

Relaciones peligrosas o asociaciones inevitables: la química cuántica en la encrucijada de la química, la física y las matemáticas*

Ana Simões

*Este artículo es una versión traducida de "Dangerous Liaisons or Unavoidable Associations: Quantum Chemistry at the Crossroads of Chemistry, Physics and Mathematics" por Mar Cuenca Lorente – Instituto de Historia de la Medicina y de la Ciencia "López-Piñero", Universidad de Valencia – CSIC que fue presentado en el 6th International Conference on the History of Chemistry, Louvain, 2007.

Resumen: En este artículo discutiré tres asuntos que muestran las particularidades de la química cuántica, tanto epistemológicas como sociales, a través de las variantes articulaciones de la química cuántica con la química, la física y las matemáticas. El primer objetivo consiste en presentar los orígenes históricos de la química cuántica. El segundo es demostrar que, para reconstruir esta historia, resulta necesario ir más allá de los aspectos "internalistas". El tercer punto que trataremos será la espectacular transformación producida por la llegada de los ordenadores en la gradualmente articulada autonomía de la química cuántica a principios de la década de los años sesenta.

Palabras clave: Culturas de la química cuántica, computadoras, relaciones con la física, la química y las matemáticas.

Abstract: In this paper I discuss three issues which manifest the particularities of quantum chemistry, epistemological as well as social, through the evolving (re)articulations of quantum chemistry with chemistry, physics and mathematics. The first is to trace the historical becoming of quantum chemistry. The second is that arguments to follow are not to be solely based on what we used to call internalist considerations. The third point is that the gradually articulated relative autonomy of quantum chemistry has been dramatically transformed with the advent of the first digital computers in the early-1960s.

Keywords: Cultures of quantum chemistry, computers, relations to physics, chemistry and mathematics.

Introducción

En 1967, el químico cuántico sueco Per-Olov-Löwdin (1916–2000) en la introducción del *International Journal of Quantum Chemistry* ofreció una definición de la disciplina, la cual tenía en ese momento cuarenta años de antigüedad:

"Quantum chemistry deals with the theory of the electronic structure of matter: atoms, molecules, and crystals. It describes this structure in terms of wave patterns, and it uses physical and chemical experience, deep-going mathematical analysis, and high-speed electronic computers to achieve its results. Quantum mechanics has rendered a new conceptual framework for physics and chemistry, and it has led to a unification of the natural sciences which was previously inconceivable; the recent development of molecular biology shows also that the life sciences are now approaching the same basis. Quantum chemistry is a young field which falls between the historically developed areas of mathematics, physics, chemistry, and biology."^[1]

El texto fue escrito cuando la química cuántica estaba experimentando un intenso crecimiento en la creación de redes de trabajo y en la internacionalización, al mismo tiempo que extendía su dominio académico a moléculas de interés biológico. Simultáneamente, se estaba comenzando a explorar el potencial de un prometedor instrumento: el ordenador

electrónico digital. La definición de Per-Olov Löwdin muestra los retos planteados en ese momento, en contraste con la situación de algunos años antes. Apunta un número de características específicas de la química cuántica: la determinación de la estructura electrónica de átomos, moléculas y agregados de moléculas; la interacción de la teoría, el experimento, las matemáticas y los algoritmos computacionales en la construcción de los aparatos metodológicos de la química cuántica; su relación con las disciplinas de matemáticas, física y biología; y, finalmente, la evaluación del papel de la mecánica cuántica para producir un marco unificador de las ciencias naturales y, en definitiva, de las ciencias de la vida.

No debería sorprender que las cambiantes relaciones de la nueva subdisciplina con respecto a la física y a las matemáticas llamaran la atención de los primeros (y también de los posteriores) profesionales de la química cuántica. Muchos de ellos trataron, implícitamente o explícitamente, este asunto particular en publicaciones científicas, libros de texto, escritos dirigidos a públicos no especializados o textos de divulgación científica. Además, el tema ya había llamado la atención de científicos contemporáneos (físicos y principalmente químicos) más interesados por la historia y la filosofía, como H. Primas, G. Woolley, S. Weininger, S. Shaik, W. Kutzelnigg, G. Frenking, R. Hoffman, P. Lazlo, etc. Estos y otros muchos autores habían participado o participaban actualmente en numerosos foros de debate. Además de las reflexiones ofrecidas por participantes y profesionales químicos, historiadores y filósofos de la ciencia han contribuido al debate a través de artículos, números monográficos de revistas, volúmenes colectivos, conferencias, etc.^[2] La impresión del autor de este trabajo es que estos debates han permanecido, a menudo, atrapados dentro de territorios disciplinares y, por lo tanto, no se han beneficiado de debates complementarios sobre los mismos temas, si hubieran circulado a través de las fronteras disciplinares.

En este trabajo se discutirán tres asuntos que revelan las particularidades de la química cuántica, tanto en sus características epistemológicas como sociales, a través de las cambiantes articulaciones y reformulaciones de la química, la fisi-



A. Simões

Centro Interuniversitário de História das Ciências e da Tecnologia,
Secção Autónoma de História e Filosofia das Ciências,
Universidade de Lisboa
Campo Grande, C4, Piso 3, 1749-016 Lisboa
C-e: asimoes@fc.ul.pt
Recibido: 02/03/2009. Aceptado: 17/06/2009.

ca y las matemáticas. En primer lugar, se rastreará la evolución histórica de la química cuántica, mediante el análisis de algunos casos históricos cuando –dicho de modo simplificado– la química cuántica estaba o bien identificándose principalmente con la física matemática o con la matemática aplicada o siguiendo el enfoque semi-empírico tan grato para los químicos. El carácter de la química cuántica se formó a través de la articulación gradual de su relativa autonomía tanto en relación con la física como con las matemáticas. Este artículo intenta mostrar la historicidad de esta autonomía relativa. La segunda cuestión es que las cuestiones que se deben tratar no están limitadas a lo que los historiadores de la ciencia de hace unas décadas denominaban "aspectos internos" de la ciencia o "aproximación internalista". También se tendrán en cuenta, siguiendo esta terminología, los "aspectos externos", es decir, cuestiones tales como la creación de cátedras, la política universitaria, el establecimiento de redes de trabajo o la creación de alianzas que los químicos cuánticos trataron de mantener con profesionales de otras disciplinas. Todos estos factores fueron bastante decisivos en la formación de las características de la química cuántica. Estas dos cuestiones además muestran una característica fascinante del desarrollo de la química cuántica, a saber, su carácter contingente. Es evidente que la química cuántica podía haberse desarrollado de manera diferente. La forma particular que ha adquirido ha sido condicionada históricamente. El tercer punto que analizaremos son los cambios que se produjeron con la llegada de la informática en los años sesenta del siglo XX. La autonomía gradual de la química cuántica y la cultura de los químicos cuánticos, que se encontraba plenamente consolidada a comienzos de esa década, se transformó espectacularmente con la llegada de los primeros ordenadores digitales: el mayor inconveniente de la química cuántica, la imposibilidad de llevar a cabo cálculos analíticos, fue, de repente, convertido en una inapreciable ventaja para la posterior legitimización de los ordenadores electrónicos. En los comienzos de 1960, parecía que toda una disciplina dependía de este particular tipo de instrumento con el fin de producir resultados fidedignos. Durante aproximadamente 40 años los químicos cuánticos tuvieron una amplia gama de opciones metodológicas, filosóficas y ontológicas, así como una gran flexibilidad en sus colaboraciones (inter)disciplinares y alianzas con el fin de formar su cultura idiosincrática. Pero, en un periodo muy corto, los ordenadores electrónicos socavaron los criterios fundamentales que habían servido de guía para tomar las decisiones relevantes en la fase precedente. A pesar de que algunos cálculos no podían todavía ser llevados a cabo analíticamente, resultaba ahora posible realizarlos de forma que todos estuvieran de acuerdo en su fiabilidad y, de este modo, alcanzar la sofisticación y la precisión requerida por las necesidades de cada químico cuántico. Los miembros de toda una comunidad científica –que habían, a través de un proceso complicado históricamente, alcanzado un consenso en cuanto a la naturaleza de su estudio– de repente, se convirtieron en subordinados de las ilimitadas posibilidades de los cálculos proporcionados por los sistemas electrónicos.

El estudio que presentamos se concentra en el periodo que comienza con la aparición de la química cuántica (1927) y concluye en la mitad de los años setenta, una vez transcurridas las primeras décadas de uso de los ordenadores electrónicos digitales. Debido a las limitaciones de tiempo y espacio, dejaremos fuera de este trabajo las discusiones sobre las relaciones de la química cuántica con la biología. Este un tema apasionante, que merecería un tratamiento detallado, sobre todo a raíz del extendido uso de ordenadores electrónicos tras los años 1960, los cuales permitieron a la química cuántica incluir en su estudio a macromoléculas y moléculas de interés biológico.

Posicionar la química cuántica

Nombrar una nueva subdisciplina

Una prueba de las dificultades encontradas para ubicar el nuevo campo en relación con áreas vecinas tales como química, física y matemáticas son la multitud de nombres que se le atribuyeron, especialmente en el periodo en que Löwdin escribió la nota introductoria a la nueva revista antes citada. Otras pruebas adicionales son los diferentes nombres asignados a las cátedras que ocuparon sus cultivadores, los títulos de las revistas donde aparecían sus publicaciones, los nombres de los congresos sobre el tema, y las descripciones de los cursos sobre la materia.

El nuevo campo ha sido llamado química matemática,^[3] química teórica subatómica,^[4] teoría cuántica de la valencia,^[5] mecánica cuántica molecular,^[6] químico-física,¹ química teórica,² así como el nuevo término estándar, química cuántica. Aunque difícil de asegurar, la primera aparición de la denominación "química cuántica" en la literatura se debe a Arthur Erich Haas (1884–1941), el catedrático de Física de la Universidad de Viena, quien en 1929 publicó *Die Grundlagen der Quantenchemie*,^[7] una colección de cuatro conferencias dadas a la Sociedad Físico-Química en Viena. Esta denominación apenas se utilizaba durante los años 1930, cuando la subdisciplina estaba forjando su identidad frente a áreas vecinas. Se empleó cada vez más en libros de texto escritos tras los años 1940,^[8] y, finalmente, ascendió hasta el título de una revista, gracias a la creación de la *International Journal of Quantum Chemistry* en 1967 por parte de Löwdin. Una especialización creciente fomentada por la aplicación constante de los programas de ordenador para resolver problemas químicos dio paso en 1980 a la aparición del *Journal of Computational Chemistry* y a la división de la química cuántica en dos subáreas: química cuántica computacional y no computacional.

La incertidumbre sobre el nombramiento de la nueva subdisciplina, se extendió durante un periodo de 40 años dentro del contexto global de la imposibilidad de cálculos analíticos. Los titubeos se desvanecieron con el reconocimiento de su estatus autónomo, para rápidamente dar lugar a la discusión de nuevas vías de especialización abiertas por la apropiación de una nueva herramienta: el ordenador. Al mismo tiempo,

¹Esta designación apareció por primera vez con la creación del *Journal of Chemical Physics* en 1933. Otras revistas usadas anteriormente como vehículos para artículos de la nueva área incluyeron el *Journal of the American Chemical Society*, *Physical Review*, para ser seguidos posteriormente por revistas como *International Journal of Quantum Chemistry* o el *Journal of Computational Chemistry*.

²J. E. Lennard-Jones ocupó la primera cátedra de Química Teórica en el mundo en 1932, pero en 1973 se le ofreció a C. A. Coulson una cátedra equivalente.

Relaciones peligrosas o asociaciones inevitables.

obligó a la comunidad a evaluar su impacto, a escoger entre puntos de vista divergentes acerca de la metodología y a extender su campo de acción a problemas relacionados con la química orgánica, la química inorgánica y la bioquímica. Además, actuó como un vínculo entre grupos de diferentes profesionales, en un tiempo en el que los ordenadores eran pocos, grandes y caros, por lo que gozar de un tiempo de uso del ordenador era casi una cuestión de lucha por la supervivencia. De forma bastante vívida, la multitud de nombres alternativos usados en las primeras décadas, dio como resultado la estabilización de la expresión "química cuántica", seguido por la agregación de un adjetivo al nombre como una marca que señalaba el aumento en la especialización (química cuántica computacional, bioquímica cuántica). Todo ello ilustra paradójicamente el desarrollo de la cambiante identidad de la nueva subdisciplina.

La aparición de la química cuántica: la apropiación de la física en la cultura de la química

La narración tradicional en la historia de la química cuántica, generalmente ofrecida por profesionales de la química, se construye alrededor del conflicto entre dos métodos computacionales alternativos para tratar los problemas de valencia: la teoría del enlace de valencia de Heitler-London-Slater-Pauling (VB) y el método de los orbitales moleculares de Hund-Mulliken (MO). En otros lugares he propuesto un esquema alternativo de análisis, centrado en un criterio más metodológico que computacional. En breves palabras, considero que la aproximación de los participantes en la construcción de la teoría y el papel de la teoría en la química forman un conjunto de criterios que justifica una clasificación diferente: el enfoque de Heitler-London frente al enfoque de Pauling-Mulliken, o para simplificarlo, el "enfoque alemán" frente al "enfoque americano".^[9]

Walter Heitler (1904–1981) y Fritz London (1900–1954) asumieron que ya eran conocidas las leyes subyacentes que gobernaban el comportamiento de los electrones, y, por lo tanto, hacer química significaba simplemente tratar con ecuaciones que eran solucionables en principio, si bien en la práctica posiblemente sólo producían soluciones aproximadas. Ellos insistieron en un enfoque centrado en la aportación de la física y las matemáticas, no sólo en relación con las herramientas usadas sino también como en cuestiones más fundamentales. Su enfoque a la química cuántica muestra la existencia de un grupo que compartía los mismos valores e incluía a otros físicos como Friedrich Hund (1896–1997) y Erich Hückel (1896–1980), y que se fundamentaba en los primeros principios de la mecánica cuántica.^[10] Era una aproximación antagonista con los modos de representación clásicos de la química, los cuales se basaban en las imágenes pictóricas que Mary Jo Nye incluye dentro de la tradición química del "lápiz y papel".^[11] Sus partidarios se tomaron seriamente la inherente invisibilidad de la mecánica cuántica.

Linus Pauling (1901–1994) y Robert Sanderson Mulliken (1896–1986) tenían una opinión diferente acerca de cómo la nueva mecánica cuántica podía aplicarse en la práctica a problemas de química y, más específicamente, a problemas relacionados con el enlace químico. Mediante un amplio uso de los métodos semi-empíricos, que suponían una combinación de mecánica cuántica, datos empíricos e imágenes pictóricas, desarrollaron sus respectivos enfoques, cuyo único criterio de

éxito eran los resultados prácticos. Más significativamente, ambos compartieron unas perspectivas comunes acerca del modo de construir su esquema teórico y sobre las características constitutivas de sus teorías, así como sobre la relación entre física y química. También compartieron un discurso similar para legitimar sus respectivas teorías.

Hubo una fuerte interacción entre el grupo "americano" y el "británico" (estos últimos habían entrado en juego en esos años) y las comunidades "alemanas", especialmente hasta finales de la década de 1930. Al mismo tiempo emergió una consonancia entre los enfoques del modelo "americano" y "británico" en cuanto a objetivos, herramientas y métodos que usar en la disciplina. En cierto sentido, el enfoque "pragmático" de los americanos, con su énfasis en la "química" y toscas aproximaciones semi-empíricas, fue seguido y complementado por el énfasis británico en las "matemáticas". La primera generación de químicos cuánticos británicos –que incluía a J. E. Lennard-Jones (1894–1954), D. Hartree (1897–1958) y C. A. Coulson (1910–1974)– percibieron los problemas de la química cuántica principalmente como dificultades en los cálculos, y trataron de solucionarlos ideando novedosos métodos de cálculo, lo que situaba a la química cuántica en el ámbito de la matemática aplicada.^[12] Su tarea fue particularmente efectiva, si bien no tan emocionante como la del grupo "alemán" o el "americano". En este nuevo contexto, la demanda de rigor adicional no fue principalmente una búsqueda de replanteamiento del marco conceptual sino, más bien, un intento de desarrollo y legitimación de las técnicas y los métodos matemáticos que podían ser usados en problemas químicos, lo que, obviamente, significaba que debían relacionarse con el área de la matemática aplicada.

Esta caracterización impresionista de la disciplina en sus primeros días que hemos ofrecido en los párrafos anteriores pone de manifiesto en qué medida la principal tarea de los primeros profesionales dependía de la articulación de la química cuántica como una subdisciplina dentro de la química, con una autonomía parcial en relación a la física y las matemáticas, a pesar de precisar el respaldo matemático de la mecánica cuántica y la apropiación de conceptos mecánico cuánticos. Al mismo tiempo que forjaban una identidad para la química cuántica, algunos de ellos ofrecieron reflexiones explícitas en las relaciones de la química con la física que provenían de sus experiencias diarias, bien como participantes en la preparación del terreno para la aparición de la química cuántica o como fundadores y constructores tempranos de la nueva subdisciplina. G. N. Lewis (1875–1946) y N. V. Sidgwick (1873–1952) son ejemplos del primer grupo y Pauling y Mulliken del segundo.

En un artículo publicado en el primer volumen del nuevo *Journal of Chemical Physics* (1933), Lewis opuso las características analíticas de las teorías químicas y el método convergente de los químicos con las características sintéticas de las teorías físicas y el método divergente de los físicos. Las teorías químicas estaban, dijo, basadas en una gran cantidad de material experimental desde el cual los químicos intentan deducir un conjunto de leyes simples que concuerdan con el fenómeno conocido;^[13] las teorías físicas postulan leyes rigiendo el comportamiento mutuo de partículas y, posteriormente, tratan de "sintetizar un átomo o una molécula".^[14]

Sidgwick, uno de los más directos defensores de la teoría de la resonancia en Gran Bretaña, ofreció una serie de conferencias sobre el enlace covalente en química cuando visitaba

Cornell en el mismo año en que el *Journal of Chemical Physics* apareció por primera vez (1933).^[15] En la conferencia inaugural discutió "las relaciones de la física y la química". Siguiendo el razonamiento de Lewis, Sidgwick hizo hincapié en que la división del conocimiento científico en diferentes áreas no era más que una construcción humana, basada en la presunción de una creciente escala de complejidad en los objetos de estudio, desde las matemáticas hasta la física, la química y la biología. Una consecuencia obvia de la creciente complejidad era que "cuanto más simple es el problema examinado más preciso es el conocimiento que se puede adquirir de él".^[16] Mientras los físicos pueden restringir su investigación a sistemas ideales y materiales manejables, el químico está forzado a extender su trabajo a todas las sustancias puras. Por lo tanto, su conocimiento de estos problemas es necesariamente menos detallado, menos preciso, menos deducible de primeros postulados.

Sidgwick señaló que se estaba produciendo un cruzamiento creciente de los límites entre las diversas ciencias. La línea que separaba las matemáticas de la física se volvía cada vez más borrosa y la frontera entre física y química había desaparecido como consecuencia del reciente desarrollo de la química junto con líneas "mecánico-moleculares". Se dio cuenta de que "ambas ciencias [física y química] están ahora examinando los mismos problemas. Es cierto que usan diferentes métodos, pero los aplican a los mismos materiales".^[17] Pronto participaría en la popularización de la teoría de resonancia de Pauling, la cual después de todo cumplía su aguda percepción puesto que supuso la incorporación de la teoría estructural, la cual Sidgwick designó como el paradigma de la teoría química en líneas "mecánico-moleculares". Pauling fue más allá y reclamó una reforma de toda la química desde el punto de vista de la teoría de la resonancia. Esta estrategia tenía implicaciones de mayor alcance en el estatus de la química dentro de la jerarquía de las ciencias. Pauling creía en la "integración" de las ciencias,^[18] que consideraba que se conseguiría a través de la transferencia de herramientas y métodos y de la forma más importante de intercambio, lo que denominó "technique of thinking". Llegó a considerar que la química, y específicamente la teoría de resonancia, jugaba un papel capital entre las ciencias físicas y biológicas, hasta tal punto que afirmó que el lugar central en las ciencias, antes ocupado por la física, ahora era patrimonio de la química.

Mulliken no fue tan lejos. Diferenció la química de la física en función de las diferentes actitudes de sus cultivadores. "A los químicos les encantan las moléculas" –afirmó– "y consiguen conocerlas individualmente" [...] "Pero ¿qué pasa con los físicos? Mi impresión es que están más preocupados por los campos de fuerza y las ondas que con las características individuales de las moléculas o la materia, con la excepción quizás de las partículas de alta energía".^[19] Mulliken describió las características dinámicas de la relación entre químicos y físicos empleando una analogía basada en el comportamiento de los movimientos ondulatorios. Los maremotos inundaban la química de tanto en tanto. Los grandes maremotos eran relativamente raros; las pequeñas olas, los sucesos más frecuentes. Los grandes maremotos están compuestos de

pequeñas olas. Mulliken identificó el primer gran maremoto con la aparición de la química física ("physical chemistry"); el siguiente gran maremoto con la llegada de física química ("chemical physics"), quizás "una moderna y aún más física variedad de la química física".^[20]

Como se ha mostrado, en las negociaciones relacionadas con el estatus de la química cuántica, un tema central era la evaluación de sus relaciones con la química y la física, ambas presentes en la práctica real de los científicos o tratadas explícitamente en sus consideraciones sobre el tema. Los historiadores y los filósofos de la ciencia también han tratado este mismo asunto. En repetidas ocasiones, han expresado sus puntos de vista haciendo referencia a la afirmación realizada en 1929 por Paul A. M. Dirac como un ejemplo de la actitud reduccionista de la mayoría de físicos (o científicos orientados a la física) involucrados de una forma u otra con la aparición de la química cuántica. De hecho, en el párrafo inicial de este artículo ("Quantum Mechanics of Many-Electron Systems"), Dirac (1902–1984) pudo anunciar que "las subyacentes leyes físicas necesarias para la teoría matemática de una gran parte de la física y la totalidad de la química son así completamente conocidas, y la dificultad es únicamente que la aplicación exacta de esas leyes conduce a ecuaciones demasiado complicadas para ser resueltas".^[21]

Un largo número de cuestiones históricamente interesantes, que ofrecen una nueva perspectiva en el tema del reduccionismo, pueden ser contestadas en relación a la afirmación de Dirac. ¿Cómo reaccionaron ante ella los propios químicos o aquellos que trabajaron en el campo que se conoció como química cuántica? ¿Se sintieron amenazados por los físicos que pensaban que podían hacer su trabajo mejor que ellos mismos? ¿Se sintieron indiferentes o, simplemente, no les importó? Una forma de contestar estas preguntas es examinar los trabajos de investigación de los químicos que específicamente citaron el documento de Dirac en 1929.^{[22],3} ¿Fue citado a menudo el artículo de Dirac? ¿Por qué fue citado? ¿Citaron los químicos especialmente el párrafo inicial de Dirac o sólo una parte del mismo? Cuando se referían a la susodicha afirmación ¿Por qué lo hacían? ¿Cuáles consideraban que eran sus repercusiones? ¿Cómo reaccionaron a las mismas?

Un análisis de la base de datos del *Science Citation Index* muestra que pocas veces el artículo de Dirac era citado por su párrafo introductorio. Es más, el análisis mostró que los pocos químicos que citaron la afirmación de Dirac no lo tomaron como una declaración filosófica. Al contrario, lo tomaron como una predicción *histórica* sobre el futuro de la química que, en ese momento, probaba ser incorrecta. Los químicos vieron la demanda de Dirac como una declaración histórica por su incapacidad para predecir la importancia de los efectos relativistas y cálculos exactos para la química. Los historiadores y filósofos podían también mirar la demanda de Dirac como una afirmación *histórica* más que *filosófica* enunciada por uno de los fundadores de la mecánica cuántica menos interesado por la filosofía, que expresaba su creencia en que la química se convertiría en una parte de la física y, por extensión, que la química teórica se convertiría en una forma todavía más física de la química física. Visto desde esta posi-

³En este trabajo he usado el *Science Citation Index* (1945–1979) para identificar todos los artículos que citan el artículo de Dirac. Para el periodo (1929–1945) que no está cubierto por SCI sólo he llevado a cabo una búsqueda no sistemática de revistas que incluyen artículos sobre química cuántica. Tan solo he cubierto un periodo de 50 años asumiendo que en este periodo el artículo de Dirac pasó a ser de "dominio común" por lo que las citaciones se redujeron consiguientemente para pasar a ser casi no existentes posteriormente.

Relaciones peligrosas o asociaciones inevitables.

ción estratégica, Dirac fracasó al predecir que la mecánica cuántica pronto se convertiría en una mayor preocupación para los químicos, y dejaría de ser tema de interés exclusivo de los físicos. No previó que aparecería una nueva generación de químicos que compartían una cultura muy diferente de la cultura reduccionista de los físicos, quienes adoptaron diferentes perspectivas metodológicas y ontológicas que, de ese modo, les permitiría abordar con éxito los problemas de la química cuántica.

Tendencias paralelas en el desarrollo disciplinario: la complicada relación de químicos y matemáticos

Quizás, como he comentado en un artículo anterior,^[23] el reduccionismo es el punto de vista global epistemológico de los físicos pero no de los químicos, por lo que este calificativo puede ser inadecuado para discutir cuestiones relativas a la química. Tal vez el concepto de reduccionismo expresa un punto de vista apreciado por los físicos pero no por los químicos. Aunque los físicos dieron por sentado que la química sería reducida a física, los químicos no se dieron el lujo de esperar pasivamente el cumplimiento de esta predicción. El reduccionismo pudo haber sido un programa de trabajo pero su puesta en marcha fue imposible, porque ya desde el principio, ni físicos ni químicos pudieron tratar analíticamente con moléculas diferentes de las más simples de todas ellas –la molécula de hidrógeno– y aún así en términos sumamente aproximados.

¿Hay otras dimensiones del reduccionismo que ofrecen perspectivas más fructíferas para el tratamiento del mismo conjunto de problemas? En este sentido resulta útil analizar la complicada relación de los químicos con los matemáticos y discutir si la apropiación de las matemáticas en la cultura química fue mucho más compleja y difícil de lo que lo fue en el caso de la física. Y, por lo tanto, dado que no pueden ser consideradas como totalmente independientes, se puede cuestionar que la aceptación de las matemáticas en la cultura química ofreciera más dificultades y resistencias que en el caso de los conceptos y las técnicas de la física.

Como cualquier forma de apropiación, las opiniones acerca de la introducción de las matemáticas eran muy variadas entre los miembros de la comunidad química, oscilando desde la aceptación a la resistencia. En realidad, estas discusiones pueden encontrarse en diferentes periodos del desarrollo de la química.⁴ El siguiente foco se encuentra en la identificación de la difícil relación en el surgimiento de la química cuántica. Mientras las afirmaciones iniciales de los científicos tales como Pauling y Van Vleck anunciaban el surgimiento de la "química matemática", llamando la atención de las posibilidades asociadas con los aparatos matemáticos encargados de la formulación de la mecánica cuántica,^[24] en el siguiente periodo, muchos de los que tuvieron éxito en establecer la química cuántica como una nueva subdisciplina estaban ansiosos por señalar el papel subordinado de las matemáticas y la parafernalia computacional. Esto no era tan sólo una estrategia retórica para satisfacer a públicos mayores, sino que se convirtió en un ingrediente constitutivo de la propia química cuántica.

Pauling logró presentar un tratamiento coherente del enlace químico que era atractiva para los químicos por sus frecuentes referencias a la "intuición de los químicos", y el uso de una gran cantidad de datos experimentales, que permitían explicar o predecir otros datos experimentales.^[25] A pesar de que recaló en repetidas ocasiones que la comprensión de la naturaleza del enlace químico, construido a partir de la apropiación del concepto mecánico-cuántico de resonancia, era posible sólo por el desarrollo de la mecánica cuántica, su uso de formulaciones matemáticas detalladas se redujo a lo imprescindible.

En su influyente libro de texto, *Valence* (1952), Coulson discutía acerca de la matematización de la química cuántica y defendía que debía ser entendible por químicos sin entrenamiento matemático. La presentación de los principios de la mecánica cuántica estuvo restringida en su libro a dos capítulos introductorios y, en muchos casos, los resultados matemáticos estaban ilustrados o complementados mediante el extenso uso de representaciones visuales. Era un reconocimiento implícito de que la visualización, en lugar de las matemáticas elaboradas, todavía seguía siendo una de las características constitutivas de la química. El mensaje era claro: la química cuántica no era otro ejemplo de aplicación de la mecánica cuántica sino, por el contrario, una nueva subdisciplina de la química. Coulson enfatizó vigorosamente el papel especial jugado por la alianza de resultados experimentales e intuición química en la selección de desarrollos matemáticos particulares, hasta tal punto que no tuvo reparos en afirmar que "el químico teórico no es un matemático, pensando matemáticamente, sino un químico, pensando químicamente".^[26] Insistió en este punto una y otra vez en reuniones, conferencias y ensayos de revisión.

El papel e importancia de las matemáticas iba a jugar un papel central no sólo en la práctica de Coulson como científico y escritor de libros de texto sino también en conferencias de divulgación de las ciencias, dirigidas a públicos más amplios y diversos.^[27] En la Tilden Lecture, que ofreció en la Chemical Society, y en su discurso inaugural como catedrático de matemáticas aplicadas ambas llevadas a cabo en los tiempos en que *Valence* vio la luz, Coulson expresó una opinión contraria a la expresada por Dirac en 1929. Afirmó que la importancia de las matemáticas para la química cuántica no se encontraba en el nivel computacional, sino, más bien, en el terreno conceptual. Presentó la química cuántica como una rama de las matemáticas aplicadas –un área posicionada entre las matemáticas puras por un lado, y la física y la química experimental por otro– que nunca debía convertirse en "un apéndice del experimento", ni tampoco "degenerar en una forma bastarda de matemáticas puras".^[28] Según Coulson, la verdadera contribución de la mecánica cuántica a la química fue mostrar el modo en el que los conceptos de la química experimental encajaban conjuntamente y cómo "todos ellos tienen un único fundamento, y cómo esta relación oculta entre ellos puede ser llevada a cabo".^[29]

Mencionamos estos casos no para elaborar un argumento concluyente sobre la relación de los químicos respecto a los matemáticos, sino más bien como ejemplos indicativos de una tendencia entre los químicos que a menudo se ha obviado en

⁴ Algunos, como Frankland, Van't Hoff, W. Ostwald, G. N. Lewis, presionaron bastante fuerte para introducir las matemáticas en la química. Incluso J. Larmor y J. J. Thomson antes que él intentaron proponer un marco matemático para tratar con problemas químicos. Pero la resistencia a tales programas vino de diferentes ámbitos.

los estudios históricos y filosóficos sobre la química cuántica. Mientras que los químicos cuánticos evaluaban el modo en el que la física podría ser apropiada en su propia cultura, también existía una discusión paralela y relativamente independiente entre ellos respecto a su apropiación de las matemáticas. Esta discusión ha pasado inadvertida por el cambio de atención hacia el momento en el que los ordenadores electrónicos digitales se adoptaron, con la esperanza de resolver las dificultades matemáticas insalvables hasta ese momento.

Diferentes culturas dentro de la química cuántica. El impacto de los ordenadores electrónicos digitales.

Tras la II Guerra Mundial, en 1948, se convocó una reunión en París para discutir los problemas más urgentes encontrados por todos aquellos interesados en cuestiones químico cuánticas. Entre los que requerían de la comunidad un esfuerzo concertado figuraban el cálculo de integrales moleculares incluyendo más de dos centros, su tabulación y los resultados numéricos. Tres años después, en 1951, un pequeño grupo de científicos se reunieron en Shelter Island para evaluar los resultados de las acciones llevadas a cabo desde 1948, y trazar mayores estrategias de investigación. Considerada como un punto y aparte en nuestra narración, la conferencia pretendía obtener fórmulas para las problemáticas integrales multi-centrales que dificultaban enormemente la integración de la ecuación de Schrödinger en la forma *ab initio*. De este modo, los químicos pudieron disponer de tablas estandarizadas de estas integrales para resolver esta ecuación. Al principio dependían de cálculos humanos ayudados por calculadoras de escritorio pero el programa de trabajo evolucionó pronto para formar una eficiente red de cooperación que supo sacar provecho del creciente número de ordenadores electrónicos digitales disponibles para la comunidad internacional.^[30] Su uso en la química cuántica hizo posible considerar seriamente la delineación de un extenso programa de cálculos "completamente teóricos" (*ab initio*). Se convirtieron en herramientas esenciales para calcular las trabajosas integrales de las versiones cada vez más sofisticadas del método de orbitales moleculares (Pariser-Parr-Pople, *Self Consistent Field*, Hartree-Fock, *Configuration Interaction*, etc...). En muchos casos, reemplazaron la información proporcionada por los datos experimentales obtenidos en el laboratorio, especialmente en el caso de moléculas inaccesibles a la experimentación. Fue, en cierto modo, un viejo sueño hecho realidad. Estos cálculos contrastaban con los denominados "semiempíricos", donde el inaccesible cálculo analítico de ciertos parámetros se solucionaba con la introducción de valores obtenidos por determinaciones experimentales, lo que se había convertido en uno de los aspectos más característicos de la química cuántica desde sus primeros días.

La conferencia sobre mecánica cuántica molecular celebrada en Boulder (Colorado, EE.UU.) en junio de 1959, fue el primer gran encuentro de este tipo desde la conferencia de Shelter Island. Fue, además, el primer encuentro donde muchos químicos teóricos comenzaron a darse cuenta de que había visiones divergentes en la comunidad de químicos cuánticos. En el discurso de sobremesa dado al final de la conferencia, Coulson emergió como uno de los más sensibles observadores de la situación. Por una vez, Coulson no predicó tolerancia sino que abogó por tomar partido.^[31] Anunció la separación de la comunidad en dos grupos distintos. El Grupo

I eran los *ab-initionists* que perseguían cálculos exactos de moléculas de hasta 20 electrones y, por tanto, estaban ansiosos por explorar las potencialidades prometidas por los ordenadores electrónicos. El Grupo II, los *a posteriorists*, permanecían fieles a los métodos semi-empíricos y negaban la importancia de cálculos exactos en química cuántica. La separación tuvo lugar debido a los puntos de vista divergentes acerca del uso de ordenadores electrónicos a gran escala.

Aunque brillante, el discurso de Coulson simplificaba excesivamente la cuestión, reduciéndola a meras divergencias respecto a la confianza en los ordenadores electrónicos. En su deseo de completa exactitud, el Grupo I parecía estar preparado para "abandonar todos los conceptos químicos convencionales y la calidad pictórica simple en sus resultados". En contra de esto, los exponentes del Grupo II mantuvieron que la química era todavía una ciencia experimental, cuyos resultados se construían con patrones en torno a conceptos bastante elementales. Coulson no hizo ningún esfuerzo para disimular sus simpatías hacia el grupo II, y volvió a insistir en que el papel de la química cuántica era entender estos conceptos básicos y mostrar los rasgos esenciales del comportamiento químico. No obstante, también era consciente de que ninguno de estos conceptos podría hacerse riguroso.

El nuevo cambio en la disciplina debido al impacto de los ordenadores fue discutido por muchos otros. ¿Tocó Coulson alguna fibra sensible con sus comentarios o, por el contrario, estuvo aislado en su análisis de la situación? Podemos escuchar la opinión de dos químicos cuánticos cuyos programas de investigación se aprovecharon de la creciente relevancia de los ordenadores para tratar moléculas grandes. Un dictamen viene del italiano Enrico Clementi (1931-), un antiguo alumno de Mulliken, que trabajó en el IBM Research Laboratory, y apareció en el primer volumen de una revista tan relevante como el *International Journal of Quantum Chemistry* (1967). De un modo bastante firme, Clementi afirmó que los ordenadores sólo serían útiles en el futuro si, y sólo si, se abandonaba la tendencia de la química computacional "hacia la formación de una enorme biblioteca de funciones de ondas con poca atención a la química como tal. Esto, por supuesto, conduciría a la química pero sólo si se computa una gran fracción significativa de las posibles moléculas. Un objetivo así parece poco realista".^[32] Reaccionó en contra de la creciente "computación" de la disciplina, si "computación" implicaba la exclusión de problemas químicos. La química cuántica sin química parecía no tener ningún sentido. Según Clementi, la única manera significativa de usar los ordenadores era diseñar programas informáticos capaces de hacer frente a problemas químicos reales, similares a los que tienen lugar en la naturaleza. Tras tal esfuerzo, el modelo matemático que resultó fue, por supuesto, una mecánica cuántica con tantas aproximaciones como un problema químico podía sostener "antes de convertirse en una "sopa" irracional de números flotantes con cuestionable significado físico".^[33] Por lo tanto, si el programa informático estaba destinado a resolver "problemas químicos sintéticos", debería ser capaz de comenzar por los átomos constituyentes y llegar a la molécula final. Si el programa estaba diseñado para resolver un "problema espectroscópico", debería dar las constantes básicas espectroscópicas. Si el problema era un "problema estructural" el programa informático debería proporcionar distancias internucleares y mapas de densidad electrónica.

También en el simposio de 1970 sobre *Aspectos de la*

Relaciones peligrosas o asociaciones inevitables.

química cuántica contemporánea ("Aspects de la Chimie Quantique Contemporaine") celebrado en Menton, Francia y organizado por el C.N.R.S., Alberte Pullman (1920-), uno de los fundadores de la bioquímica cuántica en Francia, apuntó que la preocupación por conseguir cada vez mejores valores de parámetros, integrales u otras cantidades, producía la impresión de que ciertos químicos cuánticos perseguían solamente "la reproducción de resultados conocidos por medio de métodos inciertos", en claro contraste con otras ciencias que hacían "uso de métodos conocidos para buscar resultados desconocidos".^[34] Recordó los comentarios de Coulson en la Conferencia Boulder, y sus visiones de la división de la comunidad cuántica en grupos rivales, pero no secundó la evaluación pesimista de Coulson. Predijo el inicio de un nuevo periodo en la historia de la química cuántica y vaticinó que la unidad perdida en la química cuántica sería pronto recuperada. Como consecuencia del desarrollo de técnicas para el estudio de todos los electrones de valencia y, por extensión, de todos los electrones en sistemas moleculares, la separación entre *ab-initio* y *a-posteriori* daría paso a la fusión en un solo grupo, al que denominó el grupo *ab-initio for everybody*. Añadió que temía que "la única división que persistirá entre los químicos cuánticos será [la misma] [...] que entre ricos y pobres, aquellos que tienen los medios para llevar a cabo sofisticados cálculos y aquellos que no los tienen".^[35] Sobre todo, esperaba que los cambios devolvieran la química perdida a la química cuántica.

Mientras tanto, Coulson suavizó su posición. Llegó a reconocer que el divorcio en la comunidad de la química cuántica que tanto le obsesionaba en un principio convergió con el tiempo en una pacífica cohabitación de dos culturas profesionales diferentes. Pocos meses antes de su muerte, en la conferencia inaugural como catedrático de química teórica, celebrada en 1973 en el nuevo departamento de química teórica de la Universidad de Oxford, Coulson reconoció que los enfoques de los dos grupos no estaban en conflicto mutuo. Ambos eran necesarios y complementarios, por lo que "el modo particular con que una persona aborda el uso del ordenador determina en gran medida su juicio sobre los méritos relativos de los dos tipos de estudio".^[36]

Los ordenadores permitían obtener valores numéricos tan precisos como los conseguidos con los mejores experimentos. Pero todavía eran apenas nada más que herramientas muy refinadas, como un espectroscopio o un calorímetro. A pesar de ello, Coulson valoró su estatus como instrumentos adicionales disponibles para los químicos, cuya rápida adopción incidió en los experimentos –la principal característica de la química– aunque estaba seguro de que nunca reemplazarían a los laboratorios y el trabajo experimental. El extenso uso del ordenador en química cuántica le indujo además a reexaminar el papel de las matemáticas en la química y a diferenciar, con mayor profundidad, las distintas aportaciones de la física, las matemáticas y el cálculo a la construcción de la identidad disciplinar de la química cuántica. Un ordenador da valores numéricos de ciertas magnitudes, pero no puede dar explicaciones. Para conseguir una comprensión del fenómeno estudiado son necesarios conceptos, todos los cuales recaen fuera del dominio de la estricta observación, pero todos ellos pertenecen al marco de la teoría química. Y la capacidad para inventar conceptos válidos, entrelazándolos en el "creciente modelo de la química" es lo que caracteriza a los grandes químicos y los distingue de los "numerólogos" ("numerolo-

gists"). La diversión e interés de las matemáticas no recayó definitivamente en cálculos aún más sofisticados gracias a los ordenadores cada vez más potentes y eventualmente más baratos. Sólo con la mecánica cuántica, las matemáticas se habían convertido en centrales para entender el comportamiento químico y físico de los átomos y electrones de una manera que no había sucedido nunca. Anteriormente, los químicos habían usado las matemáticas cuando se elaboraba un modelo para tratar con alguna situación química o porque una ecuación debía ser resuelta. En estos casos, a los que los químicos ya estaban acostumbrados, las matemáticas eran periféricas a la cuestión química, parecía como si procedieran desde el "exterior". Evaluando el largo, y en esos momentos, tortuoso camino recorrido, Coulson, uno de los más perspicaces de todos los químicos cuánticos, reiteró una vez más que tanto la física como las matemáticas tenían vínculos directos con la química, no independientes entre sí, pero nunca reducibles a cálculos computacionales, por más sofisticados que pudieran ser.

Si se admite la existencia de diferentes tendencias entre grupos de químicos cuánticos, al principio claramente antagonistas pero que después olvidaron sus conflictos o, incluso, se volvieron complementarios y también dependientes en sus visiones opuestas sobre el uso de los ordenadores, todo ello significa principalmente que una nueva cultura de hacer química cuántica estaba imponiéndose y forjándose un lugar en paralelo con el más tradicional. Esto fue posible sin trastocar totalmente la comunidad de químicos cuánticos que dieron prueba de su nivel de madurez y la existencia de valores compartidos que resistieron la confrontación con los nuevos. La cuestión no puede reducirse a comprender el modo en el que los ordenadores empezaron más o menos a ordenar a los químicos cuánticos (y teóricos) los tipos de problemas en que trabajarían y las formas de enfrentarse a esos problemas. En este proceso, emergió una nueva cultura identificada por un nuevo estilo de pensamiento científico, en el que la creciente complejidad de los problemas moleculares se trató mediante modelos matemáticos. Una nueva cultura en la que la articulación de modelos matemáticos y su simulación por ordenador se acompañó con representaciones gráficas, numéricas o analíticas.^[37]

Conclusiones finales ... o metáforas y sus diversos significados

La capacidad para saltar las fronteras entre disciplinas fue quizás la característica más destacada y permanente de quienes contribuyeron consistentemente al desarrollo de la química cuántica. Moverse cómodamente entre física, química, y matemáticas se convirtió en un prerrequisito para tener éxito en préstamos de técnicas, apropiación de conceptos, creación de nuevos métodos de cálculo y desarrollo de estrategias legitimadoras. Con la era de los ordenadores y el desarrollo de la informática, los químicos cuánticos se encontraron entre los primeros científicos que exploraron las posibilidades de la nueva herramienta y colaboraron, incluso, en su desarrollo. En este sentido, se convirtieron además en participantes en lo que muchos apodaron como la "segunda revolución instrumental" en química.^[38] La discusión sobre las prácticas cambiantes y sus consecuencias en la variante identidad de la química muestra como la historia de la química cuántica ilustra una de las tendencias que más fuertemente

caracterizan las ciencias del siglo XX: la exploración de nuevas fronteras y el cruce de los límites disciplinares, todo ello reforzado mediante el uso de muchos nuevos instrumentos y herramientas.

Si en el caso de la química cuántica este proceso estuvo asociado con su progresiva "desconceptualización", cuyo hueco fue cubierto por los métodos computacionales y gráficos, es una pregunta que precisa todavía bastante investigación adicional. En este trabajo, se propone una metáfora alternativa, abandonar la metáfora geográfica –incluyendo territorios, límites y puentes– y pasar a una metáfora biológica centrada en la fibra artificial. Hace referencia a uno de los participantes en nuestro relato, Coulson. Para destacar "en qué medida la validez de la versión de los científicos depende del grado de interrelación entre sus elementos", Coulson llamó la atención, en un contexto bastante diferente al de la química cuántica, al hecho de que "la resistencia de una fibra artificial depende del grado de entrecruzamiento entre las diferentes cadenas de átomos individuales". De forma similar, se podría afirmar que el éxito explicativo de la química cuántica a través de sucesivas etapas de desarrollo recaía en el grado de interrelación entre los elementos constitutivos –conceptos químicos, nociones matemáticas, métodos numéricos, representaciones pictóricas, medidas experimentales– hasta tal punto que no era la relativa contribución de cada componente lo que importaba, sino la forma en que el conjunto se reforzaba mediante la *interrelación (cross-linking)* y la *hibridación (cross-fertilisation)* de todos los elementos. Además su éxito dependió no solo de aspectos epistemológicos sino también de aspectos sociales de esta *hibridación*. Implicó el establecimiento y permanente negociación de alianzas entre miembros de una comunidad de expertos cada vez más internacional, una intensa interconexión, y ajustes y reajustes en la comunidad, tanto a nivel individual como institucional y educativo. En resumen, implicó un enorme reajuste en la cultura material de la química cuántica.

Bibliografía

- [1] P. Lödwin, *Int. J. Quantum Chem.* **1967**, *1*, 1–6.
- [2] Revistas en las que ha aparecido el debate incluyen: *Synthese*; *Hyle*; *Foundations of Chemistry*; *British Journal of the History of Science*; *Studies in the History and Philosophy of Modern Physics*; *Studies in the History and Philosophy of Science*; *Historical Studies in the Physical Sciences*.
- [3] J. H. Van Vleck, *Chem. Rev.* **1928**, *5*, 467–507; Application for the Guggenheim Fellowship, late 1925, Pauling Papers, Box 142, CIT Course Materials, Notes 1922–1930, Tau Beta Pi, CIT Transcripts, "Plans for Study".
- [4] L. Pauling, *Chem. Rev.* **1928**, *5*, 173–213.
- [5] J. H. Van Vleck, A. Sherman, *Reviews of Modern Physics*, **1935**, *7*, 167–227.
- [6] Conferencia sobre Mecánica Cuántica Molecular, **1959**, Universidad de Colorado en Boulder, 21–27 Junio.
- [7] A. E. Haas, *Die Grundlagen der Quantenchemie*, Akade. Verl, Leipzig, **1929**. Traducción inglesa por L. W. Cood: *Quantum Chemistry. A short introduction in four non-mathematical lectures*, Constable & Company, London, **1930**.
- [8] Son ejemplos: H. Eyring, J. Walter, G. Kimball, *Quantum Chemistry*, Wiley Publishers, 1944; K. Pitzer, *Quantum Chemistry*, Prentice-Hall, New York, 1953; W. Kauzmann, *Quantum Chemistry, an Introduction*, Academic Press, New York, **1957**.
- [9] K. Gavroglu, A. Simões, *Historical Studies in the Physical Sciences* **1994**, *25*, 47–110.
- [10] A. Karachalios, *Studies in the History and Philosophy of Modern Physics* **2000**, *31B*, 493–510.
- [11] M. J. Nye, *Tools and Modes of Representation in the Laboratory Sciences* (Eds.: U. Klein), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, **2001**, pp.117–132.
- [12] a) A. Simões, K. Gavroglu, *Historical Studies in the Physical Sciences* **1999**, *29*, 363–406; b) A. Simões, K. Gavroglu, *Studies in the History and Philosophy of Modern Physics* **2000**, *31*, 511–548; c) K. Gavroglu, A. Simões, *Br. J. Hist. Sci.* **2002**, *35*, 187–212.
- [13] a) G. N. Lewis, *Anatomy of Science*, Yale University Press, New Haven **1926**, 172–174; b) G. N. Lewis, *Journal of Chemical Physics* **1933**, *1*, 17–28; c) G. N. Lewis, *Valence and the Structure of Atoms and Molecules*, The Chemical Catalog Company, New York, **1923**, pp. 20–21. (reprinted por Dover Publications, 1966).
- [14] G. N. Lewis, *J. Chem. Phys.* **1933**, *1*, 17.
- [15] K. Gavroglu, A. Simões, *Br. J. Hist. Sci.* **2002**, *35*, 187–212.
- [16] N. V. Sidgwick, *Some Physical Properties of the Covalent Link in Chemistry*, Cornell University Press, New York, **1933**, 3–4.
- [17] N. V. Sidgwick, *Some Physical Properties of the Covalent Link in Chemistry*, Cornell University Press, New York, **1933**, 3.
- [18] L. Pauling, *Main Currents in Modern Thought* **1950**, *7*, 108–111. *Linus Pauling in his Own Words* (Ed., Barbara Marinacci), Simon & Schuster, New York, **1995**, pp. 107–111.
- [19] R. S. Mulliken, *Physics Today* **1968**, *21*, 52–57.
- [20] R. S. Mulliken, *Physics Today*, **1968**, *21*, 56.
- [21] P. A. M. Dirac, *Proc. Royal Soc. London, Series A*, **1929**, *123*, 714–733.
- [22] A. Simões, *Physics in Perspective* **2002**, *4*, 253–266.
- [23] A. Simões, K. Gavroglu, *Chemical Sciences in the Twentieth Century: Bridging Boundaries* (Ed., C. Reinhart), Wiley-VCH, Weinheim, **2001**, pp. 51–74.
- [24] a) Pauling Papers, Box 142, CIT Course Materials, Notes 1922–1930, Tau Beta Pi, CIT Transcripts, "Plans for Study"; b) J.H. van Vleck, *Chem. Rev.* **1928**, *5*, 467–507.
- [25] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Atoms and Molecules. An Introduction to Modern Structural Chemistry*, Cornell University Press, New York, **1939**.
- [26] C. A. Coulson, *Valence*, Oxford University Press, Oxford, **1952**.
- [27] A. Simões, *Br. J. Hist. Sci.* **2004**, *37*(3), 299–342.
- [28] C. A. Coulson, *The Spirit of Applied Mathematics*, Oxford, **1953**.
- [29] C. A. Coulson, *J. Chem. Soc.* **1955**, 2069–2070. Coulson repitió y reformuló muchos de los argumentos dados en su conferencia inaugural como Catedrático de Física Teórica en King's College, London, publicado en *Science Progress* **1948**, *36*, 436–449.
- [30] W. Aspray, en *The Cambridge History of Science, vol.5. The Modern Physical and Mathematical Sciences* (Ed., M. J. Nye), Cambridge University Press, Cambridge, **2003**, pp. 598–614.
- [31] C. A. Coulson, "Present State of Molecular Structure Calculations," Conferencia sobre Mecánica Cuántica Molecular, Universidad de Colorado en Boulder, 21–27 Junio,

Relaciones peligrosas o asociaciones inevitables.

- 1959, *Rev. Mod. Phys.* **1960**, 32, 170–177.
- [32] E. Clementi, *Int. J. Quantum Chem.* **1967**, 1S, 308.
- [33] E. Clementi, *Int. J. Quantum Chem.* **1967**, 1S, 308.
- [34] A. Pullman, "Propos d'Introduction. 1970: Bilan et Perspectives," *Colloque International sur les Aspects de la Chimie Quantique Contemporaine*, 8–13 July 1970, Menton, France, organizado por R. Daudel y A. Pullman, Editions du CNRS, Paris, **1971**, pp. 9–16.
- [35] A. Pullman, "Propos d'Introduction. 1970: Bilan et Perspectives," *Colloque International sur les Aspects de la Chimie Quantique Contemporaine*, 8–13 July 1970, Menton, France, organizado por R. Daudel y A. Pullman, Editions du CNRS, Paris, **1971**, pp. 9–16.
- [36] C. A. Coulson, *Theoretical Chemistry Past and Future*, S. L. Altmann, Oxford, **1974**, 20; CP, Ms. Coulson 36, B. 16.4, 9.
- [37] S. Schweber, M. Wächter, *Studies in the History and Philosophy of Modern Physics* **2000**, 31, pp. 583–609. Para estos autores, los ordenadores son componentes esenciales de una Hacking- type- revolution- la revolución "complex systems computer modeling and simulation". Los ordenadores generaron transformaciones radicales del contexto social, material, económico y cultural, además de introducir un nuevo estilo de pensamiento científico.
- [38] C. Reinhardt, *Shifting and Rearranging: Physical Methods and the Transformation of Modern Chemistry*, Science History Publications, Sagamore Beach, Mass, **2006**. En cierta manera este libro pertenece a una tendencia reciente, a la que han contribuido autores tales como: D. Baird, C. Meinel, P. Morris, y T. Travis, quienes prestan especial atención al papel de la instrumentación y el impacto de la llamada segunda revolución instrumental en química.

Fe de Erratas

En el artículo "Cómo ganar el Premio Nobel de Química (PNQ)" por José Elguero (*Anales de Química*, Volumen 105, Julio-Septiembre 2009, páginas 234–238) se ha deslizado una errata. En la página 236, la tabla "Química Orgánica" contiene parte de los datos de la tabla "Mecanismos de reacción, fotoquímica y fotofísica". La versión correcta figura debajo.

Química Orgánica

| | | | | |
|-----|---|------|----------------|--------------------|
| 5 | Colorantes y enlaces | 1905 | A. von Baeyer | ----- |
| 10 | Compuestos alicíclicos | 1910 | O. Wallach | ----- |
| 12 | Reacción de Grignard | 1912 | V. Grignard | Química inorgánica |
| 50 | Reacción de Diels-Alder | 1950 | O. P. H. Diels | ----- |
| 51 | Reacción de Diels-Alder | 1950 | K. Alder | ----- |
| 92 | Síntesis orgánica: compuestos con B o P | 1979 | H. C. Brown | Química inorgánica |
| 93 | Síntesis orgánica: compuestos con B o P | 1979 | G. Wittig | Química inorgánica |
| 115 | Retrosíntesis | 1990 | E. J. Corey | ----- |
| 120 | Carbocationes | 1994 | G. A. Olah | ----- |

PRELIMINARY ANNOUNCEMENT

13th International Conference on Electroanalysis

June 20 - 24, 2010



PRESENTATION

Given that we are celebrating 20 years from the previous Conference in Gijón, where ESEAC was founded, we would like to honour our colleagues who actively participated in that Conference and decisively contributed to the development of our discipline but, unfortunately, will not be with us anymore.

ORGANIZING COMMITTEE

Prof. Paulino Tuñón Blanco (*Chairman*)
 Arturo José Miranda Ordieres
 María Jesús Lobo Castañón
 Carmen Blanco López
 Noemí de los Santos Álvarez (*Secretary*)
 Rebeca Miranda Castro
 Goretti Díaz Díaz
 Eva González Fernández
 Daniel Antuña Jiménez

INVITED SPEAKERS

The following plenary lectures have been confirmed:

Prof. Royce W. Murray
University of North Carolina (USA)
Prof. Itamar Willner
The Hebrew University of Jerusalem (Israel)
Prof. José Manuel Pingarrón Carrazón
Universidad Complutense (España)
Prof. Andrew Ewing
University of Gothenburg (Sweden)