

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

Ana Simões

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

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

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

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

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