

SOBRE ALGUNAS PROPIEDADES FORMALES DE LOS SISTEMAS DE REPRESENTACION EN QUIMICA

(On Some Formal Properties of the Chemical Representation Systems)

Enrique A. SANCHEZ PEREZ*
José SANCHEZ MARIN**

Manuscrito recibido: 1997.6.20.

Versión final: 1997.8.11.

* Departament de Matemàtica Aplicada, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera, s/n, 46071 Valencia.

** Departament de Química Física, Facultat de Química, Universitat de València, Dr. Moliner, 50, 46100 Burjassot, Valencia.

BIBLID [ISSN 0495-4548 (1997) Vol. 12: No 30; p. 567-588]

RESUMEN: En este trabajo se define formalmente el concepto de representación en química utilizando homomorfismos desde estructuras algebraicas, que llamamos sistemas de tipo C, en otras estructuras especiales de símbolos muy relacionados con los que son habituales en la química experimental. Para la definición de los sistemas de tipo C se ha seleccionado un conjunto mínimo de relaciones y funciones, que son necesarias para expresar proposiciones significativas en química. También se define un lenguaje formal de primer orden adecuado a los sistemas de tipo C, que llamamos L(C). El resultado principal que se demuestra es que toda representación que verifica las mismas sentencias de L(C) que un sistema de tipo C, es necesariamente isomorfo a él. Se concluye por lo tanto que puede existir un problema lingüístico subyacente en la aplicación que de la mecánica cuántica se hace en la química teórica.

Descriptores: química, teoría de modelos, representación, estructuralismo.

ABSTRACT: *The concept of representation in chemistry has been formally defined by means of homomorphisms from algebraical structures, which we call type-C systems, to some special sets of symbols which can be related to the symbols ordinarily used in experimental chemistry. A minimum number of relations and functions, which would suffice to express significant propositions in chemistry, have been chosen to define type-C systems. A first order formal language L(C) adequate to type-C systems has been defined. It has been shown that each representation that verifies the same sentences of L(C) as a type-C system is necessarily isomorphic to it. It is concluded that a systematic study of the representation problem in chemistry is in order because a deep language problem underlies the application of quantum mechanics to chemical problems.*

Keywords: *chemistry, model theory, representation, structuralism.*

1. Introducción

La química cuántica puede ser definida como aquella parte de la química física que aplica los métodos de la mecánica cuántica al planteamiento y resolución de los problemas clásicos de

la química, es decir, al estudio de las estructuras estables en las que se encuentra la materia y de su reactividad. En un sentido amplio, se puede decir que la química cuántica pretende estudiar la estructura de los átomos y las moléculas, así como la forma que tienen estos de interactuar entre ellos para formar sistemas más complejos, mediante una metodología basada en las leyes de la mecánica cuántica (véanse por ejemplo los textos fundamentales Pilar 1968, y Szabo y col. 1982). En particular, los químicos cuánticos diseñan sus cálculos con el fin de predecir la estructura y la reactividad de las especies químicas. Pero, puesto que el estudio de tales especies y de su comportamiento a nivel macroscópico implica un gran número de moléculas, se hace necesario modelizar las sustancias mediante un pequeño número de átomos aislados, extrapolando las propiedades obtenidas para el modelo al comportamiento real de la materia. Otras técnicas, como las que se obtienen de la aplicación de la mecánica estadística, permiten estudiar el comportamiento de grandes colectivos de moléculas. Es decir, el estudio a nivel microscópico de algunas propiedades conduce a la obtención de conclusiones sobre el comportamiento de los sistemas químicos¹.

Consideremos un ejemplo muy simple para mostrar cómo se aplica esta metodología. Supongamos que un químico pretende estudiar la siguiente reacción química:



Esta expresión, interpretada en el contexto usual de la química, es una proposición que significa que, en condiciones adecuadas, la transformación química representada en (1) tiene lugar. De forma muy simplificada, el procedimiento que utilizaría un químico teórico para estudiar este problema consistiría en diseñar los cálculos necesarios para obtener una buena aproximación numérica a la diferencia de energía ΔE entre los estados más estables del H_2 y de la misma especie cuando no existe ningún enlace entre los dos átomos,

$$\Delta E = E(\text{H}_2) - 2E(\text{H})$$

Al comprobar que $\Delta E < 0$, aplicando la ley de la mecánica según la cual -en el contexto adecuado- cualquier sistema físico libre tiende a adoptar su estado de mínima energía, el químico cuántico concluiría que



Aparte de otras objeciones más o menos justificables desde *dentro* de la propia teoría sobre la validez real de este procedimiento, es evidente que esta metodología introduce en los argumentos un problema puramente lingüístico. Aunque la proposición (1) parece muy similar a la (2), su significado es distinto. Mientras (1) indica que cada colectivo macroscópico de átomos de hidrógeno tiende, en las condiciones adecuadas, a formar moléculas diatómicas de hidrógeno, (2) simplemente significa que *dos* átomos aislados de hidrógeno que interactúan tienden a combinarse para formar *una* molécula de hidrógeno.

Además, la interpretación usual de (1) no implica necesariamente que *todos* los átomos de hidrógeno desaparecerán para producir moléculas diatómicas de hidrógeno, como podría deducirse de una lectura superficial de la proposición (2) por alguien ajeno a la materia. Naturalmente, los químicos teóricos conocen estas limitaciones, y la física proporciona fundamentos teóricos suficientemente sólidos como para determinar cuando (1) se puede deducir de (2).

Algunos autores han estudiado estos y otros problemas relacionados desde un punto de vista filosófico, y también desde el punto de vista del estudio de la metodología de la química (Reduccionismo: véanse por ejemplo los trabajos de Bogaard 1978; Primas 1981 y Van Brakel 1988). Sin embargo, el presente trabajo no pretende enfrentar estas cuestiones desde estos planteamientos; nuestra intención es la de proponer como herramientas de trabajo para estos análisis unas técnicas que hasta el momento no se han utilizado en este contexto específico, aunque sí en otros campos de las ciencias formales y experimentales. Pretendemos estudiar las relaciones lógicas y semánticas que se establecen, cuando se aplica la mecánica cuántica al estudio de las estructuras moleculares, entre los resultados que se obtienen mediante estos argumentos teóricos y las proposiciones que se construyen utilizando el lenguaje propio de la química clásica². Nuestro trabajo es por lo tanto una propuesta metodológica para el estudio sistemático de la relación entre proposiciones como (1), que representa determinado tipo de cambio químico observable, y fórmulas como (2), que expresa ciertas relaciones en el contexto de la modelización teórica de los sistemas químicos.

En particular, en este trabajo nos hemos planteado dos objetivos. Por una parte, es necesario obtener una definición de lo que se puede considerar un sistema de representación en química, que sea lo suficientemente general como para que todos los sistemas que se han utilizado y actualmente se utilizan se ajusten a ella. Una vez hecho esto, obtenemos un resultado básico sobre la estructura de estos sistemas de representación, que se puede interpretar como una confirmación formal de que, si entendemos la química

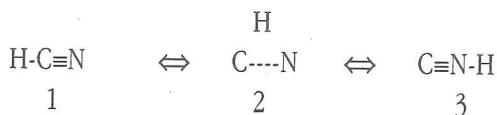
como el conjunto de sentencias formales que representan los cambios químicos, entonces la química depende fundamentalmente del sistema de representación utilizado. Es decir, el lenguaje utilizado condiciona necesariamente la propia estructura de la teoría. La disciplina que utilizamos como herramienta en nuestro análisis es la que hemos considerado más adecuada: la teoría de modelos (véase Chang y col. 1973, o bien Manzano 1989).

La primera dificultad que nos planteamos es la determinación de cuáles son exactamente los objetos sobre los cuales la química cuántica formula sus proposiciones, es decir, a qué tipo de construcciones teóricas se asigna usualmente el concepto de molécula. Esta pregunta tiene difícil respuesta, ya que actualmente existe una gran variedad de teorías dentro de la química teórica que proponen diferentes definiciones de este concepto. Por otra parte, los presupuestos de la teoría atómica -que tienen una dilatada tradición en química- según los cuales todos los fenómenos que estudia esta ciencia se pueden reducir, en última instancia, al comportamiento de las moléculas, pueden no ser del todo adecuados en la actualidad (véase por ejemplo Amann 1989). Con respecto a esta segunda objeción, en el contexto de este trabajo y sin entrar en más detalle, optamos por una respuesta basada en el siguiente argumento ligüístico: *las proposiciones significativas que se formulan en la química clásica experimental están expresadas en un lenguaje cuya dependencia de la teoría atómica es incuestionable*, puesto que la formulación química se basa precisamente en estos presupuestos.

La primera cuestión planteada, sin embargo, sobre cuál es la definición más adecuada que debemos adoptar para el concepto de molécula dentro de la química cuántica, parece tener una solución mucho más complicada, puesto que son muchos los modelos y las caracterizaciones que se deducen de ellos para este concepto. No obstante, prácticamente todos ellos asumen que es posible dar una definición -en un sentido muy amplio y aceptando la aproximación de Born-Oppenheimer³-, definiendo las clases de equivalencia de las coordenadas de los N núcleos implicados en el espacio R^{3N} que se pueden considerar asociadas a la misma molécula, teniendo en cuenta además su estado energético (véase Mezey 1987). Aunque una explicación sistemática de cómo se realiza esta partición de R^{3N} en clases asociadas a cada molécula en cada modelo queda fuera del contexto de este trabajo, pensamos que el siguiente ejemplo es lo suficientemente ilustrativo:

Consideremos un sistema formado por tres átomos, uno de hidrógeno, otro de carbono y otro de nitrógeno. En condiciones normales, pueden aislarse dos estructuras moleculares, cuyas representaciones en la notación habitual de la química orgánica son $H-C\equiv N$ y $C\equiv N-H$. La interconversión entre estas dos moléculas puede describirse asumiendo la existencia de

una "molécula" intermedia -cuya existencia se puede deducir en los modelos teóricos aunque experimentalmente no se pueda aislar-, de manera que puede escribirse esta transformación como:



Desde el punto de vista de la química cuántica, es posible asignar a cada elemento de R^9 que represente las coordenadas espaciales de los tres núcleos (fijando también la energía del sistema) una de estas configuraciones, o bien considerarlo como una representación de un sistema formado por átomos aislados. Esta pertenencia nos define obviamente una relación de equivalencia, y las clases definidas por esta relación nos permiten a su vez definir las moléculas. En general, las técnicas para llevar a cabo estas asignaciones dependen de los modelos particulares en los que se trabaje; pero lo cierto es que siempre es posible definir estas relaciones de pertenencia de conjuntos de coordenadas de núcleos a especies moleculares concretas, precisamente por que los modelos se construyen para modelizar sistemas moleculares. En nuestra opinión, una de las técnicas que más claramente permite definir siguiendo este procedimiento el concepto de molécula es la teoría de hipersuperficies de energía potencial, y lo que en general se conoce como estudio de la topología molecular, y que consiste básicamente en el estudio de una función de energía E que se define en R^{3N} . Aunque una exposición exhaustiva de esta teoría no nos parece indicada en este trabajo, diremos que cada una de las posibles estructuras de las que hemos estado hablando (por ejemplo, la especie $\text{H}+\text{C}+\text{N}$ definida por los átomos aislados, o las moléculas 1, 2 y 3) pueden ser asociadas sin ambigüedad a un conjunto de puntos estacionarios de la función E (Mezey 1982; Mezey 1987; Arteca y col. 1989)⁴. De esta forma, y utilizando también la función E y otras propiedades de esta caracterización matemática, es posible definir el mínimo conjunto de relaciones y funciones sobre este conjunto de puntos estacionarios necesario para poder formular proposiciones significativas en química. De esta manera, construimos un sistema simbólico en el cual *es posible* hablar de química, pero con el cual *no necesariamente decimos todo lo que se podría decir* en química; por eso hablamos de un sistema mínimo de relaciones y funciones. En este sentido, nuestro sistema simbólico es abierto⁵. De esta manera, definiremos lo que en el

resto de este trabajo llamaremos un *sistema de tipo C*, que entre otras cosas, dependerá del tipo de átomos que consideremos en su construcción.

Por otra parte, el primer problema que se plantea para definir el conjunto de símbolos que definen el lenguaje utilizado en química experimental, es que este sistema simbólico no es único. De hecho, se utiliza una gran variedad de sistemas simbólicos para la construcción de proposiciones significativas en la química de laboratorio. Y todavía aumenta más el conjunto de estos sistemas si además imponemos la condición de que cualquier formalismo basado en las hipótesis de la teoría atómica debe ser igualmente aceptable. Generalmente, los diferentes conjuntos de símbolos utilizados expresan diferentes niveles de información sobre el estado en el que se encuentran las sustancias, y no siempre está bien definido su significado, o bien éste depende completamente del contexto. Por ejemplo, podemos encontrar el agua en un texto de química general representada como H_2O , $H_2O(g)$, $H-O-H$, $(H_2O)_n$, H_2O (273.16 K, 1 atm.), etc. Todas estas fórmulas representan la misma sustancia -agua pura- pero un químico experimentado puede leer en ellas diferentes niveles de información⁶. Nuestra definición de *sistema de representación en química* debe ser compatible con todos estos formalismos. Llamaremos al conjunto de todos los posibles sistemas simbólicos que representan un sistema de tipo C el *conjunto de las representaciones de C*, y lo denotaremos $Rep(C)$.

Llamamos un *sistema de tipo C* a un sistema minimal de relaciones y funciones que se pueden utilizar para describir una clase dada de hipersuperficies de energía potencial generadas combinando un conjunto dado de átomos. Se define empezando por todas las series formales finitas que se pueden formar a partir de un conjunto inicial, teniendo en cuenta que es posible repetir un átomo en una serie dada. Dos series con los mismos elementos, pero en diferente orden, se considerará como la misma serie. Podemos considerar la función E que define la hipersuperficie de energía potencial para cada conjunto de átomos que definen una serie, y asignar a cada subconjunto de puntos estacionarios que definen la misma molécula (en sentido amplio, tal y como se ha comentado anteriormente) un número primo. Nótese que el número de subconjuntos de puntos estacionarios asociado a cada serie debe de ser finito (en términos químicos, con un conjunto finito de átomos sólo podemos tener un número finito de posibles agrupaciones moleculares). Si llamamos D al conjunto de todos los números primos, podemos trabajar con la aplicación producto de números naturales

$$\bullet: D \times D \rightarrow C$$

donde C es el conjunto de todos los subconjuntos de puntos estacionarios asociados a todas las posibles series de átomos. De esta manera, conseguimos que cada subconjunto de puntos críticos que representa una molécula tenga asignado un número primo, y que cada unión de varios de estos subconjuntos de diferentes hipersuperficies, tenga asignado un número natural n , que representará la estructura formada por varias moléculas separadas (exactamente las que correspondan a los números primos de la descomposición en factores primos de n), pero dentro del mismo sistema físico⁷.

Definimos la relación entre los sistemas de tipo C y los sistemas de símbolos y relaciones utilizados por los químicos (que identificaremos con las representaciones $B \in \text{Rep}(C)$) como un homomorfismo de C en B . Estas representaciones, como ya hemos comentado anteriormente, constituyen nuestra formalización de los formalismos químicos, entendidos como conjunto completos de fórmulas significativas en química. Haremos referencia a este tipo de estructuras como *sistemas de tipo B*, o, simplemente, como *sistemas B*. De esta forma, nuestra definición formal de los sistemas de representación en química implica tanto la existencia de un formalismo coherente como la de un homomorfismo algebraico, tal y como veremos después. Nuestro método de análisis consistirá en establecer un lenguaje de primer orden $L(C)$ en el cual podamos estudiar todas las proposiciones que son significativas en los sistemas de tipo C , y utilizar precisamente este lenguaje para estudiar las posibles relaciones que *a nivel lingüístico* se puedan establecer entre los sistemas de tipo C y los sistemas de tipo B . El contexto metodológico óptimo para desarrollar tal análisis es evidentemente la teoría de modelos (véase Chang y col. 1973, Manzano 1989). En concreto, el trabajo formal que desarrollamos en la tercera parte de este trabajo es un estudio de la relación entre isomorfía y equivalencia elemental que se establece al comparar un sistemas de tipo C y un sistema B , donde $B \in \text{Rep}(C)$, utilizando el lenguaje formal de primer orden $L(C)$ (véase Chang, o Manzano para las definiciones y resultados necesarios de teoría de modelos).

A continuación damos una breve descripción de los elementos que hemos introducido en la definición de los sistemas de tipo C , pero no desde el punto de vista estrictamente formal -cosa que daremos después-, sino desde el punto de vista de las relaciones semánticas que queremos establecer entre ellos y la estructura de los modelos teóricos. Así, incluimos en estos sistemas:

- Una operación $\bullet: C \times C \rightarrow C$ conmutativa y asociativa, de manera que todos los elementos de C descritos anteriormente (es decir, conjuntos de puntos estacionarios y

sucesiones finitas de estos conjuntos en hipersuperficies de energía potencial, por ejemplo) pueden ser representados de forma única por una ecuación de la forma $a = p_1 \bullet \dots \bullet p_n$, siendo p_i , $i=1, \dots, n$. números primos. Una fórmula simple de la forma $a = p$ (siendo p primo), representa un conjunto de puntos estacionarios asociados a una misma molécula en una misma hipersuperficie. Utilizaremos la notación $PI = \{p_i: i=1, \dots, m\}$ para denotar el conjunto de símbolos que representan el conjunto inicial de átomos del sistema que queremos estudiar, que se puede asociar a un subconjunto finito de números primos. Incluiremos también en nuestra representación numérica la "fórmula vacía" -que representa la "molécula sin átomos"-, a la que asignamos el número 1.

- Una relación $M(a_i, a_j)$, $a_i, a_j \in C$, que establece que a_i y a_j son conjuntos de puntos estacionarios o sucesiones de puntos estacionarios que contienen el mismo número y tipo de átomos del conjunto inicial PI . Esta relación también puede establecerse haciendo una partición del conjunto C utilizando la "función de masa" m propuesta por B. Lauth (véase Lauth 1989).

- Una relación $R(a_i, a_j)$, $a_i, a_j \in C$, que debe entenderse como que a_i y a_j son dos estados del sistema, antes y después de la reacción química. Este predicado puede definirse por ejemplo, en el contexto de la teoría de hipersuperficies de energía potencial, en términos de la accesibilidad y de la estabilidad energética de las configuraciones moleculares (puntos estacionarios) a_i y a_j . También, en el formalismo de B. Lauth, R puede definirse como una combinación de los dos estados implicados en una reacción química y las clases de equivalencia definidas por la función m . Nótese que la energía -la función que nos permite definir las hipersuperficies en el contexto teórico de Mezey- no es el único criterio que se puede utilizar para definir una relación de quasi orden como R . En la tradición química existen una gran cantidad de "potenciales" o criterios cuantitativos que nos permitirían definir relaciones de las mismas características, como la energía libre, el potencial de oxidación, o la fuerza ácido-base.

- Finalmente, definimos la relación $I(a_i, a_j)$, $a_i, a_j \in C$, que se verificará cuando dos estructuras a_i y a_j tengan el mismo valor de energía, o de cualquier otro "potencial" que se haya utilizado en la definición de R . Y puede ser definida en función de R , como veremos más adelante, pero es conveniente utilizar una notación específica para destacar esta relación.

La definición propuesta de una representación $B \in \text{Rep}(C)$ de un sistema de tipo C puede resultar muy abstracta. Por eso, en primer lugar, y con el fin de motivar la definición formal que daremos después, vamos a construir un ejemplo de un sistema B . Supongamos que queremos definir un conjunto de fórmulas químicas empezando por el -sólo potencialmente posible- estudio teórico de todas las estructuras moleculares formadas por átomos de carbono y de hidrógeno. Nuestro sistema de tipo C contiene por lo tanto todas las estructuras moleculares estables que pueden definirse a partir de combinaciones de cualquier número de estos átomos, así como sucesiones de estas estructuras, y las interacciones que aparecen entre ellas. Esto significa que tenemos definidas las relaciones M y R , y por lo tanto la I . Podemos definir una representación B_1 de este sistema muy fácilmente:

a) En primer lugar, asignamos el número primo 2 al átomo de carbono aislado C , y el 3 al átomo aislado H . Consideremos un elemento $a_i \in C$. Siempre podremos encontrar un $a_j \in C$ tal que $M(a_i, a_j)$, y que tiene asignado un número de la forma $2^n 3^m$, es decir, que está definido por un conjunto de átomos considerados aislados.

b) Por lo tanto, si a_j es un elemento de C como el que hemos dado en a), podemos definir una aplicación

$$\varphi_1: C \rightarrow C$$

de manera que para todo a_i tal que $M(a_i, a_j)$, se define $\varphi_1(a_i) = a_j$. Es fácil comprobar que si tomamos todos los elementos de C que tengan asociados números de la forma $2^n 3^m$, siendo n y m números naturales, la aplicación está bien definida.

c) Podemos definir además la aplicación

$$\varphi_2: \varphi_1(C) \rightarrow N \times N$$

como $\varphi_2(a_j) = (n, m)$, y la función

$$\varphi_3: N \times N \rightarrow C_N H_M$$

como $\varphi_3((n, m)) = C_n H_m$, donde $C_N H_M = \{C_n H_m : n, m \in N\}$ es el conjunto de elementos de nuestra representación B_1 .

La definición más sencilla de las relaciones R y M en la representación B_1 es la siguiente:

$$R = \{R(C_nH_m, C_nH_m):n,m \in N\} \text{ y } M = \{M(C_nH_m, C_nH_m):n,m \in N\}.$$

El lector puede comprobar con facilidad que la composición de aplicaciones $\varphi_3 \circ \varphi_2 \circ \varphi_1$ es un homomorfismo para las funciones y relaciones definidas en el sistema de tipo C inicial, y que además es suprayectiva. Utilizaremos estas condiciones para la definición que a continuación haremos del conjunto $\text{Rep}(C)$.

A partir de esta representación B_1 , que representa exactamente el número de átomos de C y H que contiene un sistema físico formado por átomos de C y H, podemos definir la representación B_2 , mediante la aplicación φ_4 que asigna a toda fórmula del tipo C_nH_m la fórmula C_rH_s , donde r y s son el resultado de dividir n y m por el máximo común divisor de n y m, respectivamente. B_2 constituye el conjunto de las llamadas fórmulas estequiométricas o empíricas, y es una representación clásica en química.

Estos ejemplos de sistema de tipo C y de dos representaciones de C evidencian que en general los sistemas de tipo C son estructuras formales significativamente diferentes a las estructuras formales que son sus representaciones. La primera pregunta que se plantea, cuando se pretende analizar la relación entre C y $\text{Rep}(C)$ es la siguiente: ¿Es posible encontrar una representación de C que no sea isomorfa a C que verifique exactamente el mismo conjunto de sentencias de $L(C)$ que C? Si la respuesta a esta pregunta fuera sí, sería posible obtener *representaciones significativas* de sistemas simbólicos en química diferentes -y potencialmente más simples- de los que se deducen directamente de la construcción de los sistemas de tipo C. El resultado formal fundamental de este trabajo -el teorema 2.4- demuestra sin embargo que esto no es posible. En el lenguaje técnico de la teoría de modelos, estudiar esta cuestión consiste en determinar los submodelos elementales de C que satisfacen las condiciones algebraicas mediante las cuales definimos las representaciones de C. Hemos estudiado por lo tanto la \aleph_0 categoricidad de los sistemas de tipo C, y hemos demostrado la siguiente proposición, que implica la anterior: Si B es una representación de C que es elementalmente equivalente respecto del lenguaje $L(C)$ al mismo C, entonces B es isomorfo a C. Además, la aplicación que define este isomorfismo es la misma que define a la propia representación B.

2. Sistemas de tipo C. La clase de las representaciones de un sistema de tipo C

2.1. Definición. Llamamos un *sistema de tipo C* a una estructura algebraica de signatura $(2,0;2,2,2)$ que contiene un conjunto C , una operación binaria \bullet , una relación de cuasi-orden R , y dos relaciones de equivalencia M, I , de manera que:

1- $C = \{1\} \cup \{a_i \mid i \in \mathbf{N}\}$. Denotaremos mediante los símbolos p_i a algunos elementos especiales de C .

2- Operación \bullet . Se debe cumplir $(C, \bullet) \cong (\mathbf{N} - \{0\}, \cdot)$, la estructura multiplicativa de los números naturales. Así, para todo $a_i \in C$, $a_i \bullet 1 = a_i$.

3- Relaciones: R debe ser una relación de cuasi-orden (reflexiva y transitiva).

M e I son relaciones de equivalencia (reflexivas, simétricas y transitivas), donde la definición de I viene dada por: $I(a_i, a_j)$ si y sólo si $R(a_i, a_j)$ y $R(a_j, a_i)$. Además,

$$(1, 1) \in I \subset R \subset M.$$

y si $a_i \in C$ verifica $M(1, a_i)$, entonces $a_i = 1$.

4- Para todo $a_i \in C$, definimos $Ma_i = \{a_j \in C \mid M(a_i, a_j)\}$, que es la clase de equivalencia de a_i según la relación M . Entonces $|Ma_i|$ es finito para todo $a_i \in C$, y por lo tanto el cardinal del cociente $|C/M|$ es el de los números naturales.

5- Existe un subconjunto finito $PI \subset C$ de manera que para todo $a_i \in C$ existe un $a_j \in PI$ tal que $M(a_i, a_j)$ que cumple que $a_j = p_{j1} \bullet \dots \bullet p_{jk}$, siendo $p_{jr} \in PI$, $1 < r \leq k$, donde k depende de cada j . En particular, para todo $p \in PI$, $Mp \subset PI$, y si $a \notin PI$, $Ma \cap PI = \emptyset$. Este conjunto PI representa al conjunto de estados fundamentales de todos los tipos de átomos que forman C^8 .

6.- Consideremos el conjunto $P = \{a_i \mid \forall a, a_m \in C - \{1\}, a_k \bullet a_m \neq a_j\}$. Entonces para todo $a_i \in C \exists a_j \in P$ tal que $M(a_i, a_j)$. Además, $PI \subset P$.

2.2. Definición. Sea $a_i \in C$. Definimos la longitud $\lambda(a_i)$ de a_i como:

$$\lambda(a_i) = n \quad \text{si y sólo si} \quad a_i = a_{i1} \bullet \dots \bullet a_{in} \text{ siendo } a_{ji} \in P \text{ para todo } j.$$

De acuerdo con esto, podemos definir la longitud de un conjunto de la forma $Ma_i \in C/M$ como $\lambda(Ma_i) = \max\{\lambda(a_i) \mid M(a_i, a_i)\}$.

Asumiremos que los sistemas de tipo C verifican también, con respecto a la longitud, la siguiente propiedad: Sea $a_i \in C$; si $\lambda(Ma_i) = \lambda(a_i) = n$, siendo $a_i \in Ma_i$, entonces $a_i = p_{j_1} \bullet \dots \bullet p_{j_n}$, donde $p_{j_r} \in PI$ para todo $1 \leq r \leq n$.

Por otra parte, en la demostración de las siguientes proposiciones necesitaremos la siguiente definición: $M'_m = \{Ma_i \mid \lambda(Ma_i) \leq m\}$. Se puede comprobar fácilmente que M'_m es finito para todo m . En las demostraciones que siguen utilizaremos dos índices para mayor claridad.

2.3. Definición⁹

Sea B un sistema que contenga la constante 1, una función y tres relaciones como las de C, que verifican el tercer punto de la definición de C dada en 2.1. Decimos que B es una *representación* de C si existe una aplicación suprayectiva φ de C en B que satisface:

- 1- Para cada $b_i \in B$ existe un $a_i \in C$ tal que $\varphi(a_i) = b_i$.
- 2- Para todo $a_i, a_j \in C$, $\varphi(a_i \bullet a_j) = \varphi(a_i) \bullet \varphi(a_j)$; En particular, $\varphi(1) = 1$.
- 3- Sea L una de las relaciones R, M o I. Entonces, para todo $a_i, a_j \in C$, si se cumple $L(a_i, a_j)$, entonces se cumple $L(\varphi(a_i), \varphi(a_j))$.

En otras palabras, φ es un homomorfismo suprayectivo de C sobre B. Llamaremos $Rep(C)$ al conjunto de todas las representaciones de C.

Definimos el lenguaje formal $L(C)$ que utilizaremos como un lenguaje de primer orden que contiene al menos una constante (1), una función (f) -para denotar al producto- y cuatro predicados (M, I, R, =). Denotaremos a las variables como x_i, y_i o x_{ij} , $i, j \in \mathbf{N} - \{0\}$. Utilizaremos la relación de equivalencia elemental para estudiar las relaciones entre sistemas de tipo C y los conjuntos de sus representaciones $Rep(C)$. Recuérdese que se dice que entre dos sistemas formales A y B se da una relación de *equivalencia elemental* respecto al lenguaje L (y se expresa como $A \equiv B$) si toda proposición del lenguaje L que es cierta en A lo es también en B, y viceversa.

El resultado formal fundamental de este trabajo es el siguiente teorema. Nuestra demostración es bastante técnica, por lo que la hemos dividido en una serie de lemas. Sin embargo, dadas las características de los sistemas de tipo C y de sus representaciones, el lector conocedor de la teoría de modelos se dará cuenta de que el resultado es bastante

intuitivo. La notación utilizada es la habitual en la teoría de modelos y en la teoría de conjuntos. Si A es un conjunto, $|A| \in \mathbf{N}$ es su cardinal.

2.4. Teorema. Consideremos un sistema de tipo C . La única representación $B \in \text{Rep}(C)$ que es elementalmente equivalente a C en $L(C)$, es C .

Demostración. Se trata de probar la coimplicación $B \equiv C \leftrightarrow B \equiv C$. Como $B \equiv C \rightarrow B \equiv C$ es obvio, los siguientes lemas están dirigidos a la demostración de la implicación complementaria. Para agilizar la notación, en toda la demostración, cuando al construir una fórmula de la forma $\alpha \wedge \beta$, alguna variable de β quede abierta, asumiremos que los cuantificadores de α afectan también a β , cerrándola.

2.5. Lema

Sea C un sistema de tipo C y sea $B \in \text{Rep}(C)$. Sea una función $\varphi: C \rightarrow B$ que verifica las condiciones de la definición 2.3. Si existe un $p_i \in PI$ tal que $\varphi(p_i) = 1$, entonces no es cierto que $B \equiv C$.

Demostración

Consideremos el subconjunto PI de C , que existe por definición, de manera que $|PI| = n$, y el conjunto cociente de PI por la relación M es $PI/M = \{M_i \mid 1 \leq i \leq s\}$. Definimos $d_i = |M_i|$ para todo $1 \leq i \leq s$. Consideremos la siguientes proposiciones α_i , $1 \leq i \leq s$, del lenguaje $L(C)$:

$$\alpha_i = \exists x_{i1} \dots x_{id_i} \forall x_{id_i+1} \left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} x_{ij} \neq x_{id_i+1} \right) \rightarrow \left[\left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} M(x_{i1}, x_{ij}) \right) \wedge \left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} \neg M(x_{ij}, x_{id_i+1}) \right) \wedge \right. \\ \left. \wedge \left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} \bigwedge_{j < k} x_{ij} \neq x_{ik} \right) \wedge \left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} x_{ij} \neq 1 \right) \right]$$

Ahora, definimos las proposiciones α_0 y β_1 como:

$$\alpha_0 = \left(\bigwedge_{i=1}^s \alpha_i \right) \wedge \left(\bigwedge_{t=1}^s \bigwedge_{t < r} \neg M(x_{t1}, x_{r1}) \right)$$

$$\beta_1 = \forall y_1 y_2 \left(\bigwedge_{i=1}^s \bigwedge_{j=1}^{d_i} \neg M(f(y_1, y_2), x_{ij}) \wedge y_1 \neq 1 \wedge y_2 \neq 1 \right)$$

(recordemos que, en nuestra notación, $\alpha_0 \wedge \beta_1$ está cerrada por los cuantificadores de las α_i).

Obviamente, $\alpha_0 \wedge \beta_1$ es una proposición de $L(C)$, que sólo es satisfacible en C cuando asignamos elementos p_i de PI a las variables x_{ij} (véase el punto 5 de la definición 2.1.).

Para demostrar el lema, veamos en primer lugar que si existe algún $a_i \in C$ tal que $\varphi(a_i) = 1$, y $B \equiv C$, entonces para cada $a_j \in Ma_i$, $\varphi(a_j) = 1$. Pero esto es fácil de comprobar, ya que la proposición

$$\forall x M(1, x) \rightarrow x = 1$$

se verificaría en C y no en B si se dan estas condiciones.

A continuación, supongamos que existe un $p_i \in PI$ tal que $\varphi(p_i) = 1$. Veamos que eso implica que existe una sentencia α_i que no puede ser satisfecha con elementos de $\varphi(C)$. Si $\varphi(p_i) = 1$, entonces, para cada $p_{ij} \in Mp_i$, $\varphi(p_{ij}) = 1$. Por lo tanto, $\varphi(Mp_i)$ no satisface $\alpha_i \wedge \beta_1$. Por otra parte, si existe algún $a_j \in C-PI$ tal que $\varphi(Ma_j)$ satisface $\alpha_i \wedge \beta_1$ entonces existe un $a_k \in Ma_j$ tal que $\varphi(a_k) \neq 1$ y $a_k = p_{1k} \bullet \dots \bullet p_{rk}$, donde $r \geq 2$ y $p_{rk} \in PI$. Como φ es un homomorfismo, tenemos que $\varphi(a_k) = \varphi(p_{1k}) \bullet \dots \bullet \varphi(p_{rk})$, y, por la condición impuesta por β_1 , existe un p_r tal que $\varphi(a_k) = \varphi(p_r) \neq 1$, $p_r \in PI$, y $p_r \neq p_i$. Entonces, para cada $a_r \in Ma_j$, tenemos que $\varphi(a_r) \in M_{\varphi(p_r)}$, y entonces $M_{\varphi(p_r)}$ satisface α_i o α_r , pero no satisface $\alpha_0 \wedge \beta_1$, ya que para eso es necesario que se satisfagan α_i y α_r por conjuntos de elementos *diferentes* del modelo. En otras palabras, y razonando igual para todo $a_j \in C-PI$, siempre podemos encontrar una proposición α de $L(C)$ tal que para cada $a_i \in C$, α no se satisface con $\varphi(Ma_i)$. Esto concluye la demostración. □

2.6. Lema

Para cada $a_i \in C$, si $\lambda(Ma_i) = n$ y $B \equiv C$, entonces $\lambda(M\varphi(a_i)) \geq n$.

Demostración

Para cada $a_i \in C$ existe un $a_j \in C$ tal que $M(a_i, a_j)$ y $a_j = p_{1j} \bullet \dots \bullet p_{nj}$, $p_{ij} \in PI$. Entonces $\lambda(Ma_i) = n$. Como φ es un homomorfismo, se cumple

$$M(a_i, a_j) \rightarrow M(\varphi(a_i), \varphi(a_j)),$$

donde además $\varphi(a_j) = \varphi(p_{1j}) \bullet \dots \bullet \varphi(p_{nj})$. El resultado es una consecuencia por lo tanto del lema 2.5.

□

2.7. Lema

Sea $B \in \text{Rep}(C)$. Sea φ un aplicación de C en B como en la definición 2.3. Entonces, si $B \cong C$, φ es inyectiva.

Demostración

1) Para demostrar este lema construiremos una proposición $\alpha_{\lambda n}$ del lenguaje $L(C)$ que sólo se satisface cuando la asignación de valores en las variables que aparecen en ella se hace en los clases Ma_i tales que $\lambda(Ma_i) \leq n$. El número de clases de equivalencia que satisfacen esta restricción es finita por la definición de los sistemas de tipo C ; es decir, el cardinal de M'_n es $s \in \mathbb{N}$. Denotamos por el signo d_i al cardinal de M_i , si $M_i \in M'_n$.

Definamos a continuación, para cada uno de estos M_i , la proposición:

$$\alpha_i = \exists x_{i1} \dots x_{id_i} \forall x_{id_i+1} \left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} x_{id_i+1} \neq x_{ij} \right) \rightarrow \left[\left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} M(x_{i1}, x_{ij}) \right) \wedge \left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} \neg M(x_{ij}, x_{ij+1}) \right) \wedge \right. \\ \left. \wedge \left(\bigwedge_{j=1}^{d_i} \bigwedge_{j < k} x_{ij} \neq x_{ik} \right) \right]$$

Construimos también la siguiente proposición de $L(C)$:

$$\beta_n = \left(\bigwedge_{i=1}^s \alpha_i \right) \wedge \left(\bigwedge_{i=1}^s \bigwedge_{i < j} \neg M(x_{i1}, x_{j1}) \right)$$

Si imponemos explícitamente la condición $\lambda(M_i) \leq n$, entonces obtenemos la proposición:

$$\alpha_{\lambda n} = \beta_n \wedge (\forall y_1 \dots y_{n+1} \bigvee_{i=1}^s \bigvee_{k=1}^{d_i} f(y_1, f(y_2, f(\dots y_{n+1}) \dots)) = x_{ik} \rightarrow \bigvee_{j=1}^{n+1} y_j = 1)$$

2) Comprobemos que esta proposición sólo se verifica en B si φ es inyectiva. Para ello, en primer lugar, notemos que podemos definir una partición de C como la dada por los conjuntos C_n y C_r siguientes:

$$C_n = \{a_i \in Ma_j \mid Ma_j \in M'_n\}, \quad C_r = C - C_n.$$

Supongamos ahora que φ no es inyectiva. Entonces, podemos encontrar dos elementos de C, a_i y a_j , tales que $a_i \neq a_j$ y $\varphi(a_i) = \varphi(a_j)$, y tenemos dos elementos a'_i y a'_j de las clases de a_i y a_j respectivamente, en los cuales se alcanza la longitud de esas clases; es decir,

- Existe un elemento a'_i de la forma $a'_i = p_{i1} \bullet \dots \bullet p_{iv}$, siendo $p_{ir} \in PI$, que cumple $M(a_i, a'_i)$, y $\lambda(a'_i) = \lambda(Ma_i) = v$.
- Existe un elemento a'_j de la forma $a'_j = p_{j1} \bullet \dots \bullet p_{jv}$, siendo $p_{jr} \in PI$, que cumple $M(a_j, a'_j)$, y $\lambda(a'_j) = \lambda(Ma_j) = m$.

Ahora, consideramos una sentencia de la forma $\alpha_{\lambda n}$ donde $n = \max\{v, m\}$. Entonces:

a) Por una parte, no existe ninguna asignación para las variables x_{ij} que vienen afectadas por un cuantificador \exists en $\varphi(C_r)$ que satisfaga la proposición $\alpha_{\lambda n}$, ya que si $a_k \in C_r$, entonces $\lambda(M\varphi(a_k)) > n$, y la proposición $\alpha_{\lambda n}$ no se cumple.

b) Por otra parte, supongamos que asignamos algunos de los elementos de $\varphi(C_n)$ a las variables x_{ij} que tienen el cuantificador \exists en la fórmula. Esta asignación tampoco satisface la fórmula, ya que $|\varphi(C_n)| < |C_n|$, y necesitamos exactamente $|C_n|$ elementos para satisfacer $\alpha_{\lambda n}$.

Por lo tanto, como estos dos casos completan el conjunto de todas las asignaciones posibles a las variables de $\alpha_{\lambda n}$, concluimos que si $B \equiv C$, entonces φ es inyectiva.

□

Final de la demostración del teorema

Supongamos que $B \equiv C$. Consideremos la aplicación φ de C en B que define el homomorfismo de la definición de representación. Del lema anterior, sabemos que φ es inyectiva. Por lo tanto, φ define una biyección de C en B . Veamos si además todas las relaciones son también equivalentes en C y en B .

1) En primer lugar, por la definición de φ , se cumple que $\varphi(a_i \bullet a_j) = \varphi(a_i) \bullet \varphi(a_j)$ para todo par de elementos a_i, a_j de C . Luego, con respecto al producto, las estructuras son isomorfas.

Por otra parte, con respecto a las tres relaciones M, I y R , como φ es un homomorfismo, siempre se cumple que $L(a_i, a_j)$ implica $L(\varphi(a_i), \varphi(a_j))$, siendo $L=M, I$ o R . Sólo es necesario demostrar por lo tanto las implicaciones complementarias para las tres relaciones.

2) *Relación M*: Supongamos que existen elementos a_k, a_m de C tales que $M(\varphi(a_k), \varphi(a_m))$ y $\neg M(a_k, a_m)$. Consideremos la proposición $\alpha_{\lambda n}$ del lema anterior, siendo $n = \max\{\lambda(Ma_k), \lambda(Ma_m)\}$. Entonces, supongamos que $\alpha_{\lambda n}$ se satisface, siguiendo la notación de la demostración del lema anterior, si el cardinal de M'_n es s . Por las características de $\alpha_{\lambda n}$, sabemos que entonces sólo se satisface si $|M'_n| = s$. Pero por hipótesis, $|M'_n| \leq (s-1)$ en $\varphi(C)$, y como $B \equiv C$, llegamos a una contradicción.

3) *Relación R*: Supongamos que existen elementos a_k, a_m de C_n (siendo la definición de este conjunto como en el lema anterior) tales que $R(\varphi(a_k), \varphi(a_m))$ y $\neg R(a_k, a_m)$. Definamos los siguientes conjuntos:

$$R' = \{(a_i, a_j) \mid R(a_i, a_j), a_i, a_j \in C_n\}$$

$$R'' = \{(a_i, a_j) \mid \neg R(a_i, a_j), a_i, a_j \in C_n\}.$$

Los dos conjuntos forman una partición de $C_n \times C_n$. Consideremos una asignación semántica j de elementos de C a las variables x_{ij} que satisfaga $\alpha_{\lambda n}$. Podemos construir la siguiente fórmula:

$$\beta_{Rn} = \left(\bigwedge_{(j(x_{ij}), (x_{ik})) \in R'} R(x_{ij}, x_{ik}) \right) \wedge \left(\bigwedge_{(j(x_{im}), (x_{rm})) \in R''} \neg R(x_{im}, x_{rm}) \right)$$

Obviamente, la asignación j satisface β_{Rn} . Ya hemos demostrado que si $C \equiv B$, entonces $|C_n| = |\varphi(C_n)|$. Por lo tanto podemos definir

$$\begin{aligned} \varphi(R') &= \{(\varphi(a_i), \varphi(a_j)) \mid R(\varphi(a_i), \varphi(a_j)), a_i, a_j \in C_n\} \\ \varphi(R'') &= \{(\varphi(a_i), \varphi(a_j)) \mid \neg R(\varphi(a_i), \varphi(a_j)), a_i, a_j \in C_n\} \end{aligned}$$

Como $R(\varphi(a_k), \varphi(a_m))$ y $\neg R(a_k, a_m)$, tenemos que $|\varphi(R')| > |R'|$ y que $|\varphi(R'')| < |R''|$. Consideremos la proposición $\alpha_{\lambda n} \wedge \beta_{Rn}$. Nótese que β_{Rn} está cerrada por los cuantificadores de $\alpha_{\lambda n}$. Ahora, obsérvese que si i es una asignación cualquiera para las variables x_{ij} que estén afectadas por cuantificadores \exists que satisface $\alpha_{\lambda n}$, entonces $i(x_{ij}) = i(x_{im})$ si y sólo si $x_{ij} = x_{im}$, y $i(x_{ij}), i(x_{im}) \in \varphi(C_n)$. De acuerdo con esto, dada una asignación k en $\varphi(C)$, k no puede satisfacer β_{Rn} , ya que existe otro par (x_{ij}, x_{im}) tal que $R(x_{ij}, x_{im})$. Esto demuestra que $R(a_i, a_j)$ si y sólo si $R(\varphi(a_i), \varphi(a_j))$.

Por último, lo mismo se cumple para I , ya que este predicado está definido a partir de R . Esto concluye la demostración del teorema.

□

2.8. Nota. Una aplicación directa de los resultados fundamentales de la teoría de modelos nos permite generalizar automáticamente los resultados obtenidos a extensiones $L'(C)$ del lenguaje $L(C)$ definidas como $L(C) = L(C) \cup S$, siendo $S = \{c_i; i \in \mathbb{N}\}$ un conjunto de constantes. La inclusión de constantes en el sistema formal puede ser necesaria para denotar algunos elementos de C específicos; por ejemplo, si queremos que el signo H_2 siempre sea asignado a dos átomos de H que forman una molécula, es necesario introducir $H_2 = c_1$ como constante en el lenguaje.

3. Conclusiones

Desde el punto de vista formal, hemos demostrado en el apartado anterior que no es posible mantener invariante la teoría asociada a la interpretación molecular de la química cuando intentamos utilizar otra representación que sea propiamente más pequeña -un sistema de tipo B- que la originalmente aceptada -un sistema de tipo C. Este es el resultado principal de nuestro trabajo. Recordemos que, desde el punto de vista de la teoría de modelos, entendemos como teoría el conjunto de sentencias que son ciertas en el lenguaje $L(C)$. Por lo tanto, en cualquier representación que propongamos "para hablar de química" -siempre que aceptemos como válida nuestra definición de representación-, como puede ser por ejemplo la formulación química establecida por la IUPAC, el conjunto de sentencias válidas es *diferente* del conjunto de sentencias válidas en el sistema de tipo C correspondiente, que nos da la interpretación microscópica. Por lo tanto, y esta es nuestra conclusión principal, la aplicación de la química cuántica para la interpretación molecular de la química *hace depender la teoría de la química tanto de la propia interpretación microscópica como de la estructura del sistema simbólico utilizado para expresarla*. Así, la representación B_1 que hemos construido anteriormente como ejemplo, verifica un conjunto de sentencias que es diferente del que satisface el sistema de tipo C correspondiente, ya que el homomorfismo asociado a esta representación no es biyectivo. Por ejemplo, la proposición

$$\forall x_1, x_2 M(x_1, x_2) \rightarrow R(x_1, x_2)$$

es verdadera en B_1 y falsa en C.

La demostración de esta dependencia de la estructura del sistema simbólico utilizado como representación conlleva la necesidad de hacer un estudio formal de la propia representación, para poder distinguir qué propiedades son una consecuencia de la estructura molecular de la materia y cuáles son simplemente consecuencias lingüísticas. El uso de una representación -en el sentido técnico que nosotros le damos al término- introduce siempre una generalización, ya que según nuestra definición implica la utilización de un sólo símbolo para la representación de diferentes configuraciones moleculares, y por lo tanto, lo que se afirma para este único símbolo, se está afirmando para todo el conjunto de estructuras que se asocian a tal signo. Podemos concluir, por lo tanto, que el estudio microscópico mediante la química cuántica no puede en general conducirnos directamente a la formulación de

sentencias propias de la química; antes es necesario estudiar cuál es la estructura de la representación utilizada, y si nuestra conclusión es formulable en este lenguaje sin que cambie su significado.

Notas

- ¹ Existen modelos teóricos basados en la mecánica cuántica que utilizan propiedades derivadas de la formación de grandes colectivos de moléculas, modelizando directamente líquidos o sólidos. Sin embargo, este enfoque -propio de la física del estado sólido, por ejemplo- no es el usual en química cuántica, donde la modelización de las moléculas simples sigue siendo el planteamiento más habitual. El número de trabajos científicos que se publican al año con esta metodología puede ser del orden de decenas de miles.
- ² Es bien sabido que en química los sistemas de representación son fundamentales, como confirma la larga tradición histórica de la nomenclatura y la formulación químicas.
- ³ Esta aproximación, que es fundamental en la aplicación que hace la química teórica de la mecánica cuántica no relativista se puede resumir diciendo que las coordenadas de los núcleos atómicos se pueden considerar fijas en un momento dado, siendo sólo necesario estudiar el sistema desde el punto de vista cuántico para los electrones (véase por ejemplo, Pilar 1968).
- ⁴ En este trabajo aceptamos, como se hace habitualmente, que sólo un número finito de puntos estacionarios "con sentido químico" puede ser obtenido a partir del estudio de una superficie de energía potencial.
- ⁵ Este planteamiento hace que debamos ubicar nuestro trabajo dentro del contexto del estructuralismo. Nuestra insistencia al respecto de que el conjunto de relaciones y funciones es el mínimo posible es un intento de evitar unos planteamientos excesivamente reduccionistas: siempre podríamos introducir más relaciones, si lo consideráramos necesario.
- ⁶ Bernhard Lauth ha investigado algunos problemas de referencia en el formalismo de la química. Nuestro trabajo, sin embargo, ilustra otro punto de vista diferente del suyo para enfrentarse a este problema. El lector puede encontrar algunas ideas relacionadas, siguiendo el enfoque estructuralista, en Balzer y col. (1987), y Hettema y col. (1988). En concreto, nosotros optamos por una determinación de la referencia de las fórmulas químicas en la propia teoría cuántica, no como Lauth, que trabaja en una asignación empírica. Desde este punto de vista, nuestro enfoque reduce el problema, en realidad, a la compatibilidad de los formalismos implicados.
- ⁷ Este párrafo debe entenderse como un teorema de representación, en el contexto de la teoría de modelos, aunque no lo demostramos formalmente, ya que consideramos que la prueba es directa, pero muy larga.
- ⁸ Obsérvese que, aunque impongamos que el conjunto Π sea finito, el conjunto C definido en el punto 1 no debe serlo. Nuestra intención es que el conjunto C contenga al menos *todas* las posibles combinaciones de *cualquier número* de elementos de Π , puesto que pretendemos poder representar sistemas compuestos de cualquier número de átomos. C es por lo tanto un conjunto infinito numerable. Esto puede comprobarse en los ejemplos de sistema de tipo C y de

representación dados al final de la sección anterior, donde PI sólo contiene dos elementos, y C es infinito.

- ⁹ Hemos definido *representación* como un homomorfismo de la estructura que queremos representar (el sistema C) sobre algunas estructuras concretas. Esta definición, adaptada a nuestro planteamiento, es similar (pero no igual) a la propuesta por Mundy (Mundy 1986) como un elemento básico dentro de la teoría general de la representación. Este tipo de definiciones son válidas para sistemas matemáticos, que es el contexto en el que aparecieron. Se podría plantear si es legítima su aplicación a sistemas físicos. En nuestro caso, sin embargo, recordemos que a fin de cuentas nuestro referente es una teoría matemática, puesto que los sistemas de tipo C son sistemas formales.

BIBLIOGRAFIA

- Amann, J.: 1989, 'Theoretical Chemistry en route to a Theory of Chemistry', *Angew. Chem. Int. De. Engl.* 28, 268-276.
- Arteca, G.A., Mezey, P.G.: 1989, 'Molecular Similarity and Molecular Shape Changes along Reaction Paths: A Topological Analysis and Consequences on the Hammond Postulate', *Journal of Physical Chemistry* 93, 4746-4751.
- Balzer, W., Moulines, C.U., Sneed, J.D.: 1987, 'The Structure of Daltonian Stoichiometry', *Erkenntnis* 26, 103-127.
- Bogaard, P.A.: 1978, 'The Limitations of Physics as a Chemical Reducing Agent', *PSA* 1978, Vol. 2, 345-356.
- Chang, C.C., Keisler, H.J.: 1973, *Model Theory*, Amsterdam, North-Holland.
- Hettema, H., Kuipers, T.A.F.: 1988, 'The Periodic Table -Its formalization status, and relation to atomic theory', *Erkenntnis* 28, 387-408.
- Lauth, B.: 1989, 'Reference problems in Stoichiometry', *Erkenntnis* 30, 339-362.
- Manzano, M.: 1989, *Teoría de Modelos*, Madrid, Alianza Universidad.
- Mezey, P.G.: 1982, 'Quantum Chemical Reaction Networks, Reaction Graphs and the Structure of Potential Energy Hypersurfaces', *Theoretica Chimica Acta* 60, 409-428.
- Mezey, P.G.: 1987, *Potential Energy Hypersurfaces*, Amsterdam, Elsevier.
- Mundy, B.: 1986, 'On the General Theory of Meaningful Representation', *Synthese* 67, 391-437.
- Pilar, F.L.: 1968, *Elementary Quantum Chemistry*, New York, McGraw-Hill.

- Primas, H.: 1981, *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*, Berlin, Springer-Verlag.
- Szabo, A., Ostlund, N.S.: 1982, *Modern Quantum Chemistry*, New York, McGraw-Hill.
- Van Brakel, J.: 1986, 'The Chemistry of Substances and the Philosophy of Mass Terms', *Synthese* 69, 291-324.

Enrique A. Sánchez Pérez (1965) es licenciado con grado en Ciencias Químicas, en Ciencias Matemáticas y en Filosofía y Ciencias de la Educación por la Universitat de Valencia, donde obtuvo también la Suficiencia Investigadora en el área de la Química Física (Química Teórica). Es doctor en Matemáticas por la Universitat Politècnica de Valencia, donde ha sido becario y actualmente es profesor asociado. Ha publicado su trabajo principalmente en revistas nacionales e internacionales especializadas de Matemáticas (Análisis Funcional), así como algunos libros de texto de enseñanza universitaria.

José Sánchez Marín (1951) es licenciado y doctor en Ciencias Químicas (especialidad de Química Física) por la Universidad de Valencia, en la que ha realizado la mayor parte de su labor investigadora y docente, y de la que actualmente es catedrático en el área de Química Física (Química Teórica). Ha colaborado en numerosos proyectos de investigación, tanto nacionales como internacionales, en el campo de la Química Teórica y Computacional. Sus contribuciones han sido publicadas en algunas de las más prestigiosas revistas especializadas.