



Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia

ISSN: 0124-4620

ISSN: 2463-1159

revistafilosofiaciencia@unbosque.edu.co

Universidad El Bosque

Colombia

Martínez González, Juan Camilo

LA RELEVANCIA DE LA RECONSTRUCCIÓN MODELO-TEÓRICA
PARA LA INTERPRETACIÓN DE LA QUÍMICA CUÁNTICA

Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia, vol. 18, núm. 36, 2018, -Junio, pp. 69-87

Universidad El Bosque

Bogotá, Colombia

DOI: <https://doi.org/10.18270/rcfc.v18i36.2269>

Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=41457106007>

- Cómo citar el artículo
- Número completo
- Más información del artículo
- Página de la revista en redalyc.org

redalyc.org

Sistema de Información Científica Redalyc

Red de Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal

Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso
abierto

LA RELEVANCIA DE LA RECONSTRUCCIÓN MODELO-TEÓRICA PARA LA INTERPRETACIÓN DE LA QUÍMICA CUÁNTICA^{1,2}

THE RELEVANCE OF MODEL-THEORETICAL RECONSTRUCTION FOR THE INTERPRETATION OF QUANTUM CHEMISTRY

Juan Camilo Martínez González^{3,4,5}

RESUMEN

En el presente trabajo analizo las reconstrucciones estructuralistas de la mecánica cuántica que suministra Hettema a la luz del problema de la reducción de la química a la mecánica cuántica a través de la química cuántica. La meta consiste en mostrar que esas reconstrucciones operan como un contraargumento a la posición reduccionista ya que, en realidad, no reconstruyen toda la mecánica cuántica, sino una mecánica cuántica “modificada” para los fines de la química. Finalmente subrayo el papel que esta reconstrucción de la mecánica cuántica desempeña en las discusiones acerca de los vínculos interteóricos entre química y física.

Palabras clave: Estructuralismo metateórico, química cuántica, reducción, mecánica cuántica, formalismo cuántico.

ABSTRACT

In the present work, I analyze the structuralist reconstructions of Quantum Mechanics that Hettema provides in the light of the problem of the reduction of Chemistry to quantum mechanics through Quantum Chemistry. The goal is to show that those reconstructions operate as a counter-argument to the reductionist position since, actually, they do not reconstruct all quantum mechanics, but a “modified” quantum mechanics for the purposes of Chemistry. Finally, I highlight the role that this reconstruction of Quantum Mechanics plays in the discussions about the inter-theoretical links between Chemistry and Physics.

¹ Recibido: 19 de febrero de 2018. Aceptado: 4 de julio de 2018.

² Este artículo se debe citar: Martínez González, Juan. “La relevancia de la reconstrucción modelo-teórica para la interpretación de la química cuántica”. *Rev. Colomb. Filos. Cienc.* 18.36 (2018): 69-87.

³ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - Universidad de Buenos Aires (UBA) - Becario posdoctoral. Correo electrónico: olimac62@hotmail.com.

⁴ Patrocinador: Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).

⁵ Buenos Aires, Argentina.

Keywords: Metatheoretical structuralism, Quantum Chemistry, reduction, Quantum Mechanics, Quantum Formalism.

1. INTRODUCCIÓN

La multifacética relación entre química y física es uno de los temas más discutidos en la filosofía de la química desde sus inicios. En su libro *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*, Hinne Hettema (2012) concibe esta relación como un vínculo reductivo y defiende esta posición sobre la base de un concepto “naturalizado” de reducción nageliana, que admite una serie de modificaciones que debilitan significativamente el esquema original. Con ese fin, introduce los principales conceptos del enfoque estructuralista siguiendo el trabajo canónico de Wolfgang Balzer, Ulises Moulines y Joseph Sneed, y centra su atención en la noción de reducción que brinda este enfoque. Sobre esta base, Hettema proporciona una reconstrucción estructuralista de dos versiones de la mecánica cuántica, una mecánica cuántica “simple” y una mecánica cuántica “compleja”. La principal contribución de estas reconstrucciones es que ponen claramente de manifiesto los supuestos necesarios para vincular la química estructural y la mecánica cuántica a través de la química cuántica.

El objetivo del presente trabajo es analizar las reconstrucciones estructuralistas de la mecánica cuántica que suministra Hettema a la luz del problema de la reducción de la química estructural a la mecánica cuántica a través de la química cuántica. La meta final consiste en mostrar que, cuando se las considera detenidamente, esas reconstrucciones operan como un contraargumento a la posición reduccionista del mismo autor ya que, en realidad, no reconstruyen la mecánica cuántica en todo su formalismo, sino una mecánica cuántica “modificada” para los fines de la química cuántica. Con este propósito, en la segunda sección, se revisan las características principales de los campos científicos involucrados en el presente debate: la química estructural, la química cuántica y la mecánica cuántica. En la tercera, se retoman las reconstrucciones estructuralistas de la mecánica cuántica ofrecidas por Hettema. Sobre esta base, la cuarta sección se dedica al análisis crítico del trabajo de Hettema, indicando las limitaciones de sus reconstrucciones para discutir el problema de la reducción. En la quinta, se presenta brevemente los elementos centrales de la reconstrucción

estructuralista de la mecánica cuántica propuesta por F. A. Muller, a fin de señalar que dicha reconstrucción no posee las limitaciones de la que ofrece Hettema. Finalmente, en las conclusiones se resume la argumentación desarrollada y se subraya el papel que la reconstrucción estructuralista de la mecánica cuántica desempeña en las discusiones acerca de los vínculos interteóricos entre química y física.

2. QUÍMICA ESTRUCTURAL, QUÍMICA CUÁNTICA Y MECÁNICA CUÁNTICA

Como todos los campos científicos, la química se despliega en diferentes áreas teóricas que mantienen relaciones de diferente grado y naturaleza entre sí. Aquí nos ocuparemos de la química estructural y la química cuántica, que son las áreas más cercanas al ámbito de la física y, por tanto, son las que se encuentran más involucradas en los debates acerca de la reducción de la química a la física.

La *química estructural* es el área de la química que se ocupa de determinar la estructura y la función de las moléculas. El uso de imágenes tridimensionales de las moléculas permite a los investigadores analizar la interacción entre sus diferentes tipos e inferir las propiedades de las sustancias correspondientes. La importancia de la estructura molecular se aprecia claramente en el caso de los isómeros, esto es, sustancias que poseen la misma fórmula molecular, pero manifiestan propiedades muy distintas: la diferencia entre los isómeros no reside en sus componentes, sino en la estructura tridimensional de sus moléculas.

Desde el punto de vista filosófico, el problema central de la química estructural reside en la naturaleza de la estructura molecular, entendida como el arreglo espacial de los núcleos en una molécula. No se trata de una noción auxiliar o secundaria, sino del concepto central de la química molecular: es el elemento más importante en la explicación de la reactividad química, es “el dogma central de la ciencia molecular” (Woolley 1074). Como afirma Robin Hendry, “la estructura molecular es tan central para la explicación química que explicar la estructura molecular es casi como explicar la química en su totalidad” (2010 183). El problema consiste en que el concepto parece no encontrar un lugar apropiado en el contexto de la mecánica cuántica. Mientras que “el alfa y omega de la química molecular es la doctrina de que las moléculas existen como objetos individuales y que cada molécula posee una forma, caracterizada por su marco molecular” (Primas 216), como veremos, la idea clásica de núcleos atómicos concebidos como individuos es, al menos, fuertemente conflictiva en un

ámbito cuántico. Algunos autores conciben el problema en términos de relaciones interteóricas, como Brian Sutcliffe y Guy Woolley cuando sostienen: “Nunca hemos afirmado que la estructura molecular no pueda ser reconciliada con o reducida a la mecánica cuántica, o que existe algo ‘ajeno’ acerca de ella; nuestra afirmación es mucho más modesta. No sabemos cómo hacer la conexión” (2011 94; véase también 2012).

La *química cuántica* es la rama de la química cuyo propósito principal es la aplicación de la mecánica cuántica a los sistemas químicos a nivel molecular. Por lo general, se utiliza la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Sin embargo, esta ecuación no puede ser resuelta analíticamente para sistemas multielectrónicos, puesto que encarna, bajo diferentes formas, el problema de los múltiples cuerpos. En efecto, sus soluciones solo se pueden calcular de manera aproximada mediante diferentes técnicas, entre las cuales se cuentan las variacionales y perturbacionales. Precisamente debido a su posición peculiar entre la química y la física, en los últimos tiempos la química cuántica ha comenzado a despertar la atención de los filósofos de la química, quienes la han estudiado principalmente desde un punto de vista histórico (Simões & Gavroglu; Gavroglu & Simões) o desde una perspectiva interesada en cuestiones metodológicas (Accorinti & Martínez González; Hettema 2009, 2012; Scerri).

La aplicación de la mecánica cuántica al ámbito molecular debería resolver el ya muy debatido problema de la estructura molecular. Sin embargo, este no es el caso debido a la utilización de la denominada aproximación de Born-Oppenheimer (1927), que constituye la estrategia básica e ineludible de la química cuántica en cualquiera de sus enfoques. La estructura molecular es la geometría de equilibrio de la molécula, que corresponde al mínimo de la superficie de energía potencial generada por todos los núcleos y electrones que componen la molécula. No obstante, puesto que en la práctica tal superficie no puede ser calculada tomando en cuenta todos los componentes de la molécula, es necesario introducir aproximaciones. El paso crucial de la aproximación de Born-Oppenheimer es la llamada aproximación de núcleo fijo: los núcleos se describen como partículas clásicas en reposo en posiciones definidas, lo cual brinda la estructura molecular que produce el campo eléctrico donde se mueven los electrones. Esta aproximación suele justificarse sobre la base de intuiciones clásicas: bajo el supuesto de que la masa nuclear es mucho mayor que la masa electrónica, $M \gg m$, se introduce el límite $m/M \rightarrow 0$; puede despreciarse así la energía

cinética de los núcleos y, en consecuencia, se pueden considerar en reposo en posiciones definidas. Sin embargo, de este modo se arriba a una situación que contradice el principio de Heisenberg, ya que permite a los núcleos permanecer en posiciones definidas y en reposo, es decir, con un valor definido de momento cinético. Como afirma claramente Hasok Chang:

en esta aproximación de fijación [*«clamping-down»*], los núcleos son tratados esencialmente como partículas clásicas; esta imagen es no cuántica de un modo muy fundamental, ya que asignarles simultáneamente posiciones fijas y momentos fijos (a saber, cero) viola el principio de incerteza de Heisenberg (198).

Hendry (1998, 2010), por su parte, señala que la defensa de los modelos de Born-Oppenheimer se basa en la suposición de que usarlos en lugar de la solución exacta solo introduce una pequeña diferencia en la energía. A pesar de esto, desde un punto de vista teórico, esos modelos “simplemente asumen los hechos sobre la estructura molecular que deberían explicarse” (Hendry 2010 186). En definitiva, la aproximación de Born-Oppenheimer, con su aproximación de núcleo fijo, no es una mera estrategia inocente que admite defensa en un contexto reduccionista. No solo introduce la estructura molecular “con la mano” de una manera que no se puede derivar de la mecánica cuántica, sino que lo que agrega a la mecánica cuántica contradice los principios mismos de la teoría.

Con la mecánica cuántica ya nos encontramos fuera de la química: se trata de la teoría física que se ocupa de la descripción de la naturaleza a escalas atómica y subatómica. A pesar de ser una de las más exitosas teorías físicas de la historia, sus dificultades de fundamentación continúan tan vigentes como en los días de sus primeras formulaciones. Esta desconcertante situación se comprende cuando se toman en cuenta los problemas ontológicos que surgen ante todo intento de interpretación. Aquí no nos ocuparemos del problema de la medición cuántica, ni de la no separabilidad y la indistinguibilidad cuánticas, sino que concentraremos nuestra atención en la contextualidad cuántica, por ser la característica que se constituye en mayor medida como un obstáculo para explicar la estructura molecular en términos cuánticos.

En sus orígenes, el principio de Heisenberg fue interpretado en términos epistémicos, lo cual se manifestó en su denominación como principio de incerteza: la partícula se encuentra en una posición determinada y tiene un momento cinético preciso, pero nosotros no podemos

conocerlos simultáneamente. Esta interpretación estaba a la base del llamado microscopio de Heisenberg, un experimento mental propuesto por el propio Heisenberg (1930), según el cual la medición de la posición de la partícula perturba su momento y viceversa. A pesar de la amplia difusión de esta lectura del principio de Heisenberg, el formalismo de los espacios de Hilbert sobre el que se basa la mecánica cuántica muestra a las claras que el principio nada tiene que ver con mediciones e inevitables perturbaciones, sino que es la consecuencia de una propiedad formal de la mecánica cuántica: la existencia de observables incompatibles, representados por operadores que no conmutan. La no conmutatividad es una propiedad matemática que impide que los observables incompatibles tengan valores definidos simultáneamente.

Si bien la no conmutatividad es una propiedad mucho más profunda que la mera incerteza epistémica, aún queda abierta la posibilidad de que no puedan adscribirse valores precisos a observables incompatibles debido a una limitación de las propias leyes de la mecánica cuántica. La limitación podría remediarse agregando algún tipo de “variables ocultas” que permitirían asignar valores definidos a todos los observables del sistema cuántico. Sin embargo, más recientemente, Simon Kochen y Ernst Specker presentaron un teorema fundamental que prueba, en el contexto del formalismo de los espacios de Hilbert, que cualquier asignación simultánea de valores definidos a todos los observables del sistema cuántico conduce a una contradicción lógica. Esto significa que la mecánica cuántica es en esencia contextual: solo pueden asignarse valores definidos de un modo consistente en un contexto de observables compatibles. No se trata entonces de que una partícula cuántica posea una posición definida pero no conozcamos su momento o viceversa: cualquier asignación de valores definidos a observables incompatibles está lógicamente prohibida por la propia estructura de la teoría.

Esta presentación de la contextualidad, si bien breve y carente de formalismo, parece suficiente para comprender los escollos para concebir una partícula cuántica como un individuo en el tradicional sentido filosófico del término. En efecto, las partículas cuánticas siempre tienen propiedades que no poseen valores definidos; y ello no es una limitación meramente epistémica, sino un estado cuántico de cosas descrito por la teoría. Sin duda, la cuestión de la categoría ontológica de las entidades cuánticas sigue siendo un problema

abierto. No obstante, sí puede afirmarse que se encuentran muy lejos de las entidades localizadas y distinguibles de las que habla la química estructural, cuando describe la estructura molecular a través de las posiciones espaciales de los núcleos, y de las distancias y ángulos que se calculan en forma teórica y se miden mediante técnicas ópticas.

3. RECONSTRUCCIONES ESTRUCTURALISTAS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Hettema dedica la segunda parte del libro al problema de las relaciones entre química y física mediante las herramientas provistas por el estructuralismo metateórico. En el capítulo 6, primero de esta parte, el autor proporciona una visión general de los conceptos de la propuesta estructuralista. Sobre la base de esta tarea inicial, en el siguiente capítulo, emprende la reconstrucción de la mecánica cuántica y la química cuántica, con el fin de aclarar las relaciones entre estas dos disciplinas. El objetivo final es analizar cómo la química cuántica se puede clasificar como mecánica cuántica y si también puede considerarse química. Aquí solo me enfocaré en el primer aspecto, que manifiesta claramente la presuposición del autor de que la química cuántica “es un miembro de las teorías de la mecánica cuántica” (Hettema 2012 256).

Para analizar dicho aspecto, el paso inicial es proporcionar una reconstrucción estructuralista de la mecánica cuántica. Hettema distingue entre una forma “simple” y una “compleja” de mecánica cuántica (2012 255). La primera, a diferencia de la segunda, no incluye los conceptos de estado cuántico y de probabilidad. Según el autor, una gran parte de la química cuántica se puede caracterizar en términos de la forma simple de la mecánica cuántica. Además, considera que los problemas interpretativos que normalmente se conciben como obstáculos para la reducción surgen solo en la forma compleja:

las preocupaciones expresadas especialmente por Primas (1981) sobre la reducibilidad de la química se relacionan con una forma “compleja” de mecánica cuántica, en la cual los asuntos de una función de estado cuántico y la distribución de probabilidad aceptable desempeñan un papel importante (2012 255).

Por lo tanto, Hettema comienza por la reconstrucción de la forma simple y luego agrega los componentes que convierten la mecánica cuántica simple en una versión completa de la teoría.

Según el autor, la mecánica cuántica simple se basa en los conceptos de sistema, espacio de Hilbert, operador y espectro. Sobre esta base, define la estructura mínima para la mecánica cuántica como una estructura Q_S (Hettema 2012):

Definición 1: x es una caracterización de una mecánica cuántica simple, $x \in Q_S$, si y solo si,

- (1) $x = \langle S, H, \hat{A}, \sigma(\hat{A}) \rangle$;
- (2) S es un sistema de partículas;
- (3) H es un espacio de Hilbert separable;
- (4) \hat{A} es un operador en H ;
- (5) $\sigma(\hat{A})$ es el espectro de \hat{A} .

Como puede observarse, la mecánica cuántica simple no utiliza los conceptos de estado cuántico o probabilidad. Hettema afirma que “en muchos casos en la química cuántica, la mecánica cuántica simple es suficiente para nuestro propósito” de determinar cómo la química cuántica puede considerarse mecánica cuántica (Hettema 2012 264)⁶. En estos casos, el operador \hat{A} será el operador hamiltoniano \hat{H} . La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo puede escribirse (tomando $\hbar = 1$):

$$i \frac{d\psi}{dt} = H \psi$$

Los modelos de la mecánica cuántica simple son los modelos potenciales que satisfacen la ecuación de Schrödinger.

A continuación, Hettema brinda la formulación de la mecánica cuántica compleja, que parte de la estructura de la mecánica cuántica simple, a la que se agregan dos componentes que “completan” la versión compleja: el operador de estado cuántico y la medida de probabilidad.

⁶ Agradecemos a un árbitro anónimo el señalar que, en su gran mayoría, los enfoques actuales de la química cuántica, como la teoría del funcional de la densidad (DFT) y la teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM), se basan en el análisis de densidades de probabilidades electrónicas y, por lo tanto, no pueden ser incluidos en esta “versión simple” de la mecánica cuántica presentada por Hettema. Coincido plenamente con esta observación, y por ello se incluye más adelante la reconstrucción de Muller, que supera esta limitación de la propuesta de Hettema.

El primero asigna un estado físico específico a una función en el espacio de Hilbert. El segundo se define mediante la regla de Born para el espectro del observable. Sobre esta base, una mecánica cuántica compleja ahora se caracteriza como una estructura Q_C (Hettema 2012):

Definición 2: x es una caracterización de una mecánica cuántica compleja,

$x \in Q_S$, si y solo si,

(1) $x = \langle S, H, \hat{A}, \sigma(\hat{A}), W, P \rangle$;

(2) $S, H, \hat{A}, \sigma(\hat{A})$ se definen como en el caso de la mecánica cuántica simple;

(3) W es un operador de estado;

(4) P es la medida de probabilidad.

Los modelos potenciales para una mecánica cuántica compleja, por lo tanto, agregarán los elementos adicionales relacionados con el operador de estado y medida de probabilidad. Hettema señala que una gran parte de la química cuántica se puede caracterizar como una mecánica cuántica simple que no depende de esos elementos adicionales. Sin embargo, algunos problemas químicos cuánticos sí lo hacen. Entre estos se encuentran principalmente el cálculo de las intensidades de las líneas espectrales, que depende de un mecanismo probabilístico, y el cálculo directo de las velocidades de las reacciones químicas a través de la teoría de la dispersión. Finalmente, cabe señalar que los modelos de la mecánica cuántica compleja satisfacen la ecuación de Schrödinger de manera similar a como lo hacen los modelos de la mecánica cuántica simple.

Según Hettema, estas definiciones brindan una amplia caracterización de la “física cuántica”, y para respaldar esta opinión cita a F. A. Muller (2003):

en cada rama de la física donde los fenómenos son “modelados mecánico-cuánticamente”, como la física atómica, la física de estado sólido, la química cuántica, la óptica cuántica y la teoría del transporte cuántico, el concepto de “modelo mecánico-cuántico” puede construirse como una estructura de algún tipo tal como se define arriba [. . .] o pariente cercano (196).

La pregunta que cabe formularse es si las definiciones anteriores recogen lo que se entiende por mecánica cuántica de un modo general.

4. RECONSTRUCCIONES ESTRUCTURALISTAS ¿DE LA MECÁNICA CUÁNTICA?

Si se analizan las reconstrucciones de la mecánica cuántica propuestas por Hettema, la primera reacción podría ser cuestionar la perspectiva que concibe la versión simple, carente de los conceptos de estado cuántico y probabilidad, como mecánica cuántica. Las leyes fundamentales de la teoría son la ecuación de Schrödinger, que rige la evolución temporal del estado del sistema cuántico, y la llamada regla de Born, que brinda las probabilidades de ocurrencia para cada propiedad del sistema. Por lo tanto, una reconstrucción de la mecánica cuántica que prescinde de dos conceptos que intervienen en sus leyes fundamentales resulta, al menos, demasiado limitada. Sin embargo, como afirma Olimpia Lombardi (2014), el problema que socava las reconstrucciones de Hettema es lógicamente previo, ya que afecta tanto la versión simple como la compleja: no está relacionada con el estado cuántico o con las probabilidades, sino con la selección de los observables del sistema cuántico.

La pregunta sobre si todos los operadores autoadjuntos sobre el espacio de Hilbert correspondiente a un sistema cuántico representan observables físicos o no es un problema interpretativo no resuelto. Para algunos, todos los operadores autoadjuntos representan observables ya que no existe ninguna diferencia formal que permita decidir cuáles son representativos y cuáles no. Por el contrario, otros autores consideran que solo deben interpretarse como observables los operadores que representan magnitudes con contenido físico, esto es, magnitudes para cuya medición existen procedimientos conocidos y consensuados. Sin embargo, no importa cuánto estemos dispuestos a restringir el espacio de observables, dicho espacio debe preservar una estructura mínima que incluye, al menos, ciertos observables físicos básicos, como energía, posición, momento, momento angular, etc. Además, como señala Ballentine, los observables relevantes del sistema, dotados de un claro significado físico, están estrechamente relacionados con las transformaciones espaciotemporales del grupo Galileo, es decir, el grupo de simetría de la teoría, y se pueden definir en términos de dicho grupo. Por ejemplo, el momento es el generador de las traslaciones espaciales, y la energía es el generador de las traslaciones temporales. Por el contrario, en la reconstrucción de Hettema, las estructuras que caracterizan la mecánica cuántica, tanto en su forma simple como en su forma compleja, incorporan un único operador \hat{A} , en lugar de todo el conjunto de operadores sobre el espacio de Hilbert que representan los observables físicos del sistema. Esta estrategia priva a la mecánica cuántica de contenido

físico significativo, ya que muchas magnitudes relevantes ni siquiera se pueden expresar en la reconstrucción propuesta.

Por supuesto, como resultado de esta estrategia de reconstrucción, no solo en la forma simple sino también en la compleja de la teoría, los problemas interpretativos derivados de la incompatibilidad entre observables que no conmutan desaparecen de inmediato. Pero esto se logra al precio de eliminar una de las características fundamentales de la mecánica cuántica. En efecto, el principio de incerteza, que impide que dos observables incompatibles, representados por operadores que no conmutan, tengan valores definidos simultáneamente, es uno de los pilares de la teoría; sin embargo, dicho principio ni siquiera puede formularse en una teoría con un único observable. Como consecuencia de ello, la contextualidad de la mecánica cuántica, resultado del teorema de Kochen y Specker, también desaparece en una teoría con un solo observable: carece de sentido decir que no todos los observables del sistema pueden adquirir valor definido simultáneamente si existe un solo observable. Además, como enfatiza R. I. G. Hughes, en ausencia de observables incompatibles, no existe forma de distinguir una superposición de dos estados puros de una mezcla de ellos; por lo tanto, es precisamente la existencia de observables incompatibles lo que da contenido empírico al principio de superposición.

Hettema agrega que, en los casos en que la forma simple de la mecánica cuántica es suficiente para reducir la química cuántica, en la práctica “el operador será el operador hamiltoniano \hat{H} ” (2012 264). Es cierto que en química cuántica el hamiltoniano tiene un papel central, ya que en química es habitual trabajar en la base de la energía: como las moléculas casi siempre se describen en sus estados estacionarios, es decir, en autoestados del hamiltoniano, entonces se adopta la base del espacio de Hilbert definida por dichos autoestados como la base privilegiada para la descripción. Por otra parte, en química la tarea principal es resolver la ecuación que llaman “ecuación de Schrödinger independiente del tiempo”. Pero, en el marco de la mecánica cuántica, la ecuación de Schrödinger es el postulado dinámico de la teoría, que describe la evolución temporal del sistema; por lo tanto, no tiene sentido una versión de la ecuación carente de la variable temporal. En realidad, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es la ecuación que vincula los autovectores y los autovalores del hamiltoniano. Pero, a su vez, el hamiltoniano es uno de los muchos observables físicamente significativos de un sistema cuántico: la ecuación que vincula autovectores y autovalores

puede formularse para cualquier observable ya que, desde un punto de vista estrictamente mecánico-cuántico, todos los observables del sistema están a la par. Esto significa que el privilegio del hamiltoniano, como lo presupone la química cuántica, no se deriva del formalismo de la mecánica cuántica, sino que debe agregarse al contexto cuántico como un postulado interpretativo y debe argumentarse en términos de su fecundidad para resolver los problemas conceptuales tradicionales de la teoría. Esta es precisamente la perspectiva adoptada por uno de los miembros de la familia modal de interpretaciones de la mecánica cuántica (véase Lombardi & Dieks): la interpretación modal-hamiltoniana otorga al hamiltoniano un papel principal tanto en la definición de sistemas cuánticos como subsistemas como en la selección de los observables que adquieren valores definidos (Lombardi & Castagnino; Lombardi, Fortin, Castagnino & Argendhi).

Estas consideraciones permiten concluir que lo que Hettema reconstruye como mecánica cuántica, incluso en su versión compleja, no es mecánica cuántica en un sentido estricto. La restricción a un único observable brinda una estructura teórica que carece de las características esenciales de la mecánica cuántica, precisamente aquellas características que dan lugar a los obstáculos conceptuales para la reducción deseada. En efecto, con la aproximación de Born-Oppenheimer, la química cuántica no obedece el principio de incerteza de Heisenberg y postula una estructura molecular formada por núcleos individuales en reposo en posiciones definidas. Pero esto no es un inconveniente para la reducción de la química cuántica a la mecánica cuántica, cuando esta última es la mecánica cuántica de un solo observable que nos ofrece Hettema, donde el principio cuántico ha desaparecido.

5. UNA RECONSTRUCCIÓN ESTRUCTURALISTA COMPLETA

Como fue señalado sobre el final de la tercera sección, Hettema se hace eco de las palabras de Muller (2003) en cuanto al alcance de las definiciones estructurales de la mecánica cuántica que ha propuesto. Pero este acuerdo no se restringe a las conclusiones: cuando se accede al trabajo de Muller, puede comprobarse que Hettema toma la reconstrucción estructuralista de la mecánica cuántica de allí. En efecto, en la sección 3 de su artículo, Muller define como mecánica cuántica una estructura del siguiente tipo:

$$QM \equiv \langle H, W, \hat{A}, \sigma_{\hat{A}}, P \rangle$$

donde H es un espacio de Hilbert separable, W es un operador de estado, es decir, un miembro del conjunto convexo $S(H)$ de todos los operadores acotados, positivos y autoadjuntos sobre H que tienen traza igual a 1, \hat{A} es un operador autoadjunto sobre el H , $\sigma_{\hat{A}}$ es su espectro, y P es la medida de probabilidad de Born-Von Neumann, que se define:

$$P: \{\pi_i^{\hat{A}}\} \rightarrow [0,1], \quad P(\pi_i^{\hat{A}}) = Tr(W\pi_i^{\hat{A}})$$

donde los $\pi_i^{\hat{A}}$ son los operadores que resultan de la descomposición espectral de \hat{A} . Si esta estructura se compara con la que ofrece Hettema en su versión compleja, no es difícil reconocer que se trata de la misma reconstrucción con pequeñas diferencias formales. Aquí también Muller considera un único observable para reconstruir la mecánica cuántica. ¿Esto significa que ese autor cae en la misma trampa que Hettema en cuanto a la sobresimplificación de la mecánica cuántica?

En realidad, este no es el caso. En efecto, inmediatamente después de introducir la estructura recién descripta, Muller agrega: “Huelga decir que la caracterización [anterior] se puede extender para considerar más de una magnitud física” (2003 197). Lo que le permite circunscribirse a un único observable es el propósito específico de su trabajo: brindar una nueva mirada al concepto de refutabilidad a la luz del ejemplo de la mecánica cuántica. Por ello, se ocupa de los resultados empíricos que se consiguen a través de mediciones, a los cuales denomina, en términos estructuralistas, estructura de datos. En particular se trata de establecer las frecuencias relativas que se obtienen de los diferentes intervalos de valores de un cierto observable, digamos, \hat{A} . El objetivo consiste en determinar si la mecánica cuántica previamente caracterizada como estructura “salva” la estructura de datos, en el sentido de que las frecuencias relativas obtenidas por mediciones coinciden numéricamente con las probabilidades de la medida P en la estructura que caracteriza a la mecánica cuántica. Por lo tanto, para esta discusión particular, la reconstrucción de la cuántica mediante un único observable es por completo suficiente.

No obstante, cuando Muller se ocupa de la reconstrucción completa de la mecánica cuántica, la situación es diferente. El autor encara esta tarea en un par de artículos (1997a, 1997b) concebidos como las dos partes de un trabajo completo, cuyo objetivo es analizar el artículo

donde Erwin Schrödinger (1926a) demuestra la equivalencia entre su propia mecánica ondulatoria, presentada ese mismo año (1926b, 1926c), y la mecánica matricial de Werner Heisenberg (1925), presentada el año anterior. El propósito de Muller consiste en poner de manifiesto las limitaciones de la demostración de Schrödinger, para concluir que esta inauguró lo que llama el “mito de la equivalencia”. Según el autor, solo después de que, durante los seis años siguientes, tanto la mecánica ondulatoria como la mecánica matricial fueron debidamente adjuntadas, la equivalencia se convirtió en una relación demostrable con todo rigor. Como exige un objetivo tan minucioso, aquí las reconstrucciones estructuralistas de la mecánica ondulatoria y la mecánica matricial se efectúan con todos los detalles necesarios.

No obstante, no es necesario entrar en todos los detalles para comprobar que aquí ninguna de las dos mecánicas cuánticas son teorías de un único observable. En el caso de la mecánica matricial, los observables se representan mediante matrices, y se definen las *matrices canónicas* como aquellas que satisfacen las relaciones de conmutación canónicas; el conjunto de tales matrices se denomina C_{mx} . En el caso de la mecánica ondulatoria, los observables se representan mediante operadores, y se definen los *operadores de onda canónicos* como aquellos que satisfacen las relaciones de conmutación canónicas; el conjunto de tales operadores se denomina C_{wv} . En ambos casos, no solo los conjuntos C_{mx} y C_{wv} forman parte de la estructura correspondiente, sino también las álgebras $A(C_{mx})$ y $A(C_{wv})$ generadas por dichos conjuntos.

La decisión de Hettema de seguir el artículo de Muller de 2003 en lugar de tomar sus trabajos de 1997 resulta muy conveniente a sus propósitos de defender la reducción de la química a la mecánica cuántica a través de la química cuántica. En efecto, según la reconstrucción de 2003, si el único observable es la energía, no existen observables incompatibles, representados por operadores que no conmutan. En particular, la posición y el momento no son observables cuánticos representados mediante operadores y, en consecuencia, no están sujetos al principio de Heisenberg: nada impide que un sistema posea posición y momento definidos en un mismo instante, tal como supone la aproximación de Born-Oppenheimer para los núcleos atómicos que constituyen la estructura molecular. Incluso si se decidiera

considerar que los autoproyectores del hamiltoniano también representan observables del sistema (proyectores que dan cuenta de las preguntas experimentales respecto del correspondiente autovalor de energía), se trataría de autoproyectores ortogonales que, en consecuencia, siempre conmutan entre sí y representan por tanto observables compatibles. En las dos reconstrucciones que presenta Muller en sus trabajos de 1997, por el contrario, el conjunto de todos los observables se concibe como un conjunto de objetos matemáticos (matrices u operadores de onda) que posee la estructura necesaria para representar las peculiaridades de la mecánica cuántica. En dichos conjuntos así estructurados, los observables posición y momento son incompatibles, puesto que cuentan con representaciones que no conmutan. Estas reconstrucciones, que recogen las características específicas de la cuántica, precisamente por ello no resultan funcionales a los propósitos reductivos de Hettema, puesto que hacen explícita la profunda ruptura conceptual entre mecánica cuántica y mecánica clásica.

6. CONCLUSIONES

En su defensa de la reducción de la química a la física, Hettema (2012) reconoce que los vínculos interteóricos no suministran una reducción global de una disciplina a la otra, sino solo reducciones locales y parciales de teorías particulares o de conceptos específicos. Tales vínculos exigen la introducción de idealizaciones y aproximaciones relevantes que establecen conexiones débiles y no continuas entre teorías, de modo tal que se admite “una serie de supuestos que son inadmisibles desde el punto de vista de los principios” de la teoría reductora (341). Tomando como modelo la química cuántica para sus análisis filosóficos, Hettema introduce la noción de “teoría compuesta” como el elemento teórico que puede actuar como agente de reducción. Una teoría compuesta, como la química cuántica, “extrae conceptos y observaciones de un cuerpo mayor de otras teorías y campos de una manera usualmente pragmática” (337); toma los conceptos fuera de contexto y los reutiliza “de una manera inadmisibles para la teoría en la cual el concepto se introdujo originalmente” (337). De este modo, el concepto de reducción se torna tan amplio que incluso “es capaz de acomodar algunas perspectivas no-reductivas” (47).

Una vez que el concepto de reducción se ha relajado en tal medida, parece legítimo preguntarse por qué la relación continúa denominándose “reducción” en lugar de,

sencillamente, “vínculo interteórico”, y cómo se justifica la insistencia de conceptualizar este tipo de vínculo débil como reductivo en el sentido nageliano. Sin embargo, no es este aspecto en el que aquí se ha buscado señalar. Lo que aquí se ha intentado enfatizar es que, en los vínculos supuestamente reductivos que se establecen a través de la química cuántica como teoría compuesta, parte de la complejidad conceptual de la teoría reductora original queda oculta en la teoría compuesta, que en muchos casos ignora, no solo los detalles, sino incluso los principios de las teorías componentes originales. Con la rigurosa y detallada reconstrucción de las teorías involucradas en el debate, el estructuralismo metateórico pone de manifiesto en qué medida la química cuántica es ajena a las características más específicas de la mecánica cuántica. Al apelar a las herramientas del enfoque estructuralista, Hettema socava su propia postura reduccionista ya que, en realidad, no se muestra la reducción de la química cuántica a la mecánica cuántica, sino a una mecánica cuántica “modificada” para fines de la reducción.

TRABAJOS CITADOS

- Accorinti, Hernán y Martínez Gonzáles. “Acerca de la independencia de los modelos respecto de las teorías”. *Theoria. Revista de Teoría, Historia y Fundamentos de la Ciencia* 31.2 (2016): 225-245.
- Balzer, W., C. Moulines y J. Sneed. *An Architectonic for Science: The Structuralist Program*. Springer: Netherlands, 1987.
- Ballentine, L. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. Singapore: World Scientific, 1998.
- Born, M. y R. Oppenheimer. “On the Quantum Theory of Molecules”. *Annalen der Physik* 84 (1927): 457-484.
- Chang, H. “Reductionism and the Relation Between Chemistry and Physics”. *Relocating the History of Science: Essays in Honor of Kostas Gavroglu*. Eds. Ana Simões, Jürgen Renn y Theodore Arabatzis. Dordrecht: Springer, 2015. 193-209.
- Gavroglu, K. y Simões, A. *Neither Physics nor Chemistry: a History of Quantum Chemistry*. Cambridge Mass: MIT Press, 2012.

- Heisenberg, W. “Über die quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen”. 1925. *Sources of Quantum Mechanics*. Ed. Bartel L. van der Waerden. Amsterdam: North-Holland, 1967. 261-276.
- _____. *The Physical Principles of the Quantum Theory*. Chicago: University of Chicago Press, 1930.
- Hendry, Robin. “Models and Approximations in Quantum Chemistry”. *Idealization IX: Idealization in Contemporary Physics*. Ser. *Poznan Studies in the Philosophy of the Sciences and the Humanities* 63. Eds. Jerzy Brzeziński y Niall Shanks. Amsterdam: Rodopi, 1998. 123-142.
- _____. “Ontological Reduction and Molecular Structure”. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41.2 (2010): 183-191.
- Hettema, H. “Explanation and Theory Formation in Quantum Chemistry”. *Foundations of Chemistry* 11.3 (2009): 145-174.
- _____. *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*. University of Groningen: Createspace Publishing Platform, 2012.
- Hughes, Richard. *The Structure and Interpretation of Quantum Mechanics*. Cambridge Mass: Harvard University Press, 1989.
- Kochen, S. y E. Specker. “The Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics”. *Journal of Mathematics and Mechanics* 17.1 (1967): 59-87.
- Lombardi, O. “Linking Chemistry with Physics: Arguments and Counterarguments”. *Foundations of Chemistry* 16.3 (2014): 181-192.
- Lombardi, O. y M. Castagnino. “A Modal-Hamiltonian Interpretation of Quantum Mechanics”. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 39.2 (2008): 380-443.
- Lombardi, O., S. Fortin, M. Castagnino M. y J. S. Ardenghi “Compatibility Between Environment-Induced Decoherence and the Modal-Hamiltonian Interpretation of Quantum Mechanics”. *Philosophy of Science* 78.5 (2011): 1024-1036.
- Lombardi, O. y D. Dieks. “Particles in a Quantum Ontology of Properties”. *Metaphysics in Contemporary Physics*. Ser. *Poznan Studies in the Philosophy of the Sciences and the Humanities* 104. Eds. Cristian, Wüthrich y Tomasz, Bigaj. Brill-Rodopi. (2016) 123-144.

- Muller, F. A. "The Equivalence Myth of Quantum Mechanics – Part I". *Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 28.1 (1997a): 35-61.
- _____. "The Equivalence Myth of Quantum Mechanics – Part II". *Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 28.2 (1997b): 219-247.
- _____. "Refutability Revamped: How Quantum Mechanics Saves The Phenomena". *Erkenntnis* 58.2 (2003): 189-211.
- Primas, H. "Hierarchic Quantum Descriptions and Their Associated Ontologies". *Symposium on the Foundations of Modern Physics 1994: 70 Years of Matter Waves*. Eds. Laurikainen, K., Montonen, C. y K. Sunnarborg. Paris: Editions Frontieres, 1994. 201-220.
- Scerri, E. "Just How *Ab Initio* Is *Ab Initio* Quantum Chemistry?". *Foundations of Chemistry* 6.1 (2004): 93-116.
- Schrödinger, E. "Über Das Verhältnis Der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik Zu Der Meinem". 1926a. *Collected Papers on Wave Mechanics: Together with His Four Lectures on Wave Mechanics*. Trad. F. Shearer. New York: Chelsea, 1927. 45-61.
- _____. "Quantisierung als Eigenwertproblem I". 1926b. *Collected Papers on Wave Mechanics: Together with His Four Lectures on Wave Mechanics*. Trad. F. Shearer. New York: Chelsea, 1927. 1-12.
- _____. "Quantisierung als Eigenwertproblem II". 1926c. *Collected Papers on Wave Mechanics: Together with His Four Lectures on Wave Mechanics*. Trad. F. Shearer. New York: Chelsea, 1927. 13-40.
- Simões, A. y K. Gavroglu. "Issues in the History of Theoretical and Quantum Chemistry, 1927-1960". *Chemical Sciences in the 20th Century: Bridging Boundaries*. Ed. Carsten Reinhardt. Berlín: Wiley-VCH Verlag, 2001. 51-73.
- Sutcliffe, B. T. y R. G. Woolley. "A Comment on Editorial 37". *Foundations of Chemistry* 13.2 (2011): 93-95.

- _____. “Atoms and Molecules in Classical Chemistry and Quantum Mechanics”. *Handbook of Philosophy of Science*. Vol. 6, Philosophy of Chemistry. Eds. R. F. Hendry y A. Woody, Oxford: Elsevier, 2012. 387-426.
- Woolley, R. G. “Must a Molecule Have a Shape?” *Journal of the American Chemical Society* 100.4 (1978): 1073-1078.