

Modelos atómicos y moleculares: ¿independencia conceptual o relativa?

Hernán Accorinti

Universidad de Buenos Aires, Argentina
hernanaccorinti@gmail.com

Juan Camilo Martínez González

Universidad Nacional de Tres de Febrero; CONICET, Argentina.
olima62@hotmail.com

Sebastian Fortín

Universidad de Buenos Aires, CONICET, Argentina.
afortin@conicet.gov.br

—

RESUMEN: La concepción sintáctica y semántica de las ciencias, ha promovido una perspectiva teórico dominante según la cual el conocimiento científico se encuentra primariamente cifrado en las teorías, y no en los modelos. Sin embargo, la relación entre teoría y modelo es aún tema de debate. Algunos autores (Suárez 1999, 2009, Suárez & Cartwright 2008) desafían la presunta dependencia de los modelos respecto de las teorías a través del estudio de ciertos modelos concebidos como fenomenológicos. Sin embargo en el presente trabajo, sobre la base del análisis de los modelos atómicos y moleculares en química cuántica, se argumentará en favor de una independencia de los modelos respecto de las teorías que no puede interpretarse ni como fenomenológica ni como meramente histórica y relativa. Por el contrario, estos modelos ponen de manifiesto una independencia conceptual constitutiva al proceso de modelización ya que integran dos dominios teóricos incompatibles: el clásico y el cuántico. El dominio cuántico aporta la ecuación de Schrödinger para la determinación de los niveles de energías. El dominio clásico, a través de la química estructural y de la aproximación Born-Oppenheimer (1927), aporta la geometría de la molécula dada por las posiciones fijas de los núcleos en el espacio.

PALABRAS CLAVES: concepción semántica; relación modelos-teoría; modelos moleculares; química cuántica; Aproximación Born Oppenheimer

1. Introducción

Toda una tradición epistemológica, que tiene sus inicios en la concepción sintáctica y semántica de las ciencias, ha anclado una perspectiva *teórico dominante* según la cual el conocimiento científico se encuentra primariamente cifrado en las teorías, y no en los modelos. Sin embargo, la relación entre teoría y modelo es aún tema de debate. En efecto, en la actualidad, se ha comen-

zando a reconocer a los modelos como un recurso metodológico fundamental y autónomo de la práctica científica. En continuidad con esta línea de pensamiento, el trabajo pretenderá brindar nuevos argumentos a favor de esta nueva consideración respecto de los modelos a partir de una serie de casos provenientes de la química cuántica.

Según la concepción tradicional las teorías pueden aplicarse a situaciones concretas mediante modelos específicos. Esto, en definitiva, supone que los modelos dependen de las teorías ya que la interdependencia pretendida entre la teoría y el mundo exige una interdependencia entre la teoría y aquello con lo cual se aplica al mundo: el conjunto de sus modelos. Consecuentemente para que los modelos se constituyan como hacedores de verdad cualquier modificación debería derivar de, o bien estar legitimada por, la teoría.

Esta posición ha sido cuestionada por Suárez y Cartwright (Suárez 1999; Suárez & Cartwright, 2008) quienes, abogando por una concepción instrumentalista de las teorías, aseguran que los modelos pueden ser independientes de las teorías. La discusión entre ambas perspectivas se configura a partir del modelo desarrollado por los hermanos London para dar cuenta del efecto Meissner en los materiales superconductores. La riqueza del caso descansa en que tal modelo no fue, ni pudo haber sido derivado -ni tampoco haber estado legitimado- por la teoría electromagnética vigente en 1933. Esto se debía a que, en contraposición a lo que la teoría dictaba, para la configuración del modelo en cuestión era necesario considerar un material ferromagnético como diamagnético¹.

Sin embargo, el caso no ha zanjado el debate. En efecto, revisionistas de la concepción semántica como S. French, J. Ladyman, O. Bueno y N. da Costa (French & Ladyman 1997; French & Ladyman, 1998; French & Ladyman 1999; Da Costa & French, 2000; Da Costa & French, 2003; Bueno, French, Ladyman, 2002) tratan de minimizar las consecuencias epistemológicas afirmando que la independencia del modelo respecto de la teoría es meramente histórica y relativa. En el contexto de esta discusión, y considerando que el caso de los hermanos London no puede resolver la disputa planteada, analizaremos algunos modelos atómicos y moleculares provenientes de la química cuántica. Estos casos nos permitirán aseverar, en continuidad con la línea argumental propuesta por Suárez y Cartwright (2008), que de hecho, en la práctica científica, existen modelos que se instituyen y se desarrollan de un modo autónomo e independiente a algún marco teórico específico. Sin embargo, tomando cierta distancia de ambas posturas, afirmaremos también, y fundamentalmente, que la independencia no puede ser pensada meramente como histórica o relativa, sino que, por el contrario, sería más oportuno considerarla como una independencia conceptual constitutiva al proceso de modelización. En este sentido, creemos que los modelos moleculares en química cuántica, al integrar constructivamente, y de un modo empíricamente exitoso, teorías incompatibles, abren una nueva perspectiva respecto a la

disputa en torno a la dependencia o independencia entre los modelos y las teorías.

Por último, y como corolario de la tesis que aquí pretendemos defender, analizaremos las

¹ No es la intención de este trabajo adentrarnos en los pormenores del caso. El mismo solo es citado para contextualizar la discusión. Para un análisis pormenorizado ver Suárez & Cartwright 2008; Suárez 1999; French & Ladyman, 1997.

consecuencias epistemológicas de suponer una independencia conceptual en relación al rol que cumplen las teorías en la construcción del conocimiento científico.

2 — Modelos en química cuántica

2.1 — Un modelo para el átomo de hidrógeno

Con el advenimiento de la mecánica cuántica en la década de 1920, el estudio de átomos y moléculas logró consolidar un espacio interdisciplinar denominado *química cuántica*, donde se conjugan los dominios de la química y la física: química estructural y mecánica cuántica convergen en los intentos por describir la estructura molecular.

El modelo más básico en este campo disciplinar es el del átomo de hidrógeno. Se trata de un modelo de gran interés químico pues representa el sistema más sencillo en tanto que está compuesto solo por un núcleo (que contiene un protón en el caso del protio) y un electrón. Precisamente por ello, este modelo cuenta con la ventaja de ser uno de los pocos sistemas de interés químico que admite una solución exacta de la ecuación de Schrödinger. Como veremos, para todos los demás casos sólo es posible obtener soluciones aproximadas generalmente basadas en las soluciones del átomo de hidrógeno.

Para construir el modelo del átomo de hidrógeno formalmente se utiliza la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo o ecuación de Schrödinger de estado estacionario:

$$H_{tot} \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (1)$$

donde H_{tot} es el operador Hamiltoniano total que permite calcular los valores posibles de la energía total del sistema representados por los E_i , y los Ψ_i corresponden a la función de onda, elemento central de la mecánica cuántica en tanto representa el estado cuántico del sistema. Esta ecuación también puede concebirse como la ecuación que brinda los autovalores E_i , y los Ψ_i autoestados del operador Hamiltoniano.

Para encontrar las soluciones de la ecuación de Schrödinger (1) el átomo de hidrógeno se modela como un sistema compuesto de un núcleo de masa M y carga e y un electrón con carga $-e$ y masa m_e , donde e es la carga del electrón. El operador Hamiltoniano para este tipo de sistemas contiene dos términos de energía cinética, uno para cada partícula, y un potencial asociado a la atracción electrostática entre el núcleo y el electrón. Los términos de energía cinética del núcleo E_{KN} y del electrón E_{Ke} tienen la siguiente forma:

$$E_{KN} = \frac{P_N^2}{2M} \quad E_{Ke} = \frac{p_e^2}{2m_e} \quad (2)$$

donde P_N y p_e son los operadores de momento del núcleo y del electrón, respectivamente. Para describir la interacción entre ambas partículas puntuales se introduce el potencial de Coulomb:

$$V = -\frac{e^2}{|R_N - r_e|} \quad (3)$$

donde R_N y r_e son los operadores posición del núcleo y del electrón respectivamente. El Hamiltoniano total resulta, entonces:

$$H_{tot} = \frac{P_N^2}{2M} + \frac{p_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{|R_N - r_e|} \quad (4)$$

Cuando este Hamiltoniano se introduce en la ecuación de Schrödinger (eq.(1)), se obtiene:

$$\left(\frac{P_N^2}{2M} + \frac{p_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{|R_N - r_e|} \right) \Psi = E_i \Psi \quad (5)$$

cuya solución brinda las valores posibles E_i de la energía total del sistema.

Lo relevante del caso se debe a que, en contraposición a los que analizaremos a continuación, el modelo puede ser construido exitosamente a partir de herramientas propias y exclusivas de la mecánica cuántica. En efecto, la simplicidad del sistema permite diseñar un modelo que resuelve la ecuación de Schrödinger de un modo exacto y analítico; sin la necesidad de recurrir a algún tipo de aproximación que pueda connotar rasgos característicos de los sistemas clásicos.

2.2 — Modelos polinucleares: la aproximación Born-Oppenheimer

Ahora bien, para el caso de los sistemas polinucleares como las moléculas la modelización no es tan sencilla pues para obtener la solución de la ecuación de Schrödinger es necesario introducir aproximaciones. Utilizando los subíndices $\alpha, \beta, \dots$ para designar a los núcleos y los subíndices $i, j, \dots$ para designar a los electrones, y llamando Z al número atómico de cada átomo, el Hamiltoniano total de una molécula genérica tiene la siguiente forma:

$$H_{tot} = \sum_{\alpha} \frac{P_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + e^2 \sum_{\alpha < \beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{|R_{\alpha} - R_{\beta}|} + \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} - e^2 \sum_i \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{|r_i - R_{\alpha}|} + e^2 \sum_{i < j} \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (6)$$

Donde el primer término representa la energía cinética de los núcleos; el segundo, la energía potencial debida a la interacción entre los núcleos; el tercero, la energía cinética de los electrones; el cuarto, la energía potencial debida a la interacción entre los núcleos y los electrones; y el último, la energía potencial debida a la interacción de los electrones entre sí. Debido a que este tipo de ecuación carece de solución analítica (tal y como sucedía para el caso de los sistemas hidrogenoides) es que su tratamiento exige ineludiblemente la introducción de ciertas aproximaciones.

La aproximación que se encuentra en el corazón mismo de la química cuántica es la llamada aproximación de Born-Oppenheimer (Born & Oppenheimer 1927), que permite calcular los niveles de energía de moléculas complejas mediante el recurso de separar la función de onda de la molécula en su componente nuclear y su componente electrónica.

La aproximación de Born-Oppenheimer procede en dos pasos. En el primer paso, se elimina del Hamiltoniano total la energía cinética de los núcleos (primer término de la eq.(6)). Por lo tanto, el Hamiltoniano electrónico resulta

$$H_e = e^2 \sum_{\alpha < \beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{|R_{\alpha} - R_{\beta}|} + \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} - e^2 \sum_i \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{|r_i - R_{\alpha}|} + e^2 \sum_{i < j} \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (7)$$

donde ahora se suponen los núcleos fijos en el espacio. Esto significa que las posiciones nucleares R ya no se representan mediante operadores, sino como escalares. Se trata de un Hamiltoniano electrónico porque los únicos operadores cuánticos corresponden a los electrones. Sólo el reemplazo del H_{tot} por el Hamiltoniano electrónico (H_e) permite resolver la ecuación de Schrödinger (1). El segundo paso consiste en considerar un Hamiltoniano para los núcleos donde la función de onda calculada en el primer paso juega el papel de campo externo.

Es claro que la aproximación crucial de la aproximación de Born-Oppenheimer se introduce en el primer paso. En él las interacciones entre los electrones y los núcleos son tratadas en términos de electrones sometidos a un potencial coulombiano producido por núcleos fijos en posiciones definidas. Precisamente por ello, este paso de la aproximación de Born-Oppenheimer se conoce como *aproximación de núcleo fijo* (*clamped-nucleus approximation*), y constituye una estrategia básica en química cuántica para la descripción de la estructura molecular. En efecto, en la práctica el químico cuántico comienza por postular una estructura dada por las posiciones fijas de los núcleos en el espacio, tal como se supone en la química estructural no-cuántica que se ocupa de la descripción geométrica de las moléculas. Dicha estructura genera una “superficie” de energía potencial en el espacio de las fases del sistema, “sobre” la cual se calcula el comportamiento de los electrones. Los resultados de estos cálculos se comparan finalmente con los resultados empíricos para conservar o descartar la estructura geométrica previamente supuesta. Tal como afirma Hasok Chang “asumiendo que el núcleo se encuentra fijo en el espacio en sus lugares “clásicos”, los químicos son capaces de usar la mecánica cuántica para calcular otros aspectos de moléculas tales como longitudes y energías de enlace precisas” (Chang 2015, p. 198).

La pregunta relevante aquí es cómo se justifica la aproximación de núcleo fijo. La respuesta alude a la gran diferencia entre la masa $M\alpha$ de los núcleos y la masa m_e de los electrones: puesto que $M\alpha$ es mucho mayor que m_e , puede aplicarse el límite $m_e/M\alpha=0$. En otras palabras, puede suponerse que la masa de los núcleos tiende a infinito y, como la energía cinética de un cuerpo de masa infinita es cero (ver eqs. (2)), los núcleos tendrían energía cinética nula y, en consecuencia, se encontrarían en reposo en posiciones definidas. Desde esta perspectiva, la aproximación de Born-Oppenheimer sería tan inocua como las aproximaciones por límite que se utilizan en mecánica clásica.

Sin embargo, esta respuesta es inadecuada ya que aquí no nos encontramos en un dominio clásico sino cuántico donde, como es bien sabido, las intuiciones clásicas generalmente no funcionan. En efecto, el supuesto de núcleos fijos en el espacio se encuentra reñido con un principio fundamental de la mecánica cuántica. Según el principio de indeterminación de Heisenberg, no es posible adjudicar simultáneamente a una partícula cuántica una posición definida y un momento (masa por velocidad) definido (para la relación entre el principio de indeterminación y la contextualidad cuántica, ver Hughes, 1989).

La respuesta que intenta mantenerse en el ámbito cuántico es más pertinente que la anterior, aunque, como veremos, también presenta sus dificultades. El Hamiltoniano total de la molécula H_{tot} puede separarse en una parte cinética $T\alpha(P\alpha)$, que representa el movimiento de los núcleos, y la parte electrónica H_e (ver ecuaciones (6) y (7)):

$$H_{tot} = T_n(P_\alpha) + H_e(p_i, r_i, R_\alpha) \quad (8)$$

El Hamiltoniano electrónico H_e no es función de los momentos nucleares $\hat{P}$ y, en consecuencia, conmuta con las coordenadas nucleares R_α . Además, cuando se desprecia el movimiento de los núcleos, ambos Hamiltonianos pueden considerarse aproximadamente iguales. Por lo tanto, las coordenadas nucleares $\hat{R}$ también conmutan con H_{tot} . Sobre esta base, la aproximación de núcleo fijo podría justificarse en los siguientes términos: puesto que la molécula se encuentra en un estado estacionario su estado es un autoestado de H_{tot} y, por lo tanto, tiene un valor definido de su energía total. A su vez, si H_{tot} tiene un valor definido, las coordenadas nucleares R_α , que conmutan con él también tienen un valor definido, y esto significa que se encuentran en posiciones definidas en el espacio.

Si bien aparentemente razonable, esta justificación encierra un supuesto no explicitado: el valor definido de la energía. En efecto, los autoestados del Hamiltoniano H_{tot} definen una base (o una base de proyectores, si es degenerado) del espacio de Hilbert. Como afirman Olimpia Lombardi y Mario Castagnino (2010, p. 163): “pero hay muchos otros observables que no conmutan con H_{tot} , los cuales definen diferentes bases. ¿Por qué la autobase de H_{tot} , y no de cualquier otro observable que no conmuta con H_{tot} , se elige para expresar $|\psi\rangle$? Además, el teorema de Kochen y Specker (1967) nos enseña que todos los observables de un sistema cuántico no pueden tener valores definidos simultáneamente, y por lo tanto, debe decidirse acerca del subconjunto “privilegiado” de observables con valor definido ¿Por qué el Hamiltoniano H_{tot} es uno de esos observables privilegiados?” (Los autores también discuten el supuesto del vínculo autoestado-autovalor y señalan sus limitaciones).

Por todo lo dicho podemos afirmar que la aproximación de Born-Oppenheimer no introduce una aproximación que puede, en principio, eliminarse en un proceso de des-idealización. Muy por el contrario, se basa en supuestos que resultan contradictorios ciertos principios de la propia teoría. Para utilizar una analogía en el ámbito no cuántico: no se trata de calcular el movimiento de un cuerpo sobre una superficie suponiéndola sin fricción porque el rozamiento es muy bajo, sino de suponer en el ámbito relativista que un cuerpo se mueve a una velocidad superior a la velocidad de la luz. En el primer caso, el supuesto puede eliminarse reintroduciendo la fricción y obteniendo una descripción más precisa del movimiento del cuerpo. El segundo caso, en cambio, viola uno de los principios básicos de la teoría especial de la relatividad, por el cual ningún cuerpo puede moverse a una velocidad superior a la de la luz.

Es importante resaltar que la justificación de la aproximación de Born-Oppenheimer no es una cuestión marginal en la química ya que se trata de un recurso que está a la base de la definición de la estructura molecular, que constituye “el dogma central de la ciencia molecular” (Woolley 1978, p. 1074). En esta línea Hendry afirma que “la estructura molecular es tan central para las explicaciones químicas que explicar la estructura molecular es casi como explicar la química completa” (Hendry, 2010, p. 183). Siendo así, y por lo expuesto anteriormente, se puede aseverar que los supuestos no-cuánticos ingresan en el núcleo mismo del tratamiento de las moléculas. Como afirma Guy Woolley, si describiéramos la molécula solo a partir de “primeros principios”

“no sería posible siquiera calcular los parámetros más importantes en química, esto es, aquellos que describen la estructura molecular” (Wooley, 1978, p. 1074).

En general, quienes defienden la reducción de la química molecular a la mecánica cuántica tienden a subestimar la ruptura conceptual entre ambos ámbitos y confían en que las entidades de la química molecular pueden ser caracterizadas exclusivamente en términos cuánticos. Sin embargo, aun Hinne Hettema, quien en su libro *Reducing Chemistry to Physics* caracteriza la relación entre química y física desde lo que denomina un concepto nageliano “naturalizado” de reducción, reconoce que la aproximación de Born-Oppenheimer, ubicándose en el núcleo duro del programa de investigación en química cuántica, es lo que “nos permite poner entre paréntesis temporalmente algunos de las inquietudes de principio que surgen de la aplicación de la teoría cuántica a la química” (Hettema, 2012, p. 190). Incluso más allá del caso de la aproximación de Born-Oppenheimer, Hettema admite que la aplicación de la mecánica cuántica a la química exige la formulación de modelos no basados en principios (*unprincipled*). Según el autor la práctica efectiva de la química cuántica pone de manifiesto que las estrategias propias de la disciplina “pueden sacar los conceptos de contexto y reutilizarlos de un modo no admisible para la teoría en la cual tales conceptos fueron originalmente introducidos” (Hettema, 2012, p. 337).

2.3 — Modelos polinucleares: el problema de la simetría

Hasta aquí se ha considerado el problema de la justificación de la aproximación de núcleo fijo propia de la aproximación de Born-Oppenheimer. Sin embargo, la formulación de modelos moleculares conlleva dificultades que no dependen de la aproximación de Born-Oppenheimer y que podrían subsumirse, siguiendo a Woolley y Sutcliffe (1977), bajo el nombre de ‘*problema de la simetría*’. En efecto, si las interacciones entre los componentes de la molécula son coulombianas, las soluciones de la ecuación de Schrödinger poseen simetría esférica; resultado éste independiente y previo a toda aproximación. Esto significa que, según la mecánica cuántica, una molécula en un autoestado de energía no podría poseer propiedades direccionales. Sin embargo, como es bien sabido, la asimetría de las moléculas poliatómicas es esencial para la explicación de su comportamiento químico.

Un caso particularmente relevante que pone de manifiesto el problema de la simetría es el caso de los *isómeros ópticos*. Se denominan isómeros los compuestos cuyas moléculas tienen el mismo número del mismo tipo de átomos, pero difieren en propiedades físicas y/o químicas. En el caso de los isómeros ópticos o enantiómeros, cada miembro del par es una imagen especular del otro, y se los distingue como dextrógiros o levógiros por su propiedad de rotar el plano de polarización de la luz polarizada en direcciones opuestas. La propiedad que distingue a los miembros de un par de isómeros ópticos se denomina *quiralidad*. Las moléculas quirales tienen una importante función en las reacciones enzimáticas de sistemas biológicos: muchas drogas farmacológicas son quirales, y generalmente sólo uno de los miembros del par exhibe actividad biológica. Por ejemplo, el aspartamo es un agente edulcorante con dos enantiómeros: uno de ellos es más de cien veces más dulce que la sacarosa; el otro es insípido o ligeramente amargo. Un caso dramático de la diferente actividad biológica de los enantiómeros fue el de la talidomida, una droga de fórmula molecular $C_{13}H_{10}N_2O_4$, lanzada al mercado en 1957 para calmar las náuseas durante el

embarazo: mientras uno de los enantiómeros tenía el efecto deseado, el otro era un agente teratógeno que causó terribles malformaciones en decenas de miles de casos. Sin embargo, puesto que el Hamiltoniano de una molécula sólo depende de las distancias entre sus componentes, en ambos enantiómeros el Hamiltoniano es exactamente el mismo. En este sentido la mecánica cuántica por sí sola no puede dar cuenta de la isomería² Esto es considerado por muchos químicos cuánticos como uno de los problemas centrales de la disciplina. En palabras de Woolley (1998, p. 3), “la existencia de isomería, y la propia idea de estructura molecular que la racionaliza, permanece como un problema central para la físico-química”. Y más recientemente: “¡Claramente, entonces, un autoestado de H no corresponde a una molécula clásica con estructura! Esta observación plantea la pregunta: ¿cuáles son las ecuaciones que determinan el estado cuántico de las moléculas? Más allá de la aproximación BO [Born-Oppenheimer], no tenemos idea.” (Sutcliffe & Woolley 2012, p. 416). En resumen, el problema de la distinción mecánica cuántica de los isómeros ópticos de la misma sustancia está más allá de la aproximación de Born-Oppenheimer y sus supuestos subyacentes. Es un problema que apunta a una dificultad en los intentos de explicar la química molecular en términos de las soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger para sistemas químicos.

3 — Una independencia conceptual

Por todo lo expuesto, podemos afirmar que un rasgo característico y fundamental, que consideramos puede ser el punto de inflexión en lo que respecta a la necesidad de aceptar la existencia de una independencia conceptual de los modelos respecto a las teorías, es que en la construcción de los modelos moleculares intervienen dos dominios teóricos diferentes e incompatibles: el clásico y el cuántico. El dominio cuántico aporta la ecuación de Schrödinger para la determinación de los niveles de energías. El dominio clásico, a través de la química estructural, aporta la geometría de la molécula, dada por las posiciones fijas de los núcleos en el espacio. Ambos dominios teóricos conceptualmente incompatibles contribuyen esencialmente a la construcción de los modelos moleculares.

El caso de los modelos utilizados en química cuántica brinda una nueva perspectiva para abordar el problema de la relación entre teorías y modelos. A diferencia del modelo de London y London del efecto Meissner ampliamente tratado por la literatura especializada (Suárez 1999, 2009, Suárez & Cartwright 2008, French y Ladyman, (1997) , así como de otros ejemplos analizados, como el modelo de fluidos viscosos formulado en 1904 por Ludwig Prandtl (ver Morrison, 1999), los modelos moleculares en química cuántica no son modelos fenomenológicos que surgen directamente de los insumos que suministra la actividad experimental en un cierto entorno teórico. Por el contrario, se tratan de constructos sumamente teóricos cuyas consecuencias empíricas se contrastan indirectamente. Pero también y precisamente por ello, es que se cons-

2 La decoherencia inducida por el ambiente (EID) ha sido considerada por diferentes autores (Primas, 1983; Scerri, 2011) como una posible respuesta cuántica al problema de los isómeros. Sin embargo, consideramos que los intentos no han sido satisfactorios para resolver el problema de la medición en cuántica. Para ver una descripción mas detallada ver (Fortin, Lombardi, Martínez , 2016)

truyen sobre la base de aproximaciones; aproximaciones que, como explicamos, no pueden ir eliminándose paulatinamente con la expectativa de obtener una descripción más precisa y teóricamente consistente. En efecto, en el caso de la superconductividad la relativa independencia del modelo respecto de la teoría vigente admite ser interpretada como provisoria y “remediable” por el ulterior desarrollo de la ciencia. En cambio, para el caso de los modelos moleculares, la utilización de teorías incompatibles no puede interpretarse como un recurso contingente a ser superado. Esto se debe a que el supuesto del núcleo fijo se encuentra en el núcleo mismo de la química cuántica como disciplina científica. Como afirma Hasok Chang:

Podría decirse que la mecánica cuántica de Schrödinger, ya desde su primer uso para un sistema de la vida real, nació con el supuesto del núcleo fijo. Debe enfatizarse nuevamente que esto no es algo que surge por la necesidad de aproximación, sino algo entretelado en la propia trama de la teoría cuántica elemental. El marco teórico de la mecánica ondulatoria de Schrödinger no brinda margen alguno para teorizar acerca del estado del núcleo (Chang 2015, p. 199).

En otras palabras, adscribir carácter provisorio y superable al modo en que se recurre a teorías incompatibles en química cuántica no es más que adscribir carácter provisorio a la mecánica cuántica misma, una tesis que puede resultar razonable en el marco de la filosofía de la ciencia, pero que es lógicamente previa a la discusión sobre la relación entre teorías y modelos y que no se relaciona con ella.

Por lo tanto, por sus peculiares características, el caso de los modelos moleculares de la química cuántica brinda nuevos elementos respecto de la relación entre teoría y modelos. Mientras que el caso de los superconductores no logra dirimir la cuestión³, el análisis de los modelos moleculares puede colaborar a superar el *impasse* en que se encuentra la discusión en relación al estatus epistémico que tienen las teorías en el proceso de construcción del conocimiento científico. En efecto, siendo que un modelo molecular involucra teorías incompatibles (a saber: la mecánica cuántica y la mecánica clásica), cabe preguntarse respecto a cuál de ellas el modelo en cuestión se constituye como hacedor de verdad. En otras palabras, hasta qué punto es posible continuar sosteniendo que el principal papel que cumplen los modelos en ciencia es el ser elementos de prueba confirmatorios de la teoría. La existencia de modelos que integran constructivamente y de un modo empíricamente exitoso teorías incompatibles puede utilizarse incluso como argumento para poner en cuestión la interpretación realista de las teorías científicas. Desde esta perspectiva la teoría dejaría de ser una entidad a ser confirmada mediante sus modelos precisamente porque, tal como muestra el caso de los modelos moleculares, no existiría nada como los modelos de una teoría. Dado que algunos modelos no se obtienen a partir de una teoría en particular sino por la combinación de dos marcos teóricos incompatibles, el éxito de los

3 En efecto, mientras que Mauricio Suarez y Nancy Cartwright (Suarez 1997; Suarez y Cartwright 2008), aceptando que en el modelo de los hermanos London la independencia es relativa, consideran que, aun así, ella aboga a favor de un punto de vista instrumentalista de las teorías; en cambio Bueno, French, Ladyman y da Costa pretenden minimizar tales consecuencias epistémicas precisamente apelando a que tal independencia es solo relativa y temporal (ver Bueno, French y Ladyman 2002 y da Costa & French, 2000).

modelos no podría, dada la incompatibilidad manifiesta, ser interpretada como elementos confirmatorios de ellos. En este sentido, la tesis de cobertura o dependencia legal propia de la concepción semanticista de la ciencia no sería una interpretación adecuada o suficiente para explicar la práctica científica. Es por ello que, en el marco de la química cuántica, abogamos por una interpretación de las teorías científicas no como estructuras susceptibles de ser verdaderas o falsas, sino como instrumentos útiles para la construcción de modelos.

Podría argüirse, sin embargo, que, a pesar de lo recién señalado, las teorías continúan representando principios directrices en el quehacer científico. Si bien esto es cierto, no constituye un contra-argumento en favor de la concepción teórico- dependiente de los modelos ya que el caso de los modelos moleculares no pretende mostrar que las teorías no cumplen función alguna en la construcción de los modelos. Por el contrario, en este caso las teorías juegan un papel protagónico en la medida en que, como dijimos precedentemente, no se trata de modelos fenomenológicos sino de modelos sumamente teóricos. Pero el hecho de que las teorías sean necesarias no implica una relación de dependencia entre éstas y los modelos. En efecto, los modelos moleculares, si bien contienen elementos o principios prescritos por las teorías, se constituyen autónomamente ya que toman de ellas sólo aquello que necesitan para representar las moléculas, sin importar si tales elementos generan o no contradicciones en el ámbito teórico. En este sentido, la crítica a la concepción teórico-dependiente no requiere ni supone una prescindencia de las teorías. Simplemente advierte que los cambios en los modelos no pueden ser interpretados como meras des-idealizaciones dirigidas a representar los fenómenos con mayor detalle y precisión ya que, en ocasiones, las rectificaciones necesarias, aun cuando se dieran en un marco teórico de referencia, no encuentran legitimadas por éste.

4 — Conclusión

En el presente trabajo hemos intentado contribuir al debate acerca de la relación entre las teorías y los modelos utilizados en la práctica de la ciencia a través de un ejemplo científico que no ha sido tenido en cuenta en el contexto de esta discusión. Los modelos moleculares propios de la química cuántica presentan la peculiaridad de integrar ineludiblemente teorías incompatibles, provenientes de los dominios clásico y cuántico. Esta característica puede utilizarse para argumentar no sólo que las teorías no “contienen” en sí mismas el conjunto de todos sus modelos, sino y fundamentalmente, que los modelos se construyen de un modo independiente de las teorías. Los modelos moleculares adquieren un estatus autónomo puesto que, en la medida en que resulte pragmáticamente necesario, integran elementos teóricos de dominios incompatibles. Siendo así, consideramos también, que el caso de los modelos moleculares puede aportar originales argumentos a favor de una concepción instrumentalista de las teorías científicas en el ámbito de la química cuántica ya que simplemente se constituirían como herramientas útiles para la construcción de modelos.

Por último, afirmamos que el caso evidencia una independencia de los modelos respecto de las teorías que no puede interpretarse como provisoria y contingente. En efecto, según nuestro entender la independencia adquiere un carácter conceptual debido a que la incompatibilidad teórica generada a partir de la introducción del supuesto del núcleo fijo no es sólo constitutiva del

proceso de modelización, sino, y fundamentalmente, constituyente de toda una disciplina sumamente fructífera como es la química cuántica.

REFERÊNCIAS

- BORN, M. & OPPENHEIMER, J. Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik*, **84** (20): 457-484, 1927. Versión en castellano en http://www.accefyn.org.co/revista/Vol_22/84/375-391.pdf
- BUENO, O., FRENCH, S. & LADYMAN, J. On representing the relationship between the mathematical and the empirical. *Philosophy of Science*, **69** (3): 452-473, 2002.
- CHANG, H. Reductionism and the relation between chemistry and physics. In: Arabatzis, T.; Renn, J.; Simoes, A. (eds), *Relocating the history of science: Essays in honor of Kostas Gavroglu*. New York: Springer, 2015. Pp.193-209.
- DA COSTA, N & FRENCH, S. Models, theories and structures: Thirty years on. *Philosophy of Science* **67**: S116-S127, 2000.
- DA COSTA, N. & FRENCH, S. *Science and partial truth: A unitary approach to models and scientific reasoning*. New York: Oxford University Press, 2003.
- FORTIN, S.; LOMBARDI, O.; MARTÍNEZ GONZÁLEZ, J. Isomerism and decoherence. *Foundations of Chemistry* **18** (3): 225-40, 2016.
- FRENCH, S. & LADYMAN, J. Superconductivity and structures: Revisiting the London account. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **28** (3): 363-393, 1997.
- FRENCH, S. & LADYMAN, J. A semantic perspective on idealization in quantum mechanics. In: Shanks, N. (ed.), *Idealization VIII: Idealization in contemporary physics*. [Poznan Studies in the Philosophy of the Sciences and the Humanities]. Amsterdam: Rodopi, 1998. Pp. 51-74.
- FRENCH, S. & LADYMAN, J. Reinflating the semantic approach. *International Studies in the Philosophy of Science* **13** (2): 103-121, 1999.
- HENDRY, R. F. Ontological reduction and molecular structure. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **41** (2): 183-191, 2010.
- HETTEMA, H. *Reducing chemistry to physics. Limits, models, consequences*. Groningen: Rijksuniversiteit Groningen, 2012.
- HUGHES, R. I. *The structure and interpretation of quantum mechanics*. Cambridge MA: Harvard University Press, 1989.
- KOCHEN, S. & SPECKER, E. The problem of hidden variables in quantum mechanics, *Journal of Mathematics and Mechanics*, **17**: 59-87, 1967.
- LOMBARDI, O. & CASTAGNINO, M. Matters are not so clear on the physical side. *Foundations of Chemistry* **12** (2): 159-66, 2010.
- MORRISON, M. Models as autonomous agents. In: Morgan, M. & Morrison, M. (eds.). *Models as mediators*. Cambridge: Cambridge University Press, Pp. 38-65, 1999.
- PRIMAS, H. *Chemistry, Quantum mechanics and reductionism*. Berlin: Springer. 1983
- SCERRI, E. R. Editorial 37. *Foundations of Chemistry*, **13**: 1-7, 2011.

SUÁREZ, M. The role of models in the application of scientific theories: Epistemological implications. In: Morgan, M. & Morrison, M (eds.). *Models as mediators*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999. Pp. 168-196.

SUÁREZ, M. *Fictions in science. Philosophical essays on modeling and idealization*. New York: Routledge, 2009.

SUÁREZ, M. & CARTWRIGHT, N. Theories: tools versus models. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **39** (1): 62-81, 2008.

SUTCLIFFE, B. T. & WOOLLEY, R. G. Atoms and molecules in classical chemistry and quantum mechanics. In: Hendry, R. F. & Woody, A. (eds), *Handbook of Philosophy of Science*. Vol. 6 [Philosophy of Chemistry]. Oxford: Elsevier, 2012. Pp. 387-426.

WOLLEY, R. G. Must a molecule have a shape? *Journal of the American Chemical Society*, **100** (4): 1073-1078, 1978.

WOLLEY, R. G. Is there a quantum definition of a molecule? *Journal of Mathematical Chemistry*, **23** (3): 3-12, 1998.

WOLLEY, R. G. & SUTCLIFFE, B. T. Molecular structure and the Born-Oppenheimer approximation, *Chemical Physics Letters*, **45** (2): 393-398, 1977.