



Introducción a la Filosofía de la Química

Martín Labarca - Sebastian Fortin (Eds.)

En la filosofía contemporánea de las ciencias, una de las subdisciplinas de mayor crecimiento en las últimas décadas ha sido la filosofía de la química, cuyo origen se remonta a mediados de la década de 1990. El gran interés que ha despertado la disciplina en América Latina ha sido muy significativo para el campo. Este libro pretende llenar un vacío en el ámbito latinoamericano, colocando en primer plano las perspectivas que emergen de diferentes enfoques disciplinarios. El volumen incluye colaboraciones de investigadores de Chile, Brasil y Argentina. Los trece capítulos se proponen reflejar el estado del arte de cada uno de los tópicos tratados, mostrando aspectos de la ciencia química desde diferentes perspectivas de análisis. El propósito general es introducir a educadores y estudiantes de química, así también como a químicos, historiadores y filósofos de la ciencia en los debates actuales más relevantes en el ámbito de la filosofía contemporánea de la química.



BellaTerra
Sociedad Chilena de Didáctica,
Historia y Filosofía de la ciencia

Introducción a la Filosofía de la Química / Labarca, Martín; Fortin, Sebastian (Editores). 1° edición, Sociedad Chilena de Didáctica, Historia y Filosofía de la Ciencias Bella Terra Ltda., Santiago de Chile, Chile, 2023.

1. Filosofía de la química. 2. Historia de la química. 3. Fundamentos de la química.

Editores

Martín Labarca

CONICET y Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires, Argentina.

Sebastian Fortin

CONICET y Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires, Argentina.

Autores

Ronei Mocellin, Universidade Federal do Paraná, Brasil.

Luciana Zaterka, Universidade Federal do ABC, Brasil.

Alfio Zambon, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina.

Fiorela Alassia, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina.

Cristian López, Universidad de Buenos Aires, Argentina y Universidad de Lausanne, Suiza.

María José Ferreira Ruiz, Universität Bielefeld, Alemania.

Hernán Accorinti, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Mario Quintanilla-Gatica, Universidad Católica de Chile, Chile.

Mariana Córdoba, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Martín Labarca, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Sebastian Fortin, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Título: Introducción a la Filosofía de la Química

Editores: Labarca, Martín; Fortin, Sebastian

Editorial: Sociedad Chilena de Didáctica, Historia y Filosofía de la Ciencias Bella Terra Ltda.

Lugar: Santiago de Chile, Chile

Año: 2023

Número de inscripción 2023-A-12437

ISBN 978-956-416-697-1

Diseño editorial: Martín Labarca y Sebastian Fortin

Diseño de portada: Nicolás Martínez - Maximiliano Martínez - Martín Labarca

Coordinación editorial: Martín Labarca y Sebastian Fortin

Las opiniones expuestas en los trabajos publicados en esta colección son de la exclusiva responsabilidad de sus autores.

CAPÍTULO 6

Relaciones entre química y física II: El problema de la estructura molecular

Sebastian Fortin

CONICET – Universidad de Buenos Aires

1. Introducción

El concepto de estructura molecular juega un rol central en los razonamientos y deducciones del pensamiento de un químico. Pensar a las moléculas como un conjunto de átomos con una disposición definida en el espacio y unidos por enlaces químicos tiene un gran poder predictivo y explicativo. También es un concepto muy útil en la educación química para racionalizar y visualizar fenómenos microscópicos. Sin embargo, tal concepto parece no encontrar lugar en la ontología descrita por la mecánica cuántica, ya que apela a nociones clásicas como la posición de los núcleos atómicos o la individualidad de los electrones, ambas ideas fuertemente desafiadas en el contexto cuántico. Aunque este problema ha atraído la atención de varios autores, la discusión está lejos de resolverse: las opiniones sobre el vínculo entre los conceptos cuánticos y la noción de estructura molecular divergen notablemente.

Muchos autores han enfatizado el choque conceptual entre la mecánica cuántica y la química molecular. De hecho, un sistema cuántico es una entidad contextual, descrita por su vector de estado representado en el espacio de Hilbert, que no se puede separar en partes, y que mantiene correlaciones no locales con otros sistemas cuánticos. En química molecular, por el contrario, una molécula es una entidad con propiedades definidas –como su forma–, representada en el espacio de 3 dimensiones y sin correlaciones no locales con otras entidades (*cfr.* Por ejemplo, Amman, 1992; Primas, 1994). Por estos motivos, el caso de la estructura molecular es un ejemplo de la problemática general que refiere a las relaciones interteóricas tan estudiadas por la filosofía general de las ciencias.

Los problemas para reconciliar las contradicciones entre la mecánica cuántica y la química estructural suelen estudiarse desde tres puntos de vista filosóficos. En primer

lugar se encuentra el reduccionismo, que cuenta con un capítulo propio en este libro. Según esta forma de pensar, la mecánica cuántica es una teoría fundamental que explica por sí misma todos los fenómenos químicos, es decir, todas las leyes y entidades utilizadas por la química pueden ser deducidas a partir de la mecánica cuántica. Siguiendo este mandato algunos autores adoptan una posición explícitamente reduccionista y abogan por reconstruir el concepto de estructura molecular dentro del marco de la teoría cuántica de los átomos en las moléculas (Hettema, 2012). En segundo lugar es posible recurrir a un esquema de jerarquía de niveles como los que plantean la Emergencia o la Superveniencia. A grandes rasgos, según este tipo de planteos la realidad se organiza en niveles cada uno con sus características ontológicas o epistémicas. Cada nivel ofrece una descripción del mundo a partir de la postulación de entidades que siguen leyes propias que no necesariamente pueden deducirse lógicamente del nivel inferior. Sin embargo subsiste la idea de jerarquía, los niveles inferiores son más fundamentales y generalmente vinculados al mundo microscópico y los niveles superiores son menos fundamentales y se los asocia al mundo macroscópico. Desde este tipo de descripción es posible argumentar que la estructura molecular, que pertenece a un nivel superior, ‘emerge’ a partir de los sistemas cuánticos fundamentales del nivel (Hendry, 2010). Finalmente la tercera opción es adoptar alguna variante de pluralismo ontológico. Según esta propuesta el esquema de la jerarquía de niveles postula una asimetría entre los niveles que en muchos casos es innecesaria. La existencia de niveles superiores e inferiores puede entenderse como una forma de reduccionismo débil que no captura apropiadamente la relación entre distintas teorías que coexisten y ofrecen descripciones del mundo contradictorias. En concreto, el pluralismo propone la coexistencia de diferentes planos de la realidad cada uno con sus propias características ontológicas y epistémicas. De este modo, cada plano ofrece una descripción del mundo que se relaciona con las otras en pie de igualdad y no jerárquicamente. En este caso implica, por un lado, conceder la existencia de un plano cuántico que habitan las partículas cuánticas en el que no existe la estructura, y por otro, reconocer la existencia de un plano químico en el que habitan las moléculas con estructura (Fortin, Labarca y Lombardi, 2022).

En este capítulo, el objetivo es exponer y analizar la contradicción fundamental que implica aceptar la estructura molecular y los axiomas de la mecánica cuántica al mismo tiempo. Por otro lado, se expondrá la forma en que las tres posiciones filosóficas atacan el problema.

2. La mecánica cuántica y el programa reduccionista

Para entender los problemas que surgen a la hora de intentar compatibilizar la mecánica cuántica con la estructura molecular es necesario primero comprender el esquema reduccionista planteado a principios del siglo XX. El surgimiento de la mecánica cuántica vino acompañado con una serie de éxitos que llenaron de optimismo a algunos científicos de la época. Para Paul Dirac, uno de los padres de la mecánica cuántica, la nueva teoría sería capaz de reducir a la química completamente:

La teoría general de la mecánica cuántica está ahora casi completa, las imperfecciones todavía permanecen en conexión con la adaptación exacta de la teoría a las ideas relativistas [...] las leyes físicas subyacentes necesarias para la teoría matemática de una gran parte de la física y la totalidad de la química son completamente conocidas y la dificultad sólo reside en que la aplicación exacta de esas leyes conduce a ecuaciones demasiado complicadas para ser resolubles. Por lo tanto es deseable que se desarrollen métodos prácticos aproximados de aplicar la mecánica cuántica, los cuales puedan conducir a una explicación de las principales características de sistemas atómicos complejos sin demasiados cálculos (Dirac, 1929, p.714)

Con estas palabras Dirac fundaba el programa de la química cuántica estableciendo sus objetivos, las dificultades que encontraría para alcanzarlos y los medios para superar esas dificultades. El objetivo de aplicar la mecánica cuántica a la química tiene la dificultad de que las ecuaciones matemáticas son muy complicadas para poder resolverlas. Por ese motivo será necesario introducir algunas aproximaciones para superar este inconveniente. Efectivamente este programa ha sido llevado adelante y continúa desarrollándose hasta la actualidad. Desde el punto de vista práctico ha tenido un éxito impresionante, sobre todo a partir de la introducción de métodos numéricos implementados en computadoras digitales. En la actualidad es posible calcular muchas propiedades de moléculas complejas con estos métodos. No obstante es necesario preguntarse si es correcto extender el éxito de la química cuántica al programa reduccionista. Para poder afirmar que se ha reducido la química a la física es necesario constatar que a partir de la aplicación de la mecánica cuántica pura se ha logrado llegar a calcular todas las propiedades de una sustancia y también explicar todos los procesos químicos a partir de argumentos mecánico cuánticos. En este punto conviene detenerse un momento a revisar cómo funciona la mecánica cuántica.

2.1. El formalismo cuántico

Para aplicar la mecánica cuántica a cualquier sistema el primer paso consiste en escribir el Hamiltoniano \hat{H} del sistema, éste es un objeto matemático que lleva la información sobre las características específicas del sistema a ser tratado. Luego, con el Hamiltoniano es posible escribir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (1)$$

donde ψ es la función de onda. Luego, resolviendo esta ecuación es posible encontrar las autofunciones φ_i del Hamiltoniano que son funciones matemáticas que representan los estados posibles del sistema que tienen energía bien definida. Si se asume que el sistema está en reposo y no ha sido excitado entonces se encontrará en el estado de mínima energía, es decir, en el estado fundamental φ_0 . Para una molécula en el estado fundamental su función de onda es φ_0 y encierra todas las propiedades del sistema que puede proveer la mecánica cuántica. Por lo tanto para el reduccionismo debería ser posible poder calcular todas las propiedades de una molécula, incluida su estructura, a partir de una función de onda que ha sido obtenida con este procedimiento.

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica una molécula es un conjunto de núcleos con carga positiva y electrones con carga negativa que interactúan mediante un potencial Coulombiano. Una molécula cualquiera tiene un número A de núcleos atómicos, cada uno de estos núcleos tiene asociado un operador momento \hat{p}_g y un operador de posición \hat{r}_g , donde g es un índice que etiqueta a cada núcleo y es un número entero entre 1 y A . Además, cada núcleo tiene su masa m_g y un número atómico Z_g . Por otra parte, la molécula tendrá N electrones con su correspondiente operador momento \hat{p}_i y su operador posición \hat{r}_i . Dado que todas las partículas están cargadas interactúan Coulombianamente todas con todo el resto, la intensidad de esta interacción depende de la carga y distancia entre ellas. El Hamiltoniano para un sistema de este tipo es el siguiente (Fortin, Lombardi y Martínez Gonzalez 2017):

$$\hat{H} = \sum_g^A \frac{\hat{p}_g^2}{2m_g} + e^2 \sum_{g < h}^A \frac{Z_g Z_h}{2m_g} \left| \hat{r}_g - \hat{r}_h \right|^{-1} + \sum_i^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - e^2 \sum_g^A Z_g \left| \hat{r}_g - \hat{r}_i \right|^{-1} \right) + e^2 \sum_{i < j}^N \left| \hat{r}_j - \hat{r}_i \right|^{-1} \quad (2)$$

donde e es la carga del electrón y m_e su masa. A partir de este Hamiltoniano, el procedimiento indica que resolviendo la ecuación de Schrödinger sería posible encontrar la función de onda y obtener la estructura molecular. Sin embargo se presentan varios inconvenientes entre los cuales se encuentran

- i. El problema de los núcleos fijos: El principio de Heisenberg según el cual una partícula cuántica no puede tener posición y velocidad definidas al mismo tiempo entra en contradicción con la idea de núcleos fijos formando una estructura.
- ii. El problema de las $3N$ dimensiones: La función de onda no está definida en el espacio tridimensional sobre el que se define la estructura molecular.
- iii. El problema de las simetrías: Las simetrías del Hamiltoniano cuántico de una molécula entran en contradicción con la estructura de algunas moléculas

Los problemas de compatibilidad entre la mecánica cuántica y la estructura molecular han sido tratados extensamente en la filosofía de la ciencias y no se reducen a los tres mencionados. Sin embargo, debido una cuestión de espacio y a que resultan muy ilustrativos, en este capítulo se mostrará el modo en que las distintas perspectivas filosóficas atacan estos tres problemas. Como se ha mencionado, históricamente la posición predominante ha sido el reduccionismo y los tres problemas representan un desafío para su programa. Por lo tanto, desde esta posición la estrategia consta en desarrollar mecanismos que permitan dan una respuesta a las dificultades sin salirse de la mecánica cuántica. Por su parte, desde la jerarquía de niveles y el pluralismo se argumenta que dichos desarrollos vuelven el problema más complejo pero no logran cumplir su objetivo. A continuación se presenta una formulación detallada de los problemas y algunos de estos desarrollos.

3. El problema de los núcleos fijos

Como dijera Dirac, no se dispone de las herramientas de cálculo o el poder computacional suficientes para resolver la ecuación de Schrödinger exactamente y por este motivo al estudiar sistemas químicos a partir de la mecánica cuántica se utilizan aproximaciones. Una de las más utilizadas es la aproximación de núcleos fijos. Esta aproximación surge a partir de considerar que la masa de los núcleos atómicos es mucho mayor que la de los electrones, por lo tanto la velocidad de los núcleos será relativamente pequeña y para

simplificar el cálculo se puede considerar que están quietos. Entonces se le asigna una posición fija a cada núcleo atómico y resulta el siguiente Hamiltoniano para los electrones

$$\hat{H} = \sum_g^A \frac{\bar{p}_g^2}{2m_g} + e^2 \sum_{g < h}^A \frac{Z_g Z_h}{2m_g} |\bar{r}_g - \bar{r}_h|^{-1} + \sum_i^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - e^2 \sum_g^A Z_g |\bar{r}_g - \hat{r}_i|^{-1} \right) + e^2 \sum_{i < j}^N |\hat{r}_j - \hat{r}_i|^{-1} \quad (3)$$

Nótese que ahora \bar{p}_g , \bar{r}_g y \bar{r}_h ya no son operadores como en (2), sino vectores ordinarios $|\bar{r}_g - \bar{r}_h|$ ahora es la distancia entre los núcleos. Los únicos operadores que persisten luego de la aproximación son los de posición y momento de los electrones. En efecto, los dos primeros términos pasan a ser constantes y pueden eliminarse de la expresión porque la energía siempre está definida a menos de una constante y si se define $\hat{V}_i(\hat{r}_i) = -e^2 \sum_g^A Z_g |\bar{r}_g - \hat{r}_i|^{-1}$ entonces se obtiene un Hamiltoniano más simple para los electrones

$$\hat{H} = \sum_i^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + \hat{V}_i(\hat{r}_i) \right) + e^2 \sum_{i < j}^N |\hat{r}_j - \hat{r}_i|^{-1} \quad (4)$$

Entonces el problema se transforma completamente: se pasa de un *Hamiltoniano de la molécula* a un *Hamiltoniano de los electrones en la molécula*. Resolver la ecuación (1) con el Hamiltoniano (4) resulta más realista para las computadoras actuales, y las energías calculadas coinciden con las medidas en el laboratorio, por lo que se lo considera un método exitoso.

El procedimiento aquí descrito resulta exitoso en la práctica y nadie cuestiona su uso, pero su interpretación es motivo de debate. En el contexto de la discusión sobre la estructura molecular el paso de interés es el de considerar que los núcleos atómicos están fijos. En este punto es importante recordar que en mecánica cuántica las partículas se encuentran deslocalizadas y el principio de indeterminación de Heisenberg prohíbe que una partícula cuántica tenga la posición y la velocidad bien definidas. Esto muestra que los principios de la mecánica cuántica entran en franca contradicción con el concepto de estructura. Teniendo esto en cuenta, desde las posiciones antireduccionistas se señala que la mecánica cuántica no es capaz de explicar la estructura molecular por sí misma, sino que tiene que apelar a procedimientos ajenos a la teoría que entran en contradicción con sus postulados. De este modo se afirma que no es posible realizar la reducción en forma directa y la relación entre los dos campos debe explicarse desde otro enfoque, la jerarquía de niveles o el pluralismo. O bien, para mantener una postura reduccionista es necesario

introducir algún mecanismo compatible con la mecánica cuántica que ayude a compatibilizarla con el concepto de estructura.

4. El problema de las $3N$ dimensiones

El problema de las $3N$ dimensiones, normalmente no se presenta en la práctica científica debido a que como vimos en el apartado anterior nunca se trabaja con el Hamiltoniano real de la molécula, sino con otros aproximados. No obstante, volviendo al Hamiltoniano exacto de la molécula, el problema surge a partir del tratamiento cuántico de sistemas compuestos. En el caso de un sistema que consta de una sola partícula, la función de onda es una función de 3 dimensiones. En este caso es posible identificar esas tres dimensiones con las tres dimensiones espaciales (x, y, z) que todos percibimos. Sin embargo, para un sistema de dos partículas la función de onda está definida en un espacio de 6 dimensiones, tres para una partícula y tres para la otra. Y para un sistema de N partículas la función de onda tiene $3N$ dimensiones. Este hecho es motivo de debate en la filosofía de la física y es un tema central en las discusiones sobre la interpretación de la mecánica cuántica y la construcción de su ontología. En efecto ha llevado a algunos autores a afirmar que el espacio físico real tiene $3N$ dimensiones mientras que las 3 dimensiones que percibimos en la vida cotidiana son sólo una ilusión (Albert, 2013).

En el caso de la química el espacio físico que se utiliza para representar la estructura molecular es el espacio físico ordinario de tres dimensiones. Entonces surge la dificultad de relacionar estas $3N$ dimensiones de la cuántica con las 3 dimensiones de la química. Para poder deducir la estructura molecular a partir de un procedimiento puramente cuántico primero es necesario desarrollar un método para recuperar una estructura 3D a partir de una función de onda $3ND$ que esté debidamente justificado y no viole ningún principio cuántico.

El Hamiltoniano completo de la ecuación (2) representa a un sistema con un número $A+N$ partículas cuánticas (A núcleos y N electrones) por lo que la función de onda del sistema está definida en un espacio de $3 \times (A+N)$ dimensiones. La aproximación de núcleos fijos elimina las $3A$ dimensiones de los núcleos por lo que cuando se utiliza esta aproximación se obtiene un Hamiltoniano como el de la ecuación (4) y la función de onda tiene $3N$ dimensiones. En este punto es importante tener en cuenta que aun librándose de los núcleos atómicos una molécula posee una cantidad

importante de electrones. Una molécula relativamente simple como la del ácido sulfúrico (H_2SO_4) tiene 50 electrones y las ecuaciones de estos 50 cuerpos interactuando pueden ser extremadamente complejas. Por este motivo, a pesar de que el paso del Hamiltoniano (2) al (4) representa una gran simplificación del problema las ecuaciones resultantes aún son muy complicadas como para que se puedan resolver y se aplica una segunda aproximación conocida como la Aproximación del Electrón Independiente (AEI). Este procedimiento está basado en la idea de que reemplazando la interacción entre las partículas por un potencial efectivo, es posible pensar a cada uno de los electrones por separado. Es decir, para un electrón i se define un potencial efectivo $\hat{v}_i(\hat{r}_i)$ que emula la influencia del resto de los electrones y se reemplaza el término interacción de la expresión (4) por este potencial efectivo

$$\hat{H} = \sum_i^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + \hat{V}_i(\hat{r}_i) + \hat{v}_i(\hat{r}_i) \right) \quad (5)$$

De este modo se obtiene un Hamiltoniano total que es la suma de los Hamiltonianos individuales $\hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + \hat{V}_i(\hat{r}_i) + \hat{v}_i(\hat{r}_i)$ de cada electrón y como no hay un término de interacción entre ellos se puede resolver la ecuación de Schrödinger de cada electrón por separado

$$\hat{H}_i \psi_i = E_i \psi_i \quad (6)$$

De este modo, el problema original en $3N$ dimensiones se transforma en N problemas de tres dimensiones. Por lo tanto es posible pensar que cada electrón tiene su propia energía y su propia función de onda de 3 dimensiones, es decir, ocupa un orbital determinado.

Desde el reduccionismo este cálculo se percibe como una forma de recuperar el espacio físico 3D que utiliza la química para definir la estructura. Sin embargo, un análisis detallado revela que los pasos realizados en la Aproximación del Electrón Independiente contradicen los postulados de la mecánica cuántica. En efecto, AEI no es una aproximación en el sentido convencional, sino que se trata de cambiar un sistema por otro. Nuevamente desde las posiciones antireduccionistas se argumenta que el procedimiento por medio del cual se pasa a 3 dimensiones es incompatible con la mecánica cuántica que está formulada en $3N$ dimensiones.

5. El problema de las simetrías

El tercer problema que surge está vinculado a las simetrías del Hamiltoniano, ya que las características matemáticas de la ecuación de Schrödinger hacen que las simetrías del Hamiltoniano se trasladen a la función de onda.

Cuando un cierto objeto no cambia cuando se le aplica una transformación este objeto tiene una simetría. Por ejemplo, una esfera es simétrica ante rotaciones porque el resultado de rotarla es completamente inocuo. Es decir, si se considera un esfera perfecto y se compara su estado con el que resulta después de rotarla, se encontrará que el estado es exactamente el mismo. Desde el punto de vista matemático estas transformaciones pueden representarse por un operador \mathbf{T} que se aplica a otro objeto matemático. Si al aplicar el operador \mathbf{T} a un cierto objeto queda exactamente igual que antes entonces ese objeto matemático tiene una simetría.

Sea un Hamiltoniano \hat{H} con sus autofunciones φ_n , de modo que $\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$, y una transformación de \mathbf{T} que deja invariante al Hamiltoniano, es decir $\mathbf{T}\hat{H} = \hat{H}$. Entonces es posible demostrar que las autofunciones también tienen esa simetría, es decir

$$\text{Si } \mathbf{T}\hat{H} = \hat{H} \text{ entonces } \mathbf{T}\varphi_n = \varphi_n \quad (7)$$

Esto es importante para el problema de la estructura molecular por lo siguiente. El Hamiltoniano de a una molécula genérica de la ecuación (2) corresponde a partículas interactuando a partir del potencial de Coulomb. Pero la fuerza eléctrica sólo depende de las distancias entonces el Hamiltoniano de un sistema X va a ser el mismo que el de otro sistema X' que tenga las mismas partículas respetando las mismas distancias entre ellas. Esto significa que el Hamiltoniano de una molécula es igual al Hamiltoniano de una molécula que es la imagen especular de la primera tanto en su versión exacta (2) como en su versión de núcleos fijos (4). Por lo tanto, para la mecánica cuántica un par de enantiómeros van a tener el mismo Hamiltoniano y por lo tanto las mismas autofunciones, los mismos orbitales y las mismas propiedades químicas. Sin embargo, en química es bien conocido que los enantiómeros o isómeros ópticos tienen propiedades químicas muy diferentes. Son moléculas distintas. De este modo, si para la mecánica cuántica un miembro del par es exactamente igual al otro, tiene problemas para explicar la estructura de estas moléculas.

En el caso de los enantiómeros es posible plantear un esquema similar al del problema de la medición en mecánica cuántica. Dado que el Hamiltoniano tiene simetría

ante reflexiones no distingue entre las moléculas R y S , entonces el estado fundamental de este sistema debe ser simétrico. La única opción para obtener un estado simétrico a partir de las funciones de onda ψ_R y ψ_S que corresponden a cada una de las estructuras R y S , es plantear una superposición. El estado más simple que puede obtenerse a partir de estas restricciones es

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_R + \psi_S) \quad (8)$$

Si este es el estado de la molécula entonces el problema de los isómeros ópticos se puede replantear de siguiente modo: Si el estado del sistema es ψ ¿Por qué al realizar una medición siempre se detecta a la molécula en los estados ψ_R y ψ_S pero nunca en el estado ψ ? Es decir, ¿cómo se pasa de una superposición a un estado bien definido en una medición? que es, efectivamente, la pregunta central del problema de la medición en física cuántica.

Desde el reduccionismo se argumenta que como el problema de los isómeros ópticos es una expresión del problema de la medición, entonces no debe contarse como un problema que surge a la hora de intentar la reducción de la química a la física. Por el contrario, autores como Vanessa Seifert y Alexander Franklin (Franklin y Seifert, 2020) reconocen al problema como interno de la física y afirman que si se logra resolver el problema de la medición en física entonces automáticamente queda resuelto el problema de la estructura. Desde la perspectiva antireduccionista, sin embargo, la resolución del problema de la medición no implica resolver el problema de la estructura. En primer lugar porque el problema de la estructura es mucho más amplio que el problema de los isómeros ópticos, y en segundo lugar porque una solución al problema de la medición sólo lograría explicar por qué medimos lo que medimos en nuestros aparatos de medición pero no dice nada sobre las propiedades del sistema. La estructura de estas moléculas no sólo se manifiesta a la hora de medir su quiralidad haciendo pasar un haz de luz polarizada por una solución de esta sustancia, sino que tiene manifestaciones en el tipo de reacciones químicas en las que puede participar. Por lo tanto, explicar una medición directa de la quiralidad no resuelve el problema (Fortin y Lombardi, 2021).

Por otro lado, este problema se puede extender a todos los isómeros porque además de la simetría de reflexión, hay otras simetrías del Hamiltoniano que hace que todos los isómeros de una sustancia tengan el mismo Hamiltoniano. La expresión (2) da

cuenta de la cantidad de electrones y núcleos atómicos en una molécula pero no hay ningún parámetro que indique cual es la posición de los núcleos porque como ya se ha señalado, las partículas cuánticas no tienen posición bien definida. Por lo tanto, por poner un ejemplo, tanto el etanol y el éter dimetílico tienen la misma fórmula molecular C_2H_6O y el mismo Hamiltoniano exacto. La diferencia con los isómeros ópticos es que en este caso el etanol y el éter dimetílico no tienen el mismo Hamiltoniano de núcleos fijos justamente porque en (4) la estructura que los distingue ha sido introducida de forma ad hoc desde fuera de la mecánica cuántica. Esto significa que para la mecánica cuántica estas dos sustancias son la misma y la forma de explicar sus diferencias requiere descartar el Hamiltoniano cuántico y la introducción de información que no proviene de cálculos de primeros principios.

Finalmente, la otra simetría que presenta un inconveniente es la simetría ante rotaciones del Hamiltoniano. Es posible demostrar que el Hamiltoniano tiene simetría esférica y por lo tanto las autofunciones también van a tener simetría esférica. Esta simetría es incompatible con la noción de estructura molecular ya que la estructura de cualquier molécula rompe con esta simetría.

6. Reduccionismo, emergentismo y pluralismo

Como ya se ha adelantado, los problemas señalados en las secciones anteriores pueden ser interpretados desde distintas posiciones filosóficas, pero por cuestiones históricas el debate se desarrolla en torno al reduccionismo. Por ejemplo, el hecho de que las últimas tres secciones tengan títulos como ‘El problema de...’ revela su centralidad en el planteo ya que las cuestiones señaladas en esas secciones son un problema para el reduccionismo pero no para la jerarquía de niveles o para el pluralismo. Esta centralidad se explica a partir de las razones vinculadas a su tradición y el tipo de argumentos utilizados para defender esa posición.

6.1. El punto de vista reduccionista

La idea de reducción tiene una larga tradición tanto en la historia de la filosofía como en la historia de la ciencia. Ya en la filosofía presocrática de Mileto existía la idea de reducir la multiplicidad a la unidad a partir de la postulación de una materia fundamental con la que todo está hecho. Aunque este monismo inicial fue reemplazado más tarde por una imagen óptica basada en varios principios materiales, el intento de reducir la realidad

empírica diversificada a un reino subyacente más simple ha sido fructífera y sobrevive hasta hoy. Los grandes proyectos de la física del siglo XIX fueron concebidos en términos reduccionistas y dieron lugar a teorías muy exitosas. La mecánica estadística, bajo el supuesto de que los gases no son más que partículas en interacción mecánica y el electromagnetismo, en el Maxwell unifica una gran cantidad de fenómenos e intenta reducirlos a vibraciones mecánicas de un éter luminífero. En ambos casos, la suposición ontológica subyacente era que la naturaleza está hecha de entidades mecánicas gobernadas por la física newtoniana. Con el surgimiento de la mecánica cuántica, en cuyo desarrollo la descripción del átomo de hidrógeno fue un tema central, el paso natural fue continuar con la concepción reduccionista tomando ahora como teoría fundamental a la mecánica cuántica. Es este contexto y estimulado por el optimismo que siguió al éxito de la teoría es que Paul Dirac afirma que es posible explicar ‘toda la química’ en términos cuánticos. Una vez admitido el supuesto de reducción, éste afecta directamente al concepto de estructura molecular, ya que no es una noción auxiliar o secundaria, sino un concepto central de la química. La estructura molecular es

“el dogma central de la ciencia molecular” (Woolley, 1978, p.1074)

y

“es tan fundamental para la explicación química que explicar la estructura molecular es más o menos explicar toda la química” (Hendry, 2010, p.183)

Un representante de una postura explícitamente reduccionista es Hinne Hettema (2012), quien considera que la química molecular puede reducirse a la mecánica cuántica cuando se ajusta adecuadamente la definición tradicional de reducción. Según él, el hecho de no reconocer la reducción se debe, al menos en parte, al escaso impacto de los recientes desarrollos de la química cuántica en la filosofía de la química actual. Sin embargo, cuando se analizan en detalle las relaciones entre la química molecular y la mecánica cuántica, Hettema admite que los vínculos no proporcionan una reducción global sino sólo reducciones locales y parciales de teorías químicas particulares. Se introducen idealizaciones y aproximaciones que establecen conexiones vagas y discontinuas entre las teorías e incluso se extraen conceptos fuera de contexto para utilizarlos y de una manera inadmisibles para la teoría a la que pertenecen originalmente. En resumen, esos vínculos proporcionan una noción débil de reducción, tan débil que es posible preguntarse por qué la relación todavía se llama ‘reducción’ en lugar de ‘vínculo interteórico’.

Otra estrategia reduccionista se basa en los avances teóricos sobre el proceso de medición cuántica, en particular la decoherencia cuántica concebida como el proceso que explica el límite clásico de la mecánica cuántica. La decoherencia inducida por el entorno proporcionaría la conexión necesaria entre los conceptos clásicos de química molecular y el dominio cuántico (Trost y Hornberger, 2009). Por ejemplo, al discutir el problema de la isomería óptica, Eric Scerri señala que “este problema ha comenzado a disolverse gradualmente con la creciente comprensión del papel de la decoherencia cuántica en la física y otras disciplinas” (Scerri, 2011 y 2013). Sin embargo, en el dominio de la filosofía de la física, prevalece un profundo escepticismo sobre eficacia de la decoherencia para dar cuenta del límite clásico. Aunque afirmaciones ingenuas del tipo de que la decoherencia da una respuesta completa al problema de la medición todavía forman parte del ‘folclore’, no da solución ni al problema de la medición ni, en general, al problema del límite clásico (Bacciagaluppi, 2012).

En la actualidad, la estrategia reduccionista más fuerte con respecto a la estructura molecular está basada en la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas (TCAM), propuesta por Richar Bader en la década de los noventa (Bader, 1991). Según esta teoría, la estructura molecular se puede obtener a partir de las propiedades topológicas de la densidad de electrones del sistema, que se define en el espacio físico tridimensional. En particular, las posiciones de los núcleos atómicos se identifican con máximos relativos de la densidad electrónica recuperando así la estructura. La imagen visualmente atractiva de una molécula que ofrece TCAM lleva a algunos filósofos de la química como Hinne Hettema (2012) a afirmar que con esta teoría se resuelve el problema de la estructura molecular. Sin embargo, el optimismo debería estar moderado debido a que en la práctica TCAM se aplica a una densidad electrónica que se obtiene a través de la aproximación de núcleos fijos, por lo tanto subsiste el hecho de que no es posible calcular la estructura desde primeros principios y por otro lado no resuelve el problema de las simetrías.

En otros casos, aun admitiendo la imposibilidad de derivar la estructura molecular de la mecánica cuántica, algunos autores con espíritu reduccionista consideran que esta imposibilidad no es el resultado de un obstáculo conceptual. Por el contrario, sería consecuencia de nuestro conocimiento parcial de los sistemas moleculares en el marco teórico de la mecánica cuántica, limitación que se irá superando paulatinamente en el futuro. Ésta es la posición de Guy Woolley y Brian Sutcliffe, cuando dicen:

Nunca hemos afirmado que la estructura molecular no pueda reconciliarse con la mecánica cuántica o reducirse a ella, o que haya algo extraño en ella; nuestro reclamo es mucho más modesto. No sabemos cómo hacer la conexión (Sutcliffe y Woolley, 2011, p.94).

6.2. El punto de vista de la jerarquía de niveles

Para el reduccionismo llevado a la práctica no es posible intentar la reducción de cualquier fenómeno o entidad directamente desde la teoría fundamental sino que es necesaria una serie de pasos en los que se realizan reducciones sucesivas. Así, la química nos dice que un trozo de madera es ‘en realidad’ una disposición complicada de muchos tipos de moléculas unidas, la física atómica nos dice que las moléculas son ‘en realidad’ varios átomos unidos por fuerzas interatómicas, la teoría de las partículas nos dice que los átomos son ‘en realidad’ partículas elementales en interacción, y así sucesivamente (Rohrlich, 1988). De este modo es posible hablar de niveles, cada uno más fundamental que el anterior y la reducción en cada paso es total, entonces el único nivel ‘real’ sería el fundamental ya que todo el resto puede ser explicado a partir de este. Ante las dificultades que surgen a la hora de reducir un nivel a otro es posible relajar el requerimiento de reducción ‘total’ entre niveles. Así, en cada nivel se da lugar a ciertos grados de libertad, comportamientos o entidades que no pueden explicarse a partir del nivel inferior. De este modo se dota a cada nivel de novedad e imprevisibilidad respecto del nivel inferior y gana cierto tipo de ‘realidad’ aunque se mantenga la relación asimétrica entre ellos. En términos de Philip Anderson, el todo no es simplemente mayor que, sino esencialmente diferente de la suma de las partes (Anderson, 1972). Pero tan pronto como se intenta hacer más precisa la idea general, surgen múltiples puntos de vista, que varían de un autor a otro. Hay muchas maneras de definir estas relaciones y las diferentes formas de hacerlo dan lugar a diferentes versiones de esta idea general, por ejemplo, distintos tipos de emergencia, distintos tipos de superveniencia, etc.

En el caso de la estructura molecular suele apelarse a la emergencia, no obstante, según Jaegwon Kim:

“El término ‘emergencia’ parece tener un atractivo especial para muchas personas; tiene un tono expansivo y edificante, a diferencia de la ‘reducción’, que suena constrictiva y dominante. Ahora vemos que el término se difunde libremente, especialmente por algunos científicos y escritores científicos, con

poca consideración visible de si su uso está respaldado por un significado coherente, tolerablemente unificado y compartido” (Kim, 2006, p.547)

En efecto, hay una emergencia sincrónica y otra diacrónica, la epistémica y la ontológica, la reductiva y la no reductiva. En el caso de la estructura molecular la versión más adecuada parece la emergencia ontológica sincrónica no reductiva. Por otro lado hay desacuerdos sobre qué categorías ontológicas –objetos, propiedades, procesos, etc.- pueden ser emergentes; a veces la emergencia se identifica con otras nociones, como la superveniencia, no hay consenso sobre si la causalidad descendente es un requisito para la emergencia o no; etc. Por ese motivo defender o atacar una posición emergentista puede llegar a convertirse en un laberinto y aquí se intentará abordar el tema desde una perspectiva general.

La emergencia es una relación esencialmente asimétrica: si A emerge de B, entonces B no emerge de A. La mayoría de los emergentistas basan esta asimetría en el fisicalismo, es decir, la creencia de que no hay elementos existentes más allá de los elementos físicos, y que todas las regularidades reales dependen de las regularidades fundamentales del dominio básico de la física. Esta suposición otorga al nivel físico una prioridad ontológica sobre los niveles restantes de la realidad, y esto naturalmente apoya la prioridad teórica de la física sobre otras ciencias especiales. Sin embargo, los emergentistas fisicalistas enfrentan un problema conceptual: su punto de vista parece contradecir el principio metafísico de que algo no puede surgir de la nada (O'Connor, 1994). De hecho, si todos los elementos que pertenecen a los niveles no basales se realizan mediante elementos físicos, ¿cómo puede surgir una novedad genuina? Dicho de otro modo, si las entidades químicas no se componen de nada más que de material físico, ¿cómo se puede justificar la creencia de que existen cosas tales como propiedades químicas que contradigan la mecánica cuántica? Alexandru Manafu (2011) se pregunta,

“Dada la generalidad de la física, ¿cómo se puede preservar sustancialmente la autonomía de la química, es decir, cómo se puede considerar que la química es autónoma de una manera que va más allá de la autonomía histórica o metodológica? Si el fisicalismo es cierto, ¿podemos siquiera hablar de la autonomía ontológica de la química, en contraposición a una autonomía meramente histórica o metodológica?” (Manafu, 2011, p.10).

La asimetría esencial entre los niveles implica una dependencia óntológica: si B surge de A, B depende ónticamente de A, o, en otras palabras, A tiene prioridad óntica sobre B.

Esta dependencia generalmente se expresa en términos contrafácticos, como 'si A no existiera, entonces B tampoco existiría'. Como no hay forma de decidir el valor de verdad de una proposición contrafactual más allá de toda duda, la decisión de priorizar la ontología de alguno de los niveles se apoya en las razones científicas para aceptar la existencia de los ítems –objetos, propiedades, procesos– descritos por las mejores teorías. Sin embargo es posible evaluar la contraparte epistémica del contrafactual ontológico, ¿perderíamos el conocimiento químico sobre las moléculas si no contáramos con los recursos que aporta la mecánica cuántica? La respuesta a esta pregunta ya no pertenece al campo ontológico, sino que se refiere a lo que efectivamente sucede en la ciencia. Autores como van Brakel (2000) afirman que si la química molecular resultara estar equivocada, no descalificaría todo (o incluso cualquier) conocimiento sobre, digamos, el agua. Esto significa que la relación de dependencia entre teorías no ofrece buenos argumentos conceptuales para sustentar la dependencia ontológica de la estructura molecular en el dominio cuántico.

6.3. El punto de vista del pluralismo ontológico

Resumiendo los puntos anteriores podría afirmarse que los problemas a la hora de aplicar la idea tradicional de reducción de la química a la física llevó a la adopción de la emergencia como una perspectiva no reduccionista que superaría las dificultades de la visión reduccionista. Sin embargo, el emergentismo incorpora supuestos metafísicos sobre la dependencia ontológica del dominio molecular del reino cuántico que, lejos de estar científicamente sustentados, parecen reeditar la jerarquía tradicional de las ciencias sustentada por el positivismo. Siendo que los supuestos del reduccionismo y del emergentismo aplicados a este caso manifiestan limitaciones importantes, vale la pena considerar una tercera posición filosófica: el pluralismo ontológico.

Un camino para ilustrar los principios del pluralismo ontológico es el que se basa en la filosofía trascendental. Según Kant, existe una realidad que es independiente del sujeto cognoscente: pero es un reino nouménico, que no es objeto de nuestro conocimiento. No tiene sentido especular sobre un dominio ontológico independiente, ya que no existen elementos ónticos como objetos, propiedades o procesos en la realidad nouménica: el noumeno es inefable, sólo puede concebirse como un límite del pensamiento. El mundo, habitado por los objetos de conocimiento, resulta de la síntesis entre las categorías del entendimiento y el material proveniente de la experiencia. Por

tanto, el mundo al que se refiere nuestro conocimiento científico no es una mera ontología ‘epistemologizada’ resultante de nuestros medios contingentes de acceso a la realidad. El sistema kantiano no es una epistemología sino un marco filosófico amplio que establece las condiciones necesarias de posibilidad de conocimiento y, por tanto, de cualquier discurso científico significativo. En el campo de la filosofía de la química, Olimpia Lombardi y Martín Labarca (2005 y 2006) han adoptado un pluralismo ontológico de raíz explícitamente kantiana para defender la autonomía ontológica del mundo químico con respecto al mundo de la física. Según esta propuesta, una vez establecido que diferentes teorías son aceptadas por la comunidad científica de un mismo tiempo histórico debido a su éxito pragmático, resulta claro que diferentes reinos ontológicos pueden coexistir en la medida en que cada uno de ellos está constituido por su esquema conceptual correspondiente. Pero como no existe el punto de vista privilegiado del ‘ojo de Dios’, no existe un sólo ‘mundo verdadero’ al que deban referirse todas las descripciones. Todos los dominios ontológicos provenientes de la ciencia exitosa tienen el mismo estatuto, ya que todos ellos están constituidos por descripciones igualmente objetivas. Es desde este punto de vista que las múltiples y diferentes prácticas científicas se vuelven inteligibles.

Cuando las discusiones desarrolladas en las secciones anteriores se reconsideran a la luz del pluralismo óntico, queda claro que este marco filosófico también se puede aplicar directamente al problema de la estructura molecular. Además, los argumentos en contra de la reducción y la emergencia en este contexto se convierten en argumentos a favor del pluralismo ontológico. Como se ha mostrado, no es posible explicar la estructura de las moléculas en términos de mecánica cuántica a través de vínculos reductores directos, por este motivo no es posible acabar un buen argumento a favor de la reducción ontológica. Entonces, no es posible privar al concepto de estructura molecular de su propia referencia.

El desarrollo exitoso, fundado en sus propios conceptos y métodos, es lo que sustenta la independencia de la química molecular con respecto a la mecánica cuántica desde el punto de vista pragmático y, a la vez, es lo que socava el supuesto de una dependencia ontológica de la estructura molecular. Esto no significa ignorar el uso de los poderosos recursos cuánticos en el contexto de la química molecular, pero sí implica identificarlos precisamente como meros recursos auxiliares, herramientas siempre subordinadas al marco conceptual específicamente químico. Por lo tanto, una vez que se acepta que no hay argumentos suficientes para apoyar la dependencia ontológica, la idea

de que la estructura molecular es una propiedad emergente que surge de entidades cuánticas subyacentes pierde su componente esencial.

El pluralismo ontológico (Lombardi y Pérez Ransanz, 2012) es un marco filosófico particularmente fructífero cuando el problema es interpretar las relaciones entre ontologías descritas por teorías científicas que son exitosas desde un punto de vista empírico. Se opone a la asimetría que presupone el reduccionismo e incorpora implícitamente el emergentismo. Como no hay una perspectiva externa desde la cual se pueda describir la realidad en sí misma, no se puede adoptar un punto de vista neutral para decir que uno de los dominios tiene prioridad ontológica sobre el otro. De este modo el dominio supuestamente reducido o emergente resulta estar tan constituido como el dominio supuestamente basal. En consecuencia, la prioridad óptica del mundo físico resulta ser un mero prejuicio metafísico: conceptos como enlace, forma molecular y orbital se refieren a entidades pertenecientes al dominio ontológico de la química molecular, que sólo depende de su propio cuerpo de conocimiento. Las entidades químicas no deben su existencia a un nivel de realidad ontológicamente más fundamental, sino al hecho de que están descritas por teorías cuyo inmenso poder predictivo y creativo no puede ser ignorado.

Referencias bibliográficas

- Albert, D. (2013). Wave function realism. En: Ney, A. y Albert, D. (eds.). *The Wave Function*. New York: Oxford University Press, pp.52-57.
- Amann, A. (1992). "Must a molecule have a shape?". *South African Journal of Chemistry* 45: 29-38.
- Anderson, P. W. (1972). "More is different". *Science* 177: 393-396.
- Bacciagaluppi, G. (2012). The role of decoherence in quantum mechanics. En Zalta, E. N. (ed.). *The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Winter 2012 Edition)*, URL=<http://plato.stanford.edu/archives/win2012/entries/qm-decoherence/>
- Bader, R. (1991). "A quantum theory of molecular structure and its applications". *Chemical Reviews* 91: 893-928.
- Dirac, P. A. M. (1929). "Quantum mechanics of many-electron systems". *Proceedings of the Royal Society A* 338: 714-733.
- Fortin, S.; Labarca, M. y Lombardi, O. (2022). "On the ontological status of molecular structure: Is it possible to reconcile molecular chemistry with quantum mechanics?", *Foundations of Science*, <https://doi.org/10.1007/s10699-022-09834-4>.
- Fortin, S. y Lombardi, O. (2021). "Is the problem of molecular structure just the quantum measurement problem?". *Foundations of Chemistry* 23: 379-395.
- Fortin, S.; Lombardi, O. y J. C. Martínez González (2017). "The relationship between chemistry and physics from the perspective of Bohmian mechanics". *Foundations of Chemistry* 19: 43-59.
- Franklin, A. y Seifert, V. A. (2020). "The Problem of Molecular Structure Just Is The Measurement Problem?", [Preprint], URL: <http://philsci-archive.pitt.edu/18380/>
- Hendry, R. F. (2010). "Ontological reduction and molecular structure". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41: 183-191.

- Hettema, H. (2012). *Reducing Chemistry to Physics: Limits, Models, Consequences*. Groningen: University of Groningen.
- Labarca, M. y Lombardi, O. (2010). "Why orbitals do not exist?". *Foundations of Chemistry* 12: 149-157.
- Lombardi, O. y Labarca, M. (2005). "The ontological autonomy of the chemical world". *Foundations of Chemistry* 2: 125-148.
- Lombardi, O. y Pérez Ransanz, A. R. (2012). *Los múltiples mundos de la ciencia. Un realismo pluralista y su aplicación a la filosofía de la física*. México D.F.: Siglo XXI.
- Fernández González, A. (2010). *La inteligencia emocional como variable predictora de adaptación psicosocial en estudiantes de la Comunidad de Madrid* (Tesis doctoral). Universidad Autónoma de Madrid.
- Manafu, A. (2011). *Emergence and Reduction in Science. A Case Study* (Tesis doctoral). School of Graduate and Postdoctoral Studies, University of Western Ontario.
- O'Connor, T. (1994). "Emergent properties". *American Philosophical Quarterly* 31: 91-104.
- Primas, H. (1994). Hierarchic quantum descriptions and their associated ontologies. En: Laurikainen, K. V., Montonen, C y Sunnarborg, K. (eds.). *Symposium on the Foundations of Modern Physics 1994*. Gif-sur-Yvette: Edition Frontieres, pp.210-220.
- Rohrlich, F. (1988). "Pluralistic ontology and theory reduction in the physical sciences". *The British Journal for the Philosophy of Science* 39: 295-312.
- Scerri, E. R. (2011). "Editorial 37." *Foundations of Chemistry* 13: 1-7.
- Scerri, E. R. (2013). Philosophy of chemistry: where has it been and where is it going. En: Llored, J.-P. (ed.). *The Philosophy of Chemistry: Practices, Methodologies, and Concepts*. Newcastle: Cambridge Scholars Publishing.
- Trost, J. y Hornberger, K. (2009). "Hund's paradox and the collisional stabilization of chiral molecules". *Physical Review Letters* 103: 023202.
- van Brakel, J. (2000). The nature of chemical substances. En: Bhushan, N. y Rosenfeld, S. (eds.). *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*. New York: Oxford University Press.