



## Aportes al debate sobre la reducción de la química a la mecánica cuántica

Esteban Guillermo Szigety\*

La mecánica cuántica surge en las primeras décadas del siglo XX y se presenta como la condensación de una serie de leyes y experiencias que se realizaron a nivel de las partículas atómicas y subatómicas. Su formalismo comenzó a utilizarse y mostrar una gran capacidad predictiva en problemas relacionados no sólo con los átomos, sino también con las moléculas. Esta teoría despertó en los científicos la esperanza de subordinar otros temas de la física a la mecánica cuántica, y de pronto disciplinas científicas que parecían independientes comenzaron a ser pensadas nuevamente en base a estos nuevos fundamentos. De éstas, la que más parece haber perdido su autonomía es la química, la cual comenzó a ser vista como una disciplina puramente fenomenológica o aplicada. La causa de esto reside en que la estructura molecular es tan fundamental para la química, que comprender sus leyes implica de alguna manera tener una teoría completa de la química.

Entre los filósofos de la ciencia la idea de reducción de la química a la mecánica cuántica ha tenido y continúa teniendo sus partidarios acérrimos: “Hay muchos ejemplos de reducciones que se han logrado. Por ejemplo, una gran parte de la química clásica se ha reducido a la física atómica; y la teoría clásica del calor se ha reducido a la mecánica estadística” (Kemeny & Oppenheim, 1956, p. 7).

En este artículo seminal sobre la reducción interteórica en la física, los autores dejan claramente expresado que ya no hay nada que discutir al respecto. Bader (2003) es un ejemplo más actual de esta postura, fortaleciendo la idea de la física como una ciencia fundamental. En su artículo se enfrenta a las posturas que consideran el orbital como un concepto acuñado por la química, y sobre el cual no existen en la mecánica cuántica referencias teóricas. Bader defiende la mecánica cuántica (desde ahora MC) como la física subyacente de los átomos y moléculas: para él es posible hablar de una física de los enlaces químicos. De alguna manera estos

\* Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata. Buenos Aires, Argentina. esteszige@gmail.com

autores están tomando un compromiso fisicalista reduccionista, es decir, suponen que las leyes y hechos de la física determinan todas las leyes y hechos de la química.

La pregunta sobre si la química es una rama de la física es demasiado amplia para ser contestada en este trabajo. Con el objetivo de focalizar la atención en un debate de menor extensión, analizaremos las posturas alrededor de una temática más específica: ¿se pueden reducir los átomos y las moléculas, tratados por la química, a la mecánica cuántica? (Weisberg, Needham, & Hendry, 2019). Tanto la química como MC tienen distintos niveles ontológicos y explicativos, por lo tanto, para lograr una reducción adecuada para el caso, ambos niveles deben poder encontrar un modelo de reducción que los vincule adecuadamente.

Existe una reducción tradicional, basada en los escritos de Nagel; más específicamente, en el capítulo 11 de *La estructura de la ciencia* (1961). Para el autor la química admitiría una reducción a la mecánica cuántica del tipo que él denomina heterogénea. Reconoce que hay términos de la química como la valencia, el enlace o las reacciones químicas que no aparecen en la MC, y por lo tanto es necesario conectarlos mediante leyes-puente (bicondicionales). El problema radica en la dificultad de encontrar estas leyes que permitan unificar ambas teorías, correlacionando, por ejemplo, la valencia con los orbitales, y demostrando así que ambos términos refieren a la misma cosa. El reduccionismo tradicional es básicamente un modelo deductivista, y la posibilidad de alcanzarse en el caso de la química presenta una gran complejidad. No es sólo una simple deducción lógica; la reducción que Nagel plantea es poco realista e inaplicable para este caso, debido a los requisitos lógicos que supone. Los filósofos de la ciencia que han tratado de mostrar la irreductibilidad de la química han hecho hincapié en este punto.

Sobre la reducción interteórica de Nagel diremos que es una postura explícitamente jerárquica y acumulativa de la ciencia. El mismo Nagel, en su afán por alcanzar estos objetivos, no logró ver que la reducción interteórica, en este caso, es impracticable. Considero que las ideas de Nagel podrían ser retomadas si en un futuro próximo se produjese un desplazamiento de la MC por otra teoría que permita alcanzar la tan deseada reducción interteórica de la química. A finales del siglo XX y principios del XXI, distintos filósofos de la ciencia han concluido lo mismo: que, tal cual como conocemos a la MC, es imposible considerar la reducción de la química. A continuación, profundizaremos las posturas más significativas.

Autores como Scerri (1997, 2000) han presentado fundamentos cabales contra la reducción de la teoría química de átomos y moléculas a la MC. Para este autor, la ecuación de Schrödinger describe en términos bastante precisos un gran número de fenómenos físicos, y puede especificarse completamente por unas pocas cantidades, como las cargas y las masas de los núcleos y de los electrones, así como la constante de Planck. Se puede resolver con precisión para un pequeño número de partículas (átomos aislados y moléculas pequeñas), y concuerda en detalle minucioso con los experimentos. Sin embargo, como señalan Laughlin y Pines (2000), cuando la cantidad de partículas supera el número diez dejamos atrás el terreno de lo exacto y lo preciso. Es posible realizar cálculos aproximados para sistemas más grandes, que brindan conocimiento de los tamaños atómicos, la elasticidad y demás propiedades macroscópicas. El uso de técnicas de aproximación significa que ya no son deducciones de los primeros principios o de la teoría fundamental, sino que requieren experimentación. Es decir, ingresar detalles específicos de la química, detalles de la ciencia que se quiere reducir. Lo que esto indica es una ruptura del ideal reduccionista de derivar explicaciones de una gran cantidad de fenómenos a partir de unas pocas ecuaciones o leyes simples.

Scerri no es el único que se opone al reduccionismo de la química a la MC. Trabajos anteriores como el de Primas (1981) y el de Woolley (1978) argumentan que, aunque la MC pueda ser muy esclarecedora sobre el mundo de los átomos, no por ello implica la reducción de la química. Sostienen estos autores que existen dificultades conceptuales para acomodar el conocimiento químico de las moléculas a la MC. Uno de esos conceptos que no ha encontrado reducción posible son los de enlace químico, unión y estructura molecular (Primas, 1981), los cuales no pueden expresarse a no ser a nivel químico. Para Woolley (1978) ese último concepto, el de estructura molecular, está ausente en el nivel mecánico-cuántico. Argumenta que muchas estructuras complejas no requieren de la aproximación Born-Oppenheimer para ser calculadas, y hasta se pueden obtener resultados más precisos omitiendo por completo dicha aproximación. Podemos concluir, entonces, que estos autores no niegan que exista una dependencia ontológica entre ambas teorías, pero alcanzar una reducción interteórica resulta imposible. Una vez aceptada la inviabilidad de la reducción, veamos posibles soluciones al problema.

Mario Bunge desarrolla en varios de sus artículos (1982, 2003) el debate de la reducción de la química a la física. En su artículo de 1982 lleva su

análisis a la química cuántica e intenta mostrar que lo que es válido para la física cuántica lo es también para la química cuántica, entonces se dará por exitosa la reducción. Adecuadamente demostrado, Bunge (1982, apéndice I) deja en claro que a través de las premisas de la química molecular se pueden obtener variables macro de la química, como las constantes de equilibrio de una reacción química. En la química clásica, estas constantes son consideradas parámetros experimentales; por medio de la mecánica cuántica se convierten en parámetros teóricos de la química cuántica. La interpretación queda ceñida a procesos de dispersión de colisiones inelásticas. Bunge agudiza el ojo escudriñador y logra detectar que este aparente éxito se ve empañado por el uso inevitable en los pasos deductivos de un supuesto perteneciente a la química clásica (macroquímica): la ecuación de velocidad de la teoría cinética química. Esta ecuación empírica de la velocidad de formación del producto de reacción no se deduce, sino que es postulada cuando la constante de velocidad se calcula en términos teórico-cuánticos. Por lo tanto, la química molecular no se deduce directamente de la teoría cuántica. Bunge escribe:

A primera vista, la química está incluida en la física porque los sistemas químicos parecen constituir una clase especial de sistemas físicos. Pero esta impresión es errónea, ya que lo que es físico acerca de un sistema químico son sus componentes más que el sistema en sí, que posee propiedades emergentes (aunque explicables) además de las propiedades físicas. (Bunge, 1982, p. 210)

La noción de emergentismo que Bunge introduce en esta cita es claramente incompatible con un reduccionismo fuerte al estilo de Nagel. Al no poder lograr una descripción completa desde la física, Bunge está aceptando que la MC continúa restringiendo el comportamiento de los sistemas de átomos y moléculas, aunque no pueda determinarlos completamente. La química pasa a ser una disciplina que estudia hechos autónomos de la física, pero que están asociados a sistemas físicos de orden superior.

Por otro lado, la relación entre la química y la MC ha sido tomada por algunos autores como caso paradigmático de verdadera superveniencia. Tomando la definición que nos ofrece la *Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Weisberg, Needham, & Hendry, 2019), la superveniencia es una condición necesaria para alcanzar la reducción. Por ejemplo, consideremos el caso de dos sistemas macroscópicos con propiedades idénticas que se han construido a partir de componentes microscópicos idénticos. La

observación de propiedades macroscópicas idénticas en cualquiera de los dos sistemas no necesariamente implica identidad de propiedades a nivel microscópico. Este tipo de relación no admite una ida y vuelta de un nivel de reducción al otro. Esta relación condicional es la denominada superveniencia. Si la relación entre la física y la química fuera de este tipo, estaríamos hablando de una reducción de estilo débil. Este argumento ha sido ampliamente utilizado en la filosofía de la ciencia y de la mente como una maniobra de rescate en la discusión cuando no se produce reducibilidad interteórica en las ciencias especiales, ya que se considera que la superveniencia no garantiza las consecuencias epistemológicas o explicativas que necesariamente se derivarían incluso de una fuerte dependencia ontológica entre dos niveles descriptivos diferentes.

Existen dos casos interesantes a plantear en esta discusión. El primero es el caso de los isómeros estructurales (moléculas con los mismos átomos, pero con diferentes estructuras moleculares) en los cuales su similitud no implica observar las mismas propiedades. El problema surge cuando consideramos la descripción mecánico-cuántica de isómeros como el dimetiléter ( $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ) y el etanol ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ). Ambos comparten un mismo hamiltoniano ( $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ ), es decir, la misma descripción mecánico-cuántica de sus estados físicos. Sin embargo, sus moléculas tienen comportamientos muy diferentes. El segundo caso, muy similar al anterior es el de los isómeros ópticos o enantiómeros. Estos compuestos comparten casi todas sus propiedades químicas y físicas, sólo se diferencian entre sí por el tipo de interacción que manifiestan con la luz polarizada (Fortin & González, 2013). En ambos casos, las distancias interatómicas son iguales entre los átomos de las moléculas, de modo tal que el hamiltoniano es exactamente el mismo. En consecuencia, la mecánica cuántica brinda la misma descripción para dos estructuras químicas que pueden efectivamente ser diferenciadas en la práctica a través de sus propiedades ópticas, punto de ebullición y otras características macroscópicas. Aunque Hendry (2006) argumenta que una reducción del tipo emergentista es la manera correcta de interpretar estos casos, en mi opinión una superveniencia parece ser la forma más acertada. Dado que ambos ejemplos presentan una asimetría notoria entre los niveles fundamental y especial, no hay forma de reconciliar esta relación si no es mediante este tipo de reducción débil. Ambos ejemplos rompen cualquier relación de simetría, ya que el nivel superior no puede realizar una explicación descendente. Por el momento, para aceptar una reducción fuerte deberían poder explicarse estos casos asi-

métricos y argumentar la inadecuación de la superveniencia en este caso. Creo que estos casos emblemáticos son consecuencia de la ausencia de un instrumento para la detección de variaciones cuantificables en la naturaleza micro de sus componentes. Se desconoce si la escalada de desarrollo tecnológico que la física y la química pueden lograr en un futuro permita resolver los problemas de medición a nivel micro.

Un autor que niega la reducción dura y se inclina por la superveniencia para destrabar el debate de la reducción de las disciplinas especiales es Kim. De él citamos el siguiente extracto:

La superveniencia no es un tipo de relación de dependencia, no es una relación que pueda colocarse junto con la dependencia causal, la dependencia reductiva, la dependencia mereológica, la dependencia basada en la definición o la vinculación, y similares. Más bien, cualquiera de estas relaciones de dependencia puede generar la covarianza requerida de propiedades y, por lo tanto, calificarse como una relación de superveniencia. (Kim, 1998, p. 14)

Kim dice acertadamente que la noción de superveniencia no pretende ser una solución completa para las disciplinas especiales. En un principio, la función de la superveniencia es establecer un patrón de covariación entre la mente y el cuerpo, señalando una dependencia asimétrica entre ellos. Se trata de una relación fenomenológica y explicativa, que ayuda a expresar el problema sin pretender darle una solución. A diferencia de otras tesis, la afirmación de la superveniencia parece decir algo positivo acerca de la relación entre las propiedades físicas y la química. Para ello Kim establece una tesis fisicalista no-reduccionista mediante la superveniencia. Por otro lado, su más alto logro es establecer una dependencia asimétrica entre la mente y el cuerpo, lo cual equivale a un fisicalismo mínimo que se puede aplicar a los ejemplos de los isómeros.

Creo que la idea de la superveniencia fue aceptada por aquellos influenciados por el argumento de la realización múltiple en el debate mente-cuerpo (Fodor, 1974). La tesis de las propiedades mentales como supervenientes de las propiedades físicas parecía ajustarse muy bien a los requisitos metafísicos del funcionalismo: prometía dar un sentido claro a la primacía del dominio físico y sus leyes, y así cumplir con los compromisos físicos de la mayoría de los funcionalistas como Kim (1998). Esta perspectiva es positiva en cuanto que no implica un reduccionismo físico fuerte y permite proteger la autonomía de la química. Cabría preguntarse

si la irreductibilidad interteórica que ha apoyado dentro de la filosofía de la química se transfiere fácilmente a los debates dentro de la filosofía de la mente, dando pie a un entrecruzamiento con corrientes fisicalistas no-reduccionistas de este último tiempo (Kim, 1998). La perspectiva de Fodor es claramente una posición intermedia entre el reduccionismo fuerte y la superveniencia, que parece ofrecer una forma de modelizar la reducción entre la mecánica cuántica y la química para los problemas actuales.

En definitiva, el anhelo de la filosofía de la química es lograr una descripción filosófica general de cómo su disciplina se relaciona con la física básica. Un químico de una forma u otra busca reconfortarse en la idea de estar haciendo legalmente ciencia, independientemente de lo que ocurra en un nivel más fundamental; pudiendo formular leyes y explicaciones con su propio vocabulario. A fin de cuentas, esto es lo que hacen constantemente los científicos especiales, pero necesitan de un sustento filosófico para ello. Está claro que no hay insumos suficientes, ni teóricos ni tecnológicos, para explicar la estructura y las funciones que vinculan una y otra teoría. Las nociones débiles como la superveniencia y la realización múltiple son los modelos más viables en el debate actual de la reducción de la química; concluyendo así que la reducción interteórica entre dos teorías tan fronterizas no está actualmente disponible.

## Referencias

- Bader, R. F. W. (2003). Letter to the editor: Quantum mechanics, or orbitals? *International Journal of Quantum Chemistry*, 94(3), 173-177.
- Bunge, M. (1982). Is chemistry a branch of physics? *Zeitschrift für allgemeine Wissenschaftstheorie*, 13(2), 209-223.
- Bunge, M. (2003). *Emergence and convergence: Qualitative novelty and the unity of knowledge*. Toronto: University of Toronto Press.
- Fodor, J. A. (1974). Special sciences: Or the disunity of science as a working hypothesis. *Synthese*, 28, 97-115.
- Fortin, S., & González, J. C. M. (2013). La relación entre química y física: Isomerismo óptico y la paradoja de Hund. *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, 13(26), 199-224.

- Hendry, R. F. (2006). Is there downward causation in chemistry? En D. Baird, E. Scerri, & L. McIntyre (Eds.), *Philosophy of chemistry: Synthesis of a new discipline* (pp. 173-189). Dordrecht: Springer.
- Kemeny, J. G. & Oppenheim, P. (1956). On reduction. *Philosophical Studies: An International Journal for Philosophy in the Analytic Tradition*, 7(1-2), 6-19.
- Kim, J. (1998). *Mind in a physical world: An essay on the mind-body problem and mental causation*. Cambridge: MIT Press & Bradford Books.
- Laughlin, R. B., & Pines, D. (2000). The theory of everything. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 97(1), 28-31
- Nagel, E. (1961). *The structure of science*. London: Routledge & Kegan Paul.
- Primas, H. (1981). *Chemistry, quantum mechanics and reductionism: Perspectives in theoretical chemistry*. New York: Springer-Verlag.
- Scerri, E. R. & McIntyre, L. (1997). The case for the philosophy of chemistry. *Synthese*, 111(3), 213-232.
- Scerri, E. (2000). Have orbitals really been observed? *Journal of Chemical Education*, 77(11), 1492-1494.
- Weisberg, M., Needham, P., & Hendry, R. (2019). Philosophy of chemistry. En E. Zalta, *The Stanford encyclopedia of philosophy* (Spring 2019 Edition). Recuperado de <https://plato.stanford.edu/archives/spr2019/entries/chemistry/>.
- Woolley, R. G. (1978). Must a molecule have a shape? *Journal of the American Chemical Society*, 100(4), 1073-1078.