

# LA RELACIÓN ENTRE LA QUÍMICA Y LA MATEMÁTICA

Ivan Gutman\* y Eduardo A. Castro\*\*

\*Faculty of Science, University of Kragujevac, P.O. Box 60, YU 34000 Kragujevac, Yugoslavia

\*\*CEQUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, C.C. 962, La Plata 1900, Argentina

El cálculo diferencial e integral comenzó a usarse en la Química alrededor del período 1880-1890, en relación con la cinética química y la termodinámica. Esta línea de investigación prontamente adquirió identidad propia y así surgió la Fisicoquímica. El centro mismo de la Química no ha hallado todavía modelos matemáticos propios y adecuados, a pesar de algunos intentos tempranos (en la mitad del siglo XIX) y varios otros posteriores. Como consecuencia de ello, los químicos tradicionalmente no se han mostrado muy inclinados hacia las Matemáticas. Al emerger la Química Teórica (a principios del siglo XX) los conceptos centrales de la ciencia química (Tabla Periódica, enlace químico, reactividad química, estructura de las moléculas, etc.) pudieron ser explicados. Sin embargo esta tarea fue llevada a cabo principalmente por algunos físicos. Entre las razones que pueden explicar estos hechos se puede citar la gran dificultad de los químicos para comprender y manejar el formalismo matemático de la Mecánica Cuántica así como algunos errores conceptuales serios que se cometen al tratar distintas categorías de modelos y términos usuales en la Química y otras ciencias afines. Muchos comparten la opinión que toda la Química puede ser descripta adecuada y completamente por la teoría cuántica (ecuación de Schrödinger y otras similares). Sin embargo, esta afirmación debería tomarse con mucha precaución a fin de evitar posturas reduccionistas formalmente incorrectas.

En el año 1998 el Premio Nobel de Química fue otorgado a Walter Kohn «por su desarrollo de la teoría del funcional de la densidad» y a John A. Pople «por su contribución a los métodos computacionales en la química cuántica». Kohn posee un grado B. A. en Matemática y Física (1945), un grado de M. A. en Matemática Aplicada (1946) y un grado en Física (1948). Pople posee un Ph. D en Matemática (1951). Entonces, los laureados en 1998 en Química son, por su educación formal, matemáticos. Esto habla muy claramente de la gran importancia que la Matemática ha ganado en la Química Moderna.

La relación entre la Matemática y las Ciencias Naturales (o en términos más generales, la relación entre la Matemática y la realidad objetiva) es uno de los problemas más importantes de la metodología de las Ciencias Naturales y de la metodología de la Matemática. En este trabajo solamente consideraremos un aspecto de esta relación: la aplicación y la extensión de la Matemática a la Química. Nosotros estaremos principalmente interesados si y (en caso afirmativo) cómo las estructuras y los métodos matemáticos existentes pueden ser aplicados adecuadamente a la Química. El problema inverso, o sea

de que manera los hechos químicos y las teorías que los sustentan pueden llegar a influenciar la investigación matemática no será discutido aquí, lo cual no implica que tal clase de influencia necesariamente no exista.

La matematización de una ciencia ocurre cuando sus nociones y teorías están concebidas, fundamentadas y relacionadas con suficiente rigor y precisión. Entonces, la matematización siempre refleja una instancia más madura en el desarrollo de tal ciencia. Diferentes áreas concernientes a las Ciencias Naturales pueden ajustarse de distintas maneras a las estructuras matemáticas

existentes o aquellas son desarrolladas de una forma ad hoc. En algún sentido, la Química se ubica entre la Física (donde la Matemática encontró una aplicación casi universal) y la Biología (donde las aplicaciones matemáticas son bastante modestas). Esta observación implica que en la Química estamos enfrentados con una suerte de interferencia entre estos dos extremos.

## 1. UN POCO DE HISTORIA 1.1. El Principio

Hasta el siglo XIX la Química y la Alquimia estaban severamente limitadas al mero

registro de datos empíricos y llevó mucho trabajo crear alguna clase de teoría abstracta. En 1786 Kant dijo «Yo afirmo que cada rama de la ciencia natural contiene sólo tanta ciencia como contenido matemático pueda albergar .... Entonces la Química debe excluirse de las denominadas Ciencias Naturales». Si bien se puede estar en desacuerdo con la opinión de Kant acerca de la importancia de la Matemática en las Ciencias Naturales, su juicio emitido en el siglo XVIII sobre la Química y la vinculación con la Matemática es correcto. Habiendo transcurrido tantos años desde el momento de efectuar tal afirmación, la situación hoy día no es muy distinta.

Sin embargo, hacia el final del siglo XIX el panorama cambió radicalmente. En el corto lapso que va del año 1880 a 1900 emergió una ciencia enteramente nueva, ubicada entre los límites de la Química y la Física: la Fisicoquímica. Su primer éxito está asociado con el descubrimiento de la ley de acción de masas (Guldberg & Waage, 1876-1878) y las leyes fundamentales de la Termodinámica Química (van't Hoff, 1886). A modo ilustrativo podemos mencionar que en el año 1887 comenzó a aparecer la revista «Zeitschrift für Physikalische Chemie» y que en 1896 lo hizo el «Journal of Physical Chemistry», y que en esa época trabajaron investigadores de la talla de van't Hoff, Arrhenius, Gibbs, Nernst y Ostwald. En efecto, el primer resultado químico que requirió una matemática de cierta complejidad parece haber sido la ley de acción de masas (1876-1878), en la cual se empleó el cálculo diferencial e integral.

El rápido desarrollo de la termodinámica química y la cinética química hacia fines del pasado siglo XIX y los comienzos del siglo XX tuvieron como resultado el proyectar la impresión de que el fin aforado, aquel que tantos químicos habían soñado, finalmente se llegaba a materializar, o sea que la Química se convertía en una ciencia deductiva, en la que sólo era necesario establecer algunos pocos

principios básicos, a partir de los cuales el resto podía deducirse. Se demostró que conociendo las propiedades estáticas (i.e. independientes del tiempo) y dinámicas (i.e. dependientes del tiempo) de los compuestos químicos era suficiente para determinar experimentalmente sólo unos pocos parámetros (las denominadas constantes de equilibrio para el caso de las propiedades estáticas y las constantes de velocidad para proceder a la determinación de las propiedades dinámicas) y así poder llegar a establecer su dependencia con la temperatura. Como estas constantes de equilibrio y de velocidad son funciones continuas y regulares de la temperatura, la Fisicoquímica pudo aplicar exitosamente el poderoso formalismo del cálculo diferencial.

## 1.2. Aparecen las dudas

La desilusión se fue instalando gradualmente, cuando se comprendió que las teorías fenomenológicas, tales como la termodinámica y la cinética química no pueden, en principio, ser utilizadas para el cálculo (o sea, la predicción) de las constantes de equilibrio y de velocidad. A los fines de comprender esta imposibilidad citemos a Heisenberg: «La Química está vinculada a la calidad de la materia, su composición elemental y con la posibilidad de obtener una sustancia a partir de otra. La Física, por el contrario, está interesada en las relaciones cuantitativas entre fuerzas, masas y movimiento». De acuerdo con esta clasificación, casi toda la Fisicoquímica y una parte de la Química «usual» deberían ser incluidas en la Física, cosa que por supuesto, es discutible. Lo que sí resulta importante (y acerca de lo cual podemos estar seguramente de acuerdo) es que la «calidad de la materia» es el objetivo básico de la Química.

El principal problema de la Química está en saber cómo la estructura de un compuesto está vinculada con las propiedades de ese compuesto, o, lo que es lo

mismo, cómo las constantes de equilibrio y de velocidad dependen de la estructura del compuesto considerado.

Sin el apoyo de una teoría matemática subyacente, alrededor de la mitad del siglo XIX se desarrolló en el campo de la Química Orgánica la noción de «fórmula estructural». Algo más tarde, se elaboraron ideas similares en el área de la Química Inorgánica, especialmente por medio de los trabajos de Werner. Curiosamente, muy pronto los matemáticos reconocieron que las fórmulas estructurales conllevaban un rico contenido matemático. Así, Sylvester (que fuera un distinguido matemático de esa época) escribe en 1874: «Cuanto más estudio Química, más quedo impresionado por la armonía que existe entre las teorías químicas y algebraicas». Desgraciadamente, la investigación en este sentido fue interrumpida prontamente, para ser retomada sólo hace poco tiempo. Una de las razones para poder llegar a entender esta situación puede ser que en esa época la atención de los matemáticos orientados hacia la Química fue fuertemente atraída hacia los campos de la termodinámica y la cinética química (ver más arriba).

La otra razón que posiblemente pueda explicar este estado de cosas es el tradicional complejo de inferioridad de los químicos respecto de la Matemática. Esto tiene sus raíces históricas, pero también surge del hecho de que a pesar de numerosos sueños, esperanzas y esfuerzos, hasta el presente no se ha llegado a desarrollar un formalismo matemático adecuado, capaz de describir las cualidades de los compuestos, sus transformaciones e interconversiones y sus relaciones con propiedades cuantitativas. En consecuencia, la Química desarrolló su propio lenguaje en el cual las palabras (i.e. nociones específicamente químicas) no se encuentran definidas con precisión matemática (y quizás no lo puedan ser nunca), pero que para los químicos son «intuitivamente claras». Ejemplos de tales tér-

El postulado fundamental de Guldberg y Waage era que, para un sistema homogéneo, la velocidad de una reacción química es proporcional a las masas activas de las sustancias reaccionantes, tomándose la concentración molecular de una sustancia en disolución o en la fase gaseosa como una medida de su masa activa. A partir de ello desarrollaron un método para la comparación de afinidades, suponiendo que la constante de proporcionalidad era el coeficiente de actividad para las sustancias reaccionantes antes dadas. De esta forma, si dos sustancias A y B toman parte en una reacción reversible en la cual los productos son A' y B', y las masas activas en equilibrio son  $p$  y  $q$  y  $p'$  y  $q'$ , respectivamente, las velocidades de las reacciones directa e inversa serán  $k p q$  y  $k' p' q'$ , respectivamente, donde  $k$  y  $k'$  son los coeficientes de afinidad. Como en el equilibrio las dos velocidades son iguales, entonces:

$$k p q = k' p' q'$$

y de aquí dedujeron Guldberg y Waage que, determinando experimentalmente las masas activas en equilibrio  $p$ ,  $q$ ,  $p'$  y  $q'$  se puede hallar la relación entre los coeficientes de afinidad  $k$  y  $k'$ . Posteriormente estos autores descartaron el término coeficiente de afinidad y utilizaron el de coeficiente de velocidad para  $k$  y  $k'$  y ello se corresponde con la interpretación moderna de estas constantes.

minos son estabilidad, reactividad, electronegatividad, aromaticidad, resonancia, electroafinidad, etc. Es bien sabido que hasta el presente se han publicado cientos de trabajos en los cuales se han propuesto una gran variedad de definiciones rigurosas y criterios precisos para estas y otras nociones específicamente químicas. Sin embargo, un análisis cuidadoso de todos ellos nos lleva a reconocer que estos intentos son siempre algo arbitrarios y un poco subjetivos y ellos no carecen por cierto de algún grado de ambigüedad. La actual aplicación de las matemáticas en la Química Teórica Moderna (excepto la Físicoquímica, ver más arriba, y la Química Cuántica, ver más abajo) es bastante tenue y consiste en una mezcla algo informe tomado de la Física o de la Físicoquímica. Como ilustración puede servir la mención del texto «QUÍMICA INORGÁNICA. Introducción a la Química de coordinación del estado sólido y descriptiva», Glen E. Rodgers, McGraw Hill, Madrid, 1995 el cual carece por completo de fórmula matemática alguna.

## 2. EL ADVENIMIENTO DE LA QUÍMICA TEÓRICA

### 2.1. Los primeros pasos experimentales y teóricos

Hacia fines del pasado siglo XIX se descubrieron los rayos X, el electrón y la radiactividad, que luego dieron como resultado el establecimiento de la estructura atómica. Se podría destacar un período de casi 20 años en el que la Química estuvo sujeta a cambios revolucionarios hacia principios del siglo XX. En efecto, a modo de referencia histórica y sin ninguna pretensión de dejar a un lado diversos aportes de gran significación; podemos destacar la sugerencia hecha por primera vez por Richard Abegg en 1904 de la existencia de una correlación entre la Tabla Periódica y el número de electrones de valencia y la aparición de la obra clásica de Gilbert Newton Lewis en 1923 «Valence and the Structure of Atoms and Molecules».

La teoría que desarrolló Bóhr en el año 1913 para la explicación (o, para ser más precisos, para la descripción) de algunos de los hallazgos experimentales, le permitió racionalizar la Tabla Periódica de los Elementos (1918-1920). Esto fue un logro mayor ya que por primera vez la estructura (de los átomos) se conectaba con propiedades cualitativas (de los elementos químicos). Luego que la Mecánica Cuántica fuera formulada por de Broglie, Heisenberg, Schrödinger, Born, Dirac, Jordan y otros (1925-1926) pareció que, en principio, esta nueva teoría podría resolver cualquier problema químico.

Además, el límite entre la Química y la Física pareció desvanecerse por completo. En las palabras de Heisenberg: «*Ha emergido una nueva teoría de la materia, en la que la diferencia entre la Física y la Química carece esencialmente de sentido*».

Los métodos de la Mecánica Cuántica, aquí solamente puntualizaremos que la única interacción que necesita ser tomada en cuenta para los estudios de los problemas químicos es la usual y bien conocida ley de fuerzas de Coulomb. Para los sistemas químicos podemos escribir sin mayores di-

Las desigualdades de Heisenberg muestran que el producto de las dispersiones de dos variables arbitrarias que no conmutan no puede ser menor que una cierta cantidad, que depende del valor esperado de su conmutador. La expresión matemática es:

$$\langle (DA)^2 \rangle \langle (DB)^2 \rangle \geq \langle C \rangle^2 / 4$$

donde  $[A, B] = AB - BA = iC$

con A y B dos operadores hermíticos que no conmutan. En la literatura estándar a estas desigualdades se la llama relaciones de incertidumbre o relaciones de indeterminación. Puesto que los calificativos "incertidumbre" e "indeterminación" implican una interpretación subjetiva el primero y física el segundo, según la presentación usual, no se debería usarlos para evitar confusiones e interpretaciones arbitrarias. Es preferible llamarles desigualdades y no relaciones, pues en verdad son lo primero y no lo segundo.

Sin embargo, vale la pena destacar una situación bastante paradójica. Entre los diversos factores que han contribuido manifiestamente a los cambios de la Química en este período de principios del siglo XX (la hipótesis cuántica, la espectroscopía, las descargas eléctricas, la Tabla Periódica, la electroquímica y la radiactividad), hay dos que son de naturaleza específicamente química y ellos son la Tabla Periódica y la electroquímica. La consulta bibliográfica a la literatura de ese período muestra que ambos tópicos tuvieron un papel decisivo en el establecimiento de la moderna teoría electrónica de la valencia. Pero sucede que en los libros de texto y en las referencias bibliográficas generales de estos temas, se los presenta como derivados de (antes que contribuyentes a) la moderna teoría electrónica de la valencia, que usualmente es atribuida con exclusividad a los aportes de los físicos. De hecho, no sólo los químicos ofrecieron contribuciones significativas a esta teoría a través de la electroquímica y de la ley periódica, sino que hubo aportes de gran importancia en la labor de Sir William Crookes en sus estudios de descargas eléctricas en muestras gaseosas así como el virtual dominio de los químicos en las investigaciones sobre radiactividad hasta el año 1920. Después de todo, no está demás recordar que el premio Nóbel otorgado a Rutherford fue en la especialidad Química y no Física por sus trabajos sobre la teoría de la desintegración radiactiva.

### 2.2. Llega la Mecánica Cuántica

Sin entrar en mayores detalles acerca de

las dificultades una ecuación diferencial (la denominada ecuación de Schrödinger), cuya solución nos suministra todas las propiedades (químicas y de cualquier otra clase) del sistema en consideración. Al menos, eso es lo que se piensa al presente. El optimismo de los científicos de aquella época (así como en épocas posteriores) está claramente expresado en las palabras de Dirac (1929): «*Las leyes físicas subyacentes para la teoría matemática de una gran parte de la Física y de toda la Química son totalmente conocidas [a menudo esta cita famosa termina aquí, pero en verdad continúa de la siguiente manera] y la dificultad reside solamente en que la exacta aplicación de estas leyes conduce a ecuaciones muy complicadas para ser resueltas*».

En su forma más general la ecuación de Schrödinger tiene la forma

$$EY = HY$$

donde Y es la función de onda (o función de estado) del sistema

$$E = ih/2\pi \frac{\partial}{\partial t}$$

$$H = T + V \text{ operador energía cinética + operador energía potencial}$$

La ecuación de Schrödinger se puede interpretar como la equivalencia a todo tiempo de la acción de estos operadores sobre las correspondientes funciones de onda de Schrödinger.

En muchas oportunidades se ha afirmado que en el futuro (cercano) las reacciones químicas podrán ser llevadas a cabo

«en el papel» y que el cálculo de una reacción química y las propiedades de un compuesto serán una labor de rutina, similar a los cálculos requeridos para la construcción de un puente en el área de la ingeniería civil.

El primer cálculo de naturaleza químico-cuántico se concretó en 1927 para la molécula de hidrógeno ( $H_2$ ). Sin embargo, la verdadera expansión de la Química Cuántica comenzó con el advenimiento de las poderosas computadoras emergentes en la segunda mitad del siglo XX y su expansión sigue todavía en franco progreso. No hay impedimentos fundamentales para llegar a resolver la ecuación de Schrödinger para cualquier clase de sistema de interés químico, aunque ello pueda requerir procedimientos computacionales extremadamente costosos. Los numerosos logros alcanzados hasta el presente son innegables. Sin embargo, aunque ahora la situación es significativamente diferente con respecto a los casos de la termodinámica y la cinética antes citados, nosotros consideramos que no hay suficiente espacio para desenvolver un optimismo exagerado. En este punto, merecen discutirse algunas de estas dificultades acerca de este tema.

### 2.3. Las dificultades

La aproximación mecano-cuántica a la Química es una moneda con dos caras. En efecto, por una parte, al apelar al formalismo matemático de la Física Cuántica es posible describir todos los conceptos fundamentales de la Química: valencia, reactividad, estructura química, etc. Por otra parte, esto ha sido desarrollado con el lenguaje de la Física Teórica. En el campo propio de la Química Cuántica, las cantidades básicamente estudiadas no son de interés directo para el químico (por ejemplo, funciones de onda, densidad electrónica, niveles de energía, etc.) en tanto que las cantidades de importancia específicamente química se derivan sólo por medios indirectos. De tal forma que es una cuestión abierta a la discusión, al análisis y a eventuales propuestas, si el sistema de categorías propias de la Física Cuántica es verdaderamente apropiado para el estudio de los problemas químicos. ¿Podría ser que el precio que debe pagar el químico para «proyectar» la Química desde el campo de la Mecánica Cuántica al propio terreno sea la pérdida de los conceptos más caros y preciosos al propio quehacer y entender su propia ciencia y que han sido adquiridos y desarrollados en su largo desarrollo? ¿No será que las complejas explicaciones físicas de varias nociones sencillas constituyen un serio impedimento para desarrollar a pleno un razonamiento

químico adecuado? ¿La aproximación física al estudio, análisis y comprensión de las nociones fundamentales de la Química es realmente necesaria para alcanzar un razonamiento químico correcto? Veamos un ejemplo ilustrativo: Los químicos contemporáneos están bien entrenados para pensar en términos de conceptos tales como «hibridación», «resonancia», «orbitales moleculares», «localización/ deslocalización orbital», etc. y la mayor parte de ellos creen que estas nociones tienen un carácter real. Sin embargo, todos estos conceptos son construcciones teóricas (que surgen en contextos formalmente arbitrarios y dentro de los cuales se trata de resolver la ecuación de Schrödinger de manera aproximada), que sirven para nombrar a ciertos objetos matemáticos y/o transformaciones matemáticas totalmente relativas y que poseen tanta realidad física como la pueden tener los términos «logaritmos» o «integración por partes». El origen de tamaño confusión es sencillo: muchos de aquellos químicos que usan nociones tales como «hibridación», «resonancia», etc. tienen una mínima idea bastante difusa y a menudo errónea de estos conceptos.

R. G. Wooley (1978) ha obtenido un resultado importante al llegar a demostrar que el concepto de estructura (tanto en Química como en Física Nuclear) es independiente de la Mecánica Cuántica, y debe ser adicionado a esas ciencias como un postulado ad hoc. De esta manera tal demostración invalida la opinión ampliamente aceptada que la Química puede ser construida deductivamente dentro del campo de la Física Cuántica. Esta cuestión pone de manifiesto el carácter problemático que tienen las concepciones clásicas y modernas de las ideas y modelos químicos más relevantes. En verdad, los químicos no han mostrado mucha consideración a las dificultades emergentes de la reducción de los conceptos clásicos a los modernos. Las razones de tal grado de desinterés y desconocimiento pueden ser tanto de naturaleza histórica como de tipo psicológico. Los teóricos cuánticos parecen sentir una fuerte necesidad de hacer contacto con la idea clásica de estructura molecular, ya que dicha noción es el paradigma central de la ciencia molecular. Por otro lado, aquellos que se basan esencialmente en los modelos clásicos de la estructura molecular se encuentran inclinados a creer que dichos modelos son totalmente reducibles a la física cuántica pues la ciencia física se supone que es más básica que la química y, en consecuencia, se encuentra mucho más próxima a lo que una ciencia apropiada debiera ser. Además, el compartir términos comunes en

las teorías clásicas y cuánticas también contribuye a la relación problemática entre los conceptos químicos cuánticos y clásicos.

### 3. Empiezan a aparecer soluciones

En los últimos tiempos se ha prestado gran atención a la idea de que los conceptos científicos cambian de contenido según sean empleados para explicar fenómenos substancialmente diferentes. Y así, es posible hablar de «electrones químicos» y «electrones físicos». El significado del concepto «electrón» es distinto en ambos casos: el primero se asocia a una masa fija y un tiempo de vida infinito, en tanto el segundo se considera de masa variable y un tiempo de vida finito. Análogamente, el concepto «molécula» posee diferentes significados cuando se lo considera como un agrupamiento estructurado de átomos que se mantienen unidos por enlaces químicos bastante rígidos o como un conjunto de núcleos y electrones deslocalizados en el cual todas las partículas idénticas son indistinguibles.

Parece resultar evidente que en Química se usará, y probablemente siempre será así, grupos de conceptos irreducibles y no equivalentes que comparten una denominación común, tales como «átomo», «molécula», «estructura molecular», «enlaces químicos», etc. La situación parece no ser diferente respecto de la que enfrentan los psicólogos, los antropólogos y los economistas cuando se refieren a las «necesidades humanas». Dichas necesidades a las cuales hacen referencia cada grupo disciplinario son a menudo bastante diferentes ya que los seres humanos se pueden considerar válidamente como individuos, como miembros de un agrupamiento social y como actores políticos y económicos en la sociedad de masas. Además, los variados significados del término «necesidades humanas» no son reducibles en último término a ningún conjunto primario de significados básicos a partir de los cuales los demás puedan ser derivados. En efecto, nos encontramos bastante alejados de la situación reduccionista de poder tener una ciencia de la economía y/o de la antropología derivable de la psicodinámica freudiana o junguiana. El pluralismo en los significados de los conceptos es un hecho evidente en el quehacer intelectual, y ello tiene importantes implicancias en el estudio, el desarrollo, la aplicación y la enseñanza de la Química. Resulta bastante claro que la posibilidad de predecir todas las propiedades de un sistema químico a partir de las soluciones de la ecuación de Schrödinger se basa en la suposición de que la Mecánica Cuán-

tica es suficientemente precisa a los fines químicos. Para esto, sin embargo, resulta indistinto si la Mecánica Cuántica es absolutamente precisa o no. Actualmente está bien establecido que la Mecánica Cuántica No Relativista no resulta suficiente para describir las propiedades de los elementos pesados (por ejemplo, no puede predecir que el mercurio es líquido a temperatura ambiente). En consecuencia, al realizar cálculos mecano-cuánticos precisos y exactos, se deben tener en cuenta las correcciones relativísticas a la ecuación de Schrödinger. Por otra parte, la posibilidad de que en el caso de moléculas muy grandes, la Mecánica Cuántica brinde predicciones incorrectas (puntuado por vez primera por Primas en 1967) no ha encontrado hasta el presente ninguna confirmación experimental. En todos los casos en los cuales la Mecánica Cuántica se aplica correctamente a los problemas químicos, los resultados obtenidos no se desvían de aquellos medidos experimentalmente.

#### 4. A MODO DE UNA CONCLUSIÓN ABIERTA

##### 4.1. Primera visión

Alguna vez dijo Einstein: «La Química es una ciencia muy importante e interesante a la vez, pero resulta muy difícil para los químicos». Lo que sigue podría ser entendido como una re-elaboración de esta afirmación.

La Teoría Cuántica ha hecho posible llegar a una explicación satisfactoria de las nociones básicas de la Química. Ya en 1859 Bunsen (un químico y uno de los fundadores de la Físicoquímica) descubrió que los átomos emiten un espectro característico para cada elemento químico. Eventualmente, esta propiedad llegó a constituirse en una herramienta importante en la Química Analítica y toda una disciplina científica de innegable valor y relevancia se ha conformado a partir de ella: la Espectroquímica. Sin embargo, la naturaleza de los espectros atómicos permaneció indefinida hasta 1913 cuando Bóhr (un físico) explicó el espectro del átomo de hidrógeno por medio de la teoría cuántica. Posteriormente, se pudieron comprender los espectros de otros elementos químicos a través de la aplicación de la Teoría Cuántica, especialmente luego del establecimiento de la ecuación de Schrödinger (1926). En 1921 Bóhr explicó la naturaleza de la Tabla Periódica de los elementos, uno de los pilares de la teoría química clásica. El otro pilar es la estructura química de las moléculas. El hecho de que los átomos están unidos para constituir moléculas se puede explicar formalmente por la formación de las uniones químicas en-

tre átomos. La naturaleza del enlace químico fue explicada por la teoría cuántica en 1927 por Heitler (un físico) y London (un físico). Hückel (un físico) dio una explicación en 1931 de la estructura electrónica del benceno, un verdadero enigma para los químicos que no podían resolver de manera alguna (aunque ellos trataron de hacerlo) desde mediados del siglo XIX.

Aunque hacia principios del siglo XX ya era claro que la teoría cuántica es de extraordinaria importancia para la comprensión de los fenómenos químicos, hasta el presente la mayor parte de los químicos no llegan a comprenderla de un modo satisfactorio. ¿Porqué? Nosotros pensamos que ello se debe a que la teoría cuántica usa un formalismo matemático extenso y complicado. Aún al día de hoy la teoría cuántica y sus consecuencias y aplicaciones químicamente relevantes se enseñan a los químicos de una manera sobre simplificada (a menudo errónea). Naturalmente, esto es fatalmente así cuando los propios profesores no comprenden lo que están enseñando a los estudiantes.

El resultado es lamentable: con unas pocas excepciones, los mismos químicos son totalmente incapaces de aprehender los mismos fundamentos de su propia ciencia. La teoría cuántica de los átomos, la teoría cuántica de la estructura química y la teoría cuántica de las reacciones químicas hoy día son disciplinas muy bien elaboradas pertenecientes al área de la Química Teórica. Desgraciadamente, esta teoría es muy difícil para ser comprendida y desarrollada creativamente por los mismos químicos. En este terreno, la iniciativa la llevan los físicos, los denominados físicos químicos. Por ello, no es de extrañar que la Química Teórica este siendo cada vez más una parte de la Física, denominada química-física. Sin embargo, no son pocos los químicos que hace algún tiempo han empezado a comprender este estado de cosas a partir de una educación básica en Físicoquímica que les ha hecho ver con bastante claridad los distintos contenidos conceptuales y así han aprendido satisfactoriamente qué es en verdad la Química Teórica.

##### 4.2. Alternativas

La aprehensión adecuada de la Química requiere que ella sea considerada tal como es y no como ha sido artificialmente dividida en dos partes disjuntas: teoría y principios por un lado y experimentos y propiedades por el otro. En realidad resulta necesario explicar, racionalizar y sistematizar los fenómenos y característicos materiales, lo cual conduce al desa-

rollo y la aplicación de las teorías y el uso juicioso de los principios, pero lo opuesto no es cierto, o sea que la teoría determina los hechos químicos. Además, el conocimiento y el empleo de las teorías y los principios carecen de sentido si ellos no tienen una base de hechos materiales (fenómenos químicos, propiedades de las sustancias, características fisicoquímicas, datos experimentales, etc.) que pueden ser comprendidos y racionalizados en términos de aquellos principios y teorías. Esta debería ser la acepción verdadera del término "Química Moderna" y no como es usual encontrar en muchos textos contemporáneos la mera inclusión de algunos conceptos teóricos que conllevan la intención de aparecer como novedosos y/o actuales, pero que en realidad solamente sirven para confundir al lector.

Lo que resta por ver es qué grado de desenvolvimiento tendrán las generaciones futuras en este asunto y en que medida podrán enfrentar algunos de los desafíos planteados previamente en el sentido de poder encarar el desarrollo de una teoría específicamente química, dando así respuestas satisfactorias a las necesarias re-conceptualizaciones que seguramente se habrán de producir.

Uno de los factores que obran a favor de una adecuada formación en Química Teórica es que los jóvenes muestran una gran capacidad de manejo y comprensión de los medios informáticos, lo cual facilita en mucho el acercamiento a esta disciplina. En efecto, hasta no hace mucho tiempo, el dictado de los cursos de Química Teórica era básicamente abstracto, en el sentido de que solamente se ponía el acento en el dictado y explicación de los conceptos de una manera marcadamente formal. En el mejor de los casos, se recurría a alguna clase de ejercitación por medio de demostraciones teóricas complementarias del dictado de las clases teóricas. Con el advenimiento de grandes facilidades para adquirir hardware y la accesibilidad manifiesta del software asociado a los cálculos atómicos y moleculares, ahora el dictado de esos cursos puede ser adecuadamente realizado a través de una labor integradora de los desarrollos formales (clases teóricas), las ejercitaciones numéricas y deductivas (seminarios y clases de problemas) y los cálculos explícitos (clases prácticas).

**Agradecimiento:** Los autores de este trabajo desean expresar su agradecimiento al Comité Editorial por las útiles sugerencias para mejorar la presentación del manuscrito original.