates is an important one. I am not saying, however, that I feel strongly that our structure is right, rather than yours.

With best regards, I am

Sincerely yours,

Linus Pauling:W

Un mundo en el que cada ser humano pueda vivir una buena vida⁷¹⁷

Linus Pauling

Se ha producido un gran cambio en el mundo durante los últimos años. Ya no existe la amenaza de una guerra nuclear masiva entre los Estados Unidos y la Unión Soviética que condicione nuestras políticas y acciones.

Nuestra meta ahora debería ser un mundo en el que cada persona naciera teniendo la posibilidad de una buena vida, libre del temor a ser mutilado o asesinado en la guerra, libre ante el temor de la pobreza y el hambre, libre del temor de la incapacidad y una muerte prematura como consecuencia de una triste enfermedad, y con muchas personas teniendo una buena educación, oportunidades de trabajo, buena comida, ropa y con el suficiente ingreso como para poder disfrutar de las maravillas del mundo.

Nuestra meta inmediata debería inspirar las siguientes acciones:

1. Disminuir el número de armas nucleares y convencionales del actual nivel insensato a niveles más racionales
2. Parar inmediatamente las investigaciones sobre nuevas armas, logística y otros aspectos militares.
3. Parar la proliferación de armas nucleares a otras naciones a través de un tratado efectivo.
4. Parar el flujo de todas las armas y otros mecanismos militares a naciones más pequeñas y menos desarrolladas tecnológicamente.
5. Procurar prevenir y parar todas las guerras.
6. Reducir mucho los presupuestos militares e incrementar el gasto de las riquezas del mundo de forma que mejore la calidad de vida y el bienestar de toda la gente.
7. Atacar los problemas de la sobrepoblación, la mala alimentación, la inanición y la destrucción del medio ambiente y los recursos no renovables de la Tierra.

⁷¹⁷ Traducido por Francisco Javier Serrano Bosquet y Erika Mireya Bermúdez García.

Las decisiones que nosotros tomemos ahora van a determinar la calidad de vida de los seres humanos durante siglos. Ahora es el momento de que todas las naciones y todas personas cooperen en la construcción de un mundo libre de guerras y militarismo, un mundo basado en la racionalidad y la ética.

BIBLIOGRAFÍA

OBRAS FUENTE

- **A. E. Mirsky y L. Pauling** (1.936, Julio), “On The Structure of Native, Denatured, and Coagulated Proteins” en *Proceedings of the National Academy of Science*, Vol. 22, No. 7: 439-447.
- **Cameron, Ewan y Linus Pauling** (1.973), “Ascorbic Acid and the Glycosaminoglycans: An Orthomolecular Approach to Cancer and Other Diseases” en *Oncology* **27**, 2: 181-92.
- **Cameron, Ewan y Linus Pauling** (1.980), “On Cancer and Vitamin C” en *Executive Health* **16** (4), 1-8.
- **Itano, Harvey A., and Linus Pauling** (1.949, enero), “A Rapid Diagnostic Test for Sickle Cell Anemia” en *Blood: The Journal of Hematology* IV, **1**: pp. 66-68.
- **Itano, H. A. y J. V. Neel** (1.950), “A new inherited abnormality of human hemoglobin”, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **36**: 613-617.
- **Itano, H. A.** (1.951), “A third abnormal hemoglobin associated with hereditary hemolytic anemia”, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **37**: 775-784, 1.951.
- **Pauling, Linus** (Abril, 1.928a), “The Shared-electron Chemical Bond” en *Proceedings of National Academy of Science*, Vol. 14, No. 4, pp. 359-62.
- **Pauling, Linus** (1.928b), “The Coordination Theory of the Structure of Ionic Cristal” en *Festschrift zum 60. Geburtstage Arnold Sommerfelds*, pp. 11-17. Leipzig: Verlag Hirzel.
- **Pauling, Linus** (1.928c), “The Application of the Quantum Mechanics to the Structure of the Hydrogen Molecule and Hydrogen Molecule-Ion and to Related Problems” in *Chemical Review* **5**, 173.
- **Pauling, L.** (1.929), “The Principles Determining the Structure of Complex Ionic Crystals” en *Journal of the American Chemical Society* **51**, 1010.
- **Pauling, L. and Goudsmit, S.** (1.930), *The Structure of Line Spectra*, New York: McGraw-Hill.
- **Pauling, Linus** (1.931a), “Quantum Mechanics and the Chemical Bond” en *Physical Review* **37**, 1185.

- **Pauling, Linus** (1.931b), “The Nature of the Chemical Bond. Application of Results Obtained from the Quantum Mechanics and from Theory of Paramagnetic Susceptibility to the Structure of Molecules” en *Journal American Chemistry Society* 53, pp. 1367-1400.
- **Pauling, Linus** (1.935), “The Oxygen Equilibrium of Hemoglobin and Its Structural Interpretation” en *Proceedings of the National Academy Of Science* **21**: 186-191.
- **Pauling, L. y Ch. Coryell** (1.936, Marzo), “The Magnetic Properties and Structure of the Hemochromogens and Related Substances” en *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 22, No. 3: 159-163.
- **Pauling, Linus** (1.937), “The Significance of Structural Chemistry, George Fisher Baker Lectureship, Cornell University, Ithaca, New York (Manuscript).
- **Pauling, Linus** (1.938), “The Significance of Resonance to the Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules” en Henry Gilman (ed.), *Organic Chemistry. An Advanced Treatise*, vol. 2. New York: Wiley, 1.938, pp. 1850-1890.
- **Pauling, Linus** (1.940), “A Theory of the Structure and Process of Formation of Antibodies” en *Journal of the American Chemical Society*, **62**: 2643-2657.
- **Pauling, Linus y Max Delbrück** (1.940), “The Nature of the Intermolecular Forces Operative in Biological Processes” en *Science* **92**: 77-79.
- **Pauling, Linus** (1.941), “Properties of Antibodies” manuscrito del 26 de septiembre de 1.941. Versión electrónica en: http://profiles.nlm.nih.gov/MM/B/B/C/P/_/mmbbcp.pdf
- **Pauling, Linus** (1.945), “Molecular Structure and Intermolecular Forces” en Karl, Landsteiner (ed., 1.945).
- **Pauling, Linus**, (1.946, 25 de mayo), “Molecular Architecture and Biological Reactions” en *Chemical and Engineering News* **24**, 10:1375-1377.
- **Pauling, Linus** (1.947), *General Chemistry. An Introduction to Descriptive Chemistry and Modern Chemical Theory*, San Francisco, W.H.Freeman and Company.
- **Pauling, Linus** (1.947, 17 de Julio), “Molecular Structure and Biological Specificity”. Conferencia pronunciada en el 11th *International Congress of Pure and Applied Chemistry*, Main Theater, Royal Institution

- **Pauling, Linus** (1.948, 27 de febrero), “The Nature of Forces between Large Molecules of Biological Interest” en *Proceedings of the Royal Institution of Great Britain* **34**: 181-187.
- **Pauling, Linus, Harvey A. Itano, S. J. Singer y Ibert C. Wells** (1.949, 25 Noviembre), “Sickle Cell Anemia, A Molecular Disease” en *Science* **110**, 2865, pp. 543-548.
- **Pauling, L.** (December 7, 1.949), “Structural Chemistry in Relation to Biology and Medicine”, en *Second Bicentennial Science Lecture of the City College Chemistry Alumni Association*, New York.
- **Pauling, Linus y Robert B. Corey** (1.950), "Two Hydrogen-Bonded Spiral Configurations of the Polypeptide Chain" en *Journal of the American Chemical Society* **72** (1.950): 21.
- **Pauling, Linus, Robert B. Corey y H. R. Branson** (1.951), "The Structure of Proteins: Two Hydrogen-Bonded Helical Configurations of the Polypeptide Chain" en *Proceedings of the National Academy of Science* **37** (1.951): 205-210.
- **Pauling, Linus** (1.952, Octubre), “The Hemoglobin Molecule in Health and Disease” en *Proceedings of the American Philosophical Society* **96**, 5, pp. 556-565.
- **Pauling, Linus** (1.955), “Abnormality of Hemoglobin Molecules in Hereditary Memolytic Anemias” en *Harvey Lectures XII*: 216-241.
- **Pauling, Linus** (1.956, 2 Mayo), “The Molecular Basis of Genetics”. Transcripción de la conferencia presentada ante el *American Psychiatric Association Symposium*, Chicago, Illinois. Versión electrónica en: <http://osulibrary.oregonstate.edu/specialcollections/coll/pauling/blood/notes/1956a.6-pg01-xl.html>
- **Pauling, Linus** (1.958, 1 Mayo), “Current Opinion: Molecular Disease” en *Pfizer Spectrum* **6**, 9.
- **Pauling, Linus** (1.959, 29 Marzo), “Molecular Disease”. Conferencia leída ante la *American Orthopsychiatry Association*, San Francisco.
- **Pauling, Linus** (1.963), *Química General*, Madrid, Aguilar

- **Pauling, Linus** (1.959), “Molecular Structure in Relation to Biology and Medicine” en *Ciba Foundation Symposium on Significant Trends in Medical Research*. Ciba Foundation, p. 3-10.
- **Pauling, Linus** (1.968), “The Resonating- Valence-Bond Theory of Superconductivity: Crest Superconductors and Trough Superconductors” en *Proceedings of the National Academy of Science* **60**: 59-65.
- **Pauling, Linus** (1.968b), “Orthomolecular Psychiatry: Varying the Concentrations of Substances Normally Present in the Human Body may Control Mental Disease” en *Science* **160**: 265-271.
- **Pauling, Linus** (1.970), “Fifty Years of Progress in Structural Chemistry and Molecular Biology” en *Daedalus* **99**: 988-1014.
- **Pauling, Linus** (1.970b), “Evolution and the Need for Ascorbic Acid” en *Proceedings of the National Academy of Science* **67**, 4: 1643-48.
- **Pauling, Linus** (1.974), “Some Aspects of Orthomolecular Medicine” en *Journal of the International Academy of Preventive Medicine* **1**: 1-30.
- **Pauling, Linus** (1.977, Enero), “On vitamin C and cancer” en *Executive Health* **13** (4):1-5.
- **Pauling, L.** (1.987), “Schrödinger’s contribution to chemistry and biology” en *Schrödinger: Centenary Celebration of a Polymath*, editado por C. W. Kilmister. Cambridge University Press, Cambridge: 225–233
- **Pauling, Linus** (1.991), "Open Letter to President Bush: In Support of U.S. Persian Gulf Policy" en *Washington (D.C.) Times*, 9 de enero, 1.991.
- **Pauling, Linus** (2.001), “An Episode that Changed My Life” en Mead, Clifford y Thomas Hager (2.001, eds.),
- **Pauling, Linus** (2.001), “The ultimate decision” en Mead, Clifford y Thomas Hager (2.001, eds.), *Linus Pauling: Scientist and Peacemaker*, Oregon, Oregon State University Press
- **Rath, Matthias y L. Pauling** (1.991b), “Solution of the puzzle of human cardiovascular disease: Its primary cause is ascorbate deficiency, leading to the deposition of lipoprotein(a) and fibrinogen/fibrin in the vascular wall” en *J. Orthomolecular Med.*, 1.991, 6:125-134.

ESTUDIOS, MONOGRAFÍAS Y OBRAS DE CARÁCTER GENERAL:

- **Allen, Garland** (1.983), *La ciencia de la vida en el Siglo XX*, México, FCE.
- **Asimov, Isaac** (1.999), *Breve historia de la química. Introducción a las ideas y conceptos de la química*, Madrid, Alianza.
- **Ayala, Francisco J. y Theodosius Dobzhansky** (1.983, Eds.), *Estudios sobre la filosofía de la biología*, Barcelona, Ariel.
- **Bernal, John Desmond** (1.939), *The Social Function of Science*, George Routledge & Sons Ltd., London.
- **Bochenski, I.M.** (2.002), *La filosofía actual* (2ª edición), (Trad. Eugenio Ímaz.) México, FCE. (Original Alemán, 1.947)
- **Bridges, Calvin B.** (1.916), “Non-Disjunctions as Proof of the Chromosome Theory of Heredity” en *Genetics* 1:1-52.
- **Brock, William H.** (1.992), *The fontana history of Chemistry*, Fontana Press. Ed. en cast., *Historia de la Química*, Alianza, Madrid, 1.998.
- **Bohr, Niels** (1.913b), “On the constitution of atoms and molecules” en *Philosophical Magazine*, Series 6, Volume 26: 1-25
- **Bohr, Niels** (1.913c), “On the constitution of atoms and molecules. Part II.- Systems containing only a single nucleus” en *Philosophical Magazine*, 26: 476-502.
- **Bohr, Niels** (1.913d), “On the constitution of atoms and molecules. Part III.- Systems containing several nuclei” en *Philosophical Magazine*, 26: 857-875.
- **Bohr, Niels** (1.927), “II. El postulado cuántico y el desarrollo reciente de la teoría atómica”, en *La teoría atómica y la descripción de la naturaleza*, Madrid, Alianza Universidad, 1.988: 98-102.
- **Bohr, Niels** (1.929), “III. El cuántico de acción y la descripción de la Naturaleza” en *La teoría atómica y la descripción de la naturaleza*, Madrid, Alianza Universidad, 1.988: 133-141.
- **Bohr, Niels** (1.950), “Nuestro concepto de la materia” en *¿Qué es una ley de la naturaleza?*, México, Fondo de Cultura Económica, 1.975.

- **Bohr, Niels** (1.958), “Física cuántica y Filosofía. Causalidad y Complementariedad” en *Nuevos ensayos sobre física atómica y conocimiento humano*, Madrid, Aguilar, 1.970: 3-10.
- **Broglia, Ricardo A.** (2.002), “De los núcleos atómicos a las proteínas” en *Investigación y ciencia*, número 309: 54-61.
- **Claros, Gonzalo** (2.003), “Aproximación histórica a la biología molecular a través de sus protagonistas, los conceptos y la terminología fundamental”, en *Panacea@* Vol. IV, n.º 12. Junio, 2.003. Versión electrónica en: http://www.medtrad.org/panacea/IndiceGeneral/n12_tribuna_GCClaros.pdf
- **Cochram, W. y Francis Crick** (1.952), “Evidence for the Pauling-Corey Alphahelix in Syntetic Polypeptides” en *Nature* **169**, 4293: 234-235
- **Coulson, C.A.** (1.961), *Valence*, Oxford University Press, Oxford, U.K.
- **Coulson, C.A.** (1.947), “The meaning of resonance in quantum chemistry”, en *Endesavour* 6, pps. 42-47.
- **Crick, Francis et al.** (1.961), “General Nature of the Genetic Code For Proteins” en *Nature* **192**, 4809: 1227-1232.
- **Crick, Francis** (1.966), *Of Molecules and Men*, Seattle, University of Washington Press.
- **Crick, Francis** (1.979), *¿Ha muerto el vitalismo?*, Barcelona, Antoni Bosh
- **Crick, F. H. C.** (1.993), *Qué loco propósito*, Tusquets, Barcelona.
- **Crick, Francis** (1.994), *La búsqueda científica del alma*, Madrid, Debate.
- **De Broglie, L.** (1.951), *Física y microfísica*, Buenos Aires, Espasa Calpe.
- **Del Re, Giuseppe** (1.998), “Ontological Status of Molecular Structure” en *HYLE--International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 4 (1.998), No. 2: 81-103.
- **Del Re, Giuseppe** (2.000), “Models and Analogies in Science”, *Hyle–International Journal for Philosophy of Chemistry*, 6, nº 1: 5-15.
- **Dronamraju, Krishna R.** (1.999), “Erwin Schrödinger and the Origins of Molecular Biology” en *Genetics Society of America* **153**: 1071–1076.
- **Echeverria, Javier** (2.003), *Introducción a la metodología de la ciencia. La filosofía de la ciencia en el siglo XX*, Madrid, Cátedra.

- **Edsall, J. T.** (1.953), “Some Comments on Proteins and Protein Structure” en *Proceedings of the Royal Society of London, Series B, Biological Sciences*. Vol. 141, N° 902: 97-103.
- **Einstein, Albert** (1.981), “Sobre el método de la física teórica”, en *Mis ideas y opiniones*, Barcelona, Antoni Bosch,: 242-247.
- **Escarpa Sánchez-Garnica, Dolores** (2.004) *Filosofía y biología en la obra de Claude Bernard*. PhD thesis, Universidad Complutense de Madrid.
- **Fruton, Joseph S.** (1.972), *Molecules and Life: Historical Essays on the Interplay of Chemistry and Biology*
- **Fuerst, John** (1.984), "The Definition of Molecular Biology and the Definition of Policy: The Role of the Rockefeller Foundation's Policy for Molecular Biology" en *Social Studies of Science*, Vol. 14, N° 2: 238-243.
- **Galilei, Galileo** (1623), *Il Saggiatore*, en A. Favaro (ed.), *Le Opere di Galileo Galilei* (Firenze, G. Barbèra, 1.890-1.909), vol. VI: 197-372. Se suele citar como *Opere*, seguido por el número latino del volumen y el número árabe de las páginas.
- **Gamow, George** (1.993), *El breviario del Sr. Tompkins*. México, FCE.
- **Garcia-Sucre, M. & Bunge, M.** (1.981), “Geometry of a Quantum System” en *International Journal of Quantum Chemistry*, 19: 83-93.
- **Geymonat, Ludovico** (1.985), *Historia del pensamiento filosófico y científico. Siglo XX, II*, («Geymonat maior»), Barcelona, Ariel.
- **Geymonat, Ludovico** (2.006), *Historia del pensamiento filosófico y científico. («Geymonat minor»)*, Barcelona, Crítica.
- **Gilbert, S. F.** (1.982), *Intellectual Traditions in the Life Sciences: Molecular Biology and Biochemistry, Perspectives in Biology and Medicine*, 26 (1), 151-162.
- **Gillispie, C. C.** (1.980), *Dictionary of Scientific Biography*, New York, Scribner
- **Gribbin, John** (1.986), *En busca del Gato de Schrödinger*, Barcelona, Salvat.
- **Gribbin, John** (1.995), *En busca de la doble hélice: la evolución de la biología*, Barcelona, Salvat, D.L.
- **González Recio, José Luis** (1.988), “Galileo y Kant reencontrados. Ciencia y filosofía en los orígenes de la biología molecular”, en Arana, J. (ed.): *Los filósofos y la biología*, Universidad de Sevilla, 1.998: 141-158.

- **González Recio, J. L.** (editor, 2.005), *El taller de las ideas. 10 lecciones de historia de la ciencia*, Madrid, Plaza y Valdés.
- **González Recio, José Luis** (2.006), “Filosofía de la biología, biología del conocimiento y biotecnología” en *Contextos*, Universidad de León.
- **Grande Covian, Francisco** (1.975), “Bioquímica” en Pedro Laín Entralgo, *Historia Universal de la Medicina*, Barcelona, Salvat, 1.975 (Vol. VII): 57-67.
- **Gray, George** (1.949), “Pauling and Beadle” en *Scientific American*, vol. 180, N° 5:16-21
- **Guthrie, William K.C.** (2.005), *Los filósofos griegos*, México, FCE.
- **Hager, Thomas** (1.995), *Force of nature: the life of Linus Pauling*, New York, Simon & Schster Inc.
- **Hager, Thomas** (1.998), *Linus Pauling and the Chemistry of Life*, New York, Oxford University Press.
- **Hartle, J.B.** (1.996), ‘Scientific knowledge from the Perspective of Quantum Cosmology’, in: Casti, J.L.; Karlqvist, A. (eds.), *Boundaries and Barriers: On the Limits to Scientific Knowledge*, Addison-Wesley, Reading: 116-147.
- **Heisenberg, Werner** (1.926-27), “VI. Penetrando en tierra nueva” en *Diálogos sobre física atómica*, Madrid, B.A.C., 1.972: 89-102.
- **Heisenberg, Werner** (1.930-32), “X. La mecánica cuántica y la filosofía de Kant” en *Diálogos sobre física atómica*, Madrid, B.A.C., 1.972: 146-155.
- **Heitler, W. y F. London** (1.927), en *Z. Phys.*, **44**, 455.
- **Hendry, Robin Findlay** (2.003), “Autonomy, Explanation, and Theoretical Values. Physicist and Chemists on Molecular Quantum Mechanics” en *Annals New York Academy of Sciences*, 988: 44-58.
- **Huemer, Richard P.** (ed., 1.986), *The Roots of Molecular Medicine: A Tribute to Linus Pauling*, New York, W.H. Freeman.
- **Judson, Horace Freeland** (1.987), “El octavo día de la creación”, CONACYT, Ed. Castell, México.
- **Karl, Landsteiner** (ed., 1.945), *The Specificity of Serological Reactions*, Cambridge, Massachussets, Harvard University Press.
- **Laín Entralgo, Pedro** (1.975), *Historia Universal de la Medicina*, Barcelona, Salvat, 1.975 (Vol. VII).

- **Lewis, Gilbert N.** (1.923), *Valence and the Structure of Atoms and Molecules*, The Chemical Catalog Company, New York, 92.
- **Lawrence Bragg, J. C. Kendrew y M. F. Perutz** (1.950), "Polypeptide Chain Configurations in Crystalline Proteins", en *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 203, No. 1074. (Oct. 10, 1.950): 321-357.
- **MacArthur, Ian** (1.953), "The Pauling-Corey Models and Fibrous Proteins" en *Proceedings of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences*, Vol. 141, N° 902: 33-39.
- **McEvoy, J.P y Oscar Zárate** (1.997), *Teoría cuántica para principiantes*, Buenos Aires, Era Naciente SRL
- **Mainetti, José Alberto** (1.992), *La transformación de la medicina*, La Plata, Quirón.
- **Marinacci, Barbara** (ed., 1.995), *Linus Pauling in his Own Words. Selections from his Writings, Speeches and Interviews*, Simon & Schuster International, New York.
- **Mason, Stephen F.** (1.997), "The Science and Humanism of Linus Pauling (1.901-1.994)" en *Chemical Society Reviews*, **26**: 29 - 39
- **Mayr, Ernest** (1.982), *The Growth of Biological Thought*. Cambridge (Mass.), Harvard University Press.
- **Mayr, Ernest** (1.998), *Así es la biología*, Madrid, Debate.
- **Mead, Clifford y Thomas Hager** (2.001, eds.), *Linus Pauling: Scientist and Peacemaker*, Oregon, Oregon State University Press
- **Migdal, A.B.** (1.989), *Qualitative Methods in Quantum Theory*, Addison-Wesley, New York (1st edition, 1.977).
- **Mó Romero, Otilia y Manuel Yáñez Montero** (2.000), *Enlace químico y estructura molecular*, Barcelona, J.M. Bosch.
- **Mondella, F.** (1.985), "Biología y Filosofía", en Geymonat, L. (1.985), *Historia del pensamiento filosófico y científico. Siglo XX, II*. Barcelona, Ariel: 125-201
- **Nye, M.J.** (1.993), *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry: Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines, 1.800-1.950*, University of California Press, Berkeley.

- **Ogilvie, J.F.** (1.990), ‘The Origin of Chemical Bonds – There are no Such Things as Orbitals’, *Journal of Chemical Education*, **67**: 280-289.
- **Olby, Robert** (1.974), *The Path to the Double Helix*, Macmillan, London.
- **Olby, Robert** (1.984), “The Sheriff and the Cowboys: or Weaver’s Support of Astbury and Pauling” en *Social Studies of Science*, Vol. 14, N° 2: 244-247
- **Ordóñez, J., Navarro, V. y Sánchez Ron, J.M.** (2.003), *Historia de la ciencia*, Madrid, Espasa Calpe.
- **Ortiz Masllorens, Fernando** (1.975), “Inmunología” en Pedro Laín Entralgo en Pedro Laín Entralgo, *Historia Universal de la Medicina*, Barcelona, Salvat, 1.975 (Vol. VII): 177-182.
- **Ostrovsky, Valentin N.** (2.005), “Towards a Philosophy of Approximations in the ‘Exact’ Sciences” en *HYLE--International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 11, No.2 (2.005): 101-126.
- **Paneth, F.A.** (1.962), ‘The Epistemological Status of the Concept of Element’, *British Journal for the Philosophy of Science*, **13**, 1-14: 144-160, trans. H.R. Post [reprinted in *Foundations of Chemistry*, **5** (2.003): 113-145].
- **Paradowski, Robert** (1.972), “The Structural Chemistry of Linus Pauling”, *Ph.D. Diss., University of Michigan*
- **Paradowski, Robert** (1.991), *Linus Pauling: A man of Intellect and action*, Chronology
- **Park, B.S.** (1.999), “Chemical translator: Pauling, Wheland and their strategies for teaching the theory of resonance” en *Br. J. Hist. Sci.*, 32: 21-46: 24-28.
- **Perutz, Max** (1.951), “New X-Ray Evidence on the Configuration of Polypeptide Chains” en *Nature*, **167** (4261): 1053-4.
- **Perutz, M.** (1.987), “Erwin Schrödinger’s *What Is Life?* And molecular biology en *Schrödinger: Centenary Celebration of a Polymath*, edited by C. W. Kilmister. Cambridge University Press, Cambridge: 234–251.
- **Pitt, Joseph** (2.005), “When is an Image Not an Image?” en *Techné: Research in Philosophy and Technology*, Virginia Tech:
<http://scholar.lib.vt.edu/ejournals/SPT/v8n3/pitt.html#2>.
- **Ramberg, Peter J.** (2.003) *Chemical Structure, Spatial Arrangement: The Early History of Stereochemistry, 1.874-1.914*, Ashgate, Aldershot.

- **Ramberg, Peter J.** (2.000), “Pragmatism, Belief, and Reduction. Stereofórmulas and Atomic Models in Early Stereochemistry” en *HYLE–International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 6 (2.000), No. 1: 35-61.
- **Ramsey, J.L.** (1.997), ‘Molecular Shape, Reduction, Explanation and Approximate Concepts’, en *Synthese*, 111: 233-51.
- **Rich, Alexander y Norman Davidson** (eds. 1.968), *Structural chemistry and molecular biology: a volume dedicated to Linus Pauling by his students, colleagues, and friends*, San Francisco; London, W.H. Freeman.
- **Rosenberg, Alexander** (1.985), *The Structure of Biological Science*, Cambridge University Press.
- **Russell, Bertrand** (1.972), *Ensayos filosóficos*, Madrid, Alianza
- **Sarkar, Sahotra** (1.996, ed), *The Philosophy and History of Molecular Biology: New Perspectives*, Dordrecht, Kluwer Academic Publishers.
- **Sánchez Ron, J.M.** (2.001), *Historia de la física cuántica*, Barcelona, Crítica.
- **Scerri, E.R.** (2.001), “The Recently Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues” en *Philosophy of Sciences*, 68, (Proceedings), S76-88.
- **Scerri, Eric R.** (2.005), *HYLE--International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 11, No.2 (2.005): 127-145.
- **Schrödinger, Edwin** (1.944), *What is life? The physical aspect of the living cell*, Cambridge University Press. Ed. citada trad. y notas de Ricardo Guerrero, *¿Qué es la vida?*, Barcelona, Orbis, 1.986.
- **Schrödinger, E.** (1.967), *What is life? Mind and matter*, Cambridge, Cambridge University Press. En español (1.967) *¿Qué es la vida?*, Tusquets, Barcelona.
- **Schummer, Joachim** (1.998) “The Chemical Core of Chemistry I. A conceptual Approach” en *HYLE--International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 4 (1.998), No.2: 129-162.
- **Serafini, Anthony** (1.989), *Linus Pauling. A man and his Science*, Lincoln (NE), toExcel.
- **Selleri, Franco** (1.986), *El debate de la teoría cuántica*, Madrid, Alianza Editorial.
- **Serrano Bosquet, Francisco Javier** (2.006), *Biología Molecular. Cuestiones e implicaciones filosóficas*, México, Limusa.

- **Servos, J. W.** (1.990), *Physical Chemistry in America from Ostwald to Pauling*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey.
- **Slater, John C.** (1.931), "Directed valence in Polyatomic Molecules" en *Physical Review* **37**, 481.
- **Sober, Elliot** (1.996), *Filosofía de la biología*, Trad. De T.R. Fernández y S. Del Viso, Madrid, Alianza.
- **Soyano, Andres**, *Tópico de inmunología* en <http://cea.ivic.ve/topicoimmunologia>, Centro de estudios avanzados, Venezuela. (07 de junio de 2.007)
- **Stephen Lawson** (1.999, Noviembre), "What is Orthomolecular Medicine?" del *Linus Pauling Inst.* en <http://lpi.oregonstate.edu/f-w99/orthomolecular.html> (acceso 12 de junio de 2.007).
- **Strurdivant, J.H.** (1.968) "The Scientific Work of Linus Pauling" en Rich, Alexander and Norman Davidson (eds. 1.968).
- **Szumowski, W.** (1.949), "La philosophie de la médecine: son histoire, son essence, sa dénomination et sa définition" en *Archives Internationales de l 'Histoire des Sciences*, 1.949, **9**:1097-1141.
- **Temkin, O.** (1.956), "On the Interrelationship of the History and Philosophy of Medicine" en *Bulletin of the History of Medicine*, 1.956, **30**: 241-251.
- **Tontini, Andrea** (2.004), "On the Limits of Chemical Knowledge" en *HYLE--International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 10, No.1 (2.005): 23-46.
- **Villaveces Cardoso, José Luis** (2.000) *Química y epistemología, una relación esquivada*, en *Revista colombiana de Filosofía de la Ciencia*, año/vol. 1, número 2-3, Universidad del Bosque, Bogotá, Colombia: 9-26.
- **Watson, J. D. y Crick, F. H. C** (1.953), "A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid" en *Nature* **171**: 737-378.
- **Watson, J. D. y Crick, F. H. C** (1.953b), "Genetical Implications of the Structure of Deoxyribonucleic Acid" en *Nature* **171**, 964-967.
- **Watson, J. D.** (1.968), *The Double Helix*, Nueva York, Atheneum, ed. esp. (2.000), *La doble hélice: relato personal del descubrimiento de la estructura del ADN*, Alianza, Madrid.

- **Watson, James** (2.000), *La doble hélice: relato personal del descubrimiento del ADN*, Madrid, Alianza Editorial.

RECURSOS ELECTRÓNICOS

PÁGINAS ELECTRÓNICAS DE INSTITUCIONES, ASOCIACIONES Y GRUPOS DE INVESTIGACIÓN

- **Bionomos. Historia y Filosofía de la Biología:**
<http://www.gonzlezrecio.com/bionomos/inicio.htm>
- **International Society for the Philosophy of Chemistry (ISPC):**
<http://ispc.sas.upenn.edu/>
- **Linus Pauling Institute:** <http://lpi.oregonstate.edu/lpbio/lpbio2.html>
- **Ortomolecular Medicine:** www.orthomed.org
- **Profile in Science. National Library of Medicine. The Linus Pauling Papers:**
<http://profiles.nlm.nih.gov/MM/>
- **Special Collections. OSU Libraries. Ava Helen and Linus Pauling Papers:**
<http://osulibrary.oregonstate.edu/specialcollections/coll/pauling/index.html>
- **The Caltech Institute Archives:** <http://archives.caltech.edu/index.cfm>
- **The International Society for History, Philosophy, and Social Studies of Biology (ISHPSSB):** <http://www.ishpssb.org/>
- **The Linus Pauling Institute:** <http://lpi.oregonstate.edu/index.html>

REVISTAS DE INVESTIGACIÓN ELECTRÓNICAS

- ***Foundations of Chemistry* (Versión Online):**
<http://www.springerlink.com/content/103024/>
- ***Genetics*:** <http://www.genetics.org/>

- **International Journal for Philosophy of Chemistry (HYLE):**
- <http://www.hyle.org/index.html>
- **Journal of Orthomolecular Medicine:** <http://www.orthomed.org/jom/jom.html>
- **Proceedings of the Nacional Academy of Sciences of the United States of America**
(Versión Online): <http://www.pnas.org/>

DICCIONARIOS Y ENCICLOPEDIAS EN LÍNEA

- **Babylon. Spanish:** <http://www.babylon.com/definition/Spanish>
- **Diccionario Real Academia Española:** www.rae.es
- **Encyclopædia Britannica Online:**
<http://0-search.eb.com.millennium.itesm.mx:80/eb/article-9021830>
- **Enesitpt:** http://www.gemmologie.be/listing_6.htm
- **Oxford Reference Online:** www.oxfordreference.com
- **WordReference.com:** <http://www.wordreference.com/es/>

BASES DE DATOS

- **Blackwell-Synergy-Full Collection:** <http://www.blackwell-synergy.com/>
- **Catálogo de Bibliotecas Tec:** http://biblioteca.itesm.mx/nav/buscar_catalogo.php
- **JSTOR:** <http://www.jstor.org/>
- **Lexis/Nexis Academic Universe:** <http://www.lexisnexis.com>
- **ProQuest:** www.proquest.com/
- **Redayc (Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal):**
<http://www.redalyc.org/>
- **Wikipedia. Linus Pauling:** http://es.wikipedia.org/wiki/Linus_Pauling#_note-8