

¿HACIA UNA TEORÍA DE MODELOS DE LA QUÍMICA?

Andrés Villaveces

Universidad Nacional de Colombia – Bogotá

*Dedicado a mi padre, José Luis Villaveces, con inmenso cariño
y complicidad –para evocar el té nocturno de hace muchos
años, en Mindanao. Allí está el origen remoto de varias de las
preguntas que intento abordar aquí.*

Resumen. En años recientes la teoría de modelos (una rama de la lógica matemática) se ha acercado a capturar fenómenos de la física teórica (osciladores armónicos cuánticos, etc.).

No se puede decir lo mismo con respecto a la química teórica: ésta permanece relativamente lejana del panorama de la práctica matemática, pese al llamado fuerte que hiciera Primas hace ya más de tres décadas. Hablaré de cierto diálogo personal con José Luis Villaveces que se inició hace unas tres décadas y que hoy (después de veinte años de trabajos en temas distantes) es posible retomar, entre química teórica y teoría de modelos.

Introducción: diálogos entre mundos distintos

Wir suchen überall das Unbedingte und finden immer nur Dinge.

Novalis [8]

La química parece hacer preguntas difíciles a los matemáticos; tan difíciles que (a diferencia grande de lo que sucede en física, incluso en economía, biología o lingüística) la disciplina llamada “química matemática” sigue teniendo un carácter marginal, un sabor de exploración reciente y repleta de cabos sueltos. Aunque la actividad química es inmensa hoy en día en términos de programas, estudiantes, tesis, patentes, etc. [2], la cantidad de eventos y congresos en *química matemática* es aún muy limitado, y parece ser una intersección magra tanto vista desde la química como desde la matemática.

Aunque las bases teóricas de la química –sus preguntas fundamentales– son de carácter eminentemente matemático, al examinar los trabajos en esta área nos encontramos

con muchos métodos aislados, muchos caminos iniciados pero poco transitados. Hay un contraste gigantesco con lo que sucede en física matemática, donde desde hace casi un siglo hay un consenso principal, un “mainstream” acaso no exento de sus propios problemas (naturalmente), y donde la intersección ciertamente está lejos de ser magra¹. En química sigue siendo muy atomizada y con muy poco consenso central la rama que desde no hace tanto tiempo se ha dado en llamar “química matemática”.

Todo esto es así pese a que las preguntas fundamentales de la química son casi tan antiguas como las de la física o la matemática misma... ¡tal vez aún más, si nos remontamos hasta los escritos de los presocráticos!

Este artículo es una *primera lectura* de un matemático, más específicamente de un lógico matemático², de las *preguntas de la química*, desde el punto de vista de la teoría de modelos.

Sería ingenuo pretender mucho más que señalo ciertas analogías y ciertas diferencias con preguntas fundamentales de la *física*. Por lo tanto en este escrito me limito a lo siguiente:

- Explico de manera muy compacta qué hace la teoría de modelos, en líneas generales, y por qué es un posible marco natural para abordar preguntas de la física y de la química (sección - 1 -).
- Hago una selección de preguntas difíciles y no resueltas (o al menos no resueltas de manera que hayan generado ya un consenso) en química teórica (sección - 2 -). Esta selección solo pretende ser una mirada “a vuelo de pájaro” desde la teoría de modelos.
- Describo cuatro líneas de investigación recientes³ de aplicación de teoría de modelos a la mecánica cuántica y señalo ciertas analogías y diferencias con las preguntas químicas del inicio (sección - 3 -).
- Como conclusión, señalo algunos proyectos posibles en química matemática, surgidos de las consideraciones anteriores (sección - 4 -).

¹ El peso y el prestigio de la física matemática en investigación en matemática es gigantesco. No es excesivo decir que preguntas provenientes de la física han generado una parte crucial de la matemática. En la segunda mitad del siglo XX, incluso trabajos muy centrales en matemática, muy “puros”, se han visto conectados con preguntas de la física matemática. Desde Witten hasta Langlands, pasando por Grothendieck, Shelah, Hrushovski y Zilber, hasta Atiyah o Connes, ideas aparentemente muy específicas de la matemáticas han terminado atadas a problemas de la física matemática.

² Y más específicamente aún, de un “modelo-teorista”: mi investigación principal desde 1997 ha estado centrada en la teoría de modelos, con conexiones con la teoría de conjuntos, pero más recientemente con trabajos en teoría de modelos de la física.

³ En una de esas líneas he participado como coautor – ver [9; 10].

Al final, agrego un “apéndice personal”, independiente del resto del artículo, sobre el origen de estas tres décadas de conversación.

-1- ¿Qué hace (y qué no hace) la teoría de modelos?

Es extraño que en casi toda operación química - todos los grados de conexión o separación, etc. presentes aparecen simultáneamente - en diferentes relaciones - y tienden a permanecer.

Novalis [8]

Para empezar, podemos pensar en el siguiente “problema de clasificación”: si observamos los miles y miles de estructuras matemáticas que los seres humanos hemos inventado/descubierto a través de los siglos (grupos, campos, variedades algebraicas, espacios de Hilbert, espacios de Sobolev, modelos internos de teoría de conjuntos, espacios de funciones, etc.) podemos preguntarnos qué tan “homogéneo” es ese universo de estructuras, si hay diferencias fundamentales entre estas estructuras o no. Este problema de “clasificación” planteado de manera ingenua tiene como respuesta un NO contundente, como sabe cualquier matemático aún sin entrar en los detalles de construcción. Entre todas esas estructuras posibles, estamos lejos de tener homogeneidad: hay “picos” muy altos, estructuras de algún modo inevitables en cualquier cultura matemática: los naturales $(\mathbb{N}, +, \cdot, <, 0, 1)$ (base de la aritmética), $(\mathbb{C}, +, \cdot, 0, 1)$ (geometría algebraica clásica), $(\mathbb{R}, +, \cdot, <, 0, 1)$ (geom. alg. real), curvas elípticas, espacios vectoriales (módulos, etc.), ciertos objetos de combinatoria, espacios de Hilbert, etc.

En matemática, nociones muy conocidas como *dimensión, rango, grado, carácter de densidad*, etc. corresponden a las maneras iniciales de clasificar dichas estructuras. La teoría de modelos en parte se puede ver como una búsqueda de invariantes mucho más generales que estos. *Se puede entender como una teoría de todas las configuraciones “geométricas” posibles –o incluso como la teoría de las condiciones de posibilidad de tales configuraciones.*

Para lograr esto, la teoría de modelos utiliza la lógica matemática⁴ como herramienta de control. Lo hace de varias maneras distintas.

⁴ La teoría de modelos ha sido descrita de distintas maneras: en 1970, Keisler la definía mediante la “ecuación”

teoría de modelos = lógica + álgebra universal.

Dos décadas más tarde, la ecuación había cambiado ligeramente; humorísticamente Hodges la definía como

teoría de modelos = geometría algebraica - campos,

La teoría de modelos tiene como eje principal la relación entre *clases de estructuras* con sus *posibles axiomatizaciones*.

Esta tensión entre las clases de estructuras y lo que la lógica puede (o no) capturar de estas resultó produciendo en la década de los 1970s una impresionante arquitectura de clasificación de las estructuras axiomatizables en lógica de primer orden⁵, debida primordialmente a Shelah [13].

¿Qué logra la teoría de modelos?

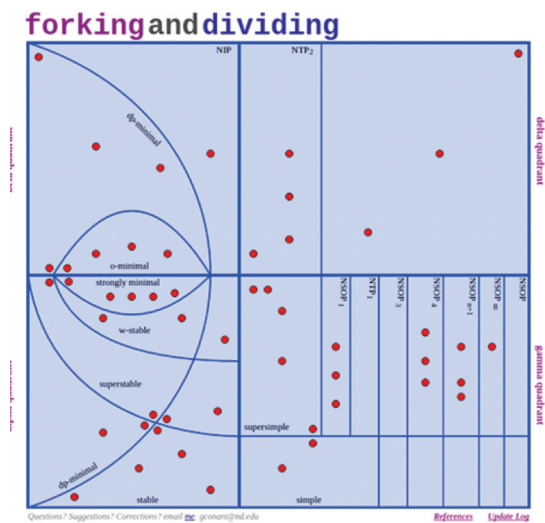
Naturalmente, esta es una pregunta demasiado amplia, pero vale la pena mencionar que la teoría de modelos hace (entre muchas otras cosas) lo siguiente:

- Generaliza buena parte de la geometría algebraica y del álgebra diferencial.
- Generaliza de manera muy radical la teoría de Galois. La teoría de Galois nació hace dos siglos (casi como la química...) como una teoría de *invariantes* bajo simetría: se pasa de buscar directamente soluciones a ecuaciones a estudiar todas las posibles simetrías de las “posibles soluciones”. Estas simetrías dan lugar a acciones de *grupos*, y luego se estudia la red de subgrupos de estas simetrías y la correspondencia con posibles soluciones.
- La teoría de modelos logra aislar la noción “extrema” de *categoricidad en potencias* (una estructura M es categórica si su teoría $\text{Th}(M)$ [el conjunto de sentencias que valen en M] determina completamente a M , siempre y cuando se limite uno a considerar estructuras de la misma cardinalidad de M). La noción de “perfección lógica” es un extremo ideal de la representación de una estructura mediante una teoría - la teoría de modelos además de dar las condiciones de existencia de este tipo extremo de estructuras provee toda una *gradación* de qué tan distante se está de la perfección lógica: la famosa “jerarquía de estabilidad” (para explicación del diagrama de la página siguiente, ver [5]).

De esta manera, podemos ver la teoría de modelos como la teoría más amplia, más libre de comparación *abstracta* y *more geometrico* que tenemos en matemática (¡y en toda la ciencia!).

y otros quince años después Hrushovski había cambiado su descripción de la teoría de modelos a la “geografía de la matemática dócil”. Cabe decir que estas descripciones escuetas dan cuenta de la riqueza brutal de la teoría de modelos solamente de manera muy parcial.

⁵ “Primer orden” significa que las fórmulas son finitarias, y contienen solamente cantidades finitas de cuantificadores y los conectivos actúan solo sobre un número finito de fórmulas - adicionalmente, la cuantificación solo se permite sobre *elementos* de las estructuras.



Aunque el anclaje inicial de la teoría de modelos fue en la lógica matemática (trabajos de Gödel, Tarski, etc.) y su desarrollo ha tenido lugar principalmente 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 temas de *geometría no conmutativa* (haces de álgebras de Weyl para el cálculo de Dirac, el “campo de un elemento” F_1 , funciones modulares, toros cuánticos, etc.⁶)

Adicional al desarrollo inmenso de la teoría de modelos en “primer orden” (donde ocurre la jerarquía de estabilidad mencionada antes) hay desarrollos de ideas similares en varias direcciones alternativas, más recientes:

- *Teoría de modelos sobre haces.* aquí se captura la *variación continua* de una estructura M sobre un espacio topológico (o más generalmente, sobre una categoría). Así, en lugar de una estructura “estática” M tenemos una estructura “que varía” M_x , para x en un espacio topológico X . La variación de esta estructura es continua (todo esto se controla mediante el haz topológico sobre X ; las fibras son estructuras clásicas y la semántica es clásica en fibras pero a nivel del haz realmente es un “forcing” sobre los abiertos de X). Hay una semántica con mucha riqueza y una sintaxis de carácter intuicionista donde (entre otras cosas) falla el principio del tercio excluido. La referencia principal es el trabajo de Caicedo [4].

⁶ Otra parte importante de la teoría de modelos ha sido crucial en dar cuenta de la “integración motivica”, área surgida en parte de trabajos de Grothendieck y con conexiones fuertes con las integrales de camino de Feynman.

- *Teoría de modelos continua.* Aunque su desarrollo se aceleró a principio de este siglo, esta retoma preocupaciones de la lógica que se remontan (por lo menos al siglo XI, en los trabajos de Avicena). Se trata (clásicamente) del problema de la lógica multivaluada. El lógico polaco Łukasiewicz dio impulso serio a esta lógica durante la primera mitad del siglo pasado, y hubo avances de Chang y Keisler en los años 1960, pero fue solo hasta este siglo que una teoría de modelos continua (usualmente con valores en todo el intervalo $[0,1]$) muy robusta surgió. El desarrollo ha sido muy ágil y ha permitido hacer teoría de modelos de espacios de probabilidad y de múltiples áreas del análisis matemático (ver [3]). Cabe señalar que gran parte de la teoría de modelos clásica (de primer orden) es adaptable al caso continuo, de manera bastante suave. En particular, la jerarquía de estabilidad tiene sentido allá también, y se comporta de manera relativamente análoga al caso clásico. Un ejemplo de un resultado espectacular en esta área se debe a Shelah y Usvyatsov: todo espacio de Banach categorico en carácter de densidad no numerable es primo sobre un modelo isométrico a la base estándar de un espacio de Hilbert. Así, de manera un poco burda, la categoricidad (“perfección lógica” de un espacio de Banach) implica que es primo sobre un espacio de Hilbert - aunque uno arranca con un espacio de Banach, algo en principio muy complejo, su categoricidad implica que sus propiedades geométricas están esencialmente controladas por un espacio de Hilbert, algo mucho más sencillo estructuralmente! Ver [14].
- *Clases elementales abstractas.* Una ruptura más radical, surgida inicialmente de trabajos de Shelah de mediados de los 80 (pero anclada en trabajos anteriores de Fraïssé y Jónsson, y en la idea de estudiar *primordialmente* la manera como las estructuras están “imbricadas” unas en otras (en lugar de sus axiomatizaciones), de estudiar todas las posibles inmersiones entre estructuras, pedir condiciones de clausura bajo límites y *luego sí* buscar o bien axiomatizaciones o bien directamente la teoría de modelos sin control lógico rígido⁷) se desarrolla de manera inicialmente lenta pero muy sólida más recientemente: toda una *teoría de estabilidad* que no depende de control lógico (axiomatización) de las clases de estructuras. La ganancia inmensa

⁷ El filósofo checo Jan Patočka enfatiza el rol de τὸ ἀρμόττον en estética. La describe como una categoría estética más específica que τὸ καλὸς. Así, τὸ ἀρμόττον corresponde a un ideal que podríamos asociar a “lo bello” por no tener palabra más específica en nuestro idioma. La raíz de τὸ ἀρμόττον es la misma que la de la palabra mejor conocida ἀρμονία, nuestra *armonía*, pero el significado realmente es belleza en el sentido de “cuadrar bien”, “encajar”. Esta categoría parece ser radicalmente distinta de la de τὸ λόγος, la *frase*, la fórmula, la descripción que tradicionalmente (y etimológicamente) asociamos con la lógica. Ver [11]. El paso de lógica clásica (controlada por fórmulas) a clases elementales abstractas (controladas por la noción de inmersión, de encaje “perfecto”), es análogo al paso de énfasis en τὸ λόγος a un énfasis en τὸ ἀρμόττον, lo bien encajado, lo armónico.

en generalidad (y naturalidad) tiene un precio: se pierde el teorema de compacidad de la lógica de primer orden, tan ubicuo en el desarrollo clásico. Sorprendentemente, una parte inmensa de la teoría de la estabilidad aún se puede llevar a cabo, sin el teorema de compacidad, pero con métodos que ponen en primer plano los encajes entre estructuras distintas y la acción de grupos de automorfismos de estas.

- *La mezcla potencialmente explosiva entre las anteriores.* Las aplicaciones de la teoría de modelos a la física que describiré en la sección - 4 - usan teoría de modelos continua, teoría de modelos sobre haces mezclada con teoría de modelos continua (trabajo conjunto con Ochoa, ver [9]), ultrapotencias métricas (importantes en teoría de modelos continua).

En resumen, tenemos con la teoría de modelos una herramienta que

- Está anclada, en mayor o menor grado, en el *lenguaje* apropiado. Es una herramienta eminentemente lógica.
- Ha logrado construir a partir de pocas hipótesis jerarquías enteras de clases de estructuras (o de teorías) que miden en cierto sentido la distancia a categoricidad.
- Es un método para analizar clases \mathbf{K} de estructuras matemáticas mediante teorías de diverso tipo $\text{Th}(\mathbf{K})$ o de manera más reciente mediante construcciones de inmersiones entre diversas estructuras.
- Permite también (mediante su asociación con la geometría y topología a través de los haces) capturar *familias de estructuras* que varían continuamente. Un aspecto importante (teorema del modelo genérico) es que permiten dar construcciones de “estructuras-límite”, de las estructuras del haz y controlar de manera precisa sus propiedades.

-2- Inconformidad en química

And here we are, in the closing of the 20th century, choking on truth.

Ernest Becker [12]

En su libro *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism* [12], Primas manifiesta su inconformidad fuerte con el estado de los fundamentos de la química. El libro apareció en 1983, y el autor lo presenta como un intento de indagar más a fondo en las teorías entonces modernas de la materia molecular. Menciona la situación paradójica siguiente: aunque se pueden “calcular” moléculas pequeñas usando los métodos de la química cuántica, la base teórica de la química no es sólida.

Primas abre su libro con un primer capítulo en tono provocador llamado *Open Problems of Present-Day Theoretical Chemistry*. Allí elabora una lista muy llamativa al ser leída en tono matemático, con subtemas como la “sobreproducción de verdad”, “teorías químicas”, el problema de “calcular todo”, y algunas cuestiones difíciles de la mecánica cuántica *molecular*. Algunas de estas preguntas son de carácter más puramente físico; señalo sin embargo las siguientes como ejemplos de las preguntas de Primas:

- ¿Aplica la mecánica cuántica a sistemas moleculares grandes?
- ¿Es universalmente válido el principio de superposición? Aunque esta pregunta es realmente clásica en física, Primas da la siguiente versión molecular de la misma:
- ¿Por qué tantos estados estacionarios no existen? De hecho, dice Primas, ¡incluso sistemas moleculares relativamente pequeños no exhiben estados estacionarios permitidos por la química cuántica tradicional!⁸
- ¿Por qué la mecánica cuántica falla al describir sistemas químicos? Esta pregunta es una variante molecular de la famosa pregunta más fundamental de Einstein ¿Por qué están localizados los cuerpos macroscópicos?
- ¿Es la temperatura un observable? Esta pregunta apunta a otro tipo de situación paradójica: aunque existen muchos sistemas en equilibrio que tienen una temperatura bien definida (se puede medir, usando un sistema simple que, dice Primas, se puede implementar con perturbaciones arbitrariamente pequeñas del estado termodinámico del sistema), la mecánica cuántica estadística tradicional *no provee* un observable (operador auto-adjunto que actúa sobre un espacio de Hilbert de estados) que represente la temperatura para un sistema *simple*.

Primas luego se embarca en un desarrollo largo (y siempre polémico - tanto con los otros químicos como con los físicos reduccionistas) de temas como la estructura de las teorías científicas (“una buena teoría debería ser consistente, confirmada e intuible”), la mecánica cuántica “pionera” y su interpretación (énfasis fuerte en las correlaciones de Einstein-Podolsky-Rosen, que han generado buena parte de lo más interesante entre matemática y física), la mecánica cuántica más allá de la etapa pionera (una visión más algebraica de la mecánica cuántica, y también lógica cuántica, teoría de la

⁸ El ejemplo que da es el siguiente: ¿por qué se puede comprar en la farmacia D-alanina (con vector estado $|\Psi_D\rangle$), L-alanina (con vector estado $|\Psi_L\rangle$) y la mezcla racémica (operador de densidad $|\Psi_D\rangle\langle\Psi_D| + |\Psi_L\rangle\langle\Psi_L|$), pero no las superposiciones coherentes $|\Psi_D\rangle + |\Psi_L\rangle$ y $|\Psi_D\rangle - |\Psi_L\rangle$? Esto es paradójico, pues según la visión tradicional, los dos últimos estados mencionados representan el estado base y un estado excitado, respectivamente. Este ejemplo señala una situación aparentemente frecuente en química, no reducible a la mera explicación física.

probabilidad no booleana). Cierra su estudio con una reevaluación de los paradigmas de la química teórica de su época, introduce una lógica de propiedades químicas que extiende la lógica temporal ortonormal y su interpretación óptica - da la W^* -lógica de la química (basada en las W^* -álgebras de von Neumann)⁹.

Más recientemente, autores como Hunger [7] han continuado la línea de Primas y han criticado la “falla de los modelos clásicos de explicación en el abordaje de la química”. El centro de la crítica de nuevo es el problema de la modelización molecular. Hunger compara tres enfoques:

- El modelo *ab initio*: iniciar con la ecuación de Schrödinger, pero aplicarla a sistemas moleculares potencialmente enormes. Sigo de manera escueta y saltada a Hunger: se subdivide la función de onda de todo el sistema, Ψ , en un producto de funciones de onda de *cada electrón*, Ψ_i - llamados “orbitales moleculares”: $\Psi = \det(\Psi_1 \otimes \Psi_2 \otimes \dots \otimes \Psi_n)$. Adicionalmente, sigue Hunger, cada uno de estos orbitales moleculares, Ψ_i , se describe como una combinación lineal de funciones de base ϕ_i . Después de varias reducciones adicionales, se llega a una “separación” del problema en componentes individuales (llamadas “operador de Hartree-Fock”), $h^{HF} \cdot \Psi_i = \epsilon_i \cdot \Psi_i$, donde h^{HF} es el operador electrónico individual de Hartree-Fock, y ϵ_i es la energía del estado basal del electrón i . *La acción de este operador es individual sobre electrones*. Hay más detalles

⁹ He aquí una lista más larga de preguntas y observaciones directamente extraídas del libro de Primas, todas muy sugestivas a nivel de posibles formalizaciones lógicas, algunas modelo-teóricas:

- Jauch: classical observables (or “essential” observables) are the missing link between physics and chemistry - 1970 (p. xii of Primas)
- “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...”
- 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
- 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!
- throwing out chemical variables... valence, bond, structure, localized orbitals, aromaticity, acidity, color, smell, water repellence, etc.
- The final aim of a scientific theory is not to summarize data but to understand reality.
- SYNTAX, SEMANTICS, PRAGMATICS - a theory must be CONSistent, CONFirmed and INTUITable
- Inner perfection (Einstein), naturalness, simplicity —
- The relationship of a theory with inner reality (pragmatics [3]) vs outer reality (semantics [2])
- METAcompleteness theorem? (intuitable - confirmed/realizable - consistent)
- nowadays: predominantly *operational* semantic interpretation

que explican las interacciones pero lo importante es que a partir de ahí se usan métodos de cálculo variacional para ir encontrando la solución: se conjeturan coeficientes para la ecuación correspondiente, se compara, se repite. Hunger señala posibles circularidades conceptuales, y peligros de no convergencia al valor que se quiere calcular.

- El modelo de la mecánica molecular (no entro en detalles, pero tiene que ver con la geometría angular de las moléculas, y su explicación en términos de “tensión estérica”).
- Un modelo de inteligencia artificial y *simulación de redes neuronales*— este último ha sido muy estudiado recientemente combinando con los métodos de “machine learning” que están en explosión hoy en día.

De estos tres probablemente el más cercano a los trabajos en física y teoría de modelos que describo en la sección siguiente es el método *ab initio*. Los modelos de mecánica molecular parecen ser más geométricos y el de redes neuronales parece estar más anclado por ahora en otras partes de la matemática, menos relevantes a este estudio.

-3- Teoría de modelos de la física

La teoría de modelos interactúa con la física cuántica de manera intensa desde hace unos pocos años. En realidad, hay interacciones con la lógica matemática de manera más general, a través de teoría de la teoría de topoi y la lógica categórica en trabajos de Isham y Doering, pero de esa vertiente no nos ocupamos aquí.

El problema con los estados propios

Describo a continuación una situación muy reciente¹⁰ (trabajos en parte en proceso aún) de interacción entre teoría de modelos y física en torno al problema de dar cuenta correcta matemáticamente de la formalización de la mecánica cuántica en el caso (¡mucho más sencillo que lo que interesa a los químicos!) de una *partícula libre* y en el caso del *oscilador armónico cuántico* y el cálculo de sus propagadores cuánticos. Aunque estos modelos son clásicos para la mecánica cuántica, los cálculos concretos de los propagadores requieren calcular integrales de camino de Feynman. Como los observables físicos se representan mediante operadores auto-adjuntos sobre un espacio de Hilbert complejo (típicamente de dimensión infinita), se puede usar la esfera unitaria para ubicar los diferentes estados del sistema; los resultados de las mediciones se representan entonces como los valores propios de esos operadores. Si

¹⁰ Me baso parcialmente para esta descripción del contexto general en la introducción al artículo de Hirvonen y Hyttinen, ver[6].

un operador auto-adjunto tiene valores propios no degenerados, los vectores propios correspondientes serán ortogonales y tendrán valores propios reales. Los físicos usualmente pasan aquí a lo que llaman “insertar un conjunto completo de estados”: lograr que los vectores propios de los operadores considerados generen todo el espacio. En ese espacio generado por los vectores propios correspondientes a las mediciones posibles, construyen “superposiciones” (combinaciones lineales), esto es, estados en los cuales el observable solo queda “determinado” *al ser medido* (y se produce el “colapso” a alguno de los estados propios). Los coeficientes de las combinaciones lineales dan las probabilidades de colapso en el estado propio correspondiente “cuando se lleva a cabo la medición”. Hasta aquí todo muy bien. Pero si enfocamos en el caso más simple posible, una partícula libre (por ejemplo en espacio unidimensional), la hipótesis de completitud del conjunto de estados entra en conflicto con trabajar en un espacio de Hilbert separable (con base enumerable). En ese caso, el operador de posición *no tiene vectores propios*. Hay varias “soluciones” usadas por los físicos matemáticos (espacio de Hilbert “equipado”/rigged, o directamente estudiar regiones del espectro compatibles con la medición... o reemplazar el trabajar realmente con vectores propios por trabajar con funciones de onda que proveen una distribución de probabilidad para la posición de la partícula).

El operador de evolución temporal es en todo este contexto la solución a la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar(\partial/\partial t)K^t = \mathbf{H}K^t,$$

donde \mathbf{H} es el hamiltoniano del sistema (el operador de energía), y K^t es el operador unitario de evolución temporal que provee el estado $K^t(\varphi)$ si el estado en tiempo 0 es φ .

Para dar esta evolución temporal, hay que calcular el *propagador* $K(x,y,t)$ (la amplitud de probabilidad de la partícula al viajar esta del punto x al punto y en tiempo t). Si *tuviéramos estados propios* bona fide $|x\rangle$, $|y\rangle$ que correspondieran a las posiciones, esta amplitud de probabilidad estaría dada por el producto interno $\langle y|K^t|x\rangle$. Pero como en muchos casos no se tiene directamente el estado propio, el propagador termina siendo calculado como el *núcleo de la representación integral* del operador de evolución temporal, $K^t\psi(y) = \int_{\mathbb{R}} K(x,y,t)\psi(x)dx$. El **paso crucial** siguiente es lograr un valor entero para el propagador usando integrales de camino de Feynman.

Los problemas arrancan ahí, y los caminos de solución aportados por la teoría de modelos divergen *en cuatro vías* a partir de este punto.

Cuatro caminos

Los cuatro caminos han sido moderadamente independientes –ha habido sana interacción entre los distintos grupos, pero realmente los enfoques son distintos en

los cuatro. Los cuatro caminos de enfoque del problema también corresponden hasta cierto punto a cuatro centros geográfico distintos: Oxford, Helsinki, Toronto y Bogotá.

Oxford: Zilber - haz de Weyl, estructuras de aproximación

Zilber en su artículo [16] (y tal vez con más detalle en [17]) plantea toda la situación descrita en la sección anterior, y se enfoca en intentar usar su “teoría de aproximación estructural” (modelo-teórica) para abordar el problema de proveer un marco para los problemas mencionados arriba (la no existencia de estados propios en muchos casos importantes, y el cálculo de Dirac implícito) usando espacios de Hilbert *de dimensión finita* como aproximaciones al estado de Hilbert realmente deseado. Este último tiene un parámetro real asociado al par de operadores posición Q y cantidad de movimiento P (tales que $Qf(x)=xf(x)$ y $Pf(x)=-i\hbar(df/dx)(x)$ - los operadores tienen conmutador $[Q,P]=i\hbar$ - y también a los operadores unitarios asociados a estos, $U^t=e^{itQ}$ y $V^t=e^{itP}$ (aquí la ley de conmutación es la de Weyl, $V^wU^t=e^{ihtw}U^tV^w$ para muchas instancias de t y w).

En [18], Zilber desarrolla en detalle su construcción mediante una combinación de lo siguiente:

- Un haz de estructuras, cada una asociada a una *representación* finito-dimensional (!) del álgebra de operadores, y atada a un par de números racionales (que “aproximan” el número real que controla la conmutación).
- Inmersiones entre estas estructuras.
- Un *límite* de estas estructuras que interpreta Zilber como un ultraproducto y luego una imagen homomorfa de este.

Zilber da varias descripciones de su proceso. Una de estas me parece particularmente relevante a las preguntas más difíciles de la química: según Zilber el universo tendría un número de partículas finito, pero tan grande que cierta “desenfoque” (blurring) que ocurre por verlo desde la distancia coincide con la imagen que tienen varios físicos o químicos cuánticos. Las estructuras de aproximación requieren escoger con cuidado el homomorfismo del segundo paso - y los haces (y prehaces) permiten entender esto.

Todo esto se puede ver también como un intento de solución al “Sexto Problema de Hilbert” (axiomatizar aquellas partes de la física donde la matemática es prevalente –en este caso, el “paso al límite continuo” hecho matemáticamente corresponde precisamente a esta solución).

Helsinki: Hirvonen y Hyttinen - ultraproductos métricos

Tapani Hyttinen y Åsa Hirvonen atacan el problema de los vectores propios “no existentes” de manera mucho más cercana a la teoría de modelos tradicional, y logran

cálculos de Dirac para la integral de camino de Feynman bastante contundentes. Su enfoque comparte con el de Zilber el aproximar el espacio de Hilbert de dimensión infinita mediante subespacios de dimensión finita, pero a diferencia de Zilber, ellos hacen básicamente dos tipos de ultraproducto: uno clásico y otro métrico. El métrico no tiene infinitesimales ni infinitos (el clásico sí). Además, arman el ultrafiltro usando teoría de números para ir logrando en el límite un número N (que Zilber suele interpretar como un número finito pero gigantesco, asociado tal vez al número de partículas del universo físico) hiperfinito y *muy divisible* (básicamente, divisible por todos los números naturales). Al igual que Zilber, tienen que lidiar con los sempiternos problemas de *renormalización*. Curiosamente, obtienen resultados ligeramente distintos de los de Zilber a la hora de hacer el cálculo de Dirac. Una ventaja de su enfoque es la cercanía fuerte a otros trabajos de teoría de modelos; una posible desventaja es el marco conceptual mucho más acotado que el de Zilber. Sin embargo, logran buenos resultados en el caso de los propagadores para el oscilador armónico cuántico.

Toronto: Bays y Hart - representaciones.

Construyendo sobre los trabajos de Zilber, Martin Bays y Bradd Hart enfocan dos temas: lograr la representación de Schrödinger del álgebra tridimensional de Heisenberg de distribuciones temperadas como ultralímite de representaciones finito-dimensionales de subgrupos del grupo de Heisenberg. Para ésto, utilizan el espacio de Schwarz y la teoría de distribuciones, y hacen un uso sofisticado de la teoría de la representación.

Aunque su trabajo tiene un énfasis más fuerte en teoría de representaciones de grupos y álgebras asociadas a las construcciones de la mecánica cuántica, cabe señalar que también usan la idea de tomar ultralímites de representaciones finito-dimensionales, como Zilber. Una diferencia, que enlaza con los trabajos iniciados en Bogotá por Ochoa y yo, es el uso del espacio de Schwarz, gaussianas y teoría de distribuciones.

Bogotá: Ochoa-Villaveces. Haces métricos y distribuciones.

Con Maicol Ochoa (químico, actualmente en Filadelfia) hemos tomado un enfoque un poco distinto de los anteriores, pero con mucho puntos en común que quiero señalar.

Arrancamos en [9] generalizando las construcciones de Caicedo de haces de estructuras a haces métricos, y encontramos condiciones para la existencia de “límites” de estos haces (modelos genéricos) con buen comportamiento. Esto nos da un marco lógico general que tiene las siguientes propiedades:

- Es una estructura natural de aproximación *topológica* (dada directamente por la estructura de haz.
- (Las fibras de dicho haz son estructuras métricas en el sentido de [3]. Los espacios de Hilbert, de Schwartz, etc. viven de manera natural sobre estas fibras.)
- En los casos buenos, tenemos el modelo genérico y el teorema del modelo genérico nos permite transferir *algunas* propiedades.

Luego en [10] continuamos usando distribuciones de Schwartz y gaussianas sobre las fibras. Armamos fibras que modelan lo suficiente para poder usar dualidad y cálculo de distribuciones de Schwartz. La idea principal es usar las propiedades *algebraicas* de las integrales involucradas en las funciones gaussianas, y sus productos con polinomios, *en lugar de* calcular integrales. Logramos versiones “físicas” de los productos internos $\langle \cdot, \cdot \rangle_U$ y $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$ asociados a los operadores y capturamos las propiedades de las integrales directamente ahí (y en sus transformadas de Fourier). El operador de cantidad de movimiento (operador diferencial en principio en el espacio de posición) se puede ver en este contexto como una transformación lineal –esto evita tener que hacer sumas de Riemann. Finalmente, la transformada de Fourier en las fibras permite representar el operador $\exp(itp^2)$ como un operador de multiplicación en el espacio de cantidad de movimiento.

¿Qué emerge de todo esto?

Naturalmente, es difícil dar una respuesta precisa a esa pregunta: los trabajos más “clásicos” mencionados en esta sección son de 2010, y el resto es realmente muy reciente (2016, 2017). Los cuatro enfoques son distintos pero tienen muchos puntos conceptuales en común. Aún es demasiado pronto para que surja una imagen clara de todo eso.

A priori no veo ventajas absolutas en ninguno de los cuatro enfoques: todos aportan algo, y un primer paso que se está dando es buscar puntos concretos de compatibilidad.

Más allá de las diferencias o similitudes (y posibles reducciones) entre estos trabajos, surgen preguntas que a mi modo de ver están relacionadas de manera natural con las preguntas de Primas, Woodyard, Hunger, etc. mencionadas antes. Discuto brevemente estas ideas, de manera absolutamente especulativa, en la siguiente sección.

-4- ¿Teoría de modelos de la química?

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 [8]

Los sistemas moleculares complejos probablemente no se pueden reducir a sistemas simples como los de la sección pasada; aun así, ciertas ideas de los cuatro caminos de tratamiento matemático podrían ser llevadas allá.

- Emerge en el trabajo de Zilber la métrica solamente al pasar al límite. No se toma un límite de espacios métricos (como en nuestro trabajo con Ochoa). La manera como emerge esa métrica en el límite es aún un misterio - acaso no completamente distinto de la emergencia de propiedades en sistemas químicos. La pregunta de Primas ¿es la temperatura un observable? podría ser llevada a estructuras de aproximación, o a haces métricos adecuados.
- El famoso modelo *ab initio* parece ser un candidato natural a ser entendido mediante métodos distintos. Se trata de un problema de aproximación, en la superficie mucho más complejo que los de partículas libres u osciladores armónicos cuánticos. Aun así, conjeturo que un análisis más contemporáneo matemáticamente hablando podría aportar luces interesantes. No estoy seguro de que sea un problema lógico o modelo-teórico.
- El primer problema de Primas (¿Aplica la mecánica cuántica a sistemas moleculares grandes?) es muy cercano a la visión de Zilber - aunque en el caso de Zilber la representación aún sirve para casos muy “simples” desde el punto de vista de la química: partícula libre, oscilador armónico cuántico.
- Sobre el principio de superposición y su conexión con el entrelazamiento cuántico, de nuevo hay trabajos (distintos de los mencionados en la sección anterior) debidos a Abramsky [1].

Recapitulación y coda

El artículo de José Luis Villaveces en este volumen [15] enfoca la ciencia como una forma especial de lectura. Da la vuelta por múltiples disciplinas y hace énfasis en la ποιήσις presente en la química orgánica, en el hacer combinado con el leer, y la manera como al tomar en serio la ciencia como lectura del libro de la vida podemos entender el encadenamiento que llevó (por ejemplo) de Schrödinger a la genética del ADN.

La teoría de modelos tiene que ver con la mirada, con la búsqueda de su control por el logos, y en sus versiones más contemporáneas con el rol de τὸ ἀρμόδιον - el “encaje perfecto” entre estructuras, la armonía.

La teoría de modelos surgió como el lado más “semántico” de la lógica matemática, el lado más adaptado a mirar estructuras del mundo (los “modelos”) y buscar invariantes muy generales. Inicialmente controlados por la semántica, pero ahora con un corpus de teoremas que permiten entrelazar variantes distintas de estructuras, entender cómo

controlar invariantes de las clases de éstas, cómo sumergir problemas sin solución en estructuras pequeñas en lugares donde estas soluciones aparecen, y construir toda una teoría de obstrucciones para estas.

En años recientes la teoría de modelos se asoma a la física - de manera probablemente aún muy incipiente, pero ya logra dar construcciones novedosas.

Los problemas de la química parecen requerir métodos a la vez similares y más novedosos: similares en la búsqueda de control de estructuras límites como en los ejemplos logrados ya en mecánica cuántica, pero más complejos por la presencia de problemas de emergencia estructural que no parecen ser cubiertos de manera adecuada hasta ahora. La pregunta de Primas sobre la temperatura como observable es un ejemplo fuerte de este fenómeno.

Apéndice personal: té en Mindanao, tres décadas

Este es un apéndice personal sobre una conversación que ha durado algo más de tres décadas, desde los té en Mindanao¹¹, donde se fue formando, hacia el final de mis estudios de bachillerato e inicio de la carrera de matemáticas en la Universidad Nacional, el pequeño ritual esporádico de tomar té muy fuerte a horas muy tardías con mi padre, mientras comentábamos muchos temas que él entonces investigaba, muchas de sus indagaciones en la estructura de la química a nivel fundamental, y que tuve la suerte de absorber (?) mientras iniciaba mi camino hacia la matemática. Se mezclaban en esas conversaciones temas tan variados como dadaísmo, surrealismo, poesía alemana, el inicio de la química (Lavoisier, estructura atómica), música de muchas épocas, posiblemente muchos otros temas que ya no recuerdo. Lo más importante de evocar esto, tal vez, es que en la mente de José Luis Villaveces (lo veo más claro ahora) esos temas en realidad no estaban ubicados en compartimientos separados: el ejemplo más vívido para mí fue, creo, el aprender a pensar todos esos temas como parte de un continuum enorme que a veces se manifestaba como un problema topológico de estructura química, a veces como un problema histórico en torno al surgimiento del dadaísmo, a veces como el uso de una rima en Goethe y su reaparición en Wagner más tardíamente. Todo estaba “al tiempo” pero con conexiones sutiles, con pasajes sorprendentes de un mundo al otro, nunca artificiales.

De alguna manera esas conversaciones en horas muy tardías tomando té las veo ahora, muchos años después, como uno de los puntos de origen de muchos hilos que han seguido. Se trataba de un químico que decidió hacia la década de 1980 acercarse de manera decisiva a la matemática y un matemático que inició su formación en esa

¹¹ Mindanao en este caso es el nombre de un conjunto residencial donde vivíamos en los años 80.

misma década y en años muy recientes se ha preocupado por hilar el diálogo entre la química y la matemática.

En 2015 en una tertulia con los estudiantes de matemáticas de la Universidad Nacional y con mi colega Fernando Zalamea, uno de los temas tuvo que ver con cómo se forma un matemático. Uno de los estudiantes me preguntó cómo era el ambiente de la Universidad Nacional durante mis años formativos, qué profesores marcaron la época. Mi respuesta, dada al vuelo y de manera improvisada, fue múltiple: al lado de mis grandes maestros matemáticos del pregrado (Charris, Caicedo, Takahashi), creo que me formó fuertemente el haber visto durante mis años de pregrado la evolución de un grupo de profesores, entre ellos José Luis Villaveces (y Antanas Mockus, y varios otros profesores de física, biología, química, matemáticas) de la Facultad de Ciencias - de discutir sobre temas relacionados con sus disciplinas en torno a la revista *Naturaleza, Educación y Ciencia* y pasar de ahí gradualmente a ocupar cargos en la primera alcaldía de Mockus en Bogotá (el gabinete era fundamentalmente una extensión de la Facultad de Ciencias de la Nacional), y que pese a múltiples tropiezos logró consolidar una visión de ciudad que sigue siendo muy añorada en nuestros días. Fue extraño el haber dado esa respuesta al vuelo (¡no preparada de antemano, las Tertulias matemáticas son así!) pues antes de ese momento nunca había caído en cuenta de la importancia que tuvo esa época de mediados de los ochenta, cuando ese grupo de profesores acaso muy idealistas se atrevió a cruzar fronteras disciplinarias (en el grupo coexistían biólogos, químicos, filósofos, físicos, matemáticos) y a pensar de manera que mezclara de manera libre el conocimiento histórico de sus áreas con lo que se podía hacer en investigación. Mientras respondía al estudiante caí en cuenta de todo eso. En mi caso vivía ese cambio tanto en la Facultad como en la casa, a veces con una taza de té tardía. Mi padre, al igual que Primas, siempre ha parecido inconforme con la inadecuada formalización de la Química, con la sensación de cierta incompletitud con el uso de la Física teórica en la formalización de la Química. El estudio de autores como Paul Mezey, Bader, Jauch, Primas - y tal vez en un espectro más filosófico la epistemología de autores de la escuela de Feyerabend marcó de manera honda esos años: el quedarse haciendo química de manera juiciosa en el laboratorio, o aún con las simulaciones (con resultados impresionantes) de la cuántica poco a poco dejó de ser una opción atractiva para él. Aunque en años siguientes me “alejé” de esas preguntas de la Química (hacia la lógica de haces, con Xavier Caicedo, luego hacia la teoría de conjuntos en el doctorado con Kenneth Kunen, y luego de nuevo hacia la teoría de modelos pero en el ámbito mucho más amplio de clases elementales abstractas, con Saharon Shelah, en años recientes el interés por la teoría de modelos de la física (muy inspirado en conversaciones con Boris Zilber) terminó trayendo la posibilidad (aún en ciernes) de revisar, por fin, cuestiones fundamentales de la química teórica, pero ahora con teoría de modelos. ¡Este artículo intenta continuar esa conversación!

Bibliografía

- [1] Abramsky, S.; Mansfield, S. and Soares, R. (2012). *The Cohomology of Non-Locality and Contextuality*, 8th. Int. Workshop on QPL. EPTCS 95.
- [2] Baird, D.; Scerri, E. and McIntyre, L. (2011). *La invisibilidad de la química*, : 13-35.
- [3] Ben Yaacov, I.; Berenstein, A.; Henson, C. W. and Usvyatsov, A. (2007). *Model theory for metric structures*.
- [4] Caicedo, X. (1995). *Lógica de los haces de estructuras*, Rev. Acad. Colomb. Cienc 19: 569-586.
- [5] Conant, G. (2016). *Página web* <http://forkinganddividing.com>
- [6] Hirvonen, Å. and Hyttinen, T. (2016). *On Eigenvectors and the Feynman Propagator*, arXiv preprint arXiv:1407.2134.
- [7] Hunger, J. (2011). *Cómo fallan los modelos clásicos de explicación en el abordaje de la química. El caso de la modelización molecular*, : 192-232.
- [8] Novalis. Wood, D. (Ed.), 1801. *Notes for a Romantic Encyclopaedia: Das Allgemeine Brouillon* - ed. David Wood. State University of New York Press - 2007, tr., Albany.
- [9] Ochoa, M. A. and Villaveces, A. (2016). *Sheaves of Metric Structures*, : 297-315.
- [10] Ochoa, M. A. and Villaveces, A. (2017). *Quantum mechanics in a metric sheaf: a model theoretic approach*, arXiv preprint arXiv:1702.08642.
- [11] Patočka, J., 1990. *L'art et le temps - Essais*. P.O.L., 8, Villa d'Alésia, Paris 14e.
- [12] Primas, H., 1983. *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*. Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin, New York.
- [13] Shelah, S., 1990. *Classification theory and the number of nonisomorphic models*. North-Holland Publishing Co, Amsterdam.
- [14] Shelah, S. and Usvyatsov, A. (2014). *Minimal Types In Stable Banach Spaces*, arXiv preprint arXiv:1402.6513.
- [15] Villaveces, J. L. (2017). *La ciencia: una forma de lectura*. En *Festschrift José Luis Villaveces*. Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. Ed. Luis Carlos Arboleda.
- [16] Zilber, B. (2010). *Non-commutative Zariski geometries and their classical limit*, Confl. Math. 2.
- [17] Zilber, B. (2010). *On model theory, non-commutative geometry and physics*.
- [18] Zilber, B. (2016). *The semantics of the canonical commutation relation*, arXiv preprint arXiv:1604.07745.