

La vida en tres dimensiones o el espacio biológico bien temperado

Life in three dimensions or the well-tempered biological space

Ruth GARCÍA CHICO y José Luis GONZÁLEZ RECIO

Recibido: 15/12/2006

Aceptado: 31/01/2007

La interpretación física de la geometría aquí sostenida no acepta, en su ampliación inmediata, la existencia de espacios de orden submolecular. Conserva a pesar de ello una parte de su significado al afrontar las preguntas sobre la constitución de las partículas elementales. Pues se puede intentar dar un significado físico a aquellos conceptos acerca de los campos que se han definido para la descripción del comportamiento geométrico de grandes cuerpos a partir de sus moléculas, así como a las partículas eléctricas que constituyen la materia. Sólo el éxito del resultado puede decidir acerca de lo justificado de un ensayo que atribuya una realidad física a los conceptos básicos de la geometría rimaniana, por encima de su dominio de definición. Podría ser que esta extrapolación evidenciara ser tan poco apta como la extrapolación del concepto de temperatura a partes de un cuerpo de orden molecular. (Albert Einstein, *Geometría y experiencia*, 1921)

Resumen

La convicción de que los fenómenos y procesos naturales podían ser representados en un espacio físico regido por la geometría euclídea actuó en la ciencia clásica como supuesto epistemológico fundamental de la creación teórica. La posibilidad de un análisis matemático del continuo garantizaba, en efecto, una descripción

intuitiva y pictórica de las trayectorias de los móviles estudiadas por la dinámica, así como una determinación precisa de los efectos producidos en el seno de las relaciones causales. Fueron convicciones y supuestos que tuvieron que ser revisados en el momento en que el cuanto de acción de Planck obligó a desarrollar una nueva física de los sistemas atómicos. Las consecuencias, no obstante, se dejarían sentir no sólo en el ámbito de la Física sino en todas aquellas regiones de la ciencia natural, como la Biología, que tenían que construirse bajo la cobertura conceptual de la naciente mecánica. El presente trabajo es una reflexión sobre los problemas filosóficos planteados en el encuentro entre la física del átomo y la química de las moléculas.

Palabras clave: Átomo, molécula, continuo, Geometría, enlace químico, instrumentalismo, idealismo, realismo.

Abstract

The certainty that natural phenomena and processes could be represented in a physical space ruled by Euclidean geometry was a fundamental epistemological assumption of theoretical creation in classical science. The possibility of a mathematical analysis of the continuum ensured an intuitive, pictorial description of mobile trajectories as studied in dynamics, as well as a precise determination of the effects generated within causal relations. These convictions and assumptions had to be reviewed when the Plank action quantum forced the development of a new physics of atomic systems. Consequences, nevertheless, transcended the scope of Physics and extended to all regions of natural science, including Biology, which had to be built under the conceptual coverage of the nascent mechanics. The present work is a reflection on the philosophical problems posed by the encounter of physics of atoms and chemistry of molecules.

Keywords: Atom, molecule, continuous, Geometry, chemical bond, instrumentalism, idealism, realism.

1. Preludio

El descubrimiento de los límites inherentes a las intuiciones y los conceptos fundamentales de la ciencia clásica, cuando en el primer tercio del siglo XX quisieron trasladarse al mundo atómico, tuvo profundas consecuencias filosóficas de orden lógico, ontológico y epistemológico. Concretamente, la desaparición de la

continuidad, como fundamento del análisis matemático y como garantía de las representaciones espaciales, provocó efectos de gran alcance en el enraizamiento filosófico de la Física, en su articulación formal y en la interpretación que cabía hacer precisamente del formalismo cuántico, si es que la visualización pictórica de los fenómenos naturales había de acompañar de manera necesaria a la creación de teorías. Es un lugar común que la revolución cuántica produjo una revisión tan esencial de los principios que habrían de vertebrar nuestro conocimiento de la Naturaleza, que el cambio de horizonte vinculado a la formulación de la teoría de la relatividad –en sus dos concreciones– se nos ofrece, en realidad, como la culminación de un proceso de vertebración y desarrollo conceptual, de maduración categorial, que tiene ya su origen en la ciencia galileana y que no constituye una quiebra de los ideales filosóficos ligados a la ciencia del siglo XVII. La ruptura impuesta por la exploración del átomo en las primeras décadas del pasado siglo tuvo, sin embargo, un valor muy diferente: era la fractura que devolvía al científico, como inaplicables en un microuniverso en principio desconcertante, sus formas de conceptualización mejor establecidas y más consolidadas. Según no tardó en señalar Niels Bohr, los ecos del nuevo régimen epistemológico a que debía someterse el conocimiento físico se iban a escuchar con rapidez en todos los ámbitos del conocimiento humano, para resonar en cada uno de ellos de forma diferente¹. Fue dentro de la investigación de las formas y las funciones biológicas donde aparecieron proyectadas con mayor brevedad e inmediatez numerosas preguntas derivadas de aquellos primeros resultados experimentales, teóricos y epistemológicos aparecidos en la microfísica. Se ha dicho, con lucidez, que la Morfología y la Fisiología habían atravesado a lo largo de los siglos XVII, XVIII y XIX tres estadios distintos: la época de la fibra, la etapa del tejido y el período de la célula². La organización y las funciones propias de los seres vivos se hicieron depender en esos respectivos momentos del papel arquitectónico y dinámico desempeñado por dichas unidades anatomofisiológicas. Pero el tránsito del siglo XIX al siglo XX vino a consolidar la convicción de que podía definirse un ámbito biológico, tanto de ordenación estructural como de actividad, aún más primario: el nivel molecular³. En 1914 la fisiología general había podido orientarse ya hacia su traducción bioquímica. Los experimentos de Warburg sobre la respiración celular han permitido concluir que la actividad biológica no depende necesariamente –como se había pensado hasta entonces– del irreductible papel desempeñado en ella por los componentes estructurales de los

¹ Cfr. Bohr, N.: *Atomic Theory and the Description of Nature*, Cambridge University Press, 1934; *Atomic Physics and Human Knowledge*, New York, John Wiley & Sons, 1958; *Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge*, New York, John Wiley & Sons, 1963.

² Cfr. Laín Entralgo, P.: *Historia de la medicina*, Barcelona, Salvat, 1978, pp. 422-424.

³ Cfr. Jacob, F.: *La logique du vivant : une histoire de l'hérédité*, Paris, Gallimard, 1971, (capítulo 5).

organismos⁴. Ni siquiera los orgánulos celulares parecían cumplir una misión, en cuanto entidades microanatómicas primarias, que resultara imprescindible para la dinámica de la vida. Las funciones orgánicas aparecían sometidas a la eficacia de una malla compleja de reacciones químicas que soportaba precisamente la conservación de las unidades morfológicas. Las transacciones energéticas entre los seres vivos y su entorno descansaban en la cinética química; la fisiología general se tornaba química biológica. En tal estado de cosas, el sentido reduccionista que el bioquímico podía dar a su trabajo dentro del laboratorio se basaba, por ejemplo, en la determinación de las sustancias que intervenían en los procesos metabólicos, en el descubrimiento de las condiciones que hacían posibles tales procesos, en la tarea atribuible a las enzimas o en el hallazgo de los ciclos y redes de reacciones en los que parecía resultar resumida la actividad fisiológica. No obstante, el enfoque estructural no tardó en reaparecer cuando se constató, más allá de toda duda, que la especificidad funcional o biológica de la actividad bioquímica estaba anudada a la disposición formal de las moléculas biológicas, a su estructura. Nacía la biología molecular.

Contamos con una amplia bibliografía que abarca y analiza en detalle los diferentes aspectos que cabe considerar en el camino que llevó a la constitución y desarrollo de esta rama crucial de las ciencias de la vida⁵. Es suficiente subrayar aquí que la disposición espacial de los átomos en las macromoléculas biológicas pasó a convertirse en una sustancial vía de explicación. Tanto en las corrientes estructuralistas como en las informacionistas, la capacidad de los átomos para conformar moléculas, así como el lenguaje codificado contenido en éstas, descansaban en la naturaleza del enlace químico y en la distribución espacial de las unidades atómicas dentro del compuesto molecular⁶. Comprender la dinámica fisiológica se hacía equiva-

⁴ Warburg, O.H.: "Beiträge zur Physiologie der Zelle", *Erg. Physiol.*, 14(1914), 253-337.

⁵ Olby, R.: *The Path to the Double Helix*, Seattle, University of Washington Press, 1974; Judson, J.F.: *The Eighth Day of Creation*, Nueva York, Simon and Schuster, 1979; Keller, E.F.: *Secrets of Life / Secrets of Death*, Londres, Routledge, 1992 y *Refiguring Life: Metaphors of Twentieth Century Biology*, Nueva York, Columbia University Press, 1995; Kevles, D.J.: "Renato Dulbecco and the New Animal Virology: Medicine, Methods and Molecules", *Journal of the History of Biology*, 26 (1993), 409-442; Lederman, M. y Tolin, S.A.: "OVATOOMB: Other Viruses and the Origins of Molecular Biology", *Journal of the History of Biology*, 26 (1993), 239-254; Summers, W.C.: "How Bacteriophage Came to Be Used by the Phage Group", *Journal of the History of Biology*, 26 (1993), 255-267; Zallen, D.T.: "The 'Light' Organism for the Job: Green Algae and the Photosynthesis Research", *Journal of the History of Biology*, 26 (1993), 269-279; Sarkar, S. (ed): *The Philosophy and History of Molecular Biology: New Perspectives*, Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 1996.

⁶ London y Heitler habían anticipado en la etapa fundacional de la mecánica cuántica una teoría del enlace químico. No obstante, hubo que esperar a los trabajos de Linus Pauling, que culminaron en 1939, para que los diferentes problemas planteados quedaran resueltos (Pauling, L.: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals. An Introduction to Modern Structural Chemistry*, New York, Cornell University Press, 1939).

lente a desentrañar los secretos y claves del microespacio biológico. La Biología se situaba a las puertas de un orden de inteligibilidad –la visualización pictórica en cuanto justificadora del orden natural– con fuerte protagonismo en la ciencia clásica. No es exagerado afirmar que de Kepler a Einstein el poder iluminador de la Geometría se había impuesto con un creciente afianzamiento, y ahora parecía extenderse a los reductos más simples, pero más determinantes, de la economía vital: la teoría biológica se tornaba geometría molecular. Al hacerlo, las ciencias de la vida parecían adquirir las credenciales de firme madurez científica que la Física pudo acreditar desde el siglo XVII. En efecto:

Las moléculas biológicas eran *formas*, disposiciones estables de materia y energía [...]. Mas ¿de qué forma se trataba? Schrödinger subrayó que los caracteres esenciales de las moléculas dependían de su estructura tridimensional. Hablar de forma de las moléculas era hablar de *forma espacial, de orden espacial* [...]. En tal medida, los principios de conservación que pudieran operar en la biología molecular habrían de ser *principios de conservación de las relaciones en el espacio* [...]. El orden espacial acaba convertido, de este modo, en la última razón de lo vital [...]. Es el sueño de la filosofía seducida por el orden geométrico. La misma que movió a Galileo en el siglo XVII. *Cada distancia interatómica, cada ángulo, cada simetría o asimetría tienen una expresión química y un significado biológico*. La actividad fisiológica, las funciones orgánicas, las leyes biológicas devienen relaciones geométricas. La polisemia del término “función” desaparece, y el ideal reduccionista se cumple enteramente, porque la función biológica es en última instancia función geométrica: *la función de la fibra cromosómica depende de su recóndita estructura espacial; las explicaciones funcionales y la teleología han pasado a convertirse en topología*.⁷

No obstante, semejante optimismo hubo de ser contenido muy pronto, dado que las exigencias para una prolongación del sustrato teórico de la física cuántica, hasta convertirlo en soporte legal de la biología molecular, eran exigencias rodeadas de problemas. La situación a que se llegó –tras el largo ascenso de la biología experimental hasta llegar a lo más alto de su soñada nivelación epistemológica con la Física– deparó una gran sorpresa: cuando los biólogos alcanzaron la cumbre de la maduración de sus conceptos, sus métodos y sus resultados –con los que pensaban equipararse a los físicos– éstos se habían marchado de aquella cima, ya no estaban allí; habían comprendido que las supuestas asunciones incuestionables de la física clásica resultaban infundadas. En 1911, Jacques Loeb había presentado al I Congreso de la Liga de Monistas, celebrado en Hamburgo, una comunicación que tituló “La concepción mecanicista de la vida”⁸. En ella, en efecto, hacía del mate-

⁷ González Recio, J.L.: “Galileo y Kant reencontrados. Ciencia y filosofía en los orígenes de la biología molecular”, *Los filósofos y la Biología. Thémata*, 20(1998), pp. 156-157.

⁸ Cfr. Loeb, J.: “The Mechanistic Conception of Life”, en Noel G. Coley y Vance M. D. Hall,

rialismo, el mecanicismo, el determinismo fisiológico y el control y la repetibilidad de las condiciones de la observación condiciones suficientes –también necesarias– para hacer de la Biología una rama de la ciencia natural tan respetable como la Física. Pero, en muy poco tiempo, la mayor parte de las ideas del manifiesto de Loeb en favor del mecanicismo biológico se habían convertido en inaceptables. No lo eran ya ni el antiguo materialismo como tesis ontológica ni el determinismo fisiológico ni la universalidad de los nexos causales ni, tampoco, el control de la observación. Se trataba de un conjunto de estipulaciones que no podían servir para definir las condiciones de una reducción de la teoría de la vida a la teoría de la materia, puesto que en el centro mismo de la física teórica habían quedado abandonadas. Para quienes daban por cierto que el problema de la organización estructural o dinámica de los seres vivos ni podía plantearse ni podía resolverse al margen de las implicaciones filosóficas de la nueva mecánica cuántica, llegaba el momento de prolongar aquellas implicaciones al terreno de la materia-viva⁹. El centro del problema lo constituía la pérdida de la continuidad en el ámbito de la microfísica y sus consecuencias dentro de los dominios de la Biología que forzosamente iban a depender de la física atómica en su vertebración teórica. La *geometría molecular* era un aspecto esencial para la constitución de la naciente biología de las moléculas y, sin embargo, su articulación conceptual resultaba ahora problemática al haberse perdido, con la desaparición de la continuidad, uno de los rasgos esenciales para la visualización pictórica de los enlaces químicos.

2. Fuga (*Del Continuo*)

Lo que nos proponemos mostrar es que muchas de las cuestiones que se suscitaban en aquellos momentos fundacionales mantienen hoy su relevancia y su interés filosófico. Al cabo, lo que estaba en juego eran los fundamentos, la naturaleza y los límites del conocimiento científico dentro de un ámbito de investigación en el que se conjugaban las demandas teóricas de la Física y de la Biología. En efecto, si bien en el dominio atómico hemos de abandonar las representaciones euclídeas para poder construir una teoría física y una interpretación de ella que estén de acuerdo con el formalismo matemático-cuántico, en el mundo molecular necesitamos recuperar las representaciones tridimensionales euclídeas para construir una teoría adecuada, que sea capaz de explicar las propiedades químicas y las funciones biológicas fundamentales de las moléculas. Con objeto de cumplir nuestro propósito, recordaremos en primer lugar la clase de ruptura que supone la mecánica cuántica

Darwin to Einstein. Primary Sources on Science & Belief, Harlow, Longman-The Open University Press, 1980, pp. 240-248.

⁹ Cfr. González Recio, J.L.: *L.c.*, pp. 148-149.

con el marco conceptual clásico y, en concreto, con las intuiciones del espacio euclídeo; abordaremos después la necesidad de tales representaciones en el ámbito molecular; y plantearemos, por último, las interpretaciones filosóficas que se pueden hacer de esta fractura lógica, ontológica y epistemológica, según sea contemplada desde posiciones instrumentalistas, idealistas o realistas.

La descripción clásica de un sistema es una descripción espacial y temporal. Se hace mediante magnitudes cinemáticas y dinámicas vinculadas a un marco espacio-temporal que podemos representarnos visualmente; y ese marco o esos marcos espacial y temporal de la descripción clásica son continuos, tanto para una interpretación realista-newtoniana del espacio y del tiempo como para una interpretación idealista-kantiana de ambos, en cuanto condiciones de todo fenómeno. Así, cualquier sistema se interpreta dentro de un escenario presidido por la continuidad. Es decir: cuando el sistema cambia de un estado a otro, lo hace de manera continua, pasando por todos los estados intermedios posibles; y, en efecto, este cambio de estado se describe mediante magnitudes asociadas al sistema que son de carácter continuo.

La cuantización, la ruptura de la continuidad, proviene del establecimiento de que una de estas magnitudes, la energía, no es continua sino que se emite y absorbe de forma discreta. Hay que postular entonces que los estados estacionarios del sistema atómico corresponden a una serie discreta de valores de energía, y que la transición de un estado estacionario a otro ocurre de forma no continua, sin pasar por todos los estados intermedios posibles. De esta forma, la cuantización se transmite o afecta al resto de las magnitudes con que se describe el sistema atómico, a las magnitudes cinemáticas y dinámicas, que ahora ya no pueden pensarse plegadas a las condiciones del espacio y el tiempo clásicos. Inevitablemente, la descripción del átomo en el nuevo horizonte cuántico cambia radicalmente la concepción del propio sistema atómico: el electrón ha de entenderse dentro del marco de la complementariedad, como onda y como partícula (en una superposición de estados); ha de concebirse sujeto al principio de incertidumbre respecto a su posición y momento simultáneos; y su comportamiento puede abordarse tan sólo como integrado en un sistema que incluye el completo diseño experimental. Por todas estas características, es imposible la descripción en forma clásica de la localización espacial y temporal de los electrones dentro de un átomo. No tienen sentido los conceptos clásicos de *radios*, *órbitas*, *trayectorias*, etc.

Semejante imposibilidad de descripción mediante conceptos clásicos plantea el problema de qué lenguaje cabe utilizar para la interpretación del formalismo matemático-cuántico y para su comunicación, ya que los términos del lenguaje natural corresponden al marco conceptual clásico. La interpretación de Copenhague decidió mantener el lenguaje natural como instrumento básico, pese a las dificultades para conectarlo con el formalismo matemático. En síntesis, puede decirse que con-

sideró prioritario a dicho lenguaje por su conexión con la experiencia. Llegados a este punto queremos volver a destacar que existe además el problema de la representación pictórica. Ella constituye también un medio de interpretación y comunicación del análisis matemático y, por otro lado, está ligada a las intuiciones clásicas del espacio euclídeo. El problema de la representación pictórica no aparece desconectado del problema del lenguaje natural, puesto que éste utiliza términos con referencias espaciales de carácter euclídeo. ¿Qué representación pictórica podemos hacer del átomo? ¿Qué representación pictórica podemos dar a sistemas que sólo pueden entenderse en el marco de la complementariedad y del principio de incertidumbre? No parece posible una representación que corresponda propiamente a la descripción mecánico-cuántica del átomo. De hecho, la construcción de una teoría física sobre el átomo nos obliga a prescindir de las intuiciones euclídeas, que entran en contradicción con el formalismo matemático. Cuando se representa pictóricamente el átomo, lo que se hace es representar gráficamente una parte de la descripción matemática; por tanto, se trata de una interpretación sesgada del formalismo. La representación pictórica más generalizada del átomo proviene de la representación gráfica de valores de probabilidad que describen estados posibles del sistema. Por decirlo de algún modo, lo que se representa son regiones del espacio intra-atómico caracterizadas por la probabilidad asociada de encontrar a una partícula en ellas, (pueden entenderse como volúmenes para los que se calcula una determinada densidad de la nube electrónica o de la intensidad de la onda).

Estos cálculos de valores de probabilidad asociados a superficies y volúmenes se obtienen a partir de la ecuación de Schrödinger (en concreto, a partir de la función de densidad ψ^2). La función ψ^2 permite calcular el volumen en el que es más probable encontrar al electrón, dada una energía determinada. A este volumen asociado a un nivel de energía del electrón se le llama orbital electrónico. Es preciso preguntar ahora: ¿cómo son la forma y la disposición espacial que se atribuye a los orbitales a partir de los cálculos matemáticos? La ecuación de Schrödinger sólo tiene solución para determinados valores de la energía. Estas soluciones de la ecuación son los llamados números cuánticos n , l y m , y s . El número cuántico principal n toma valores en el conjunto de los números naturales (1, 2, 3... hasta ∞). El valor de n se interpreta como el nivel energético que tiene el electrón y define el volumen del orbital en el que el electrón se encuentra con una probabilidad definida. Los números l y m tienen valores determinados para cada valor de n . El valor de l se emplea para definir la forma geométrica del orbital, y el valor de m se interpreta como indicador de una orientación del orbital en el espacio. (El número que queda, el número cuántico de espín, s , se refiere, por expresarlo de alguna manera, al momento angular del electrón y sólo toma dos valores). Por ejemplo: para $n = 1$, l solo puede valer 0, y la forma del orbital así definido es esférica y, por tanto, no tiene una orientación preferente en el espacio (así que $m = 0$). Los orbitales de $n =$

2 y $l = 1$, tienen forma alargada, de modo que a los valores que puede tomar el número m (en este caso: $m = -1$, $m = 0$ y $m = 1$), se les atribuyen orientaciones preferentes en los ejes x , y , z del espacio. El conjunto de los cuatro números cuánticos define a los electrones en el átomo, de manera que no pueden existir dos electrones en un mismo átomo con los cuatro números cuánticos iguales. Así, una vez definido el tamaño, el tipo y la orientación de un orbital con los tres primeros números cuánticos, sólo se podrán encontrar dos electrones en esa situación y tendrán necesariamente valores distintos del número de espín. Es importante aludir a ello, porque está relacionado con la formación de enlaces químicos que comentaremos más adelante.

En resumen: a partir de la ecuación de Schrödinger y de las soluciones de ésta, los llamados números cuánticos que definen a los electrones del átomo en los distintos niveles de energía permitidos, se obtienen representaciones gráficas de los orbitales electrónicos como volúmenes con probabilidad asociada definida de encontrar a los electrones dentro del átomo. ¿Qué interpretación cabe hacer de estos valores de probabilidad? ¿Qué realidad les podemos otorgar? Los orbitales son representaciones de regiones espaciales en las que hay una probabilidad de encontrar entidades que no podemos describir de forma clásica, sujetas como están a las nociones de complementariedad, incertidumbre o interacción con el sujeto. La descripción física del átomo y del electrón de acuerdo con la matemática cuántica no es compatible, en definitiva, con una representación realista euclídea.

3. Contrapunto molecular

Dado que las moléculas no son sino sistemas de varios átomos unidos por enlaces químicos, ¿qué sucede con la representación de las moléculas? Parece que las moléculas, en ciertos aspectos y bajo ciertas condiciones, sí podemos representarlas pictóricamente, esto es: podemos representarlas en un marco conceptual clásico. Pero, no podemos olvidar, asimismo, que los sistemas moleculares, sobre todo los sencillos, además de admitir esta representación pictórica, son sistemas que se describen mediante el formalismo mecánico-cuántico. Después de todo, la agrupación de átomos para formar moléculas tiene lugar a través de electrones compartidos por los núcleos (son estos electrones los que constituyen los enlaces químicos). Por lo tanto, la molécula es un sistema de partículas al que debe ser posible aplicar el formalismo cuántico. Bohr había postulado una teoría cuántica del enlace con la que explicaba las reglas de combinación química de los elementos que se conocían de forma empírica. No obstante, fue Linus Pauling quien, a finales de la década de 1920, realizó algunos de los trabajos más importantes para dotar a la teoría del enlace electrónico de cimientos matemáticos en el marco de la teoría cuántica. Pauling

describió en términos físicos la formación de enlaces químicos, y la estructura de las moléculas resultantes, mediante cálculos basados de nuevo en la ecuación de Schrödinger.

La teoría de Pauling del enlace covalente establece que dos átomos se unirán para formar un enlace covalente si cada uno de ellos posee al menos un electrón desapareado, es decir un electrón *solitario* en un nivel o subnivel energético (esto es, un orbital) en el que podría haber dos electrones. El caso más sencillo de enlace es el que se da entre dos átomos de hidrógeno que se aproximan para formar la molécula de hidrógeno. Inicialmente sólo existen fuerzas de atracción entre el protón en el núcleo y el electrón del mismo átomo. Al acercarse los dos átomos, aparecen fuerzas de atracción entre cada electrón y el protón del otro átomo y fuerzas de repulsión entre los dos electrones y los dos protones. La fuerza más importante es la de atracción, que hace que finalmente los orbitales lleguen a superponerse. Esto produce una disminución de la energía del sistema, y tal disminución es progresiva hasta que los núcleos están tan cerca que las fuerzas de repulsión se hacen importantes y la energía aumenta de nuevo. La mínima energía se consigue a una cierta distancia entre los núcleos, y cuando la densidad electrónica se concentra entre ambos núcleos para minimizar la repulsión entre ellos. Los electrones están entonces en un nuevo orbital, *ahora molecular*, y se encuentran apareados (con los espines opuestos). El enlace corresponde al estado de mínima energía del sistema (menor que la de los dos átomos por separado), lo que hace que la molécula sea estable.

Es importante señalar que entendemos que la aproximación entre los orbitales atómicos, hasta solaparse, tiene lugar a lo largo de un determinado eje espacial, por lo que se considera que los enlaces covalentes tienen carácter *direccional*. Este carácter direccional del enlace covalente condiciona la *geometría de la molécula*. Aunque no es posible predecir la geometría de la molécula sólo a partir de la orientación espacial supuesta para los electrones, los ángulos de enlace en la molécula se abren hasta que la repulsión electrostática entre pares de electrones se hace mínima. Además, se pueden formar orbitales híbridos, como en el caso del carbono, en el que la combinación interna de sus orbitales da lugar a otros nuevos orbitales que hacen que en los enlaces se favorezca el máximo solapamiento con los orbitales de otros átomos y que se minimice así la energía. De este modo, los orbitales híbridos permiten la formación de enlaces químicos más potentes que los que resultarían de los orbitales puros (porque su forma y su orientación aseguran un solapamiento recíproco más fuerte. En cualquier caso, en estos sistemas constituidos por dos o más átomos unidos por enlaces químicos-electrónicos, paralelamente a la caracterización cuántica mediante la función de onda, aparecen una serie de magnitudes que *se representan en el espacio tridimensional euclídeo* o, en otras palabras: nace una geometría clásica y se generan propiedades que dependen de las *disposiciones espaciales*. ¿Cómo sucede esto?

En una molécula diatómica representamos el radio de enlace, una *longitud*. En la representación de una molécula triatómica además de la longitud se emplean *ángulos*. Las moléculas poliatómicas se representan mediante estructuras geométricas que definen la disposición de los átomos en el *espacio tridimensional*. Tan crucial es la disposición espacial, que si la misma combinación de átomos puede disponerse de distintas formas en el espacio, se está ante compuestos distintos, llamados isómeros, con propiedades físicas y químicas diferentes. Por ejemplo: las moléculas de éter metílico y de alcohol etílico contienen ambas dos átomos de carbono, seis de hidrógeno y uno de oxígeno. Sin embargo, difieren en sus propiedades físicas: el alcohol es un líquido cuyo punto de ebullición es 78°C; el éter es un gas con un punto de ebullición de -24°C. Y difieren también en sus propiedades químicas: el alcohol reacciona con el sodio metálico, por ejemplo, y el éter no. Son compuestos distintos porque la disposición y las *relaciones espaciales* de sus átomos son distintas en uno y otro.

Los isómeros ópticos son un tipo de isómeros que se caracteriza por no tener ningún plano de simetría en su molécula. La *asimetría* es una característica típicamente geométrica. La asimetría hace que la molécula tenga actividad óptica, es decir, que la molécula en disolución pueda girar el plano de la luz polarizada. Y la asimetría implica que los átomos pueden disponerse de formas distintas en el *espacio* para formar los distintos isómeros. Por ejemplo: en el ácido láctico, el carbono central está unido a cuatro grupos diferentes, de forma que los enlaces pueden darse de dos formas distintas en cuanto a las posiciones relativas de los grupos entre sí; los dos isómeros del ácido son imágenes especulares no superponibles; ambos tienen las mismas propiedades físicas y químicas excepto en su actividad óptica. Si las disoluciones de uno y de otro isómero son atravesadas por luz polarizada, una girará el plano de polarización en el sentido de las agujas del reloj y la otra en sentido contrario.

En el caso de las macromoléculas orgánicas, las representaciones pictóricas de la estructura tridimensional son necesarias para explicar *funciones biológicas*. En las proteínas con actividad enzimática la especificidad de la reacción catalítica enzima-sustrato depende del acoplamiento espacial de las moléculas de forma que la enzima pueda “reconocer” a la molécula sustrato, unirse a ella e inducir mediante *interacciones orientadas* entre átomos la formación o la ruptura de enlaces para generar nuevos productos metabólicos. En el caso de la molécula de ADN, hasta que no se obtuvo una representación pictórica de su estructura tridimensional *en el espacio euclídeo* no fue posible comprender cómo la molécula podía almacenar información genética y cómo podía esta información copiarse y expresarse.

La molécula está constituida por dos cadenas que se disponen en el espacio como una doble hélice y que están formadas por unión de moléculas más pequeñas llamadas nucleótidos, de los que se distinguen cuatro tipos según sea una parte con-

creta de la unidad (la base nitrogenada). La *disposición espacial* de las bases nitrogenadas dentro de la doble hélice y la *disposición* de los átomos de las bases hacen que exista complementariedad específica entre ellas (debido a interacciones electrostáticas orientadas entre átomos que “*encajan*” *espacialmente*; interacciones que son una parte de las fuerzas que mantienen la estructura molecular). La posibilidad de replicación de la información reside en la complementariedad de las dos cadenas, y en la posibilidad de abrir la hélice y sintetizar nuevas cadenas complementarias por adición de nucleótidos cuyas bases encajan en el espacio con las de las cadenas ya existentes. La información genética que contiene el ADN para la síntesis de proteínas (más exactamente para sintetizar polipéptidos a partir de unidades elementales, los aminoácidos) está contenida en la secuencia lineal de las bases. Cada grupo de tres bases codifica uno de los 20 aminoácidos existentes. ¿De qué forma? Puede decirse que la codificación reside en la *disposición espacial* de los átomos, que será reconocida por sucesivas moléculas de ARN, (otro ácido nucleico con una estructura espacial complementaria) que finalmente unirán aminoácidos distintos dependiendo de los nucleótidos que las compongan.

Estos ejemplos muestran que la representación pictórica mediante estructuras tridimensionales en el espacio euclídeo es necesaria para explicar propiedades de las moléculas. Pero queremos hacer notar que, al mismo tiempo, las características cuánticas de *complementariedad e incertidumbre* siguen presentes, como ilustra el fenómeno de la resonancia entre formas moleculares. Así, cuando la ecuación de Schrödinger predice varios estados de la molécula con la misma energía, la molécula se explica por resonancia entre estos estados equivalentes. El concepto de resonancia está ligado al de superposición de estados cuánticos y a la descripción probabilística. De forma simplificada puede decirse que una molécula resonante está a la vez en dos estados o que vibra de uno a otro. Los ángulos y distancias que se obtienen experimentalmente coinciden con los que resultan de la combinación proporcional de los ángulos y distancias calculados para los estados resonantes.

En las moléculas poliatómicas de gran peso molecular la descripción mecánico cuántica se hace extremadamente compleja. Si consideramos que se requiere un vector de tres coordenadas para cada partícula, y tenemos en cuenta todos los electrones de cada átomo, vemos que la complejidad matemática aumenta considerablemente con cada átomo que se añade a la molécula. La matemática cuántica se aplica a aquellos átomos de la molécula que, por su posición y configuración electrónica, intervienen en las reacciones químicas. Se describe así, por ejemplo, la formación de nuevos enlaces entre moléculas. En la molécula de ADN se dan procesos típicamente cuánticos, como algunas clases de mutaciones. La absorción de fotones de luz ultravioleta puede aportar la suficiente energía a dos bases contiguas para formar entre ellas enlaces covalentes que constituyen una mutación, ya que distorsionan la estructura de la molécula e impiden la correcta replicación. (Esta *distorsión*

espacial puede ser reconocida por moléculas correctoras que catalizan la ruptura del enlace covalente o reemplazan los nucleótidos dañados). En síntesis, las moléculas son, por una parte, sistemas cuánticos de los que se hace una descripción matemática probabilística; pero, por otra, pueden representarse pictóricamente como disposiciones tridimensionales de átomos en el espacio; y esta representación es imprescindible para explicar sus propiedades. ¿Cómo se crean las representaciones pictóricas de las moléculas? Proviene de datos obtenidos a partir de patrones de difracción de rayos X, cuando la molécula es cristalizable, y por espectroscopia de resonancia magnética nuclear, para moléculas en disolución. Estos datos se tratan matemáticamente para generar representaciones tridimensionales. A pesar de la interpretación que media entre los datos experimentales y las representaciones pictóricas de la molécula, éstas son inevitables para dar cuenta de las propiedades moleculares.

La conclusión, que ya enunciábamos al principio, es que en el ámbito atómico hemos de renunciar a las representaciones euclídeas para que la teoría física y su interpretación sean coherentes con el formalismo-cuántico; mientras en el ámbito molecular, que se construye mediante enlaces electrónicos que se explican también por la matemática cuántica, necesitamos recuperar las representaciones tridimensionales euclídeas para establecer una teoría molecular que resulte adecuada en el momento de explicar las propiedades químicas y las funciones biológicas fundamentales de las moléculas.

4. Final a tres voces

Estas diferencias plantean la cuestión filosófica de cómo se interpretan y qué valor tienen las representaciones pictóricas del átomo y las de la molécula. La respuesta depende de que tomemos un posicionamiento instrumentalista, idealista, o realista. Podemos interpretarlas como meros modelos en los que la representación euclídea tiene sólo un carácter instrumental, derivado de nuestra familiaridad con ese tipo de representación. ¿Cabe darles una interpretación idealista, según la cual estamos imponiendo a los datos empíricos las condiciones para la representación euclídea? En tal caso, ¿por qué aceptan las moléculas esas condiciones y no las aceptan los átomos? ¿Es posible hacer una interpretación realista de las representaciones pictóricas de las moléculas? ¿Y de las representaciones del átomo? Comentaremos brevemente cada una de estas tres perspectivas.

Desde una posición instrumentalista, la representación pictórica de funciones de probabilidad y la representación pictórica de la disposición de los átomos de la molécula en el espacio son modelos; como también lo es el formalismo matemático-cuántico. Las representaciones pictóricas son útiles para la comprensión intuitiva, para la comunicación o para explicar y predecir propiedades. No es necesario

plantear su compromiso con la realidad. Desde esta posición, no hay contradicción interna en que para un tipo de sistemas se construyan modelos de representación en el espacio euclídeo y para otros sistemas haya que limitarse a descripciones matemáticas o a representaciones gráficas referidas a parte de la descripción matemática. La existencia de una frontera en la que un modelo deja de aplicarse y se aplica otro no es una dificultad, como no lo es el que dos modelos con marcos diferentes o hasta incompatibles se utilicen simultáneamente sobre un mismo tipo de sistemas. Podemos, incluso, considerar el espacio mismo como un modelo de representación que no alcanza la realidad ni tiene el valor de una condición ideal universal; de esta forma, el que se entienda como espacio continuo, tridimensional o no, depende sólo de las características de las que se quiere dar cuenta. En el caso del átomo estas características a su vez vendrían dadas por el modelo del formalismo cuántico. De cualquier manera, aunque no hallemos contradicciones en el recurso a modelos diferentes dentro de esta interpretación instrumentalista, queda sin explicar por qué el modelo de representación espacial euclídea sí puede aplicarse a los sistemas moleculares y no al sistema atómico.

¿Qué lectura se puede hacer de semejante estado de cosas desde una posición idealista? El espacio tridimensional clásico es la forma de organizar el mundo macroscópico de nuestra experiencia. El universo molecular acepta la imposición de esta forma o condición de la representación, pero no las regiones subatómicas, que quedarían fuera de las posibilidades de una visualización intuitiva. Podemos, pues, plantear las siguientes cuestiones: si consideramos el espacio como condición universal y necesaria del conocimiento empírico, y si consideramos también que este espacio se atiene a un escenario clásico de ordenación euclídea, la imposibilidad de descripción en él equivale entonces a la imposibilidad de conocer propiamente los sistemas cuánticos. Si la perspectiva idealista, como estamos suponiendo, incluye la tesis de que nuestras formas de representación son universales, quizá encuentra un obstáculo en la oposición que el mundo cuántico ofrece a nuestros modos espontáneos de ordenación de los datos de la experiencia. Es decir, nuestras formas de representación, si es que existen, se muestran incapaces de imponerse al mundo sin más; parece que en él hay regiones que eluden acomodarse a ellas. Dicho de otro modo: si consideramos ahora el espacio como una adaptación de nuestra percepción a las relaciones entre las entidades que se perciben, ¿el que unas entidades no puedan acomodarse completamente a cierto marco espacial, les confiere características ontológicas diferentes de las de aquellas otras entidades que sí son “espacializables” desde cierta geometría? ¿Puede decirse entonces que la oposición que el mundo subatómico ofrece a la descripción euclídea implica la existencia de propiedades ontológicas diferentes dentro del ámbito atómico y dentro del ámbito de los sistemas moleculares?

Parece que tanto la interpretación instrumentalista como la idealista plantean

cuestiones ontológicas que invitan a no olvidar la posibilidad de un análisis realista. Desde una posición realista, si se acepta que la representación euclídea de las moléculas es adecuada, el mundo molecular (como el macroscópico) tiene una disposición o estructura tridimensional intuitiva en términos clásicos. Y el mundo subatómico, o posee esa misma estructura, que no se ha conseguido matematizar, o bien tiene realmente una estructura no clásica que se describe de forma adecuada por la matemática cuántica y que no es representable pictóricamente. De forma alternativa, puede considerarse que el espacio clásico es un caso particular del espacio real de características cuánticas. La simplificación se va haciendo posible al aumentar el tamaño de los objetos. Es decir, puede concederse realidad sólo a uno de los espacios en cuestión, o bien puede aceptarse la existencia de dos ámbitos espaciales con características geométricas y reales diferenciadas. Dualidad que plantea la pregunta de cuántos tipos de marcos espaciales podemos llegar a dar por reales y por qué. Si se hace una interpretación realista de los dos ámbitos espaciales, esto es, si por una parte damos una interpretación realista al marco cuántico, y admitimos que el espacio cuantizado tiene una naturaleza ontológica definida y, por otra parte, consideramos que el espacio a nivel macroscópico es continuo y euclídeo y tiene también cierta naturaleza ontológica en cuanto tal, la interpretación realista ha de explicar la transición de un espacio a otro. ¿De qué forma las propiedades del espacio a un nivel se transforman en propiedades distintas a otro nivel? ¿Puede hablarse de espacios con propiedades diferentes, integrados unos dentro de otros? En todo caso, el primer lugar en el que buscar una frontera, si la hay, es el nivel molecular.

Bibliografía

- BOHR, N.: *Atomic Theory and the Description of Nature*, Cambridge University Press, 1934.
- BOHR, N.: *Atomic Physics and Human Knowledge*, New York, John Wiley & Sons, 1958.
- BOHR, N.: *Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge*, New York, John Wiley & Sons, 1963.
- CHANG, R.: *Química*, Madrid, Mc Graw-Hill, 1997.
- GONZÁLEZ RECIO, J.L.: “Galileo y Kant reencontrados. Ciencia y filosofía en los orígenes de la biología molecular”, *Los filósofos y la Biología. Thémata*, 20(1998), pp. 141-158.
- JACOB, F.: *La logique du vivant : une histoire de l'hérédité*, Paris, Gallimard, 1971.
- JUDSON, J.F.: *The Eighth Day of Creation*, Nueva York, Simon and Schuster, 1979.
- KELLER, E.F.: *Secrets of Life / Secrets of Death*, Londres, Routledge, 1992.
- KELLER, E.F.: *Refiguring Life: Metaphors of Twentieth Century Biology*, Nueva York, Columbia University Press, 1995.

- KEVLES, D.J.: “Renato Dulbecco and the New Animal Virology: Medicine, Methods and Molecules”, *Journal of the History of Biology*, 26 (1993), 409-442.
- LAÍN ENTRALGO, P.: *Historia de la medicina*, Barcelona, Salvat, 1978.
- LEDERMAN, M. y TOLIN, S.A.: “OVATOOMB: Other Viruses and the Origins of Molecular Biology”, *Journal of the History of Biology*, 26 (1993), 239- 254.
- LOEB, J.: “The Mechanistic Conception of Life”, en Noel G. Coley y Vance M. D. Hall, *Darwin to Einstein. Primary Sources on Science & Belief*, Harlow, Longman-The Open University Press, 1980, pp. 240-248.
- OLBY, R.: *The Path to the Double Helix*, Seattle, University of Washington Press, 1974.
- PAULING, L. y WILSON, E.B.: *Introduction to quantum mechanics with applications to chemistry*, New York, Mac Graw-Hill, 1935.
- PAULING, L.: *The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals: an introduction to modern structural chemistry*, Ithaca, Cornell University Press, 1960.
- PAULING, L.: *The chemical bond: a brief introduction to modern chemistry*, Ithaca, Cornell University Press, 1967.
- SARKAR, S. (ed): *The Philosophy and History of Molecular Biology: New Perspectives*, Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 1996.
- STRYER, L.: *Bioquímica*, Barcelona, Reverté. 1995.
- SUMMERS, W.C.: “How Bacteriophage Came to Be Used by the Phage Group”, *Journal of the History of Biology*, 26 (1993), 255-267.
- WARBURG, O.H.: “Beiträge zur Physiologie der Zelle”, *Erg. Physiol.*, 14(1914), 253-337.

Ruth García Chico
José Luis González Recio
rgarcia-chico@filol.ucm.es
jolgonza@filos.ucm.es
Departamento de Filosofía I
Facultad de Filosofía
Universidad Complutense de Madrid