



THEORIA. Revista de Teoría, Historia y

Fundamentos de la Ciencia

ISSN: 0495-4548

theoria@ehu.es

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko

Unibertsitatea

España

Córdoba, Mariana; Martínez, Juan Camilo

Los orbitales cuánticos y la autonomía del mundo químico

THEORIA. Revista de Teoría, Historia y Fundamentos de la Ciencia, vol. 29, núm. 2, mayo-agosto,

2014, pp. 261-279

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

Donostia-San Sebastián, España

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=339732249009>

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

 redalyc.org

Sistema de Información Científica

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

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

Los orbitales cuánticos y la autonomía del mundo químico *

(Quantum Orbitals and the Autonomy of the Chemical World)

Mariana CÓRDOBA y Juan Camilo MARTÍNEZ

Recibido: 10.06.2013

Versión Final: 24.10.2013

BIBLID [0495-4548 (2014) 29: 80; pp. 261-279]

DOI: 10.1387/theoria.9919

RESUMEN: El análisis del concepto de *orbital* permite argumentar—en oposición a una propuesta reciente en filosofía de la química—que no es posible defender la autonomía ontológica de la realidad química respecto de la física, sobre la base de una ruptura conceptual entre una interpretación química del concepto y otra propia de la mecánica cuántica. Esto es así porque no existen tales interpretaciones distintas del concepto de orbital, sino que, por el contrario, este concepto en química cuántica y en química estructural proviene de la mecánica cuántica.

Palabras clave: autonomía ontológica de la química; química cuántica; funciones mono-electrónicas; reducción ontológica; química estructural.

ABSTRACT: The analysis of the concept of *orbital* allows us to argue that—in opposition to a recent position in philosophy of science—it is impossible to defend the autonomy of the chemical reality in regard to physical reality, appealing to the idea that there is a conceptual rupture among a chemical interpretation and a quantum interpretation of the concept. This is the case because there are not two different interpretations of the concept of orbital. On the contrary, the concept involved in structural chemistry and in quantum chemistry comes from quantum mechanics.

Keywords: ontological autonomy of chemistry; quantum chemistry; monoelectronic wave functions; ontological reduction; structural chemistry.

1. Introducción

La relación interdisciplinaria entre química y física constituye uno de los problemas más discutidos en la filosofía de la química desde sus inicios. En esta discusión se destaca el debate en torno a la reducción de la micro-química a la mecánica cuántica. A la cuestión de si es posible esta reducción se han ofrecido respuestas que configuran posiciones distintas e incluso contradictorias entre sí (*cf.* por ejemplo, Primas 1983, Scerri 2000, 2004, Scerri y McIntyre 1997, Vemulapalli y Byerly 1999, van Brakel 2000). En este contexto, el análisis del concepto de orbital ha generado una amplia polémica.

En el presente trabajo nos detendremos en una posición que, tendiente a defender la autonomía del mundo químico respecto del mundo poblado por las entidades y propiedades propias de la física, apela a la imposibilidad de reducción ontológica precisamente a partir del análisis del concepto de orbital. Esta es la posición defendida por Olimpia Lombardi y Martín Labarca (2005, 2006; *cf.* también Labarca y Lombardi

* El presente trabajo ha sido realizado gracias al apoyo del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT) y la Universidad de Buenos Aires (UBA). Agradecemos las aportaciones de los árbitros anónimos y los editores que permitieron mejorar el trabajo.



2010a, 2010b, Lombardi y Castagnino 2010), quienes rechazan el reduccionismo ontológico y adoptan la perspectiva del realismo pluralista de raíz kantiana desarrollado por Lombardi y Ana Rosa Pérez Ransanz (2011, 2012). Lombardi y Labarca argumentan que la ontología de la química molecular presenta el mismo *status* ontológico que la ontología de la mecánica cuántica. Uno de los casos que, según los autores, permite aplicar este marco filosófico es, precisamente, el de los orbitales: sostienen que hay una diferencia de interpretación que se brinda al concepto de orbital en química y en física, y argumentan en favor de la posición pluralista a partir de la comparación de ambas interpretaciones.

En este artículo nos proponemos analizar el concepto de orbital y contraponer los resultados de nuestro examen al resultado que arroja el análisis que de tal concepto hacen Lombardi y Labarca. Consideramos que la relevancia de discutir acerca de la posición de estos autores se debe al hecho de que sus trabajos han cobrado una gran relevancia en la filosofía de la química reciente. Prueba de ello es la amplia repercusión que han tenido y la cantidad de discusiones que han motivado.

Nuestro objetivo fundamental consiste en argumentar que no es posible defender la autonomía del mundo químico a partir del análisis del concepto de orbital, dado que no existe una ruptura conceptual entre dos interpretaciones distintas, una química y otra física, de dicho concepto. Si esto es así, no deben buscarse en esta pretendida ruptura razones para defender la independencia del mundo químico. Para cumplir nuestro objetivo, formularemos tres críticas a la posición de Lombardi y Labarca. En primer lugar, (1) la denominación de *química molecular* es demasiado amplia; por ello, la propuesta pluralista de los autores no logra elucidar las categorías y conceptos propios de la química molecular, ni la teoría química que permite determinar qué son los orbitales sin apelar a la física. Aun así, (2) no hay una interpretación específica del concepto de orbital en el ámbito de la química. Por el contrario, el concepto de orbital involucrado en la química pertenece a la química cuántica y, por tanto, no se diferencia del concepto involucrado en la mecánica cuántica. Por último, (3) la química cuántica no tiene una teoría propia, sino que presenta una importante deuda teórica con la mecánica cuántica, de modo que el concepto de orbital debe ser caracterizado apelando al marco conceptual de la mecánica cuántica.

Para articular estas tres críticas será necesario exponer en qué consiste el pluralismo ontológico de raíz kantiana (Sección 2) y, en particular, cómo el pluralismo ha sido aplicado a la química (Sección 3). Reconstruiremos, asimismo, los argumentos que se proponen defender la autonomía del mundo químico a partir del análisis del concepto de orbital (Sección 4). Finalmente, en la Sección 5 presentaremos en detalle nuestras críticas.

2. *El pluralismo ontológico de raíz kantiana*

El pluralismo ontológico que proponen Lombardi y Pérez Ransanz (2011, 2012) es una posición epistemológica que se asume como un tipo peculiar de realismo científico. Desde esta perspectiva se analizan las relaciones interteóricas, interviniendo en las discusiones específicas del ámbito de las filosofías de las ciencias particulares, por medio de una exhaustiva crítica al reduccionismo.

Las autoras recorren ciertas distinciones en posiciones tradicionales de la filosofía de la ciencia, con el objetivo de señalar que su posición se aleja de lo que denominan realismo metafísico, tesis que engloba el realismo metafísico en sentido estricto y el realismo gnoseológico. El realismo metafísico en sentido estricto es la tesis según la cual la realidad misma, entendida como totalidad de objetos y con una determinada estructura, existe independientemente del sujeto en tanto que sujeto cognosciente. De acuerdo con ello, la objetividad de lo real es independiente del acto de conocimiento del sujeto, el cual no interviene en la constitución de la objetividad. Que la realidad está determinada significa que hay categorías y clases únicas y absolutas que fijan o estructuran la realidad en sus ítems ontológicos existentes, con sus propiedades y relaciones esenciales. Por su parte, el realismo gnoseológico, tal como es caracterizado por las autoras, es la posición según la cual es posible conocer esa realidad determinada, al menos aproximadamente.

Para comprender en qué consiste el pluralismo ontológico de Lombardi y Pérez Ransanz es necesario señalar que las autoras reivindican la inspiración kantiana de su propuesta. Tal inspiración se manifiesta, en primer lugar, en el hecho de que el realismo pluralista comparte con la filosofía de Kant el rechazo del realismo metafísico. En segundo lugar, toman de la filosofía kantiana la convicción de que todo aquello que llamamos “objeto”, del tipo que sea, está constituido en el marco de nuestro esquema categorial y es, por tanto, “objeto para nosotros”. Los objetos de conocimiento son construcciones de nuestra espontaneidad intelectual con arreglo a los conceptos puros; no son cosas preexistentes de las cuales la mente tiene noticia. El objeto constituido y conocido, el objeto empírico, “no es una unidad preexistente, presentada aparte de los datos sensibles, que comparamos con estos para cerciorarnos de si efectivamente corresponden a ella o no. Sólo los datos nos dan el objeto; pero tampoco ellos nos lo dan de suyo; lo dan, lo hacen presente sólo en la síntesis que los refiere a él, que al enlazarlos bajo su concepto, lo construye. El objeto empírico es objeto fenoménico; conocerlo es constituirlo, sintetizarlo. La síntesis opera regida por los conceptos puros del entendimiento o categorías” (Torretti 1980, 500).

De acuerdo con el realismo pluralista, el objeto de conocimiento resulta de la síntesis que opera de acuerdo con los conceptos del entendimiento o categorías. Esto significa que los objetos resultan de la constitución que nuestro esquema conceptual-categorial efectúa sobre el material nouménico. Sólo accedemos a aquello que, de algún modo, se nos da a nosotros, sujetos de conocimiento, y a lo cual imponemos alguna forma. En otras palabras, la realidad misma del objeto no es independiente de la estructura de la subjetividad: ni la existencia del objeto, ni lo que el objeto sea, ni la determinación de sus propiedades es independiente de dicha estructura. En este sentido se comprende el rechazo del realismo metafísico por parte de Kant. Este rechazo constituye la inspiración fundamental de la concepción epistemológica de Lombardi y Pérez Ransanz.

De acuerdo con el realismo pluralista, entonces, el conocimiento científico es conocimiento de fenómenos en sentido kantiano. Este realismo pluralista también se inspira en el realismo internalista de Hilary Putnam (1981), aunque se distancia, en

algunos aspectos fundamentales,¹ de la posición de este filósofo. El realismo internalista, entonces, agrega a esta noción de objeto constituido una visión historicista por medio de su tesis de la *relatividad conceptual*. En efecto, la postura de Putnam se aleja de la filosofía kantiana en un aspecto fundamental; las categorías, según Kant, son absolutas, son las estructuras del sujeto trascendental único, de modo que no cabe la posibilidad de pensar que las categorías mismas se modifiquen o cambien con el tiempo. Para Putnam—y en esto consiste la tesis de la relatividad conceptual—ningún concepto y ninguna categoría tiene una interpretación única o absoluta. De este modo, se acepta que existen esquemas conceptuales alternativos, no convergentes ni reducibles a un esquema único.

La tesis de Putnam de la relatividad conceptual conduce así al *pluralismo ontológico*: es posible disponer de concepciones del mundo con *ontologías distintas*, incluso incompatibles, que resulten adecuadas en determinados contextos, de acuerdo con ciertos intereses y objetivos. Por esta razón, la pregunta acerca de *qué cosas hay en el mundo* requiere de la especificación del *marco conceptual* en el que se formula la pregunta y se pretende responderla. Una vez adoptado un marco conceptual, tiene sentido preguntarse qué hechos y objetos existen y pueden ser descubiertos.

Si se dispone de concepciones del mundo con ontologías distintas, tales ontologías son genuinamente incommensurables, de modo que la tesis de la incommensurabilidad (Kuhn 1970, Feyerabend 1962), considerada desde una perspectiva fundamentalmente ontológica, constituye un componente fundamental del realismo pluralista. La incommensurabilidad que adopta el realismo pluralista debe ser comprendida en términos de diferencia entre ontologías constituidas por esquemas conceptuales diversos. Es necesario destacar que, de acuerdo con Lombardi y Pérez Ransanz, la diferencia entre ontologías concierne no sólo a las clases que estructuran los diversos mundos, sino incluso a la existencia misma de entidades individuales. Desde esta perspectiva, la idea de incommensurabilidad es consistente con un pluralismo ontológico que renuncia a la idea de que existen entidades auto-identificantes, entidades últimas y fundamentales en una realidad independiente tanto de los sujetos en tanto que sujetos cognoscientes, como de sus esquemas conceptuales.

Mientras que la posición de Putnam fue discutida principalmente en el marco del problema del cambio teórico, Lombardi y Pérez Ransanz insisten en la aplicación del pluralismo ontológico a las relaciones interteóricas sincrónicas: vínculos científicamente relevantes entre distintas teorías científicas efectivamente exitosas, aceptadas simultáneamente por la comunidad científica. Actualmente la discusión en torno a las relaciones interteóricas sincrónicas cobra una especial relevancia en el marco de la reflexión de las filosofías de las ciencias particulares, y el caso particular de relación interteórica que ha sido el innegable protagonista del debate es el caso de la reducción. El pluralismo ontológico de raíz kantiana que defienden Lombardi y Pérez Ransanz pre-

¹ En particular, Lombardi y Pérez Ransanz se alejan de la formulación de Putnam, en primer lugar, porque sostienen que Putnam no logra, en su propuesta, una adecuada elucidación de la noción de esquema conceptual. También se distancian de su realismo internalista al adoptar una noción de verdad como adecuación, que las autoras consideran más acorde con un realismo genuino. No nos detendremos en estas diferencias puesto que esto nos alejaría del propósito del presente trabajo.

senta la fuerte convicción de que las relaciones interteóricas no deben ser interpretadas como vínculos reductivos, configurando una posición enérgicamente anti-reduccionista.

Dentro de las aplicaciones del realismo pluralista, nos interesa especialmente su empleo en química, particularmente, el modo en que el pluralismo sincrónico se ha aplicado a la relación entre química y física. De esta cuestión nos ocuparemos en la sección siguiente.

3. El pluralismo ontológico en química

En el artículo “The ontological autonomy of the chemical world”, Lombardi y Labarca (2005) exponen sus críticas al reduccionismo epistemológico en ciencia y argumentan que no es posible reducir la química a la física. Cuando los autores hablan del *reducciónismo epistemológico*, tienen en mente la clásica noción filosófica de reducción delineada por Ernst Nagel (1961), de acuerdo con la cual una teoría se reduce a otra cuando la primera se *deduce* de la segunda en conjunción con ciertos enunciados denominados *leyes puente*.

El rechazo de Lombardi y Labarca de la reducción se enmarca en un rechazo—más amplio—de toda forma de dependencia epistemológica. Pero la aportación más importante de este artículo—evidente en las múltiples repercusiones que ha generado (*cfr.*, por ejemplo, Schuster 2005, Scerri 2005a, 2005b, Needham 2006, McIntyre 2007a, 2007b, Cat 2007, Scerri 2007, 2008a, 2008b, Newman 2008, Rip 2009, Needham 2010, Pagliaro 2010, Chamizo 2011, Hettema 2012, Manafu 2013, entre otros)—consistió en haber destacado que, si bien el reduccionismo epistemológico de la química a la física ha sido ampliamente impugnado, no ha resultado, en cambio, igualmente rechazado el reduccionismo ontológico. Sostienen los autores que los filósofos que defienden la independencia de la química respecto de la física suelen basar esta defensa en el rechazo del reduccionismo epistemológico. Por ejemplo, de acuerdo con algunas opiniones, las leyes de la química no pueden deducirse a partir de las leyes de la física, y tampoco los conceptos de la química (como los de enlace químico, quiralidad, forma molecular y orbital) pueden ser explicados basándose en los conceptos de la física. Por ejemplo, Eric Scerri y Lee McIntyre (1997) afirman que la reducción cuantitativa—el cálculo de propiedades químicas a partir de la mecánica cuántica—fracasa, ya que exige técnicas de aproximación que sólo pueden justificarse a partir de los datos experimentales que, precisamente, se pretende calcular. La reducción conceptual también fracasa porque la naturaleza misma de los conceptos químicos la vuelve imposible. Krishna Vemulapalli y Henry Byerly (1999), por su parte, sostienen que la reducción epistemológica fracasa incluso en casos simples, dado que las propiedades de un sistema químico no pueden ser explicadas en términos de las propiedades de sus microcomponentes físicos, tal como lo muestra el equilibrio en sistemas multicomponentes no ideales y en sistemas no ideales en termodinámica estadística. Los propios Lombardi y Labarca (2005) consideran que no es posible la reducción naghiana porque los vínculos entre teorías involucran procedimientos de paso al límite, introducción de “grano grueso”, aproximaciones y otras técnicas matemáticas mucho

más complejas que la mera deducción lógica.² En el artículo de 2005, Lombardi y Labarca muestran que el rechazo del reduccionismo epistemológico de la química a la física es generalizado en el ámbito de la filosofía de la química. Sin embargo, argumentan que la mayoría de los filósofos que rechazan el reduccionismo nageliano no ponen en cuestión la idea de que la realidad química es dependiente, en última instancia, de la realidad física, es decir, no rechazan la reducción ontológica de la química a la física. De acuerdo con Lombardi y Labarca, el reduccionismo ontológico, o bien es aceptado explícitamente, o bien ni siquiera es discutido.

Por reduccionismo ontológico los autores entienden la tesis de acuerdo con la cual la realidad descrita por una teoría es *dependiente* o *derivada* de la realidad descrita por otra teoría. Esta tesis afirma que hay dependencia ontológica de las entidades, propiedades y regularidades de un estrato de la realidad respecto de las entidades, propiedades y regularidades de otro estrato, que se considera ontológicamente fundamental. Según este tipo de reduccionismo, existe una preeminencia ontológica de un nivel de la realidad, al cual, en última instancia, se reducen, directa o indirectamente, los otros niveles (*cf.* Lombardi y Labarca 2005). Sostienen los autores que Vemulapalli y Byerly (1999) adoptan una posición declaradamente fiscalista en la medida en que afirman que la química es ontológicamente dependiente de la física. A su vez, Scerri y McIntyre (1997) desestiman el problema de la reducción en su dimensión ontológica al afirmar que la cuestión de la reducción es meramente epistemológica. Esta última es también la actitud de Paul Needham (2006), quien objeta la postura de Lombardi y Labarca en su artículo “Ontological reduction: A comment on Lombardi and Labarca”, afirmando que la idea misma de *dependencia ontológica* resulta vaga e imprecisa, tesis sobre la cual insiste en artículo posterior (2010).³

En síntesis, según Lombardi y Labarca, el reduccionismo ontológico debe ser cuestionado porque sólo así puede combatirse la idea de que, epistemológicamente reducible o no, la química es una disciplina secundaria respecto de la física fundamental. En efecto, la tesis de la reducción ontológica del mundo químico al mundo físico adjudica

² Para evaluar la discusión, así como los acuerdos existentes en torno a la posibilidad o imposibilidad de reducción de la química a la física, *cf.* Lombardi y Labarca (2005). Aquí sólo pretendemos dejar establecida la posición de Lombardi y Labarca, dado que volverán a argumentar en 2010 a favor de la autonomía de la química en la misma línea en que han iniciado la discusión en 2005, esto es, sobre la base del rechazo del reduccionismo ontológico, pero ahora apelando al concepto de orbital.

³ Resulta muy interesante la discusión con Needham (*cf.* Lombardi y Labarca 2005, Needham 2006 y Lombardi y Labarca 2006). El autor cuestiona el pluralismo por considerar, no sólo que se basa en el rechazo del reduccionismo ontológico, que resulta incomprendible en tanto se apoya en la oscura noción de *dependencia ontológica*, que considera ininteligible, sino que afirma, además, que el pluralismo es una posición demasiado radical y, en consecuencia, “intrágable”. Lombardi y Labarca responden de un modo totalmente convincente, argumentando, entre otras cosas, que el pluralismo ontológico ha mostrado sus virtudes al afrontar determinados problemas tradicionales en filosofía de la ciencia: puede aplicarse exitosamente “a casos donde dos descripciones diferentes asignan a un sistema propiedades incompatibles e incluso contradictorias: (i) determinismo e indeterminismo en sistemas altamente inestables, (ii) reversibilidad e irreversibilidad en sistemas estadísticos clásicos, (iii) aspectos clásicos y cuánticos en sistemas cuánticos, (iv) reversibilidad e irreversibilidad en sistemas cuánticos descriptos por mecánica cuántica asimétrica temporalmente [...]” (Lombardi y Labarca 2006, 89). Para una reconstrucción de la discusión entre Lombardi y Labarca y Needham, *cf.* Córdoba 2011.

a las entidades y propiedades químicas una existencia aparente o meramente derivada, que obedece a nuestras limitaciones técnicas de observación y de cálculo. Según Lombardi y Pérez Ransanz, el reduccionismo ontológico es una tesis que no puede ser pensada separadamente del realismo externalista que las propias autoras rechazan: la idea de que existe una única realidad *independiente* y que esta estaría habitada únicamente por las entidades y propiedades de la física fundamental.

Lombardi y Labarca, entonces, proponen el marco del pluralismo ontológico de raíz kantiana para comprender la relación entre química y física. Recordemos que, de acuerdo con la concepción pluralista, marcos conceptuales distintos, en ocasiones incluso incompatibles, suelen coexistir sin necesidad de que alguno de ellos sea fundamental y permita reducir o hacer converger en él a los restantes. Esta coexistencia se evidencia en la convivencia de teorías científicas diferentes que se formulan dentro de tales marcos y que son aceptadas simultáneamente por la comunidad científica. La coexistencia teórica y conceptual, a su vez, configura la existencia de diversas ontologías constituidas por dichos marcos conceptuales, y tales ontologías no tienen por qué ser reducidas, en última instancia, a una realidad fundamental. Estas ontologías diversas se relacionan, de acuerdo con los compromisos pluralistas, mediante nexos nomológicos no reductivos. La aplicación de esta concepción pluralista a la química ha conducido a Lombardi y Labarca a analizar el concepto de orbital en química y en física. A la reconstrucción de este análisis dedicaremos la sección que sigue.

4. El concepto de orbital y la defensa de la autonomía de la química

En “Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos” (2010b), Labarca y Lombardi analizan el concepto de orbital desde un marco pluralista: afirman que las interpretaciones del concepto de orbital en química y en física “corresponden a dos ontologías diferentes, ambas de igual status ontológico, cada una de las cuales posee una existencia autónoma fundada en la fecundidad de la disciplina científica correspondiente” (2010b, 310). Sostienen que es imposible la reducción de la química a la física tomando como ejemplo el concepto de orbital y las diferentes interpretaciones que asume dentro de la química molecular y la mecánica cuántica; tales interpretaciones indicarían que estamos en presencia de ontologías distintas que no mantienen entre sí una relación que involucra algún tipo de jerarquía.

Es importante resaltar que, sobre la base del pluralismo ontológico sincrónico, que atiende a las relaciones que mantienen entre sí ontologías configuradas por esquemas conceptuales expresados en teorías aceptadas simultáneamente por la comunidad científica, los autores pretenden defender la autonomía no sólo de la química en tanto disciplina, sino de la ontología química o el *mundo* químico. Debe quedar claro que este objetivo, el de defender la autonomía ontológica de la química, es el que motiva el análisis del concepto de orbital.

Luego de recordar cómo se aborda la descripción del átomo en términos de la mecánica cuántica, Labarca y Lombardi hacen hincapié en el hecho de que estos resultados son interpretados de modo distinto en física y química. Afirman que en química se recoge el formalismo cuántico, pero se “retiene el concepto de orbital a través de la regla de Born según la cual el cuadrado de la función de onda representa una probabi-

lidad. [...] En química se concibe un orbital atómico como la *región del espacio* en la cual es más probable que se encuentren los electrones de un átomo [...] un orbital atómico es una región del espacio que, si bien estrictamente posee bordes difusos, tiene una forma definida. Es precisamente la estructura geométrica del orbital atómico aquello que, en química, explica el modo en que los átomos se unen entre sí a través de los enlaces químicos dando lugar a moléculas con una forma o estructura geométrica definida. A su vez, la forma o estructura molecular (*molecular shape*) cumple un papel central en la comprensión de ciertas propiedades macroscópicas de las sustancias, como su reactividad y sus manifestaciones en espectroscopía.” (2010b, 317). La utilidad de este concepto, según los autores, da cuenta de que los químicos consideren que los orbitales atómicos *realmente existen*. Pero, afirman Labarca y Lombardi, en mecánica cuántica la situación es diferente: el término ‘orbital’ no tiene un referente objetivo, sino que un orbital se considera una función de onda de un átomo monoelectrónico—esto es, una entidad matemática—y sólo una aproximación en átomos multielectrónicos—es decir, una herramienta para calcular el estado de los electrones en el átomo a través de aproximaciones.

¿Qué es lo que motiva a los autores a basarse en el análisis de este concepto para argumentar en defensa de la autonomía de la química? Sostienen que el caso de los orbitales ha generado una gran polémica, precisamente porque colocó en primer plano un particular problema *ontológico*: el de la *existencia* de los orbitales. Problema que puso de manifiesto, a su vez, los prejuicios reduccionistas fisicalistas presentes incluso en la filosofía de la química que se empeña en rechazar el reduccionismo epistemológico—en la misma línea de lo que habían argumentado en 2005. De acuerdo con Labarca y Lombardi, estos prejuicios estallaron al ser anunciada la observación de los orbitales en 1999 y algunos químicos y filósofos de la química objetaran que se había cometido un error en la interpretación de las visualizaciones. Scerri (2001), por ejemplo, señaló que no es posible observar orbitales, porque las funciones de onda no son observables y porque los orbitales son ficciones matemáticas a las que no cabe adscribir existencia efectiva desde el punto de vista de la mecánica cuántica. Para Labarca y Lombardi, la idea de que los orbitales no existen, dado que no son sino una entidad matemática, proviene de identificar sin más una limitación matemática con una restricción ontológica. Afirman los autores: si ‘orbital’ no refiere porque los orbitales no existen, tal inexistencia debería afectar a todo tipo de átomos; “cuando el problema se plantea no en términos de cálculo matemático sino en términos conceptuales, esto es efectivamente lo que sucede: el concepto de orbital adquiere significados totalmente diferentes en física y química” (2010b, 321).⁴

Hemos señalado que, de acuerdo con el pluralismo ontológico de raigambre kantiana, la ontología resulta constituida por los esquemas conceptuales, de un lado, y por los insumos que provienen de la realidad independiente, de otro. La química molecular presenta su propio marco conceptual, que es un marco clásico en el sentido de que las

⁴ Además, si los orbitales no existen porque, como sostiene Scerri (2001), la mecánica cuántica así lo afirma, entonces habría que negar existencia a todas aquellas entidades que la mecánica cuántica no puede explicar, desde virus hasta planetas con comportamiento clásico (*fr.* Labarca y Lombardi 2010a).

moléculas de las que se ocupa esta disciplina—a diferencia, por ejemplo, de los sistemas cuánticos—son objetos clásicos, sustanciales y locales: son *individuos*—en términos filosóficos—que poseen ciertas propiedades. En el marco de una ontología clásica como la constituida por la química molecular, tiene sentido que los átomos componentes de la molécula sean concebidos en términos compatibles con tal ontología.

Según Labarca y Lombardi, en química molecular el concepto de orbital refiere a una región del espacio donde se encuentran con mayor probabilidad los electrones semi-clásicos en torno del núcleo clásico. La imagen del átomo según la cual la molécula es pensada como un objeto compuesto de núcleos clásicos y electrones semi-clásicos es, en cambio, ajena a la mecánica cuántica. De acuerdo con el esquema conceptual propio de la cuántica, ‘orbital’ carece de referente objetivo en tanto sólo refiere a la función de onda del sistema, lo que explica que Scerri afirme que *los orbitales no existen*. Con esta última afirmación, Labarca y Lombardi están de acuerdo en tanto y en cuanto se la precise: *no existen en el mundo descrito por la mecánica cuántica, pero sí existen en el mundo descrito por la química molecular*.

Sostienen los autores que es necesario reconocer que el problema de los orbitales es un problema *conceptual* para aceptar que la ruptura conceptual entre mecánica cuántica y química molecular puede ser interpretada en términos de la presencia de dos ontologías diferentes: una de ellas que cuenta con la existencia objetiva de los orbitales y otra que no, y ninguna tiene prioridad ontológica sobre la otra, sino que son autónomas. Los autores concluyen, entonces, que es legítimo sostener que los orbitales, así como la forma molecular y los enlaces químicos, no existen en la ontología cuántica, mientras que sí existen en la ontología de la química molecular. Los ítems que habitan la realidad del mundo químico “no necesitan de las entidades cuánticas para legitimar su existencia” (Labarca y Lombardi 2010b, 326). Esto es así porque cada una de las entidades definidas dentro del marco de un esquema conceptual determinado existe según las “normas” que impone el mismo marco conceptual, según las categorías y sistemas de conceptos de tal marco, en conjunción con lo que aporta la realidad independiente. De aceptar esto y de aceptar que el concepto de orbital viene definido por la química molecular, el argumento es inobjetable. Al comparar, entonces, la interpretación que se da del concepto de orbital en química molecular y en mecánica cuántica, se concluye que los orbitales existen en la ontología de la química molecular y no existen en el marco de la mecánica cuántica. En este trabajo no pondremos en cuestión la fuerza de este argumento.

Aceptando las tesis básicas del pluralismo ontológico, es correcto afirmar que tanto la propia existencia de los objetos cuanto su naturaleza dependen del marco conceptual que los constituye. Considerando la química molecular, es correcto afirmar que *aquellos que sea definido (constituido) mediante las categorías y conceptos básicos o definitorios propios del esquema conceptual de la química molecular, existe en tanto es parte de la ontología de la química molecular*. Las categorías de este marco conceptual son las que contribuyen a determinar qué es lo que existe y qué no, así como, por ejemplo, qué propiedades tiene lo existente dentro de este marco. Sin embargo, cabe preguntarse si el concepto de orbital realmente pertenece a la química molecular; en el siguiente apartado evaluaremos esta cuestión.

5. ¿Qué es un orbital?

5.1 El origen del concepto

La pregunta por la naturaleza de un orbital es fundamentalmente técnica. El origen del concepto *orbital* en química se halla en las primeras aplicaciones de la *vieja teoría cuántica* (*Old Quantum Mechanics*) a los espectros atómicos. Previamente al desarrollo de la química cuántica como disciplina, el modelo Bohr-Sommerfeld permitió dar cuenta de la estructura atómica; de acuerdo con este modelo, la estructura atómica consiste en un pesado y pequeño núcleo con carga positiva y en electrones que, con carga negativa, giran en torno al núcleo, tal como los planetas se mueven en órbitas alrededor del sol. Pero el movimiento de los electrones alrededor del núcleo del átomo es, por supuesto, distinto del movimiento planetario: la diferencia no sólo radica en el tamaño de las órbitas, sino también en el modo en que se llenan con electrones (*Aufbauprinzip*) y en las fuerzas que actúan sobre los componentes atómicos. Además, las órbitas posibles para los electrones en un átomo están restringidas a tamaños particulares y formas definidas por reglas o normas provenientes de aquella primera teoría cuántica. Según este modelo de la estructura atómica, los electrones se mueven en órbitas circulares con un momento angular definido por $h/2\pi$ para cada electrón, donde h es la constante de Planck.

El modelo Bohr-Sommerfeld describía las órbitas electrónicas utilizando los principios de la mecánica newtoniana, conforme al conocimiento de las energías y el movimiento angular de dichas órbitas. Sin embargo, con la consolidación de la mecánica cuántica en la década del '20, la mecánica newtoniana fue reemplazada por el marco teórico cuántico, que permitía una descripción más adecuada de sistemas a pequeña escala, como los átomos y las moléculas. Pero a pesar de esto, la imagen de la estructura atómica como un núcleo pesado y cargado positivamente, rodeado por electrones negativos en algo parecido a las órbitas, se mantuvo sin modificaciones importantes. Ahora bien, ¿son similares los orbitales a las órbitas? En palabras de Robert Mulliken, “un orbital significa, aproximadamente, algo como una órbita; o más precisamente, algo como una órbita hasta lo que es posible en mecánica cuántica” (1967, 13). Para determinar qué puede afirmarse respecto de una órbita dentro de la mecánica cuántica, es necesario recordar la manera como se aplica la mecánica cuántica a un átomo o una molécula. A esta cuestión dedicaremos lo que sigue.

5.2. Orbitales en átomos hidrogenoides

El tratamiento mecánico-cuántico de sistemas atómicos y moleculares está basado en las soluciones posibles de la ecuación de Schrödinger para sistemas compuestos por un electrón y un núcleo que interactúan mediante la ley de Coulomb y se mueven como un rotor rígido en tres dimensiones. Estas soluciones son funciones de onda que representan los estados estacionarios admisibles para este sistema. El sistema más básico al cual se aplica la ecuación de Schrödinger, y que cuenta con solución exacta, es el átomo de hidrógeno, que consta de un electrón y un protón; pero de manera análoga se tratan los iones He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} . Los sistemas de este tipo son denominados *hi-*

drogenoides pues, aunque difieren en la cantidad de protones en el núcleo, sólo contienen un electrón. Las diferentes soluciones de la ecuación de Schrödinger para átomos con más de un electrón sólo se pueden obtener de manera aproximada debido a la dificultad de cómputo que introducen las interacciones inter-electrónicas. Sin embargo, cuando estas interacciones son dejadas de lado, los electrones pueden tratarse de forma independiente como una función hidrogenoide, para después introducir los efectos promedio de las interacciones entre electrones mediante el método de Hartree-Fock. Gracias a ello, la función de onda atómica puede obtenerse como el producto de funciones de onda monoelectrónicas, que son funciones de onda hidrogenoides. En este sentido, los orbitales son una base mediante la cual se construye la función de onda total del sistema.

En el tratamiento mecánico-cuántico de estas funciones de onda hidrogenoides, su simetría esférica lleva a una solución en coordenadas polares ($r; \theta, \phi$). La energía de las autofunciones puede ser escrita como el producto de una parte radial (dependiente de r) y una parte angular (dependiente de θ y ϕ). La parte angular puede ser transformada en coordenadas cartesianas en una esfera de radio uno. Esto significa que si tenemos dicha esfera centrada en el origen y calculamos los valores de la función cartesiana en cada punto de la esfera, obtendremos la *distribución angular* de la función de onda.

No es nuestro objetivo detallar de manera precisa la construcción de dichas representaciones, pues se encuentra explicada en todos los manuales donde se presenta el tratamiento cuántico de funciones hidrogenoides (*cfr.*, por ejemplo, Magnasco 2009, Atkins y Friedman 2005, Fitts 2002). Lo único que se pretende resaltar es que, estrictamente, los orbitales son funciones de onda hidrogenoides y, por tanto, el término ‘orbital’ no refiere a *la región del espacio donde es más probable encontrar un electrón* como afirman Lombardi y Labarca.

5.3. Orbitales en moléculas

Las estrategias utilizadas para describir átomos dentro del formalismo de la mecánica cuántica rápidamente se extendieron hacia la descripción de sistemas moleculares. Así fue como se fundó, dentro de este dominio, la química cuántica con los *modelos orbitales* y los trabajos pioneros de Walter Heitler y Fritz London (1927) y el desarrollo de los métodos aproximados por parte de Linus Pauling y John Slater y su método del enlace de valencia (EV). Por otro lado y de manera casi simultánea, con los trabajos en espectroscopía de Friedrich Hund y Robert Mulliken se formuló el método del orbital molecular (OM) (para una discusión acerca del estatuto epistemológico de los métodos EV y OM, *cfr.* Lombardi y Martínez González 2012). Estos métodos se desarrollaron para seleccionar funciones de onda de prueba para resolver la ecuación de Schrödinger para un sistema de varios átomos, y generalmente son vistos como dos enfoques rivales, a pesar de lo cual constituyen el núcleo “teórico” de la química cuántica. Precisamente, con estas dos aproximaciones, se utilizó el término ‘orbital’ para denotar una función de onda hidrogenoide. Mulliken utiliza y define el término como sigue: (...) “el término ‘orbital’ es simplemente una abreviación para *función de onda orbital de un*

*electrón o, preferiblemente, para la autofunción orbital de un electrón*⁵ (...) “Un orbital (atómico o molecular) es, estrictamente hablando, sólo una función matemática en el espacio tridimensional ordinario” (Mulliken 1967, 14).

De este modo, el concepto de orbital como región del espacio donde es más probable hallar un electrón, que podía resultar plausible en el caso de átomos hidrogenoides, debe abandonarse cuando se pasa a la descripción de átomos con más electrones o de moléculas. En efecto, mientras cada orbital se asocia a un electrón, cuando existen muchos electrones, como en el caso de las moléculas, estrictamente la regla de Born, que brinda la probabilidad, debería aplicarse sobre la *función de onda completa de la molécula*, que no puede obtenerse sencillamente combinando las funciones de onda de los electrones particulares, esto es, los orbitales. Por ello, dichos orbitales se utilizan como una base de estados sobre la cual se construye la función de onda de la molécula completa, a través de algunos de los modelos mencionados (EV y OM).

Sobre la base de lo expuesto hasta aquí, queda claro que, si bien el término ‘orbital’ suele no ser utilizado en los desarrollos más teóricos de la mecánica cuántica, sin embargo refiere a una *función matemática* que es *determinada y caracterizada por las leyes de la mecánica cuántica*. Cabe destacar que, aunque los métodos químico-cuánticos aproximados EV y OM difieren en la manera de seleccionar las funciones de onda de prueba para resolver la ecuación de Schrödinger, concuerdan en la definición que brindan de *orbital*. En su clásico texto *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry*, Pauling define el término ‘orbital’ de la siguiente manera: “siguiendo a Mulliken, deberemos referirnos ocasionalmente a las funciones de onda orbitales de un electrón tales como las funciones hidrogenoides de este capítulo como *orbitales*” (Pauling y Wilson 1935, 137).

En definitiva, las aproximaciones EV y OM constituyen el núcleo teórico de la química cuántica; y sólo dentro de tales aproximaciones el término ‘orbital’ adquiere significado. Por otro lado, es evidente que esta parte de la química tiene una clara *denda teórica* con la mecánica cuántica en tanto utiliza su formalismo matemático y legal. Es necesario señalar que la cuestión de cuál es el vínculo entre mecánica cuántica y química cuántica lejos está de constituir un problema saldado; por el contrario, existe abundante discusión teórica al respecto (*cfr.* Hettema 2012). Pero esto no nos impide afirmar que el concepto de *orbital* tiene su claro origen en la química cuántica, y que los orbitales son entidades matemáticas definidas y caracterizadas dentro del propio marco conceptual de la mecánica cuántica. Por lo tanto, el concepto de orbital pertenece a la química cuántica y constituye el término que se utiliza para denominar las funciones hidrogenoides dentro del tratamiento cuántico de un sistema de átomos o moléculas.

5.4 Los orbitales y la autonomía del mundo químico

Según Labarca y Lombardi, existe un concepto de orbital propio de la química molecular: “En la química molecular (...) el orbital atómico del átomo de hidrógeno es la región donde es más probable que se encuentre el electrón en torno del núcleo, una entidad física que puede definirse (si bien en átomos multielectrónicos no calcularse)

⁵ Las autofunciones del hamiltoniano representan los posibles estados con energía definida de un sistema.

con precisión” (2010b, 321-322). Si aceptamos las tesis pluralistas y consideramos el concepto de orbital tal como lo hacen los autores, para comprender qué es un orbital en química molecular sería necesario identificar las categorías y conceptos de clase específicos de este marco conceptual. Asimismo, sería de utilidad identificar cuál es, en este caso, la teoría que expresa el esquema conceptual propio de la química molecular y que brinda una determinada interpretación de este concepto, interpretación que, consecuentemente, sería propia de la química molecular. En su artículo de 2010(b), Labarca y Lombardi no especifican cuáles son tales categorías y conceptos, ni cuál es dicha teoría química.

Aquí hallamos, entonces, el primer problema en relación con la pretendida ruptura conceptual del concepto de orbital en química y física: no se establece claramente un marco de categorías y conceptos químico-moleculares que determinen qué constituye un orbital. Si esto es así, no es legítimo afirmar que los orbitales *sean definidos por la química molecular o que tengan una interpretación propia en esta disciplina*.

La tarea que los autores abordan, consistente en vincular el concepto de orbital a una teoría química, no es en modo alguno sencilla, especialmente cuando toman como ejemplo una parte de la química a la que denominan *química molecular*. Esta denominación presenta el problema de ser demasiado amplia. Si por química molecular entendemos, por ejemplo, la química de una molécula y su interacción con las demás, cabe bajo esta caracterización un amplio espectro de teorías, con sus categorías y conceptos. Éstas no permitirían configurar con precisión una ontología química que, siguiendo a los autores, diera pie a una interpretación específicamente química del concepto de orbital.

Pero, por otro lado, siguiendo la interpretación que Lombardi y Labarca ofrecen del concepto de orbital, podría afirmarse que por medio de la expresión ‘química molecular’ los autores están haciendo referencia, en sentido estricto, a la química estructural. Es la química estructural la que trata acerca de la disposición de los átomos en el espacio y su relación con su comportamiento químico. En efecto, la interpretación *química* que los autores brindan del concepto de orbital está relacionada con el papel explicativo que cumplen los orbitales hibridados en el diseño de estructuras químicas: “el hecho de que el orbital atómico tenga una forma compleja debido a la interacción entre electrones no implica la inexistencia de la región del espacio donde es más probable que se encuentren los electrones del átomo considerados en su conjunto. La importancia de esto último reside en que precisamente en términos de la forma de esta región se explican los enlaces entre átomos y la estructura geométrica de las moléculas” (Labarca y Lombardi 2010b, 321).

Interpretando de este modo las intenciones de Labarca y Lombardi, nos preguntamos acerca del referente del término ‘orbital’ dentro del ámbito de la química estructural. El concepto de orbital aparece en química estructural como ayuda para explicar la geometría molecular (*molecular shape*). Pero los orbitales que permiten dar cuenta de tal geometría no son exactamente los orbitales atómicos referidos en esta discusión, sino que son orbitales de un tipo *diferente* denominados *orbitales hibridados*, y hacen referencia al cambio de cuantización de los electrones cuando hay una unión química. No obstante la diferencia, estos orbitales hibridados también se obtienen gracias al uso de

las leyes de la mecánica cuántica, al igual que los orbitales atómicos. Por consiguiente, no hay en química un único tipo de orbital, sino que orbitales de diferentes tipos permiten explicar distintas propiedades de los átomos y moléculas.

Respecto de la interpretación “química” del concepto orbital, Labarca y Lombardi (2010b) señalan la relevancia que tiene la regla de Born para tal fin: “La química reconoce el formalismo cuántico para describir el átomo, pero retiene el concepto de orbital a través de la regla de Born” (2010b, 316). Sin embargo, su argumentación no considera que la regla de Born es una ley específicamente mecánico-cuántica, lo cual pone de manifiesto que el concepto de orbital sólo puede definirse en un marco cuántico. Por otra parte, los autores no reconocen que los orbitales se introdujeron en la química estructural después del nacimiento de la química cuántica. Esto se debe al hecho de que el concepto de orbital adquiere su significado en el marco de la química cuántica, de modo que no hay una interpretación del concepto que provenga propiamente de la química clásica.

La química cuántica puede ser pensada como una teoría semicásica, en el sentido de que, a pesar de utilizar el formalismo cuántico, incorpora supuestos clásicos en sus aproximaciones. Tales supuestos, provenientes de la química clásica, son los que hacen a la química cuántica una disciplina ambigua, que contiene ingredientes provenientes de ontologías incompatibles (volveremos sobre este punto más adelante). Sin embargo, los elementos de clasicidad de la química cuántica no tienen que ver con la construcción de la entidad “orbital”, ya que el término es uno de los elementos que provienen de la mecánica cuántica.

Por otra parte, los orbitales pueden ser utilizados dentro de la química estructural para dar cuenta de la geometría de una molécula, como afirman Lombardi y Labarca. Pero esto no significa que exista una teoría claramente delimitada *dentro de esta parte de la química* que permita identificar y caracterizar qué es un orbital. Por el contrario, lo que sean los orbitales queda determinado por la química cuántica; por lo tanto, cabría afirmar que éstos no existen dentro del marco conceptual de la química estructural. Esto significa que, aun si seguimos la posición pluralista de Labarca y Lombardi, debemos afirmar que el referente del término ‘orbital’ viene fijado por la mecánica cuántica y no por la química.

Por esta razón, consideramos que no es posible defender la autonomía ontológica del mundo químico a partir de un análisis del concepto de orbital que le adjudique dos interpretaciones correspondientes a dos ontologías independientes, dado que esta conclusión no se sigue de lo que arroja tal análisis. El análisis del concepto de orbital muestra, contrariamente, que los orbitales no existen en el mundo de la química sin las leyes de la mecánica cuántica. Aceptando que la ontología de una teoría es dependiente del marco conceptual dentro del cual tiene lugar dicha teoría, entonces, puesto que el concepto de orbital pertenece a la química cuántica, refiere a una entidad matemática propia de a de la mecánica cuántica.

5.5 Química cuántica, modelos y aproximaciones.

Hemos argumentado que el concepto de orbital, sus denominaciones y usos en química están mediados por la aplicación de la mecánica cuántica a sistemas químicos, den-

tro del espacio disciplinar de la química cuántica, que se encuentra a mitad de camino entre ambas disciplinas, la física y la química (o, si se requiere mayor precisión, a mitad de camino entre la química estructural y la mecánica cuántica). Por esta razón, es necesario discutir acerca de la caracterización de la química cuántica como disciplina científica.

Indudablemente, debe reconocerse en primer lugar que la química cuántica posee una fuerte *deuda teórica* con la mecánica cuántica en tanto utiliza su marco legal y su formalismo matemático para describir las propiedades de un sistema de moléculas. Pero la aplicación de dichas leyes está mediada por supuestos químicos cualitativos acerca de la composición de los átomos y las moléculas. Un claro ejemplo de ello es el uso que se hace de los resultados que arrojan las soluciones de la ecuación de Schrödinger y la regla de Born para explicar estructuras químicas. Estos supuestos químicos, “que están a la base de los enfoques acerca de la estructura de las moléculas y de los esquemas de aproximación utilizados para resolver la ecuación de Schrödinger, permitieron desarrollar una disciplina que actualmente goza de una innegable autonomía pragmática: la química cuántica nuclea una comunidad científica bien definida que, a pesar de inevitables desacuerdos, comparte objetivos y metodologías” (Lombardi y Martínez González 2012, 658).

Como hemos señalado, entonces, los orbitales en química pertenecen a la química cuántica. Sin embargo, se impone la pregunta: ¿cuál es la relación entre química cuántica y mecánica cuántica? Para responder a esta cuestión es necesario recordar que, desde sus inicios los métodos aproximados EV y OM han sido considerados programas competidores para explicar el enlace químico. Esta situación se ha mantenido con el desarrollo de la mecánica cuántica, a pesar de que ambos enfoques en situaciones límite son equivalentes cuando se aplican al mismo sistema (Van Vleck 1935). En esta química cuántica emergente, la decisión entre ambos enfoques no descansó en su capacidad predictiva, sino en los conceptos cualitativos involucrados para desarrollar ambas aproximaciones (para un desarrollo extenso de este problema *cfr.* Woody 2012). En este sentido, las aproximaciones tenían valor explicativo en tanto estaban justificadas conceptualmente por conceptos químicos clásicos acerca de la composición de una molécula. Sin embargo, con el aumento del poder de cómputo debido a los ordenadores, se constituyó la “era de la caja negra” en química cuántica. Este enfoque, que caracteriza en gran medida el trabajo de la química computacional moderna, no permite encontrar en la química cuántica un referente claramente delimitado para conceptos provenientes de la química. En este sentido, las aproximaciones son sólo *instrumentos* para afrontar la imposibilidad de solución exacta de la ecuación de Schrödinger para sistemas de muchos cuerpos. Charles Coulson es enfático en esta diferenciación entre ambas concepciones de los métodos aproximados: “El abismo entre los dos grupos es tan grande que ahora hay pocos puntos que los pueda unir [...] en el futuro deberíamos tener los dos tipos de conferencias o estar preparados para planear sesiones paralelas para los entusiastas del grupo I y del grupo II” (1960, 173).

Sobre esta base, debe admitirse que la química cuántica no cuenta con una teoría propia en sentido estricto: la química cuántica utiliza una mecánica cuántica especiali-

zada a través de dos *modelos* que permiten aplicar el formalismo matemático y legal de mecánica cuántica. Pero esto no significa que la química cuántica sea reducible a la mecánica cuántica, pues precisamente estos dos enfoques (EV y OM) para construir funciones de onda de prueba para sistemas moleculares involucran una serie de aproximaciones *expresadas químicamente*, que permiten resolver la ecuación de Schrödinger para sistemas moleculares. Tales aproximaciones, que pertenecen al ámbito de la química cuántica, representan un conflicto para la ontología de la mecánica cuántica, pues introducen supuestos clásicos, como la identificación de los electrones y la suposición de núcleo fijo para proveer una estructura electrónica a una molécula –aproximación Born-Oppenheimer (para una discusión sobre este punto, *cfr.* Lombardi y Castagnino 2010). Por tal razón, estos dos modelos se encuentran a mitad de camino entre la química estructural y la mecánica cuántica, y expresan el uso de dos teorías ontológicamente incompatibles. En definitiva, la propia química cuántica carece de una ontología claramente identificable (para una discusión acerca del papel de los modelos en química cuántica y de la ontología de la disciplina, *cfr.* Lombardi y Martínez González 2012).

En resumen, el hecho de aceptar la propuesta pluralista de raigambre kantiana no fuerza a aceptar que el concepto de orbital tenga una interpretación propia en el campo de la química, independiente de la física. Como hemos señalado, el concepto de orbital pertenece a la química cuántica que, a pesar de no tener una ontología bien definida, permite concebirlo mediante el esquema de conceptos que le provee la mecánica cuántica. Sin duda, la cuestión acerca de la interpretación ontológica de la mecánica cuántica continúa siendo un problema abierto en nuestros días, y hemos intentado mantenernos neutrales acerca de ello. Por este motivo, en general nos hemos referido al *concepto* de orbital como proveniente del ámbito teórico de la mecánica cuántica y recibido por la química cuántica, sin pronunciarnos definitivamente acerca de la *existencia real* de los orbitales, lo cual implica un análisis interpretativo de la mecánica cuántica que excede el presente trabajo.

Finalmente, estas consideraciones iluminan la diferencia entre autonomía e independencia, ya no en el plano ontológico, sino en el epistemológico y metodológico. Si bien la química cuántica se ha constituido como un ámbito metodológicamente autónomo, y caracterizado por sus propios modelos y aproximaciones, no puede hablarse de una independencia respecto de la mecánica cuántica, ya que esta teoría le suministra las bases teóricas más generales para su desarrollo.

6. Conclusiones

En el presente trabajo hemos cuestionado la idea de que la autonomía del mundo químico pueda ser defendida sobre la base de la consideración del concepto de orbital. Específicamente, hemos afirmado que no es posible defender dicha autonomía apelando a la existencia de dos interpretaciones diferentes del concepto de orbital, una propia de la química molecular y otra propia de la mecánica cuántica. De este modo, hemos objetado la idea de que existe una ruptura conceptual entre tales interpretaciones, ruptura que, de acuerdo con Lombardi y Labarca, permitiría argumentar en favor

de una ruptura ontológica entre el mundo químico y el mundo cuántico, lo que da razones para pensar autónomamente el mundo de la química.

Nuestra argumentación se basa en tres críticas. En primer lugar, hemos señalado que la denominación de *química molecular* es demasiado amplia y Lombardi y Labarca no ofrecen las categorías y conceptos propios de la química molecular, ni tampoco la teoría química específica que nos ayude a determinar qué son los orbitales en el marco de la química molecular. Aun más, hemos afirmado que no constituye una tarea sencilla determinar en qué consiste la química molecular.

En segundo lugar, hemos señalado que no hay una interpretación del concepto de orbital anclada propiamente en la química clásica. Por el contrario, el concepto de orbital pertenece, en sentido estricto, a la química cuántica y, de aceptar las tesis del pluralismo ontológico, habría que afirmar que refiere al mismo ítem al que referiría en mecánica cuántica. En otras palabras, los orbitales, si existen, pertenecen a la ontología configurada por el esquema conceptual expresado en la mecánica cuántica. Esto significa que no es posible defender la autonomía del mundo químico a partir del análisis de este concepto, pues no es un concepto al que le cabe una interpretación propia en química clásica; sólo cabe referir a la existencia de los orbitales en química a partir de la consideración de las leyes de la mecánica cuántica.

En tercer y último lugar, hemos señalado que la química cuántica no es un ámbito basado sobre una teoría propia. Independientemente de que se tome posición respecto de la posibilidad de su reducción, queda clara la deuda teórica que la química cuántica tiene respecto de la mecánica cuántica. Y esta deuda queda, asimismo, evidenciada en lo referente al concepto de orbital, que proviene de la mecánica cuántica.

Las conclusiones obtenidas en el presente trabajo no pretenden socavar el realismo pluralista en su conjunto: pueden existir buenos motivos científicos y filosóficos para adoptar un pluralismo ontológico para comprender la ciencia, en particular, las relaciones interteóricas; de hecho, Lombardi y sus coautores han señalado en diversos trabajos las diferentes relaciones interteóricas en física donde el pluralismo muestra su fecundidad. El objetivo central ha sido argumentar que, aun si se pretende defender una posición pluralista como la que adoptan Lombardi, Labarca y Pérez Ransanz, el concepto de orbital no sirve para tal propósito. Por otra parte, este trabajo abre el camino hacia una discusión más profunda acerca de la naturaleza disciplinar de la química cuántica y de sus compromisos ontológicos.

REFERENCIAS

- Atkins, Peter W. y Ron Friedman. 2005. *Molecular Quantum Mechanics*. New York: Oxford University Press.
 Cat, Jordi. 2007. The unity of science. En Edward N. Zalta, ed., *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, Fall 2007 Edition, Stanford University,
 URL = <<http://plato.stanford.edu/archives/fall2007/entries/scientific-unity/>>.
 Chamizo, José A. 2011. The public image of chemistry. *Educación Química* 22: 320–331.
 Córdoba, Mariana. 2011. Reducción epistemológica de la química a la física. ¿Superación de la metafísica?
 En Luis Salvatico, Cibelle Celestino Silva y Juliana M. Hidalgo Ferreira, eds., *Filosofía e Historia da Ciéncia no Cone Sul. Selección de trabajos del 7º Encuentro, Asociación de Filosofía e Historia da Ciencia del Cono Sur* (AFHIC), Campinas.

- Coulson, Charles A. 1960. Present state of molecular calculations. *Conference on Molecular Quantum Mechanics*, University of Colorado at Boulder, Junio 21-27. *Reviews of Modern Physics* 32: 170-177.
- Feyerabend, Paul K. 1962. Explanation, reduction, and empiricism. En H. Feigl y G. Maxwell (eds.), *Scientific Explanation, Space, and Time, Minnesota Studies in the Philosophy of Science*, vol. 3. Dordrecht: Reidel, 28-97.
- Fitts, Donald D. 2002. *Principles of Quantum Mechanics as Applied to Chemistry and Chemical Physics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Heitler, Walter y Fritz London. 1927. Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik* 44: 455-472. Traducción al inglés en H. Hettema, ed., *Quantum Chemistry - Classic Scientific Papers*. Singapore: World Scientific, 2000.
- Hettema, Henni. 2012. *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*. PhD dissertation. University of Groningen: Createspace Publishing Platform.
- Kuhn, Thomas S. 1970². *The Structure of Scientific Revolutions*. Chicago: The University of Chicago Press.
- Labarca, Martín y Olimpia Lombardi. 2010a. Why orbitals do not exist? *Foundations of Chemistry* 12: 149–157.
- Labarca, Martín y Olimpia Lombardi. 2010b. Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos. *Principia* 14: 309–333.
- Lombardi, Olimpia y Mario Castagnino. 2010. Matters are not so clear on the physical side. *Foundations of Chemistry* 12: 159–166.
- Lombardi, Olimpia y Martín Labarca. 2005. The ontological autonomy of the chemical world. *Foundations of Chemistry* 7: 125–48.
- Lombardi, Olimpia y Martín Labarca. 2006. The ontological autonomy of the chemical world: A response to Needham. *Foundations of Chemistry* 8: 81–92.
- Lombardi, Olimpia y Juan Camilo Martínez González. 2012. Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica? *Scientiae Studia. Revista Latinoamericana de Filosofía e Historia da Ciencia* 10: 649-670.
- Lombardi, Olimpia y Ana Rosa Pérez Ransanz. 2011. Lenguaje, ontología y relaciones interteóricas: en favor de un genuino pluralismo ontológico". *Revista Arbor. Ciencia, Pensamiento y Cultura* 187: 43–52.
- Lombardi, Olimpia y Ana Rosa Pérez Ransanz. 2012. *Los Múltiples Mundos de la Ciencia. Un Realismo Pluralista y su Aplicación a la Filosofía de la Física*. México: UNAM-Siglo XXI.
- Magnasco, Valerio. 2009. *Methods of Molecular Quantum Mechanics An Introduction to Electronic Molecular Structure*. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons.
- Manafu, Alexandru. 2013. Internal realism and the problem of ontological autonomy: a critical note on Lombardi and Labarca. *Foundations of Chemistry* 15: 225-228.
- McIntyre, Lee. 2007a. The philosophy of chemistry: ten years later. *Synthese* 155: 291–292.
- . 2007b. Emergence and reduction in chemistry: ontological or epistemological concepts? *Synthese* 155: 337–343.
- Mulliken, Robert S. 1967. Spectroscopy, molecular orbitals, and chemical bonding. *Science, New Series* 157 (3784): 13–24.
- Nagel, Ernest. 1961. *The Structure of Science*. New York: Hartcourt, Brace & World.
- Needham, Paul. 2006. Ontological reduction: A comment on Lombardi and Labarca. *Foundations of Chemistry* 8: 73–80.
- . 2010. Nagel's analysis of reduction: Comments in defense as well as critique. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41: 163–170.
- Newman, Mical. 2008. Chemical supervenience. *Foundations of Chemistry* 10: 49–62.
- Pagliaro, Mario. 2010. On shapes, molecules and models: an insight into chemical methodology. *European Journal of Chemistry* 1: 276–281.
- Pauling, Linus y E. Bright Wilson. 1935. *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry*. New York: McGraw-Hill.
- Primas, Hans. 1983. *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*. Berlin: Springer.
- Putnam, Hilary. 1981. *Reason, Truth and History*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Rip, Arie. 2009. Technology as prospective ontology. *Synthese* 168: 405–422

- Scerri, Eric R. 2000. Realism, reduction and the ‘intermediate position’. En N. Bhushan y S. Rosenfeld, eds., *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*. New York: Oxford University Press, 51-72.
- . 2001. The recently claimed observation of atomic orbitals and some related philosophical issues. *Philosophy of Science* 68: S76–S88.
 - . 2004. Just how ab initio is ab initio quantum chemistry? *Foundations of Chemistry* 6: 93–116.
 - . 2005a. Normative and descriptive philosophy of science and the role of chemistry. En D. Baird, E. Scerri y Lee McIntyre, eds., *Philosophy of Chemistry: Synthesis of a New Discipline*, Boston Studies in the Philosophy of Science, Dordrecht: Springer, 119-128.
 - . 2005b. Some aspects of the metaphysics of chemistry and the nature of the elements. *Hyle - International Journal for the Philosophy of Chemistry* 11: 127–145.
 - . 2007. The ambiguity of reduction. *Hyle - International Journal for the Philosophy of Chemistry* 13: 67–81.
 - . 2008a. Philosophy of chemistry, reduction, emergence and chemical education. En M. Ellison y T. Schoolcraft, eds., *Advances in Teaching Physical Chemistry*. Washington: American Chemical Society, 59–72.
 - . 2008b. General introduction to the papers. En *Collected Papers on Philosophy of Chemistry*. London: Imperial College Press, 1-22.
- Scerri, Eric R. y L. McIntyre. 1997. The case for the philosophy of chemistry. *Synthese* 111: 213–232.
- Schuster, Peter. 2005. ‘Less is more’ and the art of modeling complex phenomena: simplification may but need not be the key to handle large networks. *Complexity* 11: 11–13.
- Torretti, Roberto. 1980. *Manuel Kant*. Buenos Aires: Charcas.
- van Brakel, Jaap. 2000. *Philosophy of Chemistry. Between the Manifest and the Scientific Image*. Leuven: Leuven University Press.
- van Vleck, John H. y Albert Sherman. 1935. The Quantum Theory of Valence. *Reviews of Modern Physics* 7: 167-228.
- Vemulapalli, G. Krishna y Henry Byerly. 1999. Remnants of reductionism. *Foundations of Chemistry* 1: 17–41.
- Woody, Andrea. 2012. Concept amalgamation and representation in quantum chemistry. En R. Hendry, P. Needham y A. Woody, eds., *A Handbook of Philosophy of Science, vol. 6: Philosophy of Chemistry*. Oxford: Elsevier, 427-466.

MARIANA CÓRDOBA es Doctora en Filosofía de la Universidad de Buenos Aires (UBA), docente de la UBA y posee una Beca de Investigación Postdoctoral en el área de Filosofía de la Ciencia, otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Ha obtenido diferentes becas de investigación, ha publicado artículos en revistas nacionales e internacionales, capítulos en diferentes libros y ha participado en eventos académicos nacionales e internacionales.

ADDRESS: Instituto de Filosofía Doctor Alejandro Korn, Facultad de Filosofía y Letras, UBA. Puán 480, 4to piso, oficina 431. CP 1406, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina. E-mail: marianacordoba16@yahoo.com.ar

JUAN CAMILO MARTÍNEZ es estudiante doctoral de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnología (ANPCyT) en Historia y Epistemología de las Ciencias de la Universidad Nacional de Tres de Febrero (UNTREF). Trabaja en filosofía de la química, especialmente en los modelos aproximados del enlace químico covalente y su relación con la mecánica cuántica.

ADDRESS: Ciudad Universitaria Pabellón II 2º Piso, oficina 217, (C1428EHA) Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina. E-mail: olimac62@hotmail.com