

Acerca de la independencia de los modelos respecto de las teorías: un caso de la química cuántica*

Hernán LUCAS ACCORINTI y Juan Camilo MARTÍNEZ GONZÁLEZ

Received: 28/10/2015

Final Version: 26/01/2016

BIBLID 0495-4548(2016)31:2p.225-245

DOI: 10.1387/theoria.15235

RESUMEN: La concepción semántica de las teorías científicas supone la dependencia de los modelos respecto de las teorías. Algunos autores desafían tal supuesto a través del estudio de ciertos modelos concebidos como fenomenológicos. Sobre la base del análisis de los modelos atómicos y moleculares en química cuántica, en el presente artículo se argumentará en favor de una independencia de los modelos respecto de las teorías que no puede interpretarse como meramente histórica y relativa al contexto. Estos modelos ponen de manifiesto una independencia conceptual, constitutiva del proceso de modelización, que no resulta de una deficiencia contingente de la teoría, deficiencia que sería resuelta por el progreso futuro de la ciencia.

Palabras clave: relación modelos-teoría, concepción semántica, química cuántica, modelos atómicos moleculares.

ABSTRACT: The semantic view of scientific theories assumes the dependence of models on theories. Some authors challenge that assumption by means of the study of certain models conceived as phenomenological. On the basis of the analysis of atomic and molecular models in quantum chemistry, in this article we will argue for an independence of models from theories, which cannot be interpreted as merely historical and context relative. Those models shows a conceptual independence that is constitutive of the modeling process; such independence cannot be conceived as a result of a contingent deficiency of the theory used, deficiency that would be overcome by the future progress of science.

Keywords: model-theory relationship, semantic view, quantum chemistry, atomic and molecular models.

1. *Introducción*

Durante las últimas décadas, la noción de modelo ha concentrado un peculiar interés en el ámbito de la filosofía de la ciencia. Disputando el papel protagónico que las teorías cumplieron durante el siglo XX, los filósofos de la ciencia han comenzado a reconocer en los modelos un recurso metodológico fundamental e indispensable de la ciencia moderna. Dicho reconocimiento se ha manifestado en una proliferación de textos en los que se intenta caracterizar qué es un modelo, determinar sus usos, clasificar sus tipos y mostrar sus

* Agradecemos al Grupo de Filosofía de las Ciencias dirigido por Olimpia Lombardi en la Universidad de Buenos Aires al cual pertenecemos, por su constante respaldo. Este trabajo ha sido posible gracias al apoyo económico del subsidio N.º 57919 otorgado por la John Templeton Foundation.



funciones dentro del campo de la ciencia (ver, por ejemplo, Morgan y Morrison 1999, Morgan 1999, Suárez 2009, Weisberg 2013, Morrison 1999, 2011, 2015). Este proceso implicó un desplazamiento respecto de aquellas perspectivas tradicionales que no consideraban los modelos como articuladores del conocimiento científico y que desconocían aquellos casos donde los modelos no podían concebirse como meras derivaciones de las teorías.

En líneas generales, tanto la concepción sintáctica como la concepción semántica de las teorías científicas suponen la subordinación de los modelos respecto de las teorías y del mundo. Como afirma Mauricio Suárez (1999, 172), en la medida en que, en la tradición sintáctica, las teorías se conciben como sistemas axiomatizados en un lenguaje formal más reglas de correspondencia, y los modelos como aquellas interpretaciones que hacen verdaderos los axiomas de las teorías, no sólo se reduce la totalidad del conocimiento a las teorías, sino que colapsa la distinción modelo-mundo: la verdad de una teoría supone al *mundo como uno de sus modelos*. Por otra parte, la concepción semántica (CS), al desvincular la teoría de su sintaxis y presentarla a partir de la clase de sus modelos, establece la *dependencia de los modelos respecto de las teorías*.

Ahora bien, entre los múltiples elementos que componen el entramado de la ciencia, como las teorías, los modelos, los modelos de datos, los datos o los sistemas «*target*» (esto es, aquella parte o aspecto del mundo del cual se ocupa el modelo), el presente trabajo no indagará cuestiones relativas al contenido epistémico o la capacidad representativa de los modelos, ni al tipo de información que brindan respecto de los correspondientes sistemas *target*. Asimismo, tampoco se preguntará respecto al estatus óntico y epistémico de los datos («*datos puros*» o «*modelos de datos*») a partir de los cuales se construye y rectifica el modelo. Por el contrario, la propuesta será analizar la relación que existe *entre las teorías y los modelos* (y no entre los modelos y los sistemas *target*), relación que puede arrojar luz sobre la clásica disputa filosófica entre realistas e instrumentalistas acerca de la interpretación de las teorías científicas.

En el marco de esta propuesta general, los objetivos específicos del presente trabajo serán dos. En primer lugar, en el contexto de las discusiones alrededor del modelo de la superconductividad de los hermanos London, se identificará el núcleo argumentativo del debate, clarificando no sólo las diferentes posiciones en disputa, sino también el estado en el que se encuentra actualmente el debate. En particular, argumentaremos que la discusión se encuentra en un *impasse* como consecuencia de ciertos desacuerdos respecto a la interpretación de la noción de independencia y su papel en el proceso de constitución de los modelos.

En segundo lugar, como estrategia propositiva, intentaremos superar el *impasse* mencionado apelando a un caso aún no debatido suficientemente por la bibliografía en el contexto de la presente discusión: los modelos atómicos y moleculares en química cuántica. Este caso nos permitirá argumentar que la independencia entre la o las teorías y el modelo no puede ser considerada, como lo hacen los partidarios de la CS, como una independencia meramente relativa e histórica, susceptible de ser superada con el devenir del desarrollo teórico. Por el contrario, el caso de los modelos en química cuántica pone de manifiesto una independencia conceptual, que se instituye como constitutiva del proceso de modelización, y que no puede concebirse como consecuencia de una deficiencia contingente de la teoría utilizada; deficiencia que sería resuelta con el futuro progreso de la ciencia.

Para alcanzar tales objetivos, en la sección 2 comenzaremos por explicitar ciertas tesis fundamentales acerca de los modelos científicos que pueden adscribirse a los representantes de la CS. A continuación, en la sección 3, presentaremos el debate acerca de la relación entre modelos y teorías en torno del modelo de los hermanos Fritz y Heinz London (1935) que da cuenta del efecto Meissner. En la sección 4 señalaremos que los desacuerdos no quedan confinados al modo de concebir la relación entre teorías y modelos, sino que se extienden a sus consecuencias epistémicas respecto del modo en que se interpreta la naturaleza y la función de las teorías en la ciencia. Puesto que la discusión no parece poder saldarse mediante la consideración del modelo de los hermanos London, en la sección 5 presentaremos el caso de los modelos atómicos y moleculares en química cuántica. Éstos, al integrar constructivamente teorías incompatibles, constituyen un importante escollo para algunos aspectos de la CS. Finalmente, en las conclusiones, presentaremos algunas perspectivas acerca de la necesidad de fortalecer una filosofía de la ciencia abierta a las peculiaridades de las diferentes disciplinas científicas.

2. *La concepción semántica y el punto de vista teórico-dominante*

Comencemos por explicitar ciertas tesis fundamentales acerca de la relación entre teorías y modelos, que son comunes tanto a la concepción sintáctica como a la concepción semántica de las teorías científicas (ver van Fraassen 1989, Díez y Moulines 1997, da Costa y French 2003, Suárez y Cartwright 2008, Bailer-Jones 2009, Le Bihan 2012):

- (i) Los modelos dependen de las teorías.
- (ii) Un modelo de una teoría es tal que no conduce a contradicciones con la teoría.
- (iii) Las correcciones (des-idealizaciones) que se introducen en los modelos deben o bien derivar de o bien estar legitimados por la teoría.
- (iv) En ambos casos (derivación o legitimación), los modelos *deben ser* modelos de las teorías, ya que en definitiva son los «*hacedores de verdad*» de las teorías.

Estas cuatro tesis recogen el espíritu *teórico-dominante* (*theory-driven*) de una concepción tradicional de las teorías científicas, en el sentido de que ponen de manifiesto la prioridad de la teoría y la consecuente dependencia de los modelos. Los modelos serían una suerte de mediadores entre las teorías y los fenómenos, puesto que las teorías sólo pueden aplicarse a situaciones concretas mediante modelos específicos. Desde esta perspectiva, el conocimiento científico estaría cifrado en las teorías, mientras que los modelos serían meras instancias aplicativas de ellas. Recordemos que, según la concepción semántica (CS), presentar una teoría es presentar el conjunto de sus modelos. Posteriormente, se intentará especificar la aplicación «propuesta» o «pretendida» que identifica, entre los modelos del conjunto, aquél que se constituye como candidato para la representación de los fenómenos del mundo.

Ahora bien, tal como lo pregonan algunos defensores de la CS, lo que se sostiene no es que la teoría *se identifique* con, es decir, no sea más que el conjunto de sus modelos (tal como afirman quienes interpretan la CS de un modo fuerte), sino que la teoría *se presenta* a partir de ellos. Sin embargo, esta ineludible distinción no cancela la dependencia de los modelos respecto de la teoría: la CS no permite la presentación de las aplicaciones propuestas mediante una estructura conceptual extraña a la teoría de la cual

los modelos dependen, ya que, si ello fuera posible, no habría relación entre la teoría y el mundo. La interdependencia pretendida entre la teoría y el mundo supone una interdependencia entre la teoría y aquello con lo cual la teoría se aplica al mundo: el conjunto de sus modelos. En este sentido parece ineluctable, desde esta concepción, sostener lo que se afirma en la tesis (i): los modelos dependen de las teorías. Y de ello se infiere de inmediato la tesis (ii): un modelo no puede conducir a contradicciones con la teoría de la cual depende.

Esto a su vez nos conduce a la tercera tesis (iii): la dependencia de los modelos respecto de la teoría exige que, en el proceso de modelización, los cambios, correcciones o «des-idealizaciones» que se realizan en un modelo deben *o bien derivar o bien estar legitimados* por la teoría. La disyunción se vuelve pertinente frente a la insistencia de los defensores de la CS en afirmar que su concepción nunca supuso una relación de deducibilidad. Sería ingenuo y erróneo, sostienen, suponer que los modelos, que incorporan una variada articulación de elementos complejos y de distinto tipo, pudieran derivarse lógicamente de las teorías. No obstante, si bien es cierto que la CS no afirma la mera deducibilidad de los modelos a partir de la teoría, sí requiere que los cambios que se introducen en el modelo para una correcta adecuación con los fenómenos estén legitimados por ella. Para que el éxito del modelo sea tomado como evidencia en favor de la teoría, el proceso de modificación o des-idealización debe fundarse en la teoría misma. Y, según los defensores de la CS, esto es así por una excelente razón: una buena teoría no debería confiar en ajustes *ad hoc* para lograr una adecuada explicación del fenómeno bajo estudio. Tal como afirman Mauricio Suárez y Nancy Cartwright (2008) recordando las tesis de Ernan McMullin (1985), «una actitud realista respecto de la teoría no necesita exigir que el modelo del fenómeno sea una consecuencia deductiva de la teoría, pero debe requerir que las simplificaciones introducidas en la descripción sean *legitimadas* por la teoría o por una descripción de los fenómenos que resultara aceptable de otro modo. Si así no fuera, la garantía no se trasladaría desde (la evidencia en favor de) el fenómeno a la teoría» (Suárez y Cartwright 2008, 67).

En consonancia con lo anterior, en el marco de la CS se considera que los modelos *deben ser* modelos *de* las teorías ya que en definitiva son sus «*hacedores de verdad*». En este sentido, Newton da Costa, autor que pretende brindar un giro revisionista de la concepción semántica, citando a Bas van Fraassen, alega que una teoría es verdadera si y sólo si uno de los modelos *permitidos* por la teoría es el mundo real (da Costa y French 2003, 32). De esta manera, las leyes de la teoría son verdaderas sólo si los fenómenos bajo estudio se ajustan a alguno de sus modelos. O sea, para que la teoría sea verdadera, entre todos sus modelos, *alguno* debe ser el modelo del fenómeno de interés. En caso contrario, no habría modo de legitimar el fenómeno representado por el modelo como evidencia en favor de la verdad de la teoría.

La estrategia de otras posturas revisionistas consiste en diferenciar entre una interpretación débil y otra fuerte de la CS. En efecto, Soazig Le Bihan (2012) supone que las críticas a la CS están dirigidas a una versión estrecha y equívoca que le adscriben atributos claramente falsos como, por ejemplo, que las teorías no son más que sus modelos, y que éstos tienen una relación lógica de deducibilidad respecto de aquéllas. Le Bihan considera posible esquivar las críticas proponiendo una versión débil que no suscriba tales tesis. En particular, afirma que es plausible interpretar de dos modos diferentes el enunciado ‘los modelos son *hacedores de verdad* de las teorías’. La primera versión sostendría

que todos los modelos son hacedores de verdad de una y sólo una teoría fundamental en tanto que se deducirían lógicamente de ésta. Según Le Bihan, esta perspectiva es claramente errónea ya que nadie niega que los modelos se construyen mediante aproximaciones de las ecuaciones de la teoría fundamental, aproximaciones que, en muchas circunstancias, implican ecuaciones incompatibles con la teoría fundamental. Como ejemplo de ello el autor esgrime el modelo del plano inclinado que, a contramano de la teoría de Newton, supone una gravedad constante y, por tanto, no puede constituirse como un hacedor de verdad de ella.

Sin embargo, esta plausible observación no es lo único que Le Bihan afirma respecto del problema. Por el contrario, el autor continúa aduciendo que se puede reinterpretar el supuesto de que los modelos son hacedores de verdad de las teorías mediante una especie de jerarquización de teorías y modelos, de modo tal que los modelos que son usados para representar el fenómeno serían modelos lógicos de varias teorías en lugar de una sola teoría. Bajo esta concepción, no habría una simple relación tripartita entre modelos, teoría y fenómenos, sino entre un conjunto de teorías escalonadas en el que cada una se construiría como hacedora de verdad de la que le antecede. De este modo, el modelo del plano inclinado no estaría localizado en el nivel de la teoría newtoniana sino en un nivel inferior: sería parte de un conjunto de modelos que corresponden a una teoría en la que la fuerza de gravedad es constante. En este sentido la teoría de Newton sería, a partir de las teorías y modelos intermedios, «derivativamente» verdadera.

Si bien esta diferenciación entre una interpretación fuerte y una interpretación débil de la CS puede ser iluminadora en relación al proceso de idealización, no es lo suficientemente poderosa como para desarticular el problema ya que incluso la versión débil continúa adscribiendo a la concepción teórico-dominante. En efecto, aun cuando los modelos no se deduzcan lógicamente de una teoría sino que dependen de ella a través de estadios intermedios de idealización, sigue cumpliéndose que los modelos *dependen* de las teorías con el fin de ser, directa o indirectamente, sus *hacedores de verdad*. Ésta es precisamente la idea que se pretende discutir en el presente trabajo. Como argumentaremos en los próximos apartados, las contradicciones entre los modelos y las teorías no son siempre producto de procesos de simplificación y/o aproximación exigidos por cuestiones pragmáticas que pueden paulatinamente eliminarse; sino que en ciertas circunstancias son constitutivas del propio proceso de modelización.

Es importante recordar que, si la versión estructuralista de la CS fuera una postura instrumentalista, entonces no aceptaría la tesis (iv) (ver van Fraassen 1989, da Costa y French 2003). De ser así, ciertos aspectos de las observaciones anteriores no le aplicarían. En efecto, si la CS no fuera una perspectiva realista acerca de las teorías científicas (esto es, una perspectiva que postula la posibilidad de adjudicar valores de verdad y así grados de confirmación a las teorías), sería inocuo enfatizar el hiato existente entre la teoría y aquellos elementos (los modelos) que se instituirían como garantías y/o instancias confirmatorias de las teorías. No obstante ello, el estructuralismo se encontraría aún comprometido con el punto de vista teórico-dominante a través de su adhesión a las tesis (i), (ii) y (iii).

Sin embargo tampoco resulta tan evidente que la versión estructuralista pretenda desprenderse de la adjudicación de valores de verdad a las teorías. Es cierto que, en este contexto, una teoría se define como un compuesto $T = \langle K, I \rangle$, donde K refiere al núcleo teórico entendido como una estructura matemática que, en tanto entidad no lingüística,

no es susceptible de ser verdadera o falsa, e I refiere a la aplicaciones propuestas. Pero el estructuralismo también introduce la noción de *aserción empírica*, que expresa, mediante un enunciado susceptible de ser verdadero o falso, la relación entre los sistemas empíricos de los que se pretende dar cuenta y los modelos determinados. De este modo, tal como afirman José Díez y Ulises Moulines (1997, 339) en cierta consonancia con la postura de Le Bihan, se podría admitir que las teorías sí pueden ser *derivativamente* verdaderas.

En definitiva, independientemente de la versión a la que se suscriba, la CS parece suponer la prioridad de las teorías y, consecuentemente, una dependencia de los modelos respecto de ellas.

3. *El debate en torno del modelo de los hermanos London*

En el presente contexto, el caso del modelo de los hermanos London (1935) sólo será de utilidad para identificar el nudo problemático sobre el cual este trabajo pretende intervenir. En consecuencia, no nos detendremos en el análisis pormenorizado del modelo, ya que esta tarea ha sido llevada a cabo por diversos autores (Cartwright, Shomar y Suárez 1995, French y Ladyman 1997, Suárez 1999, Cartwright y Suárez 2008). El propósito será identificar el núcleo argumentativo de la discusión, clarificando no sólo las diferentes posiciones en disputa, sino también el estado en el que se encuentra actualmente el debate.

Repasemos brevemente el problema suscitado en torno a los superconductores para evaluar su relevancia en el tema aquí planteado. En 1911, Heike Kammerlingh-Onnes y su alumno Gilles Holst descubrieron que la resistencia eléctrica del mercurio sólido caía abruptamente cuando se lo enfriaba a cierta temperatura crítica T_C cercana al cero absoluto. Esto se generalizó para diferentes materiales: para temperaturas $T < T_C$, donde T_C depende del tipo de material, se genera una «transición de fase» que convierte un conductor en un superconductor que permite el paso de corriente indefinidamente con una disipación insignificante de energía. En 1933, Walther Meissner y Robert Ochsenfeld encontraron que, en presencia de un campo magnético, el superconductor «expulsa» todo el flujo magnético interior. Se denominó «efecto Meissner» al hecho de que el campo magnético se hace nulo dentro del superconductor. Lo desconcertante del caso se debía al hecho de que las variaciones de temperatura no introducían modificación alguna en la estructura cristalina del material que justificara el cambio de comportamiento. En efecto, la ley de Faraday ($\text{rot } E = -dB/dt$) predice que, si el campo eléctrico E es nulo, se tiene que cumplir que la derivada temporal del campo magnético B también sea nula y, por lo tanto, el campo magnético B debe mantenerse constante en el tiempo. Según esta ley (o, en general, según las leyes de Maxwell), el flujo magnético a través de un metal no puede cambiar por modificarse la temperatura a un valor $T < T_C$.

El primer modelo exitoso que pudo dar cuenta del llamado ‘efecto Meissner’ al tratar un material ferromagnético (material cuyos momentos magnéticos se alinean frente a un campo magnético intenso) como diamagnético (material en cuyo interior se crea un campo magnético inducido opuesto al campo magnético aplicado exteriormente) fue el formulado por Fritz y Heinz London en 1935. Según el modelo, un mismo material, que es ferromagnético a temperaturas superiores a la temperatura crítica T_C , puede comenzar a compor-

tarse fenoménicamente de modo diamagnético por debajo de T_C . En función a ello los hermanos London formularon una ecuación para describir el índice o rango de expulsión del campo magnético:

$$\nabla^2 B = \lambda_L^{-2} B \quad (1)$$

donde la penetración de London λ_L , que mide el grado de penetración del campo magnético en el superconductor, depende de la cantidad de electrones por unidad de volumen que se encuentran en estado superconductor.

Más allá de los detalles técnicos mediante los cuales los hermanos London retomaron las ecuaciones de los modelos clásicos que le permitían conservar la resistencia cero mientras introducían determinadas ecuaciones propias del diamagnetismo (ver Suárez 1997, 1999, Suárez y Cartwright 2008), lo que aquí resulta relevante es resaltar el carácter fenomenológico del modelo: éste fue generado a partir de correcciones inducidas por el propio fenómeno, es decir, por la observación del efecto Meissner. En efecto, la riqueza epistémica de este caso estriba en que, como acuerdan los participantes del debate (ver da Costa y French 2000, Suárez 1997, Suárez y Cartwright 2008), las correcciones realizadas para dar cuenta del extraño efecto no fueron generadas exclusivamente a partir del electromagnetismo clásico ya que éste no brindaba motivo alguno para considerar ciertos materiales ferromagnéticos como diamagnéticos cuando adquirirían su temperatura crítica.

En este sentido para algunos autores, el modelo de los hermanos London, interpretado como un modelo fenomenológico, pondría en cuestión el punto de vista teórico-dominante de la CS, puesto que no sería la teoría, sino el fenómeno, el que se constituiría como regente del proceso de modelización. Por ejemplo, Suárez (1999) sostiene que no es cierto que una buena teoría ya contenga implícitamente en sí misma el modelo representativo adecuado en un sentido relevante. Si bien el modelo de los hermanos London utiliza indudablemente recursos de la teoría electromagnética clásica, esta teoría por sí sola no permitía formular el modelo sin el conocimiento empírico del efecto Meissner. En definitiva, según el autor, a diferencia de los supuestos de la CS, el modelo no fue y no pudo haber sido creado por un proceso de des-idealización de la teoría electromagnética vigente en 1933.

Asimismo, lo que merece cierta atención es el hecho de que los supuestos necesarios para la construcción del modelo no sólo fueron instituidos *ad hoc*, sino que también implicaban algún tipo de contradicción con la teoría vigente: a contramano de la teoría electromagnética aceptada en la época, se consideró un material ferromagnético como diamagnético (ver análisis detallado en Suárez 1997, 1999). Sobre esta base, Mauricio Suárez y Nancy Cartwright (2008) consideran que el modelo de los hermanos London pone en crisis las tesis propias de la CS, ya que cuestiona el hecho de que los modelos dependan de las teorías y, consecuentemente, sean sus hacedores de verdad.

En definitiva, el modelo de los hermanos London pondría de manifiesto la existencia de modelos que no se desarrollan en términos derivacionistas a partir de un proceso de des-idealización de la teoría. A su vez, la consecuencia epistemológica más importante en relación con el caso propuesto es que se presenta como un contraejemplo a la idea comúnmente aceptada según la cual es posible afirmar la verdad o inclusive la adecuación empírica de las teorías a través del comportamiento de sus modelos. En efecto, una pregunta

epistemológica relevante en el contexto de la discusión sería: si los modelos no dependen ni surgen exclusivamente de la teoría, la compatibilidad entre los modelos y los fenómenos del mundo, ¿aumenta el grado de verosimilitud de las teorías?; o, al menos, ¿se relaciona con la verdad de la teoría? Nótese que estas preguntas no dependen de los clásicos problemas relacionados con los procesos de abstracción y/o idealización sobre el sistema que se pretende representar. Por el contrario, lo que aquí se pone en juego es la posibilidad de obtener elementos en favor de la verdad de las teorías a partir del éxito de sus modelos, pues precisamente lo que nos preguntamos es si puede decirse que las teorías posean algo así como «sus» modelos.

4. Dependencia y hacedores de verdad

El modelo de los hermanos London se convirtió en un ejemplo paradigmático en la discusión acerca del papel de los modelos entre los partidarios de la CS, como Steven French, James Ladyman, Otávio Bueno y Newton da Costa (French y Ladyman 1997, 1998, 1999, Bueno 1997, da Costa y French 2000, 2003, Ladyman 1998, 2002, French 1999, Bueno, French y Ladyman 2002), y los partidarios de una concepción instrumentalista, denominada en ocasiones concepción ‘*toolbox*’ de las teorías, cuyos principales representantes son Suárez, Cartwright y Towfic Shomar (Cartwright, Shomar y Suárez 1995, Suárez 1999, 2009, Suárez y Cartwright 2008). Ahora bien, los desacuerdos no giran en torno a los pormenores técnicos del ejemplo ni al modo en que el modelo fue formulado. La pregunta que se impone como piedra angular de las diferencias entre ambas posturas no es si efectivamente el modelo de los hermanos London es fenomenológico e independiente, sino, por el contrario, ¿qué se entiende por fenomenológico y por independiente? En efecto, no se discute el hecho de que el modelo de la superconductividad no podía haber sido modificado sin el descubrimiento del efecto Meissner, ya que fue este efecto el que permitió pasar de la descripción de los superconductores como materiales ferromagnéticos a su tratamiento análogo a materiales diamagnéticos; tampoco se discute que tal analogía no estaba legitimada por la teoría vigente ya que el modelo fue construido mediante estrategias *ad hoc* no respaldadas en la teoría. Como veremos, las discrepancias involucran equívocos no reconocidos, que esconden el hecho de que los desacuerdos no resultan, como pareciera ser cuando uno se aproxima por primera vez al tema, de una diferencia apreciable respecto de lo que se entiende por ‘independencia’. Los desacuerdos se refieren más bien a la *relevancia epistémica* de tal noción en el marco de la filosofía de la ciencia en general y de la filosofía de los modelos en particular; y principalmente, a las consecuencias que de tal independencia, unánimemente reconocida, pueden extraerse respecto de la función y el estatus de las teorías científicas.

Pero entonces ¿cómo debe entenderse la noción de independencia?

En primer lugar, debe señalarse que existe un acuerdo general en cuanto a que dependencia y deducibilidad no deben asimilarse: cuando los partidarios de la CS afirman que los modelos dependen de las teorías no pretenden con ello afirmar una relación de deducibilidad. Esto último lo ponderan especialmente aquellos autores revisionistas de la CS que, sobre la base de la distinción entre las versiones fuerte y débil, pretenden eludir las objeciones aduciendo que los críticos no hacen más que caricaturizar la CS al concebirla, incorrectamente, desde una interpretación fuerte que asocia dependencia con deducibilidad.

Sin embargo, como dijimos, y en detrimento a lo que opinan tales revisionistas, los autores que critican la CS no pretenden establecer tal asimilación. En efecto, lo que consideran es que la cuestión de la dependencia teórica no se refiere a si existe una relación de deducibilidad de los modelos respecto de la teoría (pues todos acuerdan que no la hay), sino a cómo se justifican las modificaciones que se introducen en los modelos. La pregunta, por tanto, no es por la relación lógica que existe entre la teoría y los modelos, sino hasta qué punto es posible aceptar o justificar un cambio en el modelo que no está legitimado o generado desde el marco teórico sin que ello repercuta en el carácter epistémico de las teorías.

Por otro lado, analizar de tal modo la dependencia y evidenciar la existencia de tales cambios en donde la teoría no pareciera cumplir un papel rector, no significa, tal como por momentos se interpreta, que para los críticos de la CS la teoría no cumpla ninguna función en absoluto. En efecto autores como Steven French y James Ladyman erróneamente leen las críticas de tal modo cuando afirman que «la construcción del modelo de London y London no procedió fenomenológicamente, en el sentido de ser independiente de la teoría. Más bien se procedió considerando el contexto histórico previo y, en particular, preguntándose qué podía retenerse de tal contexto a la luz del trabajo de Meissner. Aún más, la propuesta de London y London no se elaboró en un vacío teórico» (French y Ladyman 1997, 382). Asimismo, Newton da Costa y Steven French sostienen que «tales modelos pueden funcionar independientemente (...), pero no son tan independientes de toda teoría» (da Costa y French 2000, 124). Como afirmamos, esta línea de defensa de la CS no da en el blanco ya que de ningún modo los críticos de la CS alegan que los modelos pueden formularse en un vacío teórico: «Por supuesto, estamos de acuerdo en que el contexto teórico amplio viene dado por las ecuaciones de Maxwell —ése fue nuestro punto de partida—» (Suárez y Cartwright 2008, 70). Pero el punto a considerar es que no había nada en la teoría electromagnética consabida hasta 1933 que permitiera usar la Ley de Ohm para algunos materiales y mantenerla suspendida para aquellos que se convirtieran en superconductores; como así tampoco había nada más allá de la analogía con el diamagnetismo, que se produjo gracias al descubrimiento del efecto Meissner, que habilitara a modificar las ecuaciones de modo que permitieran dar cuenta conjuntamente tanto de la resistencia cero como de la expulsión del campo magnético (para un desarrollo de las modificaciones en las ecuaciones ver Suárez 1999 y French y Ladyman 1997).

En otras palabras, no se pretende afirmar la independencia absoluta de los modelos respecto de las teorías, ya que se reconoce que indefectiblemente éstas cumplen una función. Lo que French, Ladyman y da Costa parecen no advertir es que, si bien los científicos de la época se preocuparon por lo que podía retenerse de la teoría vigente a la luz del efecto Meissner, ello no invalida el hecho, claramente señalado por Suárez y Cartwright (2008), de que nada había en ella que justificara la modificación de los modelos existentes para formular un nuevo modelo que, esencialmente, se impuso por motivos empíricos.

Además es necesario aclarar, pues ello también ha dado lugar a malentendidos, que el caso del efecto Meissner no evidencia meramente que la experiencia guía el proceso de modelización: esto, en general, es ineludible en ciencias fácticas y nadie lo pone en duda. Consecuentemente, cuando se afirma que el modelo de los hermanos London es un modelo fenomenológico no se pretende señalar el papel central de la experiencia en la formulación

del modelo, sino el hecho de que el modelo introduce modificaciones respecto de modelos previos que, motivadas por la evidencia empírica, carecían de un respaldo teórico en el contexto de la ciencia del momento.

En definitiva, el meollo del asunto no reside en negar la utilidad de las teorías, sino en determinar su función. En ocasiones, la línea de defensa de la CS se fundamenta sobre el supuesto de que los interlocutores prescriben algún tipo de independencia absoluta de los modelos respecto de la teoría. Por el contrario, la crítica a la concepción teórico-dependiente no requiere ni supone una prescindencia de las teorías. Simplemente advierte que los cambios en los modelos no pueden ser interpretados como meras des-idealizaciones dirigidas a representar los fenómenos con mayor detalle y precisión, sino que, en ocasiones, las rectificaciones necesarias, aun cuando se dan en un marco teórico de referencia, no están legitimadas por éste.

En el contexto de este debate, las diferencias conceptuales no se encuentran confinadas al problema de la relación entre teorías y modelos, sino que presentan consecuencias epistémicas sumamente relevantes respecto del modo en que se interpreta la naturaleza y la función de las teorías en la ciencia.

Bueno, French, Ladyman y da Costa pretenden minimizar las consecuencias epistémicas de la ya reconocida independencia entre modelos y teoría afirmando que tal independencia es *relativa y temporal* ya que fue superada por el desarrollo de la ciencia: «un modelo puede parecer «autónomo» en el sentido de que, *en el momento en que fue propuesto*, no quedaba claro cómo podría obtenerse de una teoría de alto nivel de un modo más o menos directo» (Bueno, French y Ladyman 2002, 515) (ver también da Costa y French 2000). En particular, el modo en que se instituyó el modelo de los hermanos London sería una «anomalía» circunstancial y, por tanto, debería ser considerado sólo como un modelo *preliminar*, superado por la teoría BCS, propuesta en 1957 por John Bardeen, Leon Cooper, y John Robert Schrieffer, que postula unos nuevos portadores de carga denominados ‘pares de Cooper’.

Para Suárez y Cartwright, en cambio, la relativa independencia de los modelos respecto de las teorías permitiría concebir el papel de las teorías de un modo diferente del tradicional. Según estos autores, la teoría dejaría de ser una entidad a ser confirmada mediante sus modelos precisamente porque, tal como muestra el caso de la superconductividad, no existiría nada como «*sus*» modelos. Dado que algunos modelos no se obtienen a partir de las teorías, el éxito de aquéllos no aumentaría la confirmación de éstas. En este sentido, la CS, específicamente la tesis de cobertura o dependencia legal, no sería una interpretación adecuada o suficiente para explicar la práctica científica. Por ello, Suárez y Cartwright (2008) abogan por una interpretación de las teorías científicas, no como estructuras abstractas susceptibles de ser verdaderas o falsas, sino como instrumentos útiles para la construcción de modelos.

Los partidarios de la CS que conciben a los modelos como hacedores de verdad de las teorías no adhieren a esta tesis. Para defender esta posición, así como también para robustecer la dependencia entre teoría y modelo frente a ejemplos como el de la superconductividad, utilizan la estrategia de relativizar la independencia en términos de un isomorfismo parcial, de modo de evaluar el modelo de los hermanos London sobre la base de la estructura que éste pudo retener: «el valor heurístico de la analogía puede también ser explicado en términos de similitud de estructura, entendida a su vez mediante el isomorfismo parcial entre las estructuras teóricas involucradas» (French y Ladyman 1997, 384).

Alcanzado este punto, la discusión entre los defensores y los críticos de la CS parece estancarse en una suerte de *impasse* puesto que, habiéndose acordado acerca de la *relativa* independencia del modelo respecto de la teoría, las dos partes no acuerdan respecto de las consecuencias epistémicas que de ello puede extraerse. Y el extensamente discutido caso del modelo de los hermanos London, a pesar de su riqueza histórica y conceptual, no brinda elementos suficientes para dirimir la cuestión en favor de una u otra postura. Por este motivo resulta interesante buscar algún otro caso que, en tanto ejemplo del modo en que se relacionan teorías y modelos, permita incorporar aspectos ausentes en el caso de la superconductividad. Aquí propondremos el caso de los modelos utilizados en química cuántica, que ha comenzado a ser tratado en la bibliografía filosófica. Un ejemplo de ello es el artículo de Olimpia Lombardi y Juan Camilo Martínez González (2012), que se pregunta acerca de la ontología a la cual refiere la química cuántica. Ese trabajo se ocupa del problema de la existencia de dos modelos incompatibles que se utilizan sin dificultades en la misma disciplina científica: *enlace de valencia* y *orbital molecular*. En la próxima sección, por el contrario, analizaremos el caso de teorías incompatibles que contribuyen a la formulación de un mismo modelo. La expectativa que subyace a esta propuesta consiste en que, aun cuando los ejemplos propuestos no conduzcan a un acuerdo final acerca de la relación entre teorías y modelos, brinden nuevos elementos que contribuyan a superar el estancamiento en el que se ha sumido la discusión.

5. Modelos atómicos y moleculares: clasicidad en química cuántica

Con el advenimiento de la mecánica cuántica en la década de 1920, el estudio de átomos y moléculas logró consolidar un espacio interdisciplinar denominado *química cuántica*, donde se conjugan los dominios de la química y la física: química estructural y mecánica cuántica convergen en los intentos por describir la estructura molecular, propiedad que cumple un papel central en la explicación de las propiedades químicas de las sustancias.

El modelo más básico en este campo disciplinar es el del átomo de hidrógeno. Se trata de un modelo de gran interés químico, pues representa el sistema más sencillo en este ámbito, compuesto por un núcleo (que contiene un protón en el caso del protio) y un electrón. Además, este modelo brinda las herramientas formales para la descripción de sistemas polinucleares de uno o más electrones, como el de la molécula de hidrógeno (H_2). Este modelo cuenta con la ventaja de ser uno de los pocos sistemas de interés químico que admite una solución exacta de la ecuación de Schrödinger. Para todos los demás casos, sólo es posible obtener soluciones aproximadas que generalmente están basadas en las soluciones del átomo de hidrógeno. Este modelo se puede generalizar para todos los sistemas monoeléctricos, que se conocen como sistemas *hidrogenoides*, como, por ejemplo, el ion del átomo de helio, He^+ , y el ion Li^{2+} ; del átomo de litio.

Para construir este modelo, formalmente se utiliza la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo o ecuación de Schrödinger de estado estacionario:

$$H_{tot} \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (2)$$

donde H_{tot} es el operador Hamiltoniano total, que permite calcular los valores posibles de la energía total del sistema representados por los E_i , y los Ψ_i corresponden a la función de

onda, elemento central de la mecánica cuántica en tanto representa el estado cuántico del sistema. Esta ecuación también puede concebirse como la ecuación que brinda los autovalores E_p y los autoestados Ψ_i del operador Hamiltoniano.

Para encontrar las soluciones de la ecuación de Schrödinger (2), el átomo de hidrógeno se modela como un sistema compuesto de un núcleo de masa M y carga e y un electrón con carga $-e$ y masa m_e , donde e es la carga del electrón. El operador Hamiltoniano para este tipo de sistemas contiene dos términos de energía cinética, uno para cada partícula, y un potencial asociado a la atracción electrostática entre el núcleo y el electrón. Los términos de energía cinética del núcleo E_{KN} y del electrón E_{Ke} tienen la siguiente forma:

$$E_{KN} = \frac{P_N^2}{2M} \quad E_{Ke} = \frac{p_e^2}{2m_e} \quad (3)$$

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

$$V = -\frac{e^2}{|R_N - r_e|} \quad (4)$$

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

$$H_{tot} = \frac{P_N^2}{2M} + \frac{p_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{|R_N - r_e|} \quad (5)$$

Cuando este Hamiltoniano se introduce en la ecuación de Schrödinger (eq.(2)), se obtiene:

$$\left(\frac{P_N^2}{2M} + \frac{p_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{|R_N - r_e|} \right) \Psi = E_i \Psi \quad (6)$$

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

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

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

donde el primer término representa la energía cinética de los núcleos, el segundo, la energía potencial debida a la interacción entre los núcleos, el tercero, la energía cinética de los

electrones, el cuarto, la energía potencial debida a la interacción entre los núcleos y los electrones, y el último, la energía potencial debida a la interacción de los electrones entre sí. A diferencia del caso de los sistemas hidrogenoides, este tipo de ecuación carece de solución analítica; por lo tanto, su tratamiento exige ineludiblemente la introducción de aproximaciones.

La aproximación que se encuentra en el corazón mismo de la química cuántica es la llamada aproximación de Born-Oppenheimer (en adelante, ABO) (Born y Oppenheimer 1927), que permite calcular los niveles de energía de moléculas complejas mediante el recurso de separar la función de onda de la molécula en su componente nuclear y su componente electrónica. El éxito de la aproximación depende del enorme valor de la relación entre las masas de los núcleos y las masas de los electrones; no obstante, incluso en los casos donde no brinda resultados suficientemente precisos para los fines requeridos, siempre se la utiliza como punto de partida de los cálculos.

La ABO procede en dos pasos. En el primer paso, la energía cinética de los núcleos (primer término de la eq.(7)) se elimina del Hamiltoniano total. Por lo tanto, el Hamiltoniano electrónico resulta

$$H_e = e^2 \sum_{\alpha < \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} + \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} - e^2 \sum_i \sum_\alpha \frac{Z_\alpha}{|r_i - R_\alpha|} + e^2 \sum_{i < j} \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (8)$$

donde ahora se suponen los núcleos fijos en el espacio. Esto significa que las posiciones nucleares R_α ya no se representan mediante operadores, sino como escalares. Se trata de un Hamiltoniano electrónico porque los únicos operadores cuánticos corresponden a los electrones. Con este Hamiltoniano H_e , en lugar del H_{tot} , se resuelve la ecuación de Schrödinger de la forma de la eq. (2). El segundo paso consiste en considerar un Hamiltoniano para los núcleos donde la función de onda calculada en el primer paso juega el papel de campo externo.

Es claro que la aproximación crucial de la ABO se introduce en el primer paso, donde las interacciones entre los electrones y los núcleos son tratadas en términos de electrones sometidos a un potencial coulombiano producido por núcleos fijos en posiciones definidas. Precisamente por ello, este paso de la ABO se conoce como *aproximación de núcleo fijo (clamped-nucleus approximation)*, y constituye una estrategia básica en química cuántica para la descripción de la estructura molecular. En efecto, en la práctica el químico cuántico comienza por postular una estructura dada por las posiciones fijas de los núcleos en el espacio, tal como se supone en la química estructural (no-cuántica) que se ocupa de la descripción geométrica de las moléculas. Dicha estructura genera una «superficie» de energía potencial en el espacio de las fases del sistema, «sobre» la cual se calcula el comportamiento de los electrones. Los resultados de estos cálculos son los que finalmente se comparan con los resultados empíricos para conservar o descartar la estructura geométrica previamente supuesta. Tal como afirma Hasok Chang «asumiendo que el núcleo se encuentra fijo en el espacio en sus lugares «clásicos», los químicos son capaces de usar la mecánica cuántica para calcular otros aspectos de moléculas tales como longitudes y energías de enlace precisas» (Chang 2015, 198; para una discusión general acerca de la relación entre química molecular y mecánica cuántica, ver Lombardi y Labarca 2005).

La pregunta relevante aquí es cómo se justifica la aproximación de núcleo fijo. La respuesta ingenua alude a la gran diferencia entre la masa M_α de los núcleos y la masa m_e de los electrones: puesto que M_α es mucho mayor que m_e , puede aplicarse el límite $m_e/M_\alpha \rightarrow 0$. En otras palabras, puede suponerse que la masa de los núcleos tiende a infinito y, como la energía cinética de un cuerpo de masa infinita es cero (ver eqs. (3)), los núcleos tendrían energía cinética nula y, en consecuencia, se encontrarían en reposo en posiciones definidas. Desde esta perspectiva, la ABO sería tan inocua como las aproximaciones por límite que se utilizan en mecánica clásica.

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

La respuesta que intenta mantenerse en el ámbito cuántico es más pertinente que la anterior, si bien, como veremos, también presenta sus dificultades. El Hamiltoniano total de la molécula H_{tot} puede separarse en una parte cinética $T_\alpha(P_\alpha)$, que representa el movimiento de los núcleos, y la parte electrónica H_e (ver ecuaciones (7) y (8)):

$$H_{tot} = T_n(P_\alpha) + H_e(p_i, r_i, R_\alpha) \quad (9)$$

El Hamiltoniano electrónico H_e no es función de los momentos nucleares P_α y, en consecuencia, conmuta con las coordenadas nucleares R_α . Además, cuando se desprecia el movimiento de los núcleos, ambos Hamiltonianos pueden considerarse aproximadamente iguales. Por lo tanto, las coordenadas nucleares R_α también conmutan con H_{tot} . Sobre esta base, la aproximación de núcleo fijo podría justificarse en los siguientes términos: puesto que la molécula se encuentra en un estado estacionario su estado es un autoestado de H_{tot} y, por lo tanto, tiene un valor definido de su energía total; a su vez, si H_{tot} tiene un valor definido, las coordenadas nucleares R_α , que conmutan con él, también tienen un valor definido, y esto significa que se encuentran en posiciones definidas en el espacio. Si bien aparentemente razonable, esta justificación encierra un supuesto no explicitado: el valor definido de la energía. En efecto, los autoestados del Hamiltoniano H_{tot} definen una base (o una base de proyectores, si es degenerado) del espacio de Hilbert. Como afirman Olimpia Lombardi y Mario Castagnino (2010, 163): «Pero hay muchos otros observables que no conmutan con H_{tot} , los cuales definen diferentes bases. ¿Por qué la autobase de H_{tot} y no de cualquier otro observable que no conmuta con H_{tot} , se elige para expresar $|Y\rangle$? Además, el teorema de Kochen y Specker (1967) nos enseña que todos los observables de un sistema cuántico no pueden tener valores definidos simultáneamente; por lo tanto, debe decidirse acerca del subconjunto «privilegiado» de observables con valor definido. ¿Por qué el Hamiltoniano H_{tot} es uno de esos observables privilegiados?» (Los autores también discuten el supuesto del vínculo autoestado-autovalor y señalan sus limitaciones).

Por lo tanto, la ABO no introduce una aproximación que puede, en principio, eliminarse en un proceso de des-idealización, sino que se basa en supuestos que resultan contra-

dictorios con uno de los principios de la propia teoría sobre la que se aplica, o, al menos, completamente ajenos a dicha teoría. Para utilizar una analogía en el ámbito no cuántico: no se trata de calcular el movimiento de un cuerpo sobre una superficie suponiéndola sin fricción porque el rozamiento es muy bajo, sino de suponer en el ámbito relativista que un cuerpo se mueve a una velocidad superior a la velocidad de la luz. En el primer caso, el supuesto puede eliminarse reintroduciendo la fricción y obteniendo una descripción más precisa del movimiento del cuerpo. El segundo caso, en cambio, viola uno de los principios básicos de la teoría especial de la relatividad, por el cual ningún cuerpo puede moverse a una velocidad superior a la de la luz.

Es importante resaltar que la justificación de la ABO no es una cuestión marginal en la química, ya que se trata de un recurso que está a la base de la definición de la estructura molecular, que constituye «el dogma central de la ciencia molecular» (Woolley 1978, 1074); «la estructura molecular es tan central para las explicaciones químicas que explicar la estructura molecular es casi como explicar la química completa» (Hendry 2010, 183). Por lo tanto, los supuestos no-cuánticos ingresan en el núcleo mismo del tratamiento de las moléculas. Como afirma Guy Woolley, mediante la descripción de la molécula a partir de «primeros principios» «no es posible siquiera calcular los parámetros más importantes en química, esto es, aquellos que describen la estructura molecular» (Woolley 1978, 1074). El autor considera que la imposibilidad de determinar la geometría de la molécula mediante la mecánica cuántica prueba que el concepto de estructura molecular no es más que una «poderosa e iluminadora metáfora» (Woolley 1982, 4).

En general, quienes defienden la reducción de la química molecular a la mecánica cuántica tienden a subestimar la ruptura conceptual entre ambos ámbitos y confían en que las entidades de la química molecular pueden ser caracterizadas exclusivamente en términos cuánticos. Éste es el caso del químico cuántico Hinne Hettema, quien en su libro *Reducing Chemistry to Physics* (2012) caracteriza la relación entre química y física desde lo que denomina un concepto nageliano «naturalizado» de reducción, que debilita el esquema reductivo original. Adoptando una visión Lakatosiana, reconoce no obstante que la ABO se ubica en el núcleo duro del programa de investigación en química cuántica y es lo que «nos permite poner entre paréntesis temporalmente algunos de las inquietudes de principio que surgen de la aplicación de la teoría cuántica a la química» (2012, 190). Incluso más allá del caso de la ABO, Hettema admite que la aplicación de la mecánica cuántica a la química exige la formulación de modelos no basados en principios («*unprincipled*»), los cuales «introducen una serie de supuestos que son inadmisibles desde un punto de vista basado en principios» (2012, 314). Según el autor, la práctica efectiva de la química cuántica pone de manifiesto que las estrategias propias de la disciplina «pueden sacar los conceptos de contexto y reutilizarlos de un modo no admisible para la teoría en la cual tales conceptos fueron originalmente introducidos» (2012, 337) (para una revisión crítica del libro de Hettema, ver Lombardi 2014).

Hasta aquí se ha considerado el problema de la justificación de la aproximación de núcleo fijo propia de la ABO. Sin embargo, la formulación de modelos moleculares conlleva dificultades que no dependen de la ABO y que podrían subsumirse, siguiendo a Woolley y Sutcliffe (1977), bajo el nombre del '*problema de la simetría*'. En efecto, si las interacciones entre los componentes de la molécula son coulombianas, las soluciones de la ecuación

de Schrödinger poseen simetría esférica, resultado independiente y previo a toda aproximación. Esto significa que, según la mecánica cuántica, una molécula en un autoestado de energía no podría poseer propiedades direccionales. Sin embargo, como es bien sabido, la asimetría de las moléculas poliatómicas es esencial para la explicación de su comportamiento químico. Robin Hendry considera el caso del ácido clorhídrico, que posee una distribución asimétrica de carga que explica su comportamiento ácido y su punto de ebullición; sin embargo, de acuerdo con la mecánica cuántica, el valor esperado del momento bipolar de una molécula en un autoestado arbitrario del Hamiltoniano total de la molécula es siempre cero (Hendry 2010).

Un caso particularmente relevante que pone de manifiesto el problema de la simetría es el caso de los *isómeros ópticos*. Se denominan isómeros los compuestos cuyas moléculas tienen el mismo número del mismo tipo de átomos, pero difieren en propiedades físicas y/o químicas. En el caso de los isómeros ópticos o enantiómeros, cada miembro del par es una imagen especular del otro, y se los distingue como dextrógiros o levógiros por su propiedad de rotar el plano de polarización de la luz polarizada en direcciones opuestas. La propiedad que distingue a los miembros de un par de isómeros ópticos se denomina *quiralidad*. Las moléculas quirales tienen una importante función en las reacciones enzimáticas de sistemas biológicos: muchas drogas farmacológicas son quirales, y generalmente sólo uno de los miembros del par exhibe actividad biológica. Por ejemplo, el aspartamo es un agente edulcorante con dos enantiómeros: uno de ellos es más de cien veces más dulce que la sacarosa; el otro es insípido o ligeramente amargo. Un caso dramático de la diferente actividad biológica de los enantiómeros fue el de la talidomida, una droga de fórmula molecular $C_{13}H_{10}N_2O_4$ lanzada al mercado en 1957 para calmar las náuseas durante el embarazo: mientras uno de los enantiómeros tenía el efecto deseado, el otro era un agente teratógeno que causó terribles malformaciones en decenas de miles de casos. Sin embargo, puesto que el Hamiltoniano de una molécula sólo depende de las distancias entre sus componentes, en ambos enantiómeros el Hamiltoniano es exactamente el mismo. En este sentido la mecánica cuántica por sí sola no puede dar cuenta de la isomería. Esto es considerado por muchos químicos cuánticos como uno de los problemas centrales de la disciplina. En palabras de Woolley (1998, 3), «la existencia de isomería, y la propia idea de estructura molecular que la racionaliza, permanece como un problema central para la físico-química». Y más recientemente: «¡Claramente, entonces, un autoestado de H no corresponde a una molécula clásica con estructura! Esta observación plantea la pregunta: ¿cuáles son las ecuaciones que determinan el estado cuántico de las moléculas? Más allá de la aproximación BO [Born-Oppenheimer], no tenemos idea.» (Sutcliffe y Woolley 2012, 416).

En definitiva, en la construcción de los modelos moleculares intervienen dos dominios teóricos: el clásico y el cuántico. El dominio cuántico aporta la ecuación de Schrödinger para la determinación de los niveles de energías. El dominio clásico, a través de la química estructural, aporta la geometría de la molécula, dada por las posiciones fijas de los núcleos en el espacio. Ambos dominios teóricos conceptualmente incompatibles contribuyen esencialmente a la construcción de los modelos moleculares.

El caso de los modelos utilizados en química cuántica brinda una nueva perspectiva para abordar el problema de la relación entre teorías y modelos. A diferencia del modelo de London y London del efecto Meissner, así como de otros ejemplos tratados en la bi-

bliografía —como el modelo de fluidos viscosos formulado en 1904 por Ludwig Prandtl, estudiado por Margaret Morrison (1999)—, los modelos moleculares no son modelos fenomenológicos que surgen directamente de los insumos que suministra la actividad experimental en un cierto entorno teórico, sino que se trata de constructos altamente teóricos, cuyas consecuencias empíricas se contrastan indirectamente. Pero lo más relevante respecto de la discusión que aquí abordamos es que los modelos no se construyen sobre la base de aproximaciones que pueden ir eliminándose paulatinamente para alcanzar una descripción más precisa, sino que uno de los supuestos que incorporan resulta incompatible con los principios de la teoría fundamental sobre la que supuestamente se basan. En el caso de la superconductividad, la relativa independencia del modelo respecto de la teoría vigente admite ser interpretada, como lo hacen los defensores de la CS, como provisoria y «remediable» con el ulterior desarrollo de la ciencia. En el caso de los modelos moleculares, la utilización de teorías incompatibles no es un recurso contingente a ser superado, sino que se encuentra en el núcleo mismo de la química cuántica como disciplina científica. Como afirma Hasok Chang: «Podría decirse que la mecánica cuántica de Schrödinger, ya desde su primer uso para un sistema de la vida real, nació con el supuesto del núcleo fijo. Debe enfatizarse nuevamente que esto no es algo que surge por la necesidad de aproximación, sino algo entretejido en la propia trama de la teoría cuántica elemental. El marco teórico de la mecánica ondulatoria de Schrödinger no brinda margen alguno para teorizar acerca del estado del núcleo» (Chang 2015, 199). En otras palabras, adscribir carácter provisorio y superable al modo en que se recurre a teorías incompatibles en química cuántica no es más que adscribir carácter provisorio a la mecánica cuántica misma, una tesis que puede resultar razonable en el marco de la filosofía de la ciencia, pero que es lógicamente previa a la discusión sobre la relación entre teorías y modelos y que no se relaciona con ella.

Precisamente por sus peculiares características, el caso de los modelos moleculares de la química cuántica brinda nuevos elementos a la discusión entre los defensores y los críticos de la CS respecto de la relación entre teoría y modelos. Habiendo aceptado ambas partes una independencia relativa y parcial del modelo respecto de la teoría, sin embargo no acuerdan respecto de las consecuencias epistémicas que de ello puede extraerse. Puesto que el caso de los superconductores no logra dirimir la cuestión, la discusión parece haberse estancado sin producir nuevos argumentos. El análisis de los modelos moleculares puede colaborar a superar este *impasse*, en la medida en que obliga a repensar el papel de las teorías en la práctica científica.

En efecto, siendo que un modelo molecular involucra teorías incompatibles, cabe preguntarse respecto a cuál de ellas el modelo en cuestión se constituye como hacedor de verdad. En otras palabras, hasta qué punto es posible continuar sosteniendo que el principal papel que cumplen los modelos en ciencia es el ser elementos de prueba confirmatorios de la teoría. La existencia de modelos que integran constructivamente y de un modo empíricamente exitoso teorías incompatibles puede utilizarse incluso como argumento para poner en cuestión la interpretación realista de las teorías científicas.

Podría argüirse que, a pesar de lo recién señalado, las teorías continúan representando principios directrices en el quehacer científico. Si bien esto es cierto, no constituye un contra-argumento en favor de la concepción teórico-dependiente de los modelos. En efecto, el caso de los modelos moleculares no pretende mostrar que las teorías no

cumplen función alguna en la construcción de los modelos. Por el contrario, en este caso las teorías juegan un papel protagónico en la medida en que no se trata de modelos fenomenológicos sino altamente teóricos. Pero el hecho de que las teorías sean necesarias no implica una relación de dependencia entre éstas y los modelos. En efecto, los modelos moleculares, si bien contienen elementos o principios prescriptos por las teorías, se constituyen autónomamente ya que toman de ellas sólo aquello que necesitan para representar las moléculas, sin importar si tales elementos generan o no contradicciones en el ámbito teórico.

En definitiva, el caso propuesto contribuye a repensar las pretensiones realistas de las versiones tradicionales de la CS en favor de una visión instrumentalista de las teorías. Asimismo, la CS en su versión instrumentalista se podría encauzar sólo mediante una adecuada y profunda flexibilización de la noción de dependencia entre teorías y modelos, de modo tal que la misma permitiera dar cuenta de la incompatibilidad teórica en los modelos propios de la química cuántica aquí presentados.

6. Conclusiones

En el presente trabajo hemos intentado contribuir al debate acerca de la relación entre las teorías y los modelos utilizados en la práctica de la ciencia a través de un ejemplo científico no tradicionalmente analizado en este contexto de discusión. Los modelos moleculares propios de la química cuántica presentan la peculiaridad de integrar ineludiblemente teorías incompatibles, provenientes de los dominios clásico y cuántico. Esta característica puede utilizarse para argumentar no sólo que las teorías no «contienen» en sí mismas el conjunto de todos sus modelos, sino y fundamentalmente que los modelos se construyen de un modo independiente de las teorías: un modelo no lo es de una teoría particular respecto de la cual funciona como hacedor de verdad y/o elemento confirmatorio. Los modelos moleculares adquieren un estatus autónomo puesto que integran elementos teóricos de diferentes dominios, incluso incompatibles, en la medida en que resultan pragmáticamente necesarios. Por ello, la independencia de los modelos respecto de las teorías no es meramente provisoria y contingente, sino que adquiere un carácter conceptual en tanto constitutiva del propio proceso de modelización. Sobre esta base, el caso de los modelos moleculares parece abonar el terreno para una concepción instrumentalista de las teorías científicas, a la manera del enfoque toolbox, según el cual las teorías deben considerarse como herramientas útiles para la construcción de modelos.

Es interesante señalar que la tolerancia a la incompatibilidad que presenta la química cuántica no es exclusiva del caso en que se incorporan elementos teóricos incompatibles en un mismo modelo. Esta disciplina también pone de manifiesto dicha tolerancia cuando formula modelos incompatibles para obtener las funciones de onda de prueba para sistemas moleculares: como ya fue señalado, los enfoques de *enlace de valencia* y de *orbital molecular*, además de incorporar la aproximación de núcleo fijo, incluyen supuestos conceptuales y cualitativos diferentes acerca de naturaleza misma de las moléculas (ver Lombardi y Martínez González 2012). Para el enfoque de enlace de valencia, las moléculas están compuestas por sus átomos constituyentes, en los cuales los electrones tienen una ubicación localizada; es decir, los electrones se encuentran asociados a un núcleo particular. Por su parte, desde la

perspectiva del enfoque del orbital molecular, la molécula se concibe como una nueva entidad en la cual los átomos constituyentes ya no pueden ser identificados: por lo tanto, los electrones se encuentran totalmente deslocalizados, esto es, no pueden asignarse a un átomo particular. No obstante, ambos modelos se utilizan de un modo fructífero, constituyéndose como elementos centrales de la química cuántica.

Esta tolerancia a la incompatibilidad que manifiesta la química cuántica (y la química en general) abre nuevas perspectivas para ulteriores reflexiones. En particular, podría preguntarse en qué medida la visión teórico-dominante anclada en las propiedades lógicas de las teorías científicas ha sido influida por una suerte de «imperialismo de la física» (Scerri 2000, 421) predominante en la filosofía de la ciencia tradicional. Durante las últimas décadas, la filosofía de la ciencia ha incorporado el estudio de otras disciplinas científicas, como la química, con sus propias especificidades teóricas, pragmáticas y metodológicas. Este movimiento de apertura puede conducir a reconsiderar el modo en el que se concibe la actividad científica. No obstante, esta cuestión se encuentra más allá de los límites del presente artículo y podrá ser objeto de ulteriores trabajos.

REFERENCIAS

- Bailer-Jones, D.M. 2009. *Scientific Models in Philosophy of Science*. Pittsburgh: University of Pittsburgh Press.
- Born, M. y Oppenheimer, J. 1927. Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik*, 84: 457-484. Versión en castellano en http://www.accefyn.org.co/revista/Vol_22/84/375-391.pdf
- Bueno, O. 1997. Empirical adequacy: A partial structures account. *Studies in History and Philosophy of Science*, 28: 585-610.
- , French, S. y Ladyman, J. 2002. On representing the relationship between the mathematical and the empirical. *Philosophy of Science*, 69: 452-473.
- Cartwright, N., Shomar, T. y Suárez, M. 1995. The tool box of science. en W. Herfel, W. Krajewski, I. Niiniluoto y R. Wojcicki (eds.), *Theories and Models in Scientific Processes*. Amsterdam: Rodopi.
- Chang, H. 2015. Reductionism and the relation between chemistry and physics, en T. Arabatzis, J. Renn y A. Simoes (eds), *Relocating the History of Science: Essays in Honor of Kostas Gavroglu*. New York: Springer.
- Da Costa, N. y French, S. 2000. Models, theories and structures: Thirty years on. *Philosophy of Science*, 67: 116-127.
- y —. 2003. *Science and Partial Truth: A Unitary Approach to Models and Scientific Reasoning*. New York: Oxford University Press.
- Díez, J. y Moulines, U. 1997. *Fundamentos de la Filosofía de la Ciencia*. Barcelona: Ariel Editorial.
- French, S. 1999. The phenomenological approach to physics. *Studies in the History and Philosophy of Modern Physics*, 30: 267-281.
- y Ladyman, J. 1997. Superconductivity and structures: Revisiting the London account. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, 28: 363-393.
- y —. 1998. A semantic perspective on idealization in quantum mechanics, en N. Shanks (ed.), *Idealization VIII: Idealization in contemporary physics*, Poznan Studies in the Philosophy of the Sciences and the Humanities. Amsterdam: Rodopi.
- y —. 1999. Reinflating the semantic approach. *International Studies in the Philosophy of Science*, 13: 103-121.

- Hendry, R.F. 2010. Ontological reduction and molecular structure, *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, **41**: 183-191.
- Hettema, H. 2012. *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*. Groningen: Rijksuniversiteit Groningen.
- Hughes, R.I. 1989. *The Structure and Interpretation of Quantum Mechanics*. Cambridge MA: Harvard University Press.
- Kochen, S. and Specker, E. 1967. The problem of hidden variables in quantum mechanics, *Journal of Mathematics and Mechanics*, **17**: 59-87.
- Le Bihan, S. 2012. Defending the semantic view: What it takes. *European Journal for Philosophy of Science*, **2**: 249-274.
- Ladyman, J. 1998. What is structural realism?, *Studies in History and Philosophy of Science*, **29**: 109-24.
- . 2002. *Understanding Philosophy of Science*. London and New York: Routledge.
- . 2014. Linking chemistry with physics: arguments and counterarguments, *Foundations of Chemistry*, **16**: 181-192.
- y Castagnino, M. 2010. Matters are not so clear on the physical side, *Foundations of Chemistry*, **12**: 159-66.
- y Labarca, M. 2005. The ontological autonomy of the chemical world, *Foundations of Chemistry*, **7**: 125-148.
- y Martínez González, J.C. 2012. Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica?, *Scientiae Studia*, **10**: 649-670.
- London, E. y London, H. 1935. The electromagnetic equations of the supraconductor, *Proceedings of the Royal Society (London)*, **A149**: 71-88.
- McMullin, E. 1985. Galilean idealization, *Studies in History and Philosophy of Science*, **16**: 247-263.
- Morgan, M. 1999. Learning from models, en M. Morgan y M. Morrison (eds.), *Models as Mediators*, Cambridge: Cambridge University Press.
- y Morrison, M. 1999. Models as mediating instruments, en M. Morgan y M. Morrison (eds.), *Models as Mediators*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Morrison, M. 1999. Models as autonomous agents, en M. Morgan y M. Morrison (eds.), *Models as Mediators*. Cambridge: Cambridge University Press.
- . 2011. One phenomenon, many models: Inconsistency and complementarity, *Studies in History and Philosophy of Science*, **42**: 342-351.
- . 2015. *Reconstructing Reality: Models, Mathematics, and Simulations*. Oxford: Oxford University Press.
- Scerri, E. 2000. The failure of reduction and how to resist disunity of the sciences in the context of chemical education. *Science & Education*, **9**: 405-425.
- Suárez, M. 1997. *Models of the World, Data-Models and the Practice of Science*, PhD Thesis, London School of Economics, Agosto de 1997.
- . 1999. The role of models in the application of scientific theories: Epistemological implications, en M. Morgan y M. Morrison (eds.), *Models as Mediators*. Cambridge: Cambridge University Press.
- . 2009. *Fictions in Science. Philosophical Essays on Modeling and Idealization*. New York: Routledge.
- y Cartwright, N. 2008. Theories: tools versus models, *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, **39**: 62-81.
- Sutcliffe, B.T. y Woolley, R.G. 2012. Atoms and molecules in classical chemistry and quantum mechanics, en R.F. Hendry y A. Woody (eds), *Handbook of Philosophy of Science. Vol. 6, Philosophy of Chemistry*. Oxford: Elsevier.
- Van Fraassen, B.C. 1989. *Laws and Symmetry*. Oxford: Clarendon Press.
- Weisberg, M. 2013. *Simulation and Similarity: Using Models to Understand the World*. New York: Oxford University Press.

- Woolley, R.G. 1978. Must a molecule have a shape?, *Journal of the American Chemical Society*, **100**: 1073-1078.
- . 1982. Natural optical activity and the molecular hypothesis, *Structure and Bonding*, **52**: 1-35.
- . 1998. Is there a quantum definition of a molecule?. *Journal of Mathematical Chemistry*, **23**: 3-12.
- Woolley, R.G. y Sutcliffe, B.T. 1977. Molecular structure and the Born–Oppenheimer approximation, *Chemical Physics Letters*, **45**: 393-398.

HERNÁN LUCAS ACCORINTI es Profesor de Enseñanza Media y Superior en Filosofía por la Universidad de Buenos Aires (UBA). Se desempeña como docente en la materia «Introducción al pensamiento científico» del CBC de la Universidad de Buenos Aires (UBA) y actualmente se encuentra cursando el doctorado en dicha Universidad bajo la dirección de Olimpia Lombardi. Ha publicado en revistas y participado en eventos académicos del ámbito nacional y regional. (hernanaccorinti@gmail.com)

JUAN CAMILO MARTÍNEZ GONZÁLEZ es estudiante de doctorado en Historia y Epistemología de la Ciencia de la Universidad Nacional de Tres de Febrero (UNTREF). Actualmente es becario doctoral del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas (CONICET, Argentina) su área de investigación es la filosofía de la química bajo la dirección de Klaus Ruthenberg y Olimpia Lombardi. (olimac62@hotmail.com)

DIRECCIÓN: Instituto de Filosofía, Facultad de Filosofía y Letras, Universidad de Buenos Aires, Puán 480, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.