



Modelos científicos: el problema de la representación

Olimpia LOMBARDI

Hernán ACORINTI

Juan Camilo MARTÍNEZ



RESUMEN

El presente artículo se enfoca en la relación entre conocimiento y representación. Se consideran los problemas relativos a los argumentos que pretenden justificar el carácter representativo de los modelos. Señalamos que los intentos por dar cuenta de la representación que no incluyan al agente como elemento constitutivo no cuentan con respaldo filosófico suficiente: la caracterización de la representación en términos no intencionales se enfrenta con problemas conceptuales difícilmente superables. Como estrategia propositiva, discutimos una serie de modelos incompatibles para poner definitivamente en duda el papel protagónico del representar en el conocimiento científico. Estos casos evidencian que se genera conocimiento científico cuando los modelos permiten predecir y manipular el comportamiento de algunas variables del sistema, aun cuando ello no implique la posibilidad de describir cómo es efectivamente el sistema en sus aspectos inobservables. Finalmente, al brindar un caso donde un mismo modelo integra teorías incompatibles, pudimos extender la tesis planteada al ámbito de las teorías. La hipótesis principal que intentaremos establecer es que, si bien la asociación entre conocimiento y representación no debe abandonarse definitivamente, sí debe flexibilizarse de modo tal que se admita la posibilidad de reconocer la legitimidad de un conocimiento de tipo no representativo.

PALABRAS-CLAVE • Representación. Química cuántica. Enlace covalente. Modelos incompatibles. Mecánica estadística.

INTRODUCCIÓN

La potestad cognoscitiva que la actividad científica se arroga descansa, en gran medida, en la capacidad representativa de sus constructos teóricos. Con la finalidad de comprender y justificar tal capacidad se han intentado legitimar de diferentes modos las fuentes del representar. En vistas a ello, la epistemología clásica ha trazado un camino desde la canónica, y quizás anticuada, discusión entre los partidarios del isomorfismo y/o la similitud entre representante y representado, hasta llegar a una reivindicación de posturas pragmatistas. En el contexto de esta problemática, el presente trabajo in-

tentará recorrer tal devenir a la luz de una serie de modelos que actualmente se utilizan en ciencias, con el objetivo de analizar los límites de tales posiciones, y así poner en evidencia que el imaginario que asocia fuertemente conocimiento y representación no parece ser suficiente para abarcar la multiplicidad de formas en las que se construye y se produce el conocimiento científico. La hipótesis principal que intentaremos establecer es que, cuando hablamos de conocimiento en ciencia, la asociación entre conocimiento y representación, si bien no debe desarticularse definitivamente, sí debe flexibilizarse de modo tal que se admita la posibilidad de reconocer la legitimidad de un conocimiento de tipo no representativo.

Advirtiendo la preeminencia que ha ganado el tratamiento de los modelos por sobre las teorías en la filosofía de la ciencia de las últimas décadas, en el presente trabajo el problema del representar será abordado primordialmente a partir de los modelos científicos. No obstante, y en vistas a considerar posibles réplicas a la hipótesis planteada, hacia el final del presente trabajo afirmaremos que tampoco las teorías son susceptibles de ser evaluadas exclusivamente en términos representacionistas. Muy por el contrario, al igual que los modelos, éstas también cumplen funciones instrumentales.

En vistas a ello, en primer lugar analizaremos críticamente las distintas versiones que se han esgrimido en torno a la propiedad característica que, presumiblemente, fundamenta la relación de representación entre los modelos y los sistemas representados. Enfatizaremos que el principal inconveniente de tales propuestas reside en su pretensión de establecer una relación no intencional o natural entre ambos dominios. En este contexto, esgrimiremos las virtudes del planteo pragmatista y perspectivista presentado por Ronald Giere como una franca superación respecto de aquellas posturas que no contemplan al agente como un elemento constitutivo y fundamental para garantizar la representación. Sin embargo, en segundo término, señalaremos los límites de tal propuesta, analizando una serie de modelos incompatibles que comprometen seriamente cualquier tipo de representacionismo. Por último, trataremos de demostrar, siempre considerando la práctica efectiva de la ciencia, en qué sentido estaríamos habilitados a considerar que, además de los modelos, también las teorías científicas cumplen funciones instrumentales en el contexto de producción de conocimiento científico.

1 MODELOS: NATURALISMO VERSUS PRAGMATISMO

1.1 LA PRETENSIÓN NATURALISTA DEL REPRESENTAR

Los modelos, entendidos como construcciones artificiales producto de ciertas técnicas de abstracción y/o idealización, alteran y simplifican el fenómeno de estudio. De este modo, facilitan la manipulación de las variables relevantes que, al fundar la capacidad predictiva sobre el sistema, permiten explicar el por qué de su comportamiento (cf. Kennedy, 2006). La manipulabilidad que se logra mediante la modelización de los sistemas que se investigan suele relacionarse en ocasiones con la existencia de las entidades manipuladas. No obstante, para lograr establecer tal inferencia es necesario interpretar la capacidad predictiva de los modelos como signo de su capacidad representativa. En este sentido, el problema de la representación se vuelve crucial, ya que de él dependería la potencialidad epistémica de los modelos. En efecto, clásicamente se presupone que los modelos se instituyen como fuentes del conocimiento siempre y cuando logren representar al sistema. Esta perspectiva asume que los modelos nos dicen algo de la realidad si los aspectos presentados en ellos encuentran su contrapartida en el objeto de estudio (cf. Frigg & Hartmann, 2006). En otras palabras, se supone que los modelos y los sistemas *target* se encuentran vinculados a través de una determinada relación,¹ que en un principio se concibió como no intencional, en virtud de la cual se fundamenta la potencialidad cognoscitiva de los modelos.

Dicha relación permitiría considerar la capacidad predictiva y manipulativa de los modelos como indicios de su capacidad representativa. En este sentido, en vistas a fundamentar la representación, se instituyeron dos grandes corrientes dentro de la epistemología tradicional: una perspectiva de índole estructural, que interpreta la relación en términos de algún tipo de morfismo entre modelo y sistema, y otra perspectiva menos formal, que entiende la relación en términos de similitud. Bajo tales propuestas, por ejemplo, se analiza el conocido caso del túnel del viento, donde se intenta simular los efectos del aire en objetos como aviones, automóviles o misiles, colocando el modelo a escala en un conducto en el que se propulsa aire en forma constante. Este modelo sería representativo o bien por la existencia de algún tipo de relación lógico-matemática entre las estructuras del modelo y del sistema, o bien en términos de similitud en tanto el modelo a escala sería una réplica del original.

No obstante, es evidente que los modelos no son idénticos al sistema ya que, en tanto pretenden ser *re-presentaciones* y no meras presentaciones, se instituyen como un sustituto y, por lo tanto, como algo diferente de aquello a representar. En este sen-

¹ Entendemos por sistema *target* aquella parte o aspecto del mundo del cual se ocupa el modelo.

tido, respecto del modelo del túnel del viento, por ejemplo, una de las dificultades iniciales, aunque relativamente menor, es considerar las cuestiones relativas al tamaño y la proporción de los elementos empleados, como también el tipo de materiales utilizados, ya que estos factores pueden alterar el proceso experimental. Para este caso no es menor mantener una proporción adecuada entre el tamaño del modelo y la velocidad del viento. Este tipo de consideraciones refieren al hecho de que todo modelo se constituye, por un lado, como producto de un proceso de abstracción de aquellas variables no relevantes del sistema y, por el otro, como producto de un proceso de idealización de aquellos factores que, no encontrándose en el sistema, son fundamentales para la manipulabilidad y, con ello, para la eficacia del modelo.

Ahora bien, entre estos dos procesos que intervienen en la construcción de un modelo, el proceso de idealización es considerado, desde ciertas perspectivas, más difícil de justificar que el proceso de abstracción: en tanto que la idealización implica adscribir al modelo propiedades o relaciones no correspondidas en el sistema, se instituye como una deliberada distorsión de éste. En efecto, para quienes conciben la representatividad en términos de una relación lógico-matemática entre las estructuras del modelo y del sistema *target*, la idealización constituye una dificultad a resolver. Por el contrario, quienes defienden la capacidad representativa del modelo a partir de la similitud entre éste y el sistema, pueden afrontar con relativo éxito el fenómeno de la idealización, pues lo único que se requiere es que ambos dominios tengan propiedades similares (cf. Giere, 2011). Desde esta perspectiva, aun las representaciones que resultan inexactas como consecuencia de las idealizaciones serían representaciones, pues parece intuitivo suponer que, independientemente de aquellas propiedades no compartidas, el modelo del túnel del viento simula, y en este sentido imita, el comportamiento de un avión ante los efectos reales de determinado ambiente.

Siendo un criterio más flexible y menos estricto que el que exigen las propuestas estructuralistas, el recurso a la similitud presenta, aparentemente, ciertas ventajas en cuanto al intento de fundamentar la representatividad de los modelos. No obstante, producto de lo que denominaremos *la pretensión naturalista del representar*, esta propuesta no está exenta de serios inconvenientes que exigen una rigurosa reformulación de la cuestión. En efecto, mientras se pretenda fundamentar el representar a partir de una relación no intencional sustentada exclusivamente a partir de los elementos *propios* del modelo, la similitud no se instituiría como una condición ni suficiente ni necesaria. Por un lado, la similitud no sería una condición suficiente del representar pues cualesquiera dos objetos son similares entre sí en una infinidad de propiedades o relaciones no relevantes. Desde una concepción naturalista del representar, que presupone que el modelo es representativo del sistema *en virtud* de sus propios elementos, no se podría identificar el rasgo respecto del cual se dice que son similares. Pretender

resolver este inconveniente apelando a la propiedad relevante en función de la cual decimos que el modelo representa al sistema no parece fructífero, puesto que se caería en una circularidad inaceptable en cuanto se afirme que “*A* representa *B* si y sólo si es similar en aquellos casos en los que *A* representa *B*” (Suárez, 2003, p. 235). Por otro lado, de ser una condición necesaria, lo sería trivialmente, ya que todo objeto es similar en algún aspecto a cualquier otro objeto sin que exista o pueda existir entre ellos relación alguna de representación. Por lo tanto, en todo caso, la similitud sería tanto una condición de la representación como de la no-representación.

Pero la postura estructuralista, anclada en las propiedades formales de los dominios, ¿logra superar tales dificultades? Originalmente, se propuso como criterio representativo el isomorfismo, que implica una relación biyectiva entre las estructuras del modelo y del sistema. El propósito era intentar evitar todos los inconvenientes mencionados en lo que respecta a la trivialidad y la insuficiencia de la similitud. Puesto que el isomorfismo exige una relación biunívoca entre ambos dominios, todos y cada uno de los elementos de un dominio deben encontrar su contrapartida en el otro. De este modo, desaparece el problema suscitado por las propiedades no relevantes, pues, desde esta perspectiva, es condición que todos los elementos del sistema *target* tengan su contrapartida en el modelo y viceversa; a su vez, también desaparece el problema de la trivialidad puesto que, a diferencia del caso de la similitud, no es cierto que todo sea isomorfo a cualquier otra cosa.

No obstante, aunque por motivos diferentes, el isomorfismo, como criterio de representatividad, tiene tantos problemas como el criterio de la similitud (cf. Frigg, 2006). En primer lugar, la postura estructuralista no logra rescatar la necesaria direccionalidad implícita en el proceso representativo. Por un lado, la coincidencia estructural presupone una simetría entre los dominios no compatible con la noción de representación: lo deseable es que el modelo represente *al* sistema y no a la inversa. Asimismo lo deseable es que lo haga respecto de un sistema en particular: respecto de aquél que pretende representar. No obstante, si bien es cierto que no todo es isomorfo a todo, una estructura sí puede serlo respecto a muchas otras sin que ello pueda o tenga que interpretarse como signo de su representatividad para con ellas. Por ejemplo, el sistema del péndulo es isomorfo a ciertos sistemas eléctricos sin que ello signifique que uno represente al otro ni que el modelo del primero sea también, representativamente hablando, el modelo del segundo.

En segundo término, el isomorfismo tiene serias dificultades para dar cuenta de lo que, producto del proceso de idealización, denominamos “falsas” o “inadecuadas” representaciones (*misrepresentation*). La relevancia que tiene el dar cuenta de las idealizaciones se debe al hecho de que ninguna representación implica una relación *reflexiva*, pues no es cierto que algo se representa a sí mismo, sino que en todo caso se

presenta a sí (cf. Suárez, 2003). En este sentido, como dijimos precedentemente, lo que se espera es que bajo ningún concepto el representado y el representante sean idénticos. Por lo tanto, lo que en inglés se denomina *misrepresentation* es algo consustancial al proceso representativo, que el isomorfismo, al presuponer una relación biunívoca, no logra considerar: las representaciones inadecuadas (*misrepresentations*) son representaciones correctas, ya que logran dar cuenta del comportamiento del sistema, a pesar de la falta de correspondencia entre muchos de los aspectos del modelo y del sistema. Según los propios parámetros de la concepción basada en el isomorfismo, el modelo o bien es una descripción estructuralmente adecuada del fenómeno en cuestión, o bien no es una representación en absoluto (cf. Knuuttila, 2005; Knuuttila & Boon, 2011).

En este sentido, la explicación vía isomorfismo, en contraposición a lo que sucede en la práctica científica, no puede asimilar la “falsa representación” como representación. Las versiones debilitadas que, apelando a diferentes tipos de morfismos, como el homomorfismo o el isomorfismo parcial, pretenden dar cuenta de tales circunstancias, instituyen condiciones débiles y poco fructíferas para la representación. Como afirma Gabriele Contessa (cf. 2006, p. 375), cualesquiera dos estructuras parciales son trivialmente isomorfas siempre que los aspectos discordantes se mantengan indeterminados en los respectivos sistemas. En este sentido, el isomorfismo parcial es insuficiente, ya que con él cualquier modelo representa cualquier sistema. El problema estriba en que esta postura oscila entre la rigurosidad propia del formalismo que supone y la problemática flexibilidad y laxitud inherente a la similitud. En efecto, el enfoque basado en el isomorfismo, motivado por la idea de establecer la relación de representación sobre rigurosas relaciones formales, se encuentra, precisamente como consecuencia de tal rigurosidad, con sus propias limitaciones. Pero, en su intento por dar respuesta a tales limitaciones mediante la postulación de diversos morfismos, el enfoque estructural flexibiliza los criterios al punto tal de contraer los mismos problemas inherentes al enfoque de la similitud que en un principio pretendía evitar.

1.2 LA SALIDA PRAGMÁTICA

La imposibilidad de comprender la representación a partir de una propiedad natural de los modelos que pudiera dar cuenta de la complejidad y heterogeneidad existente condujo a repensar el concepto de modelo y la propia noción de representación desde una nueva perspectiva. En particular, condujo a fundar la peculiaridad de la representación en la intencionalidad del agente, al modo de “*C usa S para representar T con un propósito X*”. En efecto, Ronald Giere (2004; 2010) propone un enfoque pragmático y perspectivista del representar, que no depende en forma exclusiva de los elementos intrínsecos a los modelos, sino que está supeditada a la mirada desde la cual el inves-

tigador pretende demarcar el sistema en función a ciertos criterios metodológicos. Desnaturalizando la fuente de la representación, el pragmatismo instituye una relación triádica, al sumar al agente al binomio mundo-modelo: el agente, constituyéndose como elemento vinculante, garantiza la direccionalidad del modelo hacia el sistema *target* a través de su propia intencionalidad. De este modo, se anularía la crítica a la perspectiva no intencional sustentada sobre la base de que, en algún sentido, todo es similar a todo o, si se quiere, parcialmente isomorfo a todo (cf. Giere, 2011). El agente rompería esta especie de *realizabilidad múltiple* (cf. Frigg, 2006), especificando aquello que el modelo pretende representar. Se plantea, asimismo, un tipo de perspectivismo, donde los distintos modelos son analizados como múltiples visiones que describen diferentes aspectos del sistema. Diferentes perspectivas de análisis adjudicarán diferentes características: así, podríamos utilizar diferentes modelos para describir el mismo sistema. De este modo, el sistema tendría una propiedad u otra en función al aparato conceptual con el cual se lo analice.

Otra postura de raíces pragmatistas es la concepción inferencial de Mauricio Suárez (2003), según la cual *A* representa *B* si (1) la fuerza representacional de *A* nos orienta o apunta a *B* (o sea, si la fuente *A* es capaz de guiar a un usuario competente e informado para poner en consideración al sistema *target B*), y si (2) *A* permite hacer inferencias científicas sobre *B*. En el marco del problema de la representación, Suárez pretende obviar la discusión en torno a si el representar sienta sus bases en la similitud o en algún tipo de morfismo. En contraposición propone una concepción deflacionaria que no revalorice ninguna propiedad más allá de la capacidad inferencial de los modelos respecto de los sistemas.

Ahora bien, puede ser cierto que, en algún aspecto, estas propuestas sean menos ambiciosas que las primeras y, en este sentido, quizás, puedan dejar una suerte de insatisfacción filosófica; como afirma Roman Frigg:

cuando nos preguntamos cómo funciona la representación, lo que nos gustaría saber es qué hace exactamente el científico cuando usa *S* para representar *T*. Si decimos que intenta representar *T* por medio de *S*, meramente parafraseamos el problema y no lo respondemos, porque lo que queremos saber es qué involucra dicha intención (Frigg, 2002, p. 19).

En efecto, es difícil explicitar qué es lo que queda de representacionalismo en tales propuestas. El proyecto que pretendía explicar el valor heurístico de los modelos en términos representacionalistas se debilita de tal modo que podría decirse que cualquier cosa representa a cualquier cosa mientras ésta sea la intención del agente. Así las cosas, la defensa de tesis realistas que toda interpretación representacionalista

pareciera conllevar se diluye en la voluntad de agente que proyecta y explica, pero no representa.

No obstante, y aun contemplando que tales críticas pueden ser pertinentes, algo que aboga en favor de las propuestas pragmatistas es que, en la práctica científica, existen múltiples casos donde diferentes modelos, en función a consideraciones pragmático-metodológicas, brindan distintas perspectivas respecto del mismo fenómeno. La química pone de manifiesto reiteradamente esta situación: conceptos clasificatorios comúnmente usados en la práctica efectiva de laboratorio pueden ser descritos utilizando diferentes modelos. Por ejemplo, el par ácido/base suele describirse mediante, por lo menos, tres modelos que describen de manera diferente la causa estructural por la cual una sustancia es un ácido o una base. En el caso del modelo de Arrhenius, basado en el modelo de iones hidrógeno (H^+) e iones hidróxido (OH^-), los ácidos y las bases se clasifican por su capacidad para generar iones H^+ y OH^- en solución acuosa, respectivamente. A diferencia de ello, para el modelo de Brønsted-Lowry, basado en modelar las reacciones químicas como intercambios de cationes hidrógeno H^+ , la acidez es la medida de la capacidad que tiene una sustancia para “donar” H^+ y la basicidad es la medida de la capacidad para “aceptar” H^+ en una reacción química de transferencia protónica. Con el advenimiento de las primeras teorías electrónicas del enlace químico, se impone el modelo de Lewis basado en intercambio de electrones: la acidez o basicidad de una sustancia se puede determinar por su habilidad para aceptar o donar electrones, respectivamente. Estos tres modelos se usan de manera simultánea gracias a que, en muchos casos, los tres clasifican a cada sustancia particular como ácido o base del mismo modo; el uso de uno u otro modelo depende, entre otras cosas, del tipo de sustancia que se esté analizando. No obstante, vale aclarar que el uso de los pares electrónicos para determinar la acidez/basicidad de una sustancia permitió expandir el rango de aplicación del concepto hacia más sustancias: el modelo de Lewis permite considerar reacciones ácido-base que no transcurren en medio acuoso o que se generan sin transferencia de H^+ .

2 MODELOS INCOMPATIBLES EN CIENCIAS

Sin duda, el caso en que distintos modelos brindan diferentes perspectivas sobre un mismo fenómeno es muy común en ciencias. Ahora bien, también es cierto que si se considera con cierto detenimiento la práctica científica en su totalidad, también se encuentran circunstancias que no pueden circunscribirse bajo la idea perspectivista de la representación. En efecto, del análisis de tal práctica surgen problemas que exceden el ámbito propio de la idealización que, como dijimos, es inherente a todo pro-

ceso de modelización. Como afirma Margaret Morrison (cf. 2011, p. 344), mientras que diferentes estrategias aproximativas o *desidealizantes* contribuyen a acortar las distancias entre ciertos modelos y los sistemas representados, generando versiones *más realistas* respecto del fenómeno descrito, cuando nos encontramos ante modelos incompatibles resulta muy difícil esgrimir argumentos que nos permitan determinar cómo es que tales modelos nos dicen algo de la realidad. En otras palabras, el hecho de que dos modelos que se aplican a un mismo sistema sean incompatibles significa que adjudican al sistema propiedades que no puede poseer simultáneamente; por lo tanto, al menos uno de los modelos no representa al sistema en un sentido realista.

Lo apremiante de la situación generada a partir de la existencia de modelos incompatibles es que dicha situación no sólo no es ajena a la práctica científica, sino que, por el contrario a lo que puede suponerse, no es consecuencia de casos aislados propios de ciertas disciplinas o inclusive de ciertas teorías. Existen numerosos y diversos casos de modelos incompatibles; a continuación, expondremos brevemente algunos ejemplos. Estos ejemplos no serán desarrollados en detalle: se los presentará sólo en la medida suficiente como para poner de manifiesto la incompatibilidad que se pretende señalar.

2.1 ENLACE DE VALENCIA Y ORBITAL MOLECULAR

El concepto de enlace químico, que refiere al fenómeno que mantiene unidos y estabilizados los componentes de las moléculas, constituye un concepto fundamental en química estructural debido a que, al determinar la estructura de las moléculas a partir de los enlaces atómicos, se organiza el conocimiento acerca de las sustancias. Gilbert Lewis (1916) desarrolló la primera teoría del enlace químico en el marco de la regla del octeto, según la cual los átomos tienen una tendencia a completar sus últimos niveles de energía con ocho electrones. Desde esta perspectiva, el enlace químico se definía en términos de los pares de electrones compartidos por dos núcleos atómicos a fin de completar los ocho electrones en la capa de valencia.

Frente a ciertas dificultades de la teoría de Lewis, y con el advenimiento de la mecánica cuántica en la década de 1920, surge la química cuántica como un nuevo ámbito científico que intentará explicar los resultados de la química estructural en términos de la mecánica cuántica (cf. Woody, 2000). Es precisamente en este contexto que se inscriben el modelo del Enlace de Valencia (EV) y el modelo del Orbital Molecular (OM) como posibles enfoques para dar cuenta del enlace químico. Si bien tales enfoques suelen ser denominados “teorías”, es más correcto conceptualizarlos en términos de modelos debido a que ninguno de los dos supone un marco teórico propio y autónomo (cf. Lombardi & Martínez González, 2012). En efecto, aun considerando los

supuestos incompatibles que a continuación detallaremos, la dependencia de ambos enfoques respecto de la mecánica cuántica impide que sean considerados como constructos teóricos diferentes.

El enfoque EV fue formulado por Walter Heitler y Fritz London (1927) a fines de la década de 1920, y fue luego completado por Linus Pauling en la década de 1930 (Pauling, 1960 [1939]). En él se describe el compuesto molecular como un conjunto de átomos, donde los electrones son localizables en el sentido de que se encuentran asociados a un núcleo particular. Por lo tanto, el enfoque EV no se aparta radicalmente de la química estructural, en tanto que permite representar las posiciones de los electrones en las moléculas: EV pasó a considerarse como una herramienta que, siguiendo la manera estructural de pensar los problemas químicos, utilizaba el formalismo de la mecánica cuántica (para un análisis más detallado ver Park, 1999; Hendry, 2006). Contemporáneamente al surgimiento de EV, OM aparece como enfoque alternativo principalmente en los trabajos de Friedrich Hund (1929) y Robert Mulliken (1932). El enfoque OM presupone una especie de holismo molecular, implicando, con ello, una nueva entidad conceptual donde los electrones no están localizados en orbitales atómicos sino en orbitales moleculares deslocalizados alrededor de la molécula entera.

En resumen, los enfoques EV y OM pueden considerarse modelos incompatibles en cuanto a descripciones de la estructura interna de las moléculas. Para el enfoque EV, la molécula es una entidad compuesta, donde es posible continuar identificando los átomos componentes y, por tanto, los electrones pertenecen a cada átomo particular. Para el enfoque OM, la molécula es un todo inanalizable en componentes atómicos ya que los átomos pierden su identidad al integrarse en la molécula; en consecuencia los electrones ya no pueden pensarse como pertenecientes a un átomo particular.

Es interesante resaltar que, si bien EV y OM presentan descripciones moleculares diferentes e incluso incompatibles, coexisten al interior de la química cuántica. El enfoque EV predominó en los orígenes de la química cuántica ya que su familiaridad con la química estructural permitía una representación visual que garantizaba un marco de aplicabilidad; su aplicación continúa vigente en nuestros días en los ámbitos de la fotoquímica y química del estado sólido. Por su parte, el enfoque OM tiene preeminencia en el ámbito de la química cuántica computacional. Por lo tanto, actualmente no existe una instancia inapelable de decisión entre ambos enfoques.

2.2 ELECTRONEGATIVIDAD

La electronegatividad, entendida como la medida de la tendencia de un átomo para atraer electrones y así formar los diferentes enlaces químicos, se constituye como uno de los conceptos fundamentales para explicar las diferentes relaciones entre sustan-

cias químicas y sus posibles reacciones: diferentes valores de electronegatividad determinarán diferentes tipos de enlaces posibles. Una de las peculiaridades de la electronegatividad es que no puede medirse de modo directo (como sí puede hacerse, por ejemplo, con el potencial de ionización), sino que sólo puede determinarse empíricamente de un modo indirecto, a través de cálculos a partir de otras propiedades directamente medibles. Existen alrededor de siete modelos diferentes que fundamentan la escala de electronegatividad y que se utilizan comúnmente en la práctica química; aquí sólo consideraremos dos de ellos. De todos modos, es interesante señalar que, a pesar de las diferencias entre los modelos utilizados para caracterizar la electronegatividad, y del hecho de que las escalas resultantes son diferentes, no obstante todos los modelos ordenan los elementos del mismo modo en las escalas de electronegatividad.

Una de las primeras escalas de electronegatividad es la que formuló Pauling (1932), quien la definió como “un número que representa el poder de atracción [de los elementos] por los electrones en un enlace covalente, por medio del cual la cantidad de carácter iónico parcial de un enlace puede ser estimado” (Pauling, 1950, p. 236). La escala de Pauling toma como modelo de enlace químico al enlace covalente, en el cual no se produce transferencia de electrones. La escala se basa en el concepto de enlace covalente “normal” $A:B$ que, de acuerdo con el llamado “postulado de aditividad”, se define como promedio de los enlaces homopolares $A:A$ y $B:B$, esto es, $A:B = (A:A + B:B)/2$. Sobre esta base, la escala de electronegatividad se establece en función de la diferencia entre la energía efectiva del enlace covalente entre A y B , calculada termodinámicamente a partir de la energía empíricamente necesaria para romper dicho enlace, y la energía del enlace covalente normal $A:B$, calculada en forma teórica a partir del postulado de aditividad.

En 1934, Mulliken desarrolló otro método equivalente para calcular la electronegatividad, en este caso tomando como modelo de enlace químico no los enlaces covalentes, sino los enlaces iónicos, donde las uniones sí se producen a partir de la transferencia de electrones. El propio Mulliken afirmaba que “el fundamento físico de esto [electronegatividad] se ha mantenido oscura, aunque ha sido evidente que la electronegatividad de un átomo tiene que estar relacionado de alguna manera con su afinidad electrónica o con su potencial de ionización o a ambos” (Mulliken, 1934, p. 782). Mulliken define así la electronegatividad como el promedio del potencial de ionización (I) y la afinidad electrónica (A) de un elemento: $(I+A)/2$.

Con independencia de los detalles técnicos, lo expuesto es suficiente para poner de manifiesto que, si bien ambas caracterizaciones de la electronegatividad conducen al mismo ordenamiento de los elementos, se basan en modelos conceptualmente incompatibles. Mientras que Pauling considera la electronegatividad como una propiedad *relacional* de átomos en moléculas donde prevalece el enlace químico, Mulliken la con-

cibe como una propiedad *intrínseca* de los átomos considerados aisladamente. En otras palabras, mientras que en el modelo de Pauling la electronegatividad es una propiedad anclada en el propio enlace químico, en el modelo de Mulliken es una propiedad característica de los átomos que intervendrán en el enlace.

2.3 ESTRUCTURA DEL NÚCLEO ATÓMICO

Si bien existen diversos modelos diferentes que intentan dar cuenta de la estructura del núcleo de un átomo, aquí sólo analizaremos el modelo de la gota líquida y el modelo de capas. Presentaremos estos modelos a la luz de la hipótesis según la cual no pueden analizarse meramente como constituyendo diferentes perspectivas que resaltan distintas características del fenómeno. Como detallaremos, y siguiendo a Margaret Morrison (cf. 2011), estos modelos presuponen propiedades que no pueden ser adjudicadas simultáneamente al mismo sistema. En este sentido, difícil sería pensar que los modelos en cuestión se constituyeran como verdades parciales que se van complementando para obtener una mirada completa del fenómeno.

El modelo de la gota líquida fue el primer modelo nuclear propuesto para explicar las diferentes propiedades de los núcleos. Es el modelo más simple y describe el núcleo, en analogía con las moléculas de un fluido clásico, como una colección incompresible fuertemente unida de nucleones (protones y neutrones) donde las partículas, interactuando fuertemente entre sí con una fuerza coulombiana repulsiva proporcional al número de protones, apenas tienen espacio entre ellas. Si bien este modelo no logra dar cuenta de todas las propiedades del núcleo, sí logra explicar características importantes, como la energía de enlace, que se considera proporcional al número de protones, y la fisión nuclear, que se explica en términos de la repulsión coulombiana.

Si bien el modelo de la gota líquida fue inicialmente muy exitoso, ya que permitió entender diversos procesos nucleares, algunas mediciones de las energías de enlace de ciertos núcleos resultaron significativamente diferentes respecto de las predicciones realizadas a partir del modelo. Esto, conjuntamente con el descubrimiento de los que pasaron a denominarse *números mágicos* (el número de protones y neutrones que le dan al núcleo una particular estabilidad), permitió formular otro tipos de modelos donde, en lugar de pensar el comportamiento de los nucleones en función de los fuertes potenciales de interacción, se concebía el núcleo como compuesto de partículas independientes que, análogamente a los electrones, ocupan capas y subcapas afectadas levemente entre sí. El modelo de capas supone que los nucleones se mueven en un potencial promedio generado por todos los otros nucleones: a diferencia del modelo anterior, aquí se describen las propiedades nucleares a partir de la interacción de un nucleón con un potencial efectivo.

Nuevamente, aun sin detenerse en detalles técnicos, es posible reconocer la incompatibilidad entre ambos modelos. El modelo de capas se basa en la idea de que los constituyentes del núcleo se mueven de manera independiente. El modelo de la gota líquida implica justamente lo contrario, dado que en éste el movimiento de cualquiera de sus constituyentes está correlacionado con el movimiento de todos sus vecinos. Como afirma Morrison,

lo que esta breve discusión muestra es que el espín, tamaño, energía de enlace, la fisión y varias otras propiedades de un núcleo estable son todas reportadas a partir de uso de diferentes modelos que describen uno y el mismo fenómeno (el núcleo) en formas diferentes y contradictorias (Morrison, 2011, p. 349).

2.4 MECÁNICA ESTADÍSTICA: BOLTZMANN VERSUS GIBBS

Quizás puede creerse que la incompatibilidad en los casos anteriores se debe a que tales modelos se inscriben en el campo teórico de la mecánica cuántica, cuyo estatus ontológico es, al menos, conflictivo. No obstante, la existencia de modelos incompatibles excede el ámbito de la cuántica, tal como pondrá de manifiesto el caso de la mecánica estadística.

La mecánica estadística se ocupa de describir el comportamiento de un sistema mecánico en términos estadísticos, sin precisar el comportamiento de cada uno de los componentes del sistema. Si bien se trata de una de las teorías tradicionales de la física, aún hoy sigue generando debates en torno a sus fundamentos. El origen de los desacuerdos reside en la coexistencia de dos enfoques teóricos, el de Boltzmann y el de Gibbs, que difieren en aspectos conceptuales centrales, en particular, en las condiciones y el modo de dar cuenta de la irreversibilidad.

El enfoque de Boltzmann distingue dos niveles descriptivos en el sistema. En el micronivel, los micro-estados mecánicos evolucionan según las leyes de la mecánica clásica de un modo reversible; en el macro-nivel, los macro-estados pueden evolucionar de un modo irreversible, tendiendo a un valor final de equilibrio del cual el sistema no puede escapar. La relación entre micro-estados y macro-estados es de muchos-a-uno: muchos micro-estados diferentes corresponden al mismo macro-estado. Sobre esta base, la probabilidad de un macro-estado es considerada proporcional al número de sus micro-estados compatibles. Por lo tanto, desde el enfoque de Boltzmann, el *macro-estado de equilibrio* se define como el *macro-estado más probable*, esto es, aquél al que corresponde el mayor número de micro-estados. De este modo se explica la evolución irreversible hacia el equilibrio: los sistemas de un enorme número de grados de

libertad tienden a evolucionar desde sus macro-estados menos probables hacia sus macro-estados más probables.

La estrategia de Gibbs se basa en describir el comportamiento del *ensemble representativo* del sistema macroscópico bajo estudio. Un *ensemble* es un conjunto de sistemas abstractos, conceptualmente contruidos, que poseen la misma microestructura que el sistema de interés, están sometidos a los mismos vínculos externos, pero se encuentran distribuidos sobre los diferentes micro-estados posibles, es decir, son compatibles con el macro-estado del sistema. Si el número N de sistemas del *ensemble* es suficientemente alto, la situación del *ensemble* en cada instante puede especificarse mediante una función densidad, que brinda el número de sistemas del *ensemble* para cada micro-estado mecánico posible del sistema. La probabilidad de cada micro-estado se considera proporcional al número de sistemas del *ensemble* que le corresponden. Desde este enfoque, para un sistema cerrado, se define el equilibrio estadístico como la situación en la cual la función densidad, esto es, la probabilidad, se distribuye uniformemente sobre todos los micro-estados posibles. Puesto que, de acuerdo con las leyes mecánicas, la función densidad no puede alcanzar la situación de distribución uniforme y detenerse en ella, se define un *equilibrio de grano grueso*, en el cual la función densidad se distribuye *aparentemente* de un modo uniforme. Consecuentemente, la irreversibilidad también es un fenómeno de grano grueso, debido a la imposibilidad de discriminar con precisión infinita en qué micro-estado se encuentra el sistema macroscópico, y que sólo se produce en sistemas suficientemente inestables.

Si bien breve, esta presentación pone claramente de manifiesto que los dos enfoques modelan el sistema macroscópico de maneras diferentes e incompatibles (cf. Lombardi & Labarca, 2005a; Frigg, 2008). Mientras que desde la perspectiva gibbsiana la irreversibilidad podría manifestarse en sistemas simples, definidos por pocas micro-variables mecánicas, el enfoque de Boltzmann requiere que el sistema posea un elevado número de grados de libertad para manifestar un comportamiento irreversible. Mientras que en el enfoque boltzmanniano la inestabilidad no es condición necesaria para el comportamiento irreversible del sistema, la explicación gibbsiana de la irreversibilidad depende esencialmente del carácter altamente inestable del sistema. El concepto de equilibrio también es diferente en ambos enfoques: mientras que el equilibrio boltzmanniano se identifica con el macro-estado más probable, el equilibrio gibbsiano es el estado final de la evolución de grano grueso. Como resultado, el concepto mismo de irreversibilidad, entendido como evolución hacia el equilibrio, adquiere un contenido diferente en ambos enfoques.

Es interesante destacar que estas importantes divergencias conceptuales han conducido, hasta el presente, a fuertes discusiones entre los defensores de cada uno de ambos enfoques (cf. Lombardi & Labarca, 2005a). La situación es particularmente

paradójica en la medida en que los enfoques de Boltzmann y de Gibbs son los dos modos de modelizar sistemas mecánicos macroscópicos tradicionalmente adoptados en mecánica estadística por su fecundidad teórica y sus éxitos empíricos.

3 MODELOS INCOMPATIBLES: CRISIS EN LA REPRESENTACIÓN

Los ejemplos presentados en la sección anterior ponen de manifiesto que la existencia de modelos incompatibles, esto es, modelos exitosos referidos al mismo sistema *target* que le adscriben propiedades incompatibles, presenta una dificultad mucho más difícil de zanjar que la presentada por las representaciones inadecuadas (*misrepresentations*). Este caso no sólo anula la inferencia que concluye tesis realistas a partir del éxito predictivo, sino que fundamentalmente cuestiona el valor epistémico de los modelos en términos de representación. En otras palabras, tales situaciones ponen en crisis cualquier concepción que considere que la potestad cognoscitiva de los modelos descansa en la capacidad que tienen para representar el fenómeno. En efecto, ni la versión pragmatista de la representación propuesta por Giere, ni la versión deflacionaria propuesta por Suárez, serían adecuadas a la luz de la incompatibilidad entre modelos.

La limitación de la propuesta de Giere consiste en que no resulta coherente admitir la representatividad de modelos incompatibles con la expectativa de que ellos brinden perspectivas diferentes respecto al *mismo* fenómeno. Esto significa que es difícil pensar que los modelos en cuestión se constituyen como verdades parciales que se van complementando para obtener una mirada completa del sistema. La evidencia de incompatibilidad pone de manifiesto que no siempre los modelos proveen una descripción limitada del sistema *target*, sino que, en muchos casos, no proveen (si seguimos atados a la idea de que el conocimiento brindado por la ciencia debe ser representativo) una imagen consistente de él.

Por otro lado, la concepción inferencial de la representación propuesta por Suárez tampoco parece satisfactoria. Si, como muestran los ejemplos de la sección anterior, en un mismo sistema *S* es posible inferir propiedades incompatibles a partir de un modelo *A* y de otro modelo *B*, no parece aceptable interpretar tal inferencia en términos de representación: independientemente de cómo se arribe a la adjudicación de propiedades incompatibles, dicha adjudicación no resulta admisible por motivos lógicos. Para que la concepción deflacionaria fuera realmente tal, debería deflacionar el concepto mismo de representación. Ante la situación planteada por la existencia de modelos incompatibles, quizás lo más adecuado sería decir, parafraseando a Suárez (2004), “*A nos brinda algún tipo de conocimiento respecto a B si...*”; y para ello habría que

revalorizar la facultad del agente, pero sin atribuir pretensiones realistas ni representacionalistas al modelo.

En definitiva, ante una situación de incompatibilidad entre modelos, nos es imposible especificar qué modelo describe correctamente al sistema o, mejor dicho, cómo es el sistema. Lo perturbador del caso es que es difícil comprender el alcance de la información que nos brinda este tipo de modelos. Parece que, ante la mirada representacionalista, el éxito en la aplicación de los diversos modelos no puede trasladarse en un incremento del conocimiento de su naturaleza. El problema radica, entonces, en cómo podemos traducir el éxito pragmático en un incremento de nuestro conocimiento si seguimos presos de la concepción representacionalista. Bajo tal perspectiva es imposible comprender el carácter epistémico de la información brindada por los modelos.

Frente a la situación planteada por el caso de modelos incompatibles, se abren dos alternativas. La que parece más inmediata consiste en abandonar la pretensión realista que todo representacionalismo parece conllevar, adoptando algún tipo de instrumentalismo respecto de los modelos. Sin embargo, si no se desea dejar de ser realista y representacionalista, se presenta una segunda alternativa: abandonar el monismo ontológico en favor de un pluralismo ontológico que disuelve la incompatibilidad (cf. Lombardi & Pérez Ransanz, 2012b): para hablar con precisión, según el pluralismo las propiedades incompatibles no serían propiedades del *mismo* sistema, sino de dos sistemas diferentes, ya que cada uno de ellos se configuraría en función al aparato semántico con el cual se lo describa.

Existe aún una tercera posibilidad, que permanece anclada en el realismo más tradicional. Se podría considerar que siempre es legítimo preguntarse, respecto de los modelos incompatibles, cuál de ellos representa más adecuadamente al sistema. El sentido de tal pregunta encubre la creencia, absolutamente irrefutable en tanto creencia, que no más de uno puede ser el correcto (también, bajo la misma creencia, podría suponerse que los dos son incorrectos). En otras palabras, frente a la incompatibilidad, el realista podría tomar la decisión de considerar a uno de ellos como el modelo objetivo. En este sentido, uno de los modelos sería un modelo “realista”, y el otro, en el mejor de los casos, sería un modelo meramente instrumental. De este modo se podría continuar defendiendo tanto el realismo como el representacionalismo.

El problema de esta decisión radica en que no habría motivos internos suficientes que legitimaran la postura que la fundamenta. Aquello que, en algún sentido, deslegitima la pregunta acerca de cuál es el modelo objetivo es que, como lo muestran los ejemplos considerados, no hay motivos científicos para preferir uno de los modelos incompatibles por sobre el otro. En todos los casos, los dos miembros del par satisfacen los criterios necesarios que toda concepción representacionalista y realista exigen para su aceptación: ambos modelos son empíricamente adecuados, ambos

establecen predicciones exitosas, y ambos permiten realizar inferencias sobre el sistema. En otras palabras, el supuesto del carácter objetivo de sólo uno de los modelos incompatibles no está legitimado por los criterios de corrección estándar que la ciencia utiliza en la práctica.

4 UN CASO DONDE TAMBIÉN LAS TEORÍAS FUNCIONAN COMO INSTRUMENTOS

Un camino para salvar a la asociación entre conocimiento y representación, implícito en parte de la bibliografía filosófica sobre el tema, consiste en sostener que, en realidad, no son los modelos sino las teorías las que se constituyen como representativas: son las teorías las que, eventualmente a través de los modelos, se erigen como fuente del conocimiento y del representar. Bajo tal concepción, la actitud realista quedaría salvaguardada por el carácter representativo de las teorías que, mediante sus leyes, describirían la estructura de la naturaleza. Los modelos, en cambio, no serían más que meras herramientas que, de un modo más o menos imperfecto, nos permitirían aplicar las leyes a los casos específicos.

Frente a esta postura resulta conveniente considerar ciertos argumentos que abogan en favor de un punto de vista instrumentalista también respecto de las teorías. A continuación consideraremos un ejemplo que parece respaldar la concepción de las teorías como herramientas útiles para la construcción de modelos (cf. Suárez & Cartwright, 2008): el caso de los modelos atómicos y moleculares en química cuántica. El corazón del argumento descansa en que, en dichos modelos, convergen dos *teorías incompatibles* entre sí. Esto evidenciaría que, en este caso, lejos de estar dotadas de representatividad, las respectivas teorías se constituyen como instrumentos útiles que sirven para la formulación de modelos empíricamente exitosos.

Analicemos brevemente el modelo mencionado. En el contexto de la química cuántica, confluyen los dominios de la química y la física en vistas a describir la estructura molecular. La ley básica de la disciplina es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo o ecuación de estado estacionario, $H_{tot} \Psi_i = E_i \Psi_i$, 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. A fin de resolver la ecuación de Schrödinger es necesario formular un modelo del sistema que permita obtener el Hamiltoniano total H_{tot} que, reemplazado en la ecuación, permite obtener las posibles funciones de onda con sus correspondientes valores posibles de energía total.

El sistema más sencillo es el del átomo de hidrógeno, que 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; además, el núcleo y el electrón interactúan a través de un potencial de Coulomb. Con este modelo puede formularse el Hamiltoniano total, que contiene dos términos de energía cinética, uno para cada partícula, y un potencial asociado a la atracción coulombiana entre el núcleo y el electrón. Cuando este Hamiltoniano se introduce en la ecuación de Schrödinger, la ecuación puede fácilmente resolverse por vía analítica, obteniéndose las soluciones exactas de la ecuación.

En 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. En efecto, el Hamiltoniano total se complejiza pues debe incluir, además de la energía cinética para cada una de las partículas involucradas y las interacciones coulombianas entre los electrones y sus núcleos, las interacciones coulombianas de los electrones entre sí y de los núcleos entre sí. Ya el modelo de un sistema de dos electrones conduce a un Hamiltoniano que, introducido en la ecuación de Schrödinger, impide la resolución exacta de la ecuación. En otras palabras, salvo en el caso particular del átomo de hidrógeno (o átomos hidrogenoides), la ecuación de Schrödinger 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) (cf. Born & Oppenheimer, 1927). La ABO 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. Para ello es necesario presuponer la llamada aproximación de núcleo fijo (*clamped-nucleus approximation*), según la cual, tal como se supone en la química estructural (no-cuántica), se establecen posiciones fijas de los núcleos en el espacio. 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, p. 198; para una discusión general acerca de la relación entre química molecular y mecánica cuántica, ver Lombardi & Labarca, 2005b).

La pregunta relevante aquí es cómo se justifica la aproximación de núcleo fijo. Una respuesta frecuente es la que 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, 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 sería aplicable en el mundo clásico. Pero en este caso es inadecuada: aquí no nos encontramos en un dominio clásico sino cuántico donde, como es bien sabido, las intuiciones clásicas generalmente no funcionan. El principal motivo para ello es que en el ámbito cuántico no es posible adjudicar simultáneamente valores definidos a todas las propiedades del sistema. En particular, no es posible suponer que la energía cinética de una partícula es cero y que, al mismo tiempo, su posición está determinada (cf. Lombardi & Castagnino, 2010).

El origen de los problemas reside en la ruptura conceptual entre la química estructural, basada en el supuesto de partículas clásicas que poseen configuraciones espaciales definidas, y la mecánica cuántica, que desafía el concepto clásico de individuo. En particular, el supuesto de núcleos atómicos en reposo y 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). Incluso Hinne Hettema (cf. 2012), quien adopta una estrategia reduccionista que intenta subestimar la ruptura conceptual entre la química estructural y mecánica cuántica, reconoce que la ABO se ubica en el núcleo duro de la química cuántica y ello “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, p. 190). Asimismo, afirma que a la hora de aplicar la mecánica cuántica a la química se “introducen una serie de supuestos que son inadmisibles desde un punto de vista basado en principios” (2012, p. 314), evidenciando que en el contexto de la disciplina se “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, p. 337; cf. Lombardi, 2014).

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 contradictorios con uno de los principios de la propia teoría sobre la que se aplica, o, al menos, resultan 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 insistir en el hecho que los modelos moleculares utilizados en química cuántica no se construyen sobre la base de aproximaciones que pueden ir eliminándose paulatinamente con el avance de la ciencia, hasta alcanzar una descripción más precisa. En este caso, 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 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 entretelado 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, p. 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 provisoriedad 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 acerca de la representatividad de los modelos científicos y que no se relaciona con ella (cf. Accorinti & Martínez González, 2016).

Las consecuencias epistemológicas que del caso pueden extraerse son sumamente relevantes, ya que instituyen un nuevo argumento en favor de la tesis de que las teorías son, como tantos otros elementos, herramientas útiles que nos permiten construir modelos. En los modelos moleculares intervienen tanto el dominio clásico (a través de la química estructural que aporta la geometría de la molécula a partir de las posiciones fijas de los núcleos en el espacio) como el cuántico (a través de la ecuación de Schrödinger para la determinación de los niveles de energía), y sendos dominios son conceptualmente y ontológicamente incompatibles. Este hecho es muy difícil de articular, no sólo con una lectura representacionista de los modelos, sino también con la interpretación realista de las teorías científicas, según la cual éstas se confirman a partir del éxito empírico de los respectivos modelos. En efecto, siendo que cualquier modelo molecular involucra teorías incompatibles, cabe preguntarse respecto a cuál de ellas el modelo en cuestión se constituye como hacedor de verdad. Por lo tanto, la existencia de modelos que integran constructivamente y de un modo empíricamente exitoso teorías incompatibles, exponiendo a las teorías como instrumentos útiles, cuestiona el fuerte lazo existente entre teoría, modelo, representación y conocimiento.

CONCLUSIONES

El objetivo central del presente artículo ha sido brindar una serie de argumentos teórico-filosóficos, anclados principalmente en la práctica científica, dirigidos a poner en evidencia que no siempre el conocimiento está supeditado a la representación. Para ello, en primer lugar, mencionamos los problemas relativos a los diversos argumentos esgrimidos para justificar el carácter representativo de los modelos científicos. Señalamos, en este sentido, que los intentos por dar cuenta de la representación que no incluyan al agente como elemento constitutivo no cuentan con respaldo filosófico suficiente: la caracterización de la representación en términos no intencionales, a partir de una relación naturalista entre modelo y sistema, se enfrenta con problemas conceptuales difícilmente superables. Luego, como estrategia superadora, apelamos a una serie de ejemplos de modelos incompatibles con el objetivo de poner definitivamente en tela de juicio el papel protagónico del representar en el conocimiento científico. A través de estos ejemplos se genera conocimiento científico porque los modelos permiten manipular y predecir el comportamiento de algunas variables en el sistema que se está analizando, aun cuando ello no implique la posibilidad de describir cómo es efectivamente el sistema en sus aspectos inobservables. Por último, al brindar un caso donde un mismo modelo integra teorías incompatibles, pudimos extender la tesis planteada también al ámbito de las teorías.

Es importante aclarar que el propósito del artículo no es canonizar un instrumentalismo absoluto en todos los ámbitos e instancias de la ciencia. Lo que se pretende es desarticular un imaginario fuertemente enraizado que considera que el conocimiento desarrollado por la ciencia depende de la capacidad representativa que tienen los elementos cognoscitivos por ella generados. En este sentido, no se niega aquí que algunos modelos, e inclusive algunas teorías, produzcan conocimiento científico *porque* representen. Lo que se intenta afirmar es que no es ése el único camino para alcanzar conocimiento: en muchas áreas y disciplinas también se genera conocimiento en términos instrumentales y predictivos, y ello exige admitir la legitimidad de un conocimiento de tipo no representativo. ☞

AGRADECIMIENTOS. Este trabajo ha sido posible gracias al apoyo económico del subsidio 57919 de la John Templeton Foundation, y del subsidio PICT-2014-2812 de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT-FONCyT).

Olimpia LOMBARDI

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas,
Universidad de Buenos Aires, Argentina.
olimpiafilo@arnet.com.ar

Hernán ACORINTI

Universidad de Buenos Aires, Argentina.
hernanaccorinti@gmail.com

Juan Camilo MARTÍNEZ

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas,
Universidad de Buenos Aires, Argentina.
olimac62@hotmail.com

Scientific models: the problem of representation

ABSTRACT

This article focuses on the relationship between knowledge and representation. We consider the difficulties of the approaches that try to justify the representative character of models. We point out that the attempts to account for representation from a perspective that does not include the agent as a constitutive element lack enough philosophical support: the characterization of representation in unintentional terms face conceptual difficulties that are hard to overcome. As a positive proposal, we discuss a number of incompatible models to call into question the leading role of representation in scientific knowledge. Those cases show that scientific knowledge is generated because those models allow us to predict and manipulate the behavior of some variables of the system, even if this does not imply the possibility of describing how effectively the system is in its unobservable aspects. Finally, by providing a case where the same model integrates incompatible theories, we can extend our thesis to the domain of theories. The main hypothesis we try to establish is that, although the association between knowledge and representation must not be definitively given up, it should be relaxed so that the possibility of recognizing the legitimacy of non-representative knowledge be admitted.

KEYWORDS • Representation. Quantum chemistry. Covalent bond. Incompatible models. Statistical mechanics.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ACCORINTI, H. & MARTÍNEZ GONZÁLEZ, J. C. Acerca de la independencia de los modelos respecto de las teorías: un caso de la química cuántica. *Theoria. Revista de Teoría, Historia y Fundamentos de la Ciencia*, 31, p. 225-45, 2016.
- ARABATZIS, T.; RENN, J. & SIMOES, A. (Ed.). *Relocating the history of science: essays in honor of Kostas Gavroglu*. New York: Springer, 2015.
- BORN, M. & OPPENHEIMER, J. R. Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik*, 84, p. 457-84, 1927.
- CHANG, H. Reductionism and the relation between chemistry and physics. In: ARABATZIS, T.; RENN, J. & SIMOES, A. (Ed.). *Relocating the history of science: essays in honor of Kostas Gavroglu*. New York: Springer, 2015. p. 193-209.
- CONTESSA, G. Scientific models, partial structures and the new received view of theories. *Studies in History and Philosophy of Science*, 37, p. 370-7, 2006.
- FRIGG, R. Models and representation: why structures are not enough. *Measurement in Physics and Economics Project Discussion Paper Series*. DP MEAS 25/02, 2002. London School of Economics.
- . Scientific representation and the semantic view of theories. *Theoria. Revista de Teoría, Historia y Fundamentos de la Ciencia*, 55, p. 46-65, 2006.
- . A field guide to recent work on the foundations of statistical mechanics. In: RICKLES, D. (Ed.). *The Ashgate companion to contemporary philosophy of physics*. London: Ashgate, 2008. p. 99-196.
- FRIGG, R. & HARTMANN, S. Models in science. In: ZALTA, E. N. (Ed.). *Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Stanford: Stanford University, 2006.
- GIERE, R. How models are used to represent physical reality. *Philosophy of Science*, 71, p. 742-52, 2004.
- . An agent-based conception of models and scientific representation. *Synthese*, 172, p. 269-81, 2010.
- . Representing with physical models. In: HUMPHREYS, P. & IMBERT, C. (Ed.). *Models, simulations and representations*. New York: Routledge, 2011. p. 209-15.
- HEITLER, W. & LONDON, F. Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 44, p. 455-72, 1927.
- HENDRY, R. Two conceptions of the chemical bond. *Philosophy of Science*, 75, p. 909-20, 2006.
- HETTEMA, H. *Reducing chemistry to physics. Limits, models, consequences*. Groningen: Rijksuniversiteit Groningen, 2012.
- HUGHES, R. I. *The structure and interpretation of quantum mechanics*. Cambridge: Harvard University Press, 1989.
- HUMPHREYS, P. & IMBERT, C. (Ed.). *Models, simulations and representations*. New York: Routledge, 2011.
- HUND, F. Chemical binding. *Transactions of the Faraday Society*, 25, p. 646-8, 1929.
- KENNEDY, A. G. Models and scientific explanation, *Philosophy of Science Association*. 22nd Biennial Meeting, Montreal, 2006. Disponible en: <<http://philsci-archive.pitt.edu/id/eprint/8374>>.
- KNUUTTILA, T. Models, representation and mediation. *Philosophy of Science*, 72, p. 1260-71, 2005.
- KNUUTTILA, T. & BOON, M. How do models give us knowledge? The case of Carnot's ideal heat engine. *European Journal for Philosophy of Science*, 1, p. 309-34, 2011.
- LEWIS, G. N. The atom and the molecule. *Journal of the American Chemical Society*, 38, p. 762-85, 1916.
- LOMBARDI, O. Linking chemistry with physics: arguments and counterarguments. *Foundations of Chemistry*, 16, p. 181-92, 2014.
- LOMBARDI, O. & LABARCA, M. Los enfoques de Boltzmann y de Gibbs frente al problema de la irreversibilidad. *Crítica. Revista Hispanoamericana de Filosofía*, 37, p. 39-81, 2005a.
- . The ontological autonomy of the chemical world. *Foundations of Chemistry*, 7, p. 125-48, 2005b.

- LOMBARDI, O. & CASTAGNINO, M. Matters are not so clear on the physical side. *Foundations of Chemistry*, 12, p. 159-66, 2010.
- LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ GONZÁLEZ, J. C. Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica? *Scientiae Studia*, 10, p. 649-70, 2012.
- LOMBARDI, O. & PÉREZ RANSANZ, A. R. *Los múltiples mundos de la ciencia. Un realismo pluralista y su aplicación a la filosofía de la física*. México: UNAM/Siglo XXI, 2012.
- MORRISON, M. One phenomenon, many models: Inconsistency and complementarity. *Studies in History and Philosophy of Science*, 42, p. 342-51, 2011.
- MULLIKEN, R. Electronic structures of polyatomic molecules and valence. *Physical Review*, 40, p. 55-62, 1932.
- _____. A new electronegativity scale; together with data on valence states and on valence ionization potentials and electron affinities. *Journal of Chemical Physics*, 2, p. 782-93, 1934.
- PARK, B. S. Chemical translators: Pauling, Wheland and their strategies for teaching the theory of resonance. *The British Journal for the History of Science*, 32, p. 21-46, 1999.
- PAULING, L. *The nature of the chemical bond IV. The energy of single bonds and the relative electronegativity of atoms*. *Journal of the American Chemical Society*, 54, p. 3570-82, 1932.
- _____. *College chemistry: an introductory textbook of general chemistry*. 2 ed. San Francisco: Freeman, 1950.
- _____. *The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals*. Ithaca: Cornell University Press, 1960 [1939].
- RICKLES, D. (Ed.). *The Ashgate companion to contemporary philosophy of physics*. London: Ashgate, 2008.
- SUÁREZ, M. Scientific representation: against similarity and isomorphism. *International Studies in the Philosophy of Science*, 17, p. 225-44, 2003.
- _____. An inferential conception of scientific representation. *Philosophy of Science*, 71, p. 767-79, 2004.
- SUÁREZ, M. & CARTWRIGHT, N. Theories: tools versus models. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, 39, p. 62-81, 2008.
- WOODY, A. I. Putting quantum mechanics to work in chemistry: the power of diagrammatic representation. *Philosophy of Science*, 67, p. S612-27, 2000.
- ZALTA, E. N. (Ed.). *Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Stanford: Stanford University, 2006.

