



Ricordo del Prof. Leonello Paoloni

GIANFRANCO LA MANNA

Ho avuto l'occasione di incontrare il prof. Paoloni per la prima volta alla fine del 1970, subito dopo aver conseguito la laurea in chimica a Roma, quando mi offrì la possibilità di partecipare all'assegnazione di una borsa di studio presso l'Università di Palermo, dove il prof. Paoloni era titolare della cattedra di Chimica teorica. Avevo 24 anni e accettai con entusiasmo e anche con un po' di trepidazione, visto che si trattava della mia prima occupazione lavorativa, in una città che non conoscevo.

Da quel giorno ha preso inizio una collaborazione che è durata circa 13 anni, e un rapporto di stima per lo scienziato e per la persona che è durato e dura per sempre.

Nei 13 anni di collaborazione, la chimica teorica ha avuto un enorme sviluppo, agevolato dal progresso tecnologico degli strumenti di calcolo. Il prof. Paoloni ha avuto parte attiva nella istituzione del Centro di calcolo dell'Università di Palermo, di cui è stato sovrintendente per molti anni.

I principali argomenti di ricerca che abbiamo affrontato e studiato insieme possono essere così sintetizzati:

- Razionalizzazione di correlazioni empiriche attraverso grandezze ricavate dalla funzione d'onda.
- Strutture caratterizzate da interazioni di legami a idrogeno (metanolo–acetone) o interazioni intermolecolari.
- Costruzione di sistemi molecolari con proprietà catalitiche con metodi semiempirici (CNDO).
- Utilizzazione di metodi di calcolo ab initio. Collaborazione con il gruppo di E. Clementi. Studio teorico dell'interazione soluto–solvente con tecnica Montecarlo, che permette di considerare un gran numero di molecole di solvente.

- Interazioni intermolecolari dell'acetoneitrile.
- Studio del bullvalene (molecola flussionale, importante per la problematica dell'esistenza del legame chimico connessa alle condizioni esterne) e dell'isomero pentaprismano.

A questo proposito, voglio ricordare la definizione di “struttura molecolare” data dal prof. Paoloni, che non esiterei a definire la più corretta da me conosciuta.

L'organizzazione spaziale degli atomi, definita come geometria molecolare, è determinata dalle interazioni tra atomi adiacenti e non adiacenti. Essa è direttamente osservabile (risultato di misure). La formula di struttura molecolare, costruita come reticolato di legami definisce le relazioni di adiacenza tra gli atomi. Essa è unica e caratteristica di ciascuna sostanza solonell'intervallo di temperatura entro cui tali relazioni di adiacenza restano compatibili con l'ampiezza delle oscillazioni intorno alla posizione media di equilibrio degli atomi.

Nello stesso lavoro (L. Paoloni, *La Chimica e l'Industria*, 1977, 59 (1), 37–43), l'autore critica l'uso disinvolto e distorto che viene fatto della nozione di orbitale nei testi di chimica della scuola secondaria (e non solo):

[...] la nozione di orbitale, così come proposta, è arbitraria ed in più è intrinsecamente irrilevante, e perciò inutile, ai fini esplicativi e classificatori cui viene destinata. [...] L'impiego di funzioni orbitali nell'approssimazione della funzione d'onda come prodotto di funzioni monoelettroniche, utile in sede tecnica per fare calcoli previsionali o esplicativi entro limiti di errore considerati accettabili, diventa obiettabile quando in sede didattica esso si trasforma in una etichetta per singoli elettroni, ai quali si assegna una localizzazione spaziale spinta fino all'uso di modelli figurativi materializzati e tangibili. Occorre, a mio avviso, riconoscere che si tratta di uno schema concettuale privo di qualsiasi riscontro fisico osservabile. È per queste ragioni, ed anche per altre che tralascio in questa sede, che preferirei veder scomparire la parola orbitale dai testi di didattica chimica della scuola secondaria.

Questo bisogno di chiarezza concettuale e di rigore metodologico è stata una delle caratteristiche principali del prof. Paoloni.

In realtà, c'è ancora molto da fare, se in una recente pubblicazione distribuita circa un mese fa (10 febbraio 2012) con il giornale *La Repubblica* (collana *Capire la scienza*, n.9, pag.27) si legge:

La meccanica quantistica ha permesso di spiegare come attorno agli atomi gli elettroni si trovino in orbitali atomici, mentre nel caso delle molecole gli elettroni occupino ciò che chiamiamo orbitali molecolari.

Da sottolineare che l'autore di questo testo è Harold Kroto, premio Nobel per la chimica nel 1996, noto per aver sintetizzato la molecola C₆₀.

Oltre all'attività didattica universitaria e all'attività di ricerca scientifica, il prof. Paoloni ha dedicato molte energie alla diffusione di una visione diversa dell'insegnamento della chimica nella scuola secondaria, organizzando una notevole serie di seminari in tutta Italia.

A livello locale, dal 1983 in poi, la sua attività di ricerca si è rivolta verso gli studi di storia e didattica della chimica e, da quel momento, ho potuto comunque sempre giovarmi dei suoi suggerimenti e incoraggiamenti.

Gianfranco La Manna
giancolam@katamail.com