

# ¿Existe una teoría de modelos de la química?

(un diálogo, tres décadas - química y matemática)

Andrés Villaveces

*Universidad Nacional de Colombia - Bogotá*



Festschrift - José Luis Villaveces

# CONTENIDO

Tres décadas: 1985-2015

Antes...

Años 80

Inconformidad con la química teórica

Primas

Hacia una teoría de modelos de la química...

Teoría de modelos de la física

Primas abre un camino

# NOVALIS...

Wir suchen überall das Unbedingte  
und finden  
immer nur Dinge

Novalis (Allgemeine Brouillon - Notas para una Enciclopedia  
Romántica - 1799)

# DE LA QUÍMICA... A LA FISICOQUÍMICA...



(Década de 1960: juventud en la Universidad Nacional)

# DE LA FISICOQUÍMICA... A LA QUÍMICA TEÓRICA...



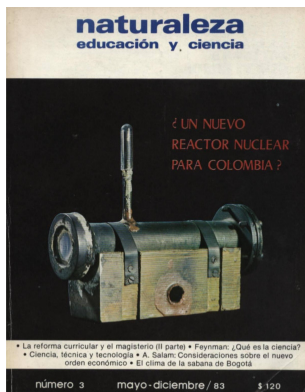
Caminos

# DE LA QUÍMICA TEÓRICA... A LA QUÍMICA MATEMÁTICA...



Años 70: JLV, en una carrera en la Universidad Nacional, con varios químicos (incluida María Cristina Niño, junto a él)

# LA REVISTA NATURALEZA, EDUCACIÓN Y CIENCIA... Y EL CAMBIO DE BOGOTÁ



- ▶ Bromberg, Mockus, Andrade, Granés, Pérez, E. Zalamea, Villaveces, etc.
- ▶ (físicos, matemáticos, químicos, filósofos, biólogos... en diálogo)
- ▶ Hacia el cambio de Bogotá...

# PREOCUPACIONES E INCONFORMIDAD: HACIA LA TOPOLOGÍA



*J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1994**, *34*, 309–313

309

## Upper and Lower Bonds for Molecular Energies

Edgar E. Daza\* and José Luis Villaveces

Grupo de Química Teórica, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D. C., Colombia

Received May 18, 1993\*

We have revisited the molecular Hamiltonian to emphasize its nuclear charge dependence. We have studied the variations in  $\Psi$  due to changes in these charges, and we have related them variationally to isoelectronic isotropic molecular systems in the nuclear charge space, through simplicial complexes. We built a general way of comparing B–O energies for these kind of molecules, and we are able to generate an order between them. Up to the case of  $Z = 3$ , we have shown that the energy of the united atom of nuclear charge  $z = N$  and that corresponding to a cluster of  $N$  hydrogen atoms play the role of upper and lower bounds for the energy of any molecular system between them.

### 1. INTRODUCTION

— Kim, S. Kim, J. Kim, J. Kim



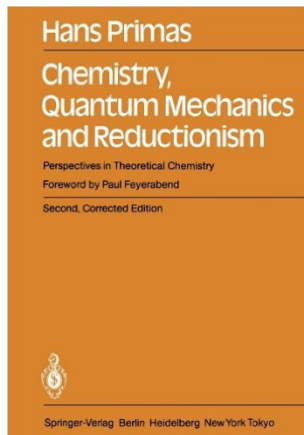
## DE NUEVO, NOVALIS...

*Química - el arte de la variación (preparación) de la materia. Fuerza y movimiento son sinónimos. La mecánica - el arte de la variación del movimiento - el arte de la modificación del movimiento.*

*Novalis - Allgemeine Brouillon*

# HANS PRIMAS

En su libro Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism (1982) el químico suizo Hans Primas da voz a la inconformidad.



# LAS PREGUNTAS DE PRIMAS (I)

- ▶ Jauch: classical observables (or “essential” observables) are the missing link between physics and chemistry - 1970
- ▶ Ernest Becker: And here we are, in the closing of the 20th century, choking on truth.
- ▶ Yet, the monism of Newtonian physics simply has been replaced by a new monism governed by the Schrödinger equation
- ▶ We can calculate bonding energy without even knowing what a bond is!
- ▶ ... a danger to forget the original impetus of our enterprise: understanding the behavior of matter
- ▶ ... numerical qm is a most important tool for chemistry but it cannot replace thinking...

## LAS PREGUNTAS DE PRIMAS (II)

- ▶ the important concepts of chemistry have never been well-treated by ab-initio quantum chemistry so that quantum mechanics has not become the primary tool in the chemist's understanding of matter
- ▶ requiring operational definitions and first-principle underpinnings of all concepts
- ▶ throwing out chemical variables... valence, bond, structure, localized orbitals, aromaticity, acidity, color, smell, water repulsion, etc.
- ▶ Do isolated quantal systems exist at all? What is a “system” (in the presence of entanglement)? (EPR, Bell's Inequalities, etc.).  
**This is the most important open problem, according to Primas!**

## PRIMAS, HACIA CIERTA LÓGICA...

- ▶ Pauli principle as a universal and inviolable law of nature?
- ▶ Does qm apply to large molecular systems?
- ▶ Is the superposition principle universally valid?
- ▶ The main stumbling block for the development of a theory of large and complex molecular systems is not computational but conceptual...
- ▶ Good theory: consistent, confirmed and intuitible. The two mappings (from the external world into the formal framework of the theory, from the formal framework of the theory into psychic structures of the subject) of knowledge.

# VILLAVECES

José Luis Villaveces lanza respuestas a otros autores (Mezey, Bader, en los años 80) y (con varios estudiantes - entre ellos Daza, Moyano, Rodríguez) dirige sus esfuerzos a

- ▶ Topologización de la estructura química,
- ▶ Procesos dinámicos de la química afianzados en la cuántica, pero con énfasis en propiedades emergentes relacionales

CHIMICA CHIMICA ACTA  
CCCAA 78 (2) 275-281 (2005)  
ISSN 0011-1641  
CCA-3008  
Original Scientific Paper

## From Trees (Dendrograms and Consensus Trees) to Topology\*

Guillermo Restrepo<sup>a,b</sup> and José L. Villaveces<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratorio de Química Teórica, Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia

<sup>b</sup>Observatorio Colombiano de Ciencia y Tecnología, Bogotá, Colombia

RECEIVED MARCH 16, 2005; REVISED MARCH 16, 2005; ACCEPTED MARCH 13, 2005

**Keywords:** dendrotopology, mathematical chemistry, topology, cluster analysis, dendrograms, consensus trees. We describe a methodology to induce a set of chemical interest with a topology. This procedure starts with the definition of the chemical set as a group of elements plus their neighborhood relationships. A graphical representation of these two conditions is a dendrogram tree. Next, we show a mathematical procedure to build up a basis for a topology with which we can calculate several topological properties, such as: diameter and boundaries of sets of chemical interest. We show four practical examples of this methodology: 71 chemical elements, 31 amino acids, 250 benzimidazoles and 20 amino acids.

*Journal of Mathematical Chemistry*, Vol. 39, No. 2, February 2006 (© 2005)  
DOI: 10.1007/s10910-005-9083-5

## On the topological sense of chemical sets

Guillermo Restrepo<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratorio de Química Teórica, Universidad de Pamplona, Ciudad Universitaria, Pamplona, Colombia

E-mail: grestrepo@unipamplona.edu.co

Héber Mesa

<sup>b</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad del Valle, Edificio 220, Oficina 2190, Cali, Colombia

José L. Villaveces

<sup>c</sup>Grupo de Química Teórica, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Received 29 September 2004; revised 4 November 2004

# MÁS RECIENTEMENTE, EN QUÍMICA TEÓRICA - J. MATH. CHEM. 2015

- ▶ Métodos numéricos computacionales,
- ▶ Big data, data mining,
- ▶ Teoría de grafos, dendrogramas, dendrímeros,
- ▶ Grafos, redes,
- ▶ Nudos, enlaces,
- ▶ Información cuántica, ...

# MÁS RECIENTEMENTE, EN QUÍMICA TEÓRICA - J. MATH. CHEM. 2015

- ▶ Métodos numéricos computacionales,
- ▶ Big data, data mining,
- ▶ Teoría de grafos, dendrogramas, dendrímeros,
- ▶ Grafos, redes,
- ▶ Nudos, enlaces,
- ▶ Información cuántica, ...
- ▶ ¡Pero siguen abiertas las preguntas de Primas!



¡Pero siguen abiertas las preguntas de Primas!

## MÁS RECIENTEMENTE...



(JLV, con su esposa Magola Delgado, y con su hermana Marta María)

# HACIA UNA TEORÍA DE MODELOS DE LA QUÍMICA...

*Es extraño que en casi toda operación química - todos los grados de la conexión o separación, etc. presentes aparecen simultáneamente - en relaciones diferentes - y suelen permanecer. Relación con los diferentes tonos de todo toque de cuerda - la quinta, la tercera [intervalo], etc.*

Novalis - Allgemeine Brouillon - c. 1799

# TEORÍA DE MODELOS: ¿QUÉ ES?

La teoría de modelos es una rama de la lógica matemática, que ha sido descrita de distintas maneras:

- Keisler (1970): teoría de modelos = lógica + álgebra universal

La teoría de modelos arranca con la relación entre clases de estructuras y sus axiomatizaciones posibles.

# TEORÍA DE MODELOS: ¿QUÉ ES?

La teoría de modelos es una rama de la lógica matemática, que ha sido descrita de distintas maneras:

- ▶ Keisler (1970): teoría de modelos = lógica + álgebra universal
- ▶ Hodges (1993): teoría de modelos = geometría algebraica – campos

La teoría de modelos arranca con la relación entre clases de estructuras y sus axiomatizaciones posibles.

# TEORÍA DE MODELOS: ¿QUÉ ES?

La teoría de modelos es una rama de la lógica matemática, que ha sido descrita de distintas maneras:

- ▶ Keisler (1970): teoría de modelos = lógica + álgebra universal
- ▶ Hodges (1993): teoría de modelos = geometría algebraica – campos
- ▶ Hrushovski (2006): teoría de modelos: la geografía de la matemática dócil

La teoría de modelos arranca con la relación entre clases de estructuras y sus axiomatizaciones posibles.

# TEORÍA DE MODELOS: ¿QUÉ LOGRA?

No se puede resumir esa pregunta, pero vale la pena mencionar que la teoría de modelos

- Generaliza parte de la geometría algebraica y el álgebra diferencial,

# TEORÍA DE MODELOS: ¿QUÉ LOGRA?

No se puede resumir esa pregunta, pero vale la pena mencionar que la teoría de modelos

- ▶ Generaliza parte de la geometría algebraica y el álgebra diferencial,
- ▶ Aísla nociones de genericidad, de elementos imaginarios - es también la “teoría de Galois” más general que tenemos a la fecha,



# TEORÍA DE MODELOS: ¿QUÉ LOGRA?

No se puede resumir esa pregunta, pero vale la pena mencionar que la teoría de modelos

- ▶ Generaliza parte de la geometría algebraica y el álgebra diferencial,
- ▶ Aísla nociones de genericidad, de elementos imaginarios - es también la “teoría de Galois” más general que tenemos a la fecha,
- ▶ Aísla la noción de categoricidad (¿cuándo una axiomatización, una descripción de un fenómeno del mundo, es “perfecta?”), y

# TEORÍA DE MODELOS: ¿QUÉ LOGRA?

No se puede resumir esa pregunta, pero vale la pena mencionar que la teoría de modelos

- ▶ Generaliza parte de la geometría algebraica y el álgebra diferencial,
- ▶ Aísla nociones de genericidad, de elementos imaginarios - es también la “teoría de Galois” más general que tenemos a la fecha,
- ▶ Aísla la noción de categoricidad (¿cuándo una axiomatización, una descripción de un fenómeno del mundo, es “perfecta?”), y
- ▶ Permite filtrar a través de jerarquías (“estabilidad modelo-teórica”) todas las teorías matemáticas posibles, y detectar invarianza entre muchas de estas.

# TEORÍA DE MODELOS: ¿QUÉ LOGRA?

No se puede resumir esa pregunta, pero vale la pena mencionar que la teoría de modelos

- ▶ Generaliza parte de la geometría algebraica y el álgebra diferencial,
- ▶ Aísla nociones de genericidad, de elementos imaginarios - es también la “teoría de Galois” más general que tenemos a la fecha,
- ▶ Aísla la noción de categoricidad (¿cuándo una axiomatización, una descripción de un fenómeno del mundo, es “perfecta?”), y
- ▶ Permite filtrar a través de jerarquías (“estabilidad modelo-teórica”) todas las teorías matemáticas posibles, y detectar invarianza entre muchas de estas.
- ▶ Es la teoría de comparación lógica (y más recientemente, geométrica en un sentido muy abstracto) que tenemos

# TEORÍA DE MODELOS MÁS RECIENTE

Aunque su nacimiento fue en la lógica matemática (Gödel, Tarski, etc.) y su desarrollo gigante tuvo (y tiene) lugar en diálogo con el resto de la matemática (Shelah, Hrushovski, Zilber, Ax-Kochen, Robinson, etc.), parte de la teoría de modelos se ha ido acercando a pasos agigantados a temas como

# TEORÍA DE MODELOS MÁS RECIENTE

Aunque su nacimiento fue en la lógica matemática (Gödel, Tarski, etc.) y su desarrollo gigante tuvo (y tiene) lugar en diálogo con el resto de la matemática (Shelah, Hrushovski, Zilber, Ax-Kochen, Robinson, etc.), parte de la teoría de modelos se ha ido acercando a pasos agigantados a temas como la geometría no conmutativa (campos de característica 1, haces de álgebras de Weyl), invariantes asociados a física ( $j$ ), toros cuánticos, etc.

# TEORÍA DE MODELOS MÁS RECIENTE

Aunque su nacimiento fue en la lógica matemática (Gödel, Tarski, etc.) y su desarrollo gigante tuvo (y tiene) lugar en diálogo con el resto de la matemática (Shelah, Hrushovski, Zilber, Ax-Kochen, Robinson, etc.), parte de la teoría de modelos se ha ido acercando a pasos agigantados a temas como la geometría no conmutativa (campos de característica 1, haces de álgebras de Weyl), invariantes asociados a física ( $j$ ), toros cuánticos, etc.

Teoría de modelos de la física, a través de geometría no conmutativa, invariantes modulares, álgebras de operadores

# HACES, LÓGICA INFINITARIA, CATEGORICIDAD

- ▶ La teoría de modelos sobre haces (Macintyre, X. Caicedo - lógica “dinámica” y controlada topológicamente como herramienta para analizar simultáneamente sistemas muy complejos pero controlados topológicamente) y el “model theoretic forcing” han sido llevados por Shelah y autores más recientes (Boney, Vasey) a análisis de límites sobre clases complejas.
- ▶ En otra línea, la acción de grupos sobre haces ha sido estudiada por Padilla y V. (A.) - y por Ochoa y V. (A.).
- ▶ Cruz y Zilber tienen análisis modelo teórico del haz correspondiente a osciladores armónicos cuánticos.

# ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO

El fenómeno más fundamental de la teoría cuántica - el entrelazamiento cuántico fue verificado experimentalmente por Einstein-Podolsky-Rosen y luego explicado matemáticamente por el teorema de Kochen-Specker y las desigualdades de Bell. Las desigualdades de Bell y el Teorema de Kochen-Specker ahora tienen explicaciones (y variantes) modelo-teóricas sólidas. Tienen incluso su propio entrelazamiento con universos alternos de la teoría de conjuntos (trabajos de Pitowsky, Magidor y Farah). Superposiciones modelo-teóricas y principios global-local (haces).



# CAMINOS (PRIMAS)

El camino menos interesante (y más trillado) de todos es tal vez la lógica cuántica (versiones de Jauch y Primas). Más allá de ese camino, Primas arroja las siguientes preguntas, mucho más modelo-teóricas:

- ▶ Encontrar un lenguaje apropiado para una teoría de sustancias y moléculas, que dé buena cuenta de fenómenos típicos en química (taxonomía química, termodinámica química, cinemática química y teoría de sistemas química).
- ▶ La química cuántica contemporánea puede no ser falsa, pero no es apropiada. Faltan explicaciones. (¡Y no están!)

# PRIMAS - EPR, ¿TEORÍA DE MODELOS?

Primas propone varias cosas (a medias) que tienen un sabor modelo-teórico. Parte de la dificultad viene del entrelazamiento, de diversos grados de entrelazamiento.

Primas propone estudiar simultáneamente muchas álgebras de operadores (“observables” -  $W^*$ -álgebras) en un marco común - él lo llama el “retículo de subteorías” - y en ese retículo las subteorías  $T_\alpha \leq T$  refleja cada una un grado mayor o menor de entrelazamiento.

La teoría de modelos está ahí...

¡Gracias a ustedes por su atención!

¡Gracias a ustedes por su atención!



¡Y muchas, muchas gracias a JLV por esta conversación de varias décadas!