

## LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA EN LA FILOSOFÍA DE LA CIENCIA CONTEMPORÁNEA\*

MARTÍN LABARCA\*\*

### RESUMEN

Sobre la base del supuesto reduccionista según el cual la química puede ser reducida a la física fundamental, ella suele ser considerada una disciplina meramente fenomenológica y, por tanto, una ciencia de un prestigio inferior al de la física. Tal supuesto ha retrasado fuertemente el surgimiento de la filosofía de la química como subdisciplina de la filosofía de la ciencia. Afortunadamente, esa situación ha comenzado a modificarse durante los últimos años: la filosofía de la química se ha convertido en un campo de rápido crecimiento. En el presente artículo se revisan las principales líneas de investigación en la filosofía de la química contemporánea y los beneficios potenciales que puede obtener la educación en química a partir de los trabajos generados por los filósofos de esta disciplina.

*PALABRAS CLAVE: FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA, REDUCCIONISMO, MODELOS Y EXPLICACIONES EN QUÍMICA, EDUCACIÓN EN QUÍMICA.*

### 1. LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA HOY

En la actualidad, la filosofía de la ciencia se ha diversificado y ramificado en diversas disciplinas dedicadas a analizar los problemas filosóficos de las ciencias especiales: en la bibliografía contemporánea encontramos filosofía de la física, de la biología, de la matemática, etc. Sin embargo, la filosofía de la química se encuentra generalmente ausente en esa lista. En efecto, no sólo existen muy pocas revistas<sup>1</sup> especializadas en los problemas filosóficos derivados de dicha disciplina científica, sino que en los encuentros académicos los filósofos de la química aún suelen ser confinados a las secciones correspondientes a la filosofía de las ciencias físicas. Esta situación es particularmente sorprendente a la luz de la extensa historia de la química como disciplina

\* Agradezco las valiosas sugerencias de Eduardo Mari y Olimpia Lombardi. Este trabajo fue posible gracias al apoyo de la Universidad Nacional de Quilmes.

\*\* Universidad Nacional de Quilmes.

<sup>1</sup> Las revistas existentes son: *Hyle –International Journal for the Philosophy of Chemistry*, que comenzó en 1995, y *Foundations of Chemistry*–, cuyo primer número es del año 2000. Existe también una sociedad internacional (*International Society for the Philosophy of Chemistry*), así como un grupo de discusión en Internet (“philchem”) cuya existencia data de 1997.

científica y de su posición relevante en el contexto actual de las ciencias naturales. ¿Por qué, entonces, la química ha sido en gran medida ignorada por los filósofos de la ciencia?

Puede resultar sorprendente que sólo a mediados de la década pasada la filosofía de la química comenzara a despertar interés como subdisciplina dentro de la filosofía de la ciencia contemporánea. Las razones de tal retraso se justifican sobre la base de los siguientes factores, estrechamente relacionados entre sí: a) la adopción de un realismo ingenuo de corte externalista, según el cual existe una única ontología que constituye el objeto de nuestro conocimiento, y b) como consecuencia, el supuesto de que la química puede ser reducida a la física fundamental, tesis que se ha convertido en lugar común entre los físicos y los filósofos de la ciencia. Este supuesto encuentra su mejor expresión en el famoso *dictum* de Paul Dirac: “Las leyes físicas fundamentales necesarias para la teoría matemática de una gran parte de la física y la totalidad de la química [son] completamente conocidas desde la mecánica cuántica” (Dirac, 1929, p. 714). De ser válida esta afirmación, los problemas filosóficos de la química, cuando son considerados en profundidad, pertenecen en realidad al ámbito de la filosofía de la física. De este modo, la química es considerada una ciencia “secundaria”, meramente fenomenológica y, por tanto, de un prestigio inferior al de la física, la cual ocuparía el lugar más alto en la jerarquía de las ciencias naturales.<sup>2</sup> A esta situación se agrega la percepción social de la química en la actualidad: según Vancik (1999), la relación existente entre la industria química moderna y los problemas ambientales actuales, sumado a una campaña anticientífica (especialmente antiquímica) en los medios de comunicación, afectan sensiblemente la imagen de la química en la sociedad. En definitiva, la tradición Dirac / mecánica cuántica y realismo metafísico por un lado, y el desprestigio social de la química por otro, han impedido a la filosofía de la química emerger como un campo de investigación de igual derecho y jerarquía que la filosofía de la física y de la biología.

## 2. TÓPICOS ACTUALES EN FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA

Afortunadamente, durante los últimos años esta situación de olvido ha comenzado a revertirse: la filosofía de la química está adquiriendo un nuevo impulso, esto es, “reformulándose” a sí misma. Los nuevos filósofos de la

<sup>2</sup> Esto no significa que las afirmaciones reduccionistas de Dirac hayan ejercido una influencia directa sobre la percepción de los químicos sobre su propia disciplina. En un interesante trabajo histórico acerca de la influencia de tales afirmaciones, Simoes (2002) concluye que las mismas no han afectado el trabajo de los químicos cuánticos.

química comienzan no sólo a cuestionarse algunas de las concepciones tradicionales acerca de la química, sino también a abordar nuevos tópicos que indican la existencia de un ámbito legítimo de reflexión filosófica. A continuación expondremos algunos de los problemas centrales que se debaten en este nuevo campo de investigación.

### **METAFÍSICA DE LAS ENTIDADES QUÍMICAS**

Este tópico, uno de los principales en la filosofía de la química actual, se refiere a la naturaleza de las entidades químicas. También a este ámbito corresponde la discusión acerca del estatus epistemológico y ontológico de conceptos tales como los de elemento, átomo y molécula, y el de conceptos relacionados como los de estructura y fase (*cfr.* Van Brakel, 1997, 1986; Paneth, 2003 [1962]). Estrechamente relacionada con el concepto de identidad molecular se encuentra la noción de estructura molecular: en efecto, en casi todas las descripciones químicas se considera que una molécula conserva su identidad cuando cambia su forma o su estructura mediante vibraciones o rotaciones, pero la pierde al formarse o romperse enlaces covalentes. La noción de estructura molecular es la que ha concentrado la mayor parte de los debates. ¿Es la estructura molecular reductible o irreductible? ¿Se trata de un mero concepto que no tiene relación con la realidad? ¿Es un aspecto esencial para la identidad molecular?

La controversia acerca del estatus epistemológico del concepto de estructura molecular ha dado lugar a un extenso debate en los últimos tiempos. La discusión tuvo su punto de partida en el polémico y desafiante artículo de Wooley (1978) (“¿Debe una molécula tener una estructura?”); allí el autor señala que desde el punto de vista de la teoría cuántica, la noción de estructura molecular se contrapone con la noción clásica y, por tanto, no es una propiedad intrínseca de los sistemas químicos. En la misma línea, Hans Primas (1983) considera que la estructura molecular es sólo una poderosa y reveladora metáfora que no se corresponde con la realidad descripta por la mecánica cuántica. De ser así, entonces, “la idea fundamental de que las moléculas son construidas aditivamente a partir de átomos, los que retienen su identidad esencial dentro de la molécula, es puesta en duda” (Weininger, 1984, p. 939). Pese a ello, el propio Wooley (1985) enfatiza que en química el concepto de estructura molecular no debe ser abandonado, si bien recuerda que tal concepto surgió en un contexto científico muy diferente del actual.

No obstante, como correctamente indica Scerri (2000a), la mayoría de los químicos reaccionaría con total incredulidad ante la idea de que la estructura molecular es sólo una “metáfora iluminadora”, dado que se trata de un concepto central en la química contemporánea. La evidencia contundente

aportada por la espectroscopía y por otros estudios estructurales –entre ellos, técnicas modernas de microscopía– en favor de su existencia en el nivel químico, permitirían rechazar tal perspectiva.

Precisamente sobre esta base, Ramsey (1997) argumenta en favor de una interpretación realista del concepto de estructura molecular. Este autor afirma que si se emplea una descripción física del concepto, se observa que el mismo es reductible ontológicamente, aunque de manera aproximada. Como consecuencia, la estructura molecular es un concepto aproximado con límites definidos. Señala, además, que –contra Wooley y Primas– cuando este concepto es adecuadamente interpretado, se trata de un “objeto de creencia” (p. 234).

El origen del conflicto acerca de la interpretación del concepto de estructura molecular se encuentra en la irrupción de la mecánica cuántica en el ámbito de la química. En efecto, desde un punto de vista cuántico la noción de estructura carece por completo de significado dada la indeterminación de la posición y la trayectoria de los componentes moleculares. Pero, al mismo tiempo, el concepto de estructura molecular ocupa un lugar central en las explicaciones químicas, incluso respecto de una cuestión tan básica como la identidad de las moléculas. ¿Cuál es el referente del término “estructura molecular”? El debate, como vemos, está aún lejos de concluir.

#### **EL PROBLEMA DEL REALISMO**

El problema del realismo se encuentra fuertemente relacionado con el tópico anterior, puesto que se centra en la pregunta acerca de la existencia o no de los referentes de los términos teóricos en química. En este ámbito las discusiones se han concentrado principalmente en torno del concepto de orbital atómico, central en la química contemporánea, y del concepto de configuración electrónica, estrechamente vinculado con el anterior. ¿Se trata de entidades existentes en el mundo químico pero no en el mundo físico? ¿Son entidades “reales”?

Tal como lo expresa Scerri (2000a), estas preguntas plantean un interesante problema filosófico, puesto que apuntan al núcleo del problema del realismo. Es sabido que un orbital es la región del espacio, próximo al núcleo atómico, donde existe la mayor probabilidad de encontrar un electrón. En general, los químicos y los educadores en química suelen ser realistas ingenuos al atribuir a los orbitales una existencia definida. Sin embargo, desde el punto de vista de la mecánica cuántica, un orbital no es más que una herramienta matemática para expresar dicha probabilidad. La misma se expresa mediante una función matemática (una función de onda  $\psi$ ) que constituye una solución de la ecuación de Schrödinger para, por ejemplo, sistemas de un

electrón, esto es, un orbital atómico para el átomo de H o un orbital molecular para el  $H_2^+$ . Por este motivo, los físicos y los químicos computacionales utilizan orbitales y configuraciones electrónicas como meras ficciones matemáticas útiles para el cálculo. Sobre esta base, Scerri (2000a) y Ogilvie (1990) sostienen que desde la perspectiva de la mecánica cuántica, no existe tal cosa como el orbital atómico o la configuración electrónica. A pesar de ello este último autor sugiere que, no obstante, ambos conceptos resultan útiles en química y, claramente, no deberían ser abandonados. Otros autores, por el contrario, indican que es necesario considerar caminos alternativos para evitar el concepto de orbital, incluso en la enseñanza media y en los cursos universitarios de química general (Tsarpalis, 1997).

Sin embargo, durante el segundo semestre de 1999 una noticia conmovió el mundo de la química y de la física: los orbitales habían sido visualizados y fotografiados por primera vez (Zuo *et al.*, 1999). El hallazgo, que fuera tapa de la prestigiosa revista científica *Nature*, fue rápidamente comunicado en el mundo científico (*cfr.*, Yam, 1999; Jacoby, 1999; Zurer, 1999), y no sólo fue nominado como uno de los cinco *highlights* del año en la química (Zurer, 1999), sino que científicos de prestigiosas universidades señalaron rápidamente la utilidad de dicho trabajo como punto de partida para la comprensión de otros fenómenos del mundo físico.<sup>3</sup> La visualización de orbitales en otro compuesto fue comunicada, también, por otro grupo de investigadores poco tiempo después (Pascual *et al.*, 2000).

A pesar del impacto y de la expectativa que generó el resultado de la observación de los orbitales electrónicos, algunos químicos algo más reflexivos y filósofos de la química objetaron rápidamente las conclusiones obtenidas por los investigadores responsables de la experiencia, señalando el error conceptual cometido en la interpretación de dichas visualizaciones (Wang y Schwarz, 2000; Scerri, 2000b, 2001a). Por ejemplo, Scerri ha insistido en que los orbitales no pueden visualizarse, no sólo porque las funciones de onda no son observables, sino porque, desde la perspectiva de la mecánica cuántica, los orbitales son sólo ficciones matemáticas desprovistas de cualquier existencia real (Scerri, 2003a, p. 8). El error conceptual, señala el autor, consiste en confundir el concepto de orbital con el concepto de densidad de carga (o de electrones), el cual, efectivamente, sí se observa durante los experimentos.<sup>4</sup>

<sup>3</sup> Por ejemplo, Humphreys (1999) afirma que la visualización de los orbitales *d* en la cuprita ( $Cu_2O$ ) puede ser el primer paso para comprender la superconductividad de óxidos de cobre a altas temperaturas.

<sup>4</sup> Es interesante señalar que esta distinción conceptual le es concedida a Scerri por el grupo de investigadores que publicó el artículo citado en *Nature* (Spence *et al.*, 2001).

Por otra parte, algunos autores afirman que la química debe ser considerada de manera realista con el fin de establecer su autonomía de la física (Crasnow, 2000; Primas, 1983). También puede argumentarse que el problema de la “realidad” de los orbitales se analiza mejor como una cuestión de explicación científica, y no desde el realismo: podemos pensar en los orbitales como descripciones aproximadas, que no refieren a entidades, lo cual no pondría en peligro ni la autonomía de la química ni la de los conceptos químicos (Jenkins, 2002).

### **AUTONOMÍA DE LA QUÍMICA**

Tal vez el tópico que más ha ocupado a los filósofos de la química desde la constitución de su propia subdisciplina filosófica ha sido el problema de la autonomía de la química respecto de otras ciencias, en particular, respecto de la física. Las discusiones acerca del realismo han jugado un papel relevante en este problema, en particular referidas nuevamente a la interpretación de los orbitales electrónicos. Sin embargo, los debates acerca de la autonomía de la química se han centrado principalmente en torno al problema de la reducción, en particular, a la pregunta acerca de la posibilidad o imposibilidad de reducción de la química a la física. Si bien ambas disciplinas siguieron un desarrollo histórico independiente, el impactante éxito de la mecánica cuántica en el siglo XX condujo a físicos y filósofos de la ciencia a afirmar que la química puede ser reducida a la física fundamental.<sup>5</sup> El ya mencionado *dictum* de Paul Dirac (1929) expresa claramente este supuesto reduccionista. Sobre esta base, la química se concibe como una rama de la física que trata de sistemas complejos o procesos particulares, los cuales podrían “en principio” ser descriptos y explicados por medio de la teoría cuántica.

Durante los últimos años, diversos autores han comenzado a desafiar este enfoque tradicional con el propósito de recuperar la autonomía de la química y, *a fortiori*, la legitimidad de la filosofía de la química. En algunos casos, la autonomía de la química como disciplina científica es defendida en términos históricos, enfatizando las diferentes tradiciones históricas que marcaron la evolución de la física y de la química (cfr. Vancik, 1999). Pero los principales argumentos se basan en la distinción entre reducción ontológica y reducción epistemológica. En efecto, la más frecuente línea de argumenta-

<sup>5</sup> También debe tomarse en cuenta el trabajo de los llamados “químicos cuánticos”, cuyo trabajo se basa en el supuesto reduccionista. Las mejoras realizadas en los cálculos teóricos, que permiten una mejor interpretación de las experiencias, junto con el avance de la informática, han logrado que la química cuántica haya ingresado en su “tercera etapa” de desarrollo (Richards, 1979).

ción propuesta por los filósofos de la química para defender la autonomía de la química y la legitimidad de su propio campo de investigación filosófica es la que enfatiza la imposibilidad de reducción epistemológica de la química a la física. Si bien los argumentos particulares difieren entre sí, todos los autores concuerdan en considerar que las descripciones y los conceptos químicos no pueden derivarse de los conceptos y las leyes de la física, tal como lo supone el reduccionismo epistemológico. Por ejemplo, van Brakel (1997) analiza la tradicionalmente aceptada reducción de la termodinámica a la mecánica estadística (Kemeny y Oppenheim, 1956; Nagel, 1961), señalando que, en general, la temperatura no puede definirse como la energía cinética molecular media: esto es verdadero para gases perfectos compuestos de moléculas ideales en movimiento aleatorio, pero no para sólidos, plasmas o en el vacío. Según van Brakel, todos los problemas que involucran reducción interteórica parecen relacionarse con la noción macroscópica de equilibrio, una noción central de la termodinámica: por ejemplo, el concepto macroscópico de temperatura sólo tiene sentido para sistemas en equilibrio pero, microscópicamente, no hay tal cosa como equilibrio.

En su rechazo de la reducción epistemológica de la química a la física, Vemulapalli y Byerly (1999) afirman que la reducción epistemológica falla incluso en casos relativamente sencillos: en general, las propiedades de un sistema químico no pueden ser explicadas en términos de las propiedades de los microcomponentes físicos; y aun si las propiedades químicas de un macrosistema pudieran derivarse de sus microcomponentes, esto requeriría supuestos adicionales relacionados con el fenómeno macroscópico. Una las situaciones consideradas por estos autores es el equilibrio en sistemas compuestos no ideales: si bien existe un método para relacionar las propiedades de un sistema con las actividades de sus componentes, los valores numéricos de las actividades individuales deben derivarse empíricamente a partir de experimentos sobre el sistema, o teóricamente postulando fuerzas intermoleculares u otras hipótesis *ad hoc* ajenas al cuerpo principal de la teoría; en cualquier caso, las actividades individuales no pueden deducirse de las teorías que rigen el comportamiento de los microcomponentes del sistema.<sup>6</sup> Sobre la base de éste y otros ejemplos, Vemulapalli y Byerly (1999, p. 37) concluyen que: “La reducción epistemológica falla radicalmente cuando se intenta derivar las explicaciones químicas específicas a partir de la física fundamental [...] sólo tiene éxito en derivar resultados químicos suponiendo da-

<sup>6</sup> Según Scerri (2003a), uno de los principales motivos para el resurgimiento de la filosofía de la química fue que la química no ha sido aún completamente reducida a la mecánica cuántica (para un análisis detallado de ésta afirmación, cf. Scerri, 1994).

tos químicos". En la misma línea de argumentación, Benfey (2000, p. 198) afirma: "Hay un límite intrínseco para que la física pueda predecir los fenómenos de la química [...] sólo los datos químicos pueden indicar qué aproximación mecánico-cuántica es válida".<sup>7</sup>

Si bien existe un amplio acuerdo respecto a la imposibilidad de reducir epistemológicamente la química a la física, los filósofos de la química no dudan acerca de la reducción ontológica: cuando se las analiza con profundidad, las entidades químicas no son más que entidades físicas. Por ejemplo, Vemulapalli y Byerly (1999) adoptan una posición fisicalista según la cual, si bien las propiedades de un sistema químico no pueden efectivamente derivarse de las propiedades físicas, la química conserva su dependencia ontológica respecto de la física fundamental: "La reducción ontológica, en el sentido de mostrar la dependencia de todos los fenómenos sobre procesos físicos constituyentes, ha sido un programa de investigación altamente exitoso" (Vemulapalli y Byerly, 1999, p.18). Para estos autores, la emergencia de entidades y propiedades químicas debería ser interpretada sólo en un sentido epistemológico: la tesis ontológica del fisicalismo evita el surgimiento de entidades 'dudosas', carentes de respaldo científico. Desde una perspectiva similar, Scerri y McIntyre (1997, p. 18) consideran que "la dependencia ontológica de la química respecto de la física parece ser casi un resultado inevitable"; según estos autores, el problema de la reducción –que es el problema a resolver para preservar la autonomía de la química– es una cuestión epistemológica y no ontológica. A su vez, Luisi (2002) reemplaza la distinción entre reducción epistemológica y ontológica por la distinción entre deducibilidad *en principio* y deducibilidad *efectiva* o *práctica*: las propiedades químicas son 'en principio' deducibles de las propiedades físicas; sin embargo, no pueden ser derivadas efectivamente de las propiedades del nivel físico "debido a dificultades técnicas, tales como la carencia de fuerza computacional o el progreso insuficiente de nuestros conocimientos" (Luisi, 2002, p.192). A su vez, Benfey (2000) recuerda la segunda parte de la frecuentemente citada afirmación de Dirac: "...la dificultad [para derivar la química de la física] sólo consiste en que la aplicación exacta de estas leyes [de la mecánica cuántica] lleva a ecuaciones demasiado complicadas para ser resueltas" (Dirac, 1929, p. 714). Sobre la base de tal afirmación, Benfey señala el límite intrínseco para la deducción efectiva de la química a partir de la física: por ejemplo, el andamiaje matemático necesario para describir la densidad de

<sup>7</sup> Algunos autores indican que, aun cuando fuera posible reducir tales conceptos (por ejemplo, enlace, quiralidad, etc.) a la teoría cuántica, la química conservaría su independencia debido a que comprende su propia metodología, instrumental y propósitos (Weininger, 1984; Bunge, 1982).

electrones de una estructura tan simple como la del benceno, requeriría un número de entidades superior al número de partículas fundamentales en nuestro universo.

Sin embargo, es también posible poner en duda que la posición actual de rechazo de la reducción epistemológica de la química a la física sea suficiente para evitar las conclusiones que colocan a la química en un lugar subordinado respecto de la física. En efecto, podría sostenerse que sólo la autonomía ontológica del mundo químico es capaz de dotar a la química del mismo *status* que la física en el contexto de las ciencias naturales. En este sentido se ha argumentado que el pluralismo ontológico suministra el contexto filosófico adecuado para abordar el problema de la relación entre el mundo físico y el mundo químico (Lombardi y Labarca, 2005a), puesto que permite concebir una realidad fenoménica estratificada, organizada en múltiples niveles ontológicos, todos ellos interconectados por relaciones objetivas pero no-reducitivas. En otras palabras, no existe una única ontología a la cual refiere todo el conocimiento científico. Por el contrario, cada ciencia, y aún cada teoría, opera sobre su propio nivel ontológico donde las entidades y regularidades referidas por la teoría pueden ser consideradas legítimamente como reales. Desde este enfoque, entonces, es posible admitir la autonomía ontológica del mundo químico y, *a fortiori*, revertir la idea tradicional de la “superioridad” de la física respecto de la química.<sup>8</sup>

#### **MODELOS Y EXPLICACIONES EN QUÍMICA**

Los modelos constituyen un aspecto central de la organización y práctica en la química contemporánea (Tomasi, 1999; Trindle, 1984). Los químicos construyen y refinan modelos no sólo para intentar comprender fenómenos diversos, sino también para guiar sus futuros experimentos. Por ejemplo, los modelos moleculares proporcionan información muy valiosa acerca de los requerimientos geométricos en una reacción química. En la química ácido-base las propiedades físicas y químicas de los ácidos y de las bases se explican mediante los modelos de Arrhenius, Brønsted-Lowry y Lewis. En cinética química el mecanismo del cambio químico ha sido explicado bajo distintos modelos a través de la historia de la química (Justi y Gilbert, 1999). Por su parte, Sibel Erduran (2001) destaca la importancia del uso de modelos en la educación en química como herramienta para el aprendizaje conceptual de la disciplina.

<sup>8</sup> Otros argumentos filosóficos que tienden del mismo modo hacia la idea de un pluralismo ontológico, pueden verse en Scerri (2000c) y van Brakel (2000).

De esta manera, la naturaleza de los modelos y explicaciones en química es un área de interés creciente en la filosofía de la química contemporánea, dado que el mundo químico provee numerosos y variados ejemplos a los filósofos de la ciencia interesados en este tema. ¿En qué consisten las explicaciones en la química moderna? ¿Son autónomas de las explicaciones concernientes a la física? ¿Cuál es la naturaleza de los modelos químicos?

Si se admite una estrecha relación entre la química y la física, podría pensarse que los modelos y explicaciones en química deben ser abordados, también, desde un reduccionismo epistemológico. Es decir, la física fundamental debería explicar satisfactoriamente la naturaleza de los modelos químicos y brindar explicaciones más generales y fundamentales que las explicaciones químicas. Sin embargo, algunos autores subrayan que, aun cuando las regularidades químicas estén instanciadas en procesos físicos fundamentales, puede ser más útil explicarlas y describirlas en un nivel químico. En otras palabras, las explicaciones y modelos en química son genuinamente específicos del nivel químico considerado y, por tanto, son autónomas de las explicaciones y modelos en la física (Scerri, 2000a; Scerri y McIntyre, 1997).

Sin embargo, tal como advierten algunos autores, es necesario evitar la utilización de explicaciones *ad-hoc* para dar cuenta de ciertos fenómenos químicos particulares que luego no puedan ser generalizadas a otras situaciones (Scerri, 2000a). Un ejemplo de esta situación es la explicación dada para describir la aparente “paradoja de los orbitales”, referida a la configuración electrónica de la primera serie de los elementos de transición: la mayoría de los educadores en química e incluso textos universitarios señalan que el orbital  $4s$  es preferentemente ocupado antes que el orbital  $3d$  debido a que posee menor energía; sin embargo, esta idea no se sustenta ni en la teoría cuántica ni en hallazgos experimentales (Scerri, 2004; Melrose y Scerri, 1996; Vanquickenborne *et al.*, 1989; Scerri, 1989).

En definitiva, es posible comprender el creciente interés de los filósofos de la química por este tópico puesto que la química, por su propia naturaleza, involucra explicaciones mucho más específicas que en el caso de la física, dada la amplia variedad de sustancias existentes y la gran diversidad de reacciones que las involucran.

#### LEYES Y TEORÍAS QUÍMICAS

Respecto de esta cuestión, los filósofos de la química se formulan algunas de las siguientes preguntas: ¿Qué son las leyes y las teorías químicas? ¿Poseen alguna peculiaridad que las diferencie de las leyes físicas? ¿La Ley Periódica de los elementos constituye una ley científica en el mismo sentido que las leyes de la dinámica en física clásica?

Si se adhiere a la tesis epistemológicamente reduccionista de la química respecto de la física, es consecuente afirmar que las leyes químicas no existen como tales. De ser así, la autonomía de la química como disciplina científica se vería seriamente cuestionada al no poder formular sus propias leyes naturales. Pero, tal como lo indica Vancik (1999), dos preguntas se presentan ante esta situación: a) ¿la química posee leyes naturales?; y b) ¿la habilidad de formular leyes es una propiedad inherente de una ciencia autónoma? Estas cuestiones plantean un interesante debate epistemológico. Mientras algunos autores consideran que las leyes y teorías químicas son leyes naturales de igual derecho y naturaleza que las leyes y teorías físicas (Vihalemm, 2003), otros señalan que los sistemas estudiados por ambas disciplinas difieren en complejidad, con lo cual sería natural pensar que las leyes y teorías del mundo químico manifiestan un carácter peculiar que las diferencia de las leyes y teorías del mundo físico (Christie y Christie, 2003).

En los últimos años, el carácter científico de la tabla periódica de los elementos ha sido objeto de un exhaustivo análisis filosófico (cf., por ejemplo, Scerri y McIntyre, 1997; Scerri, 1998 y 1991; Hettema y Kuipers, 1988).<sup>9</sup> La ley periódica de Mendeleiev, una ley fundamental de la ciencia química, constituye la ley central de la tabla periódica. Sin embargo, desde la perspectiva de la física, esta ley se encuentra lejos de tener la misma estructura y precisión que las leyes del mundo físico. Quien considere que las leyes de la física deben ser admitidas como paradigma de ley natural, sin duda concluirá que la ley periódica no es una legítima ley de la naturaleza y, por tanto, admitirá la subordinación del mundo químico a la legalidad física. Pero algunos autores, si bien admiten que la ley periódica de los elementos químicos muestra una cierta vaguedad y no puede expresarse mediante una proposición, afirman que esto no significa que no se trate de una ley natural: las leyes químicas no deben juzgarse deficientes desde los estándares de la física (Scerri, 2000a).

### 3. IMPACTO SOBRE LA EDUCACIÓN EN QUÍMICA

En general, la química continúa siendo considerada por los estudiantes como una disciplina difícil. Ello es comprensible en la medida en que el aprendizaje de la química exige operar e interrelacionar tres niveles diferentes de pensamiento: a) el nivel macro (tangible), b) el nivel micro (atómico y mole-

<sup>9</sup> La axiomatización de la tabla periódica de los elementos llevada a cabo por Hettema y Kuipers (1988) fue criticada por Eric Scerri (1997). Posteriormente, los autores presentaron una versión perfeccionada de su propuesta original (Hettema y Kuipers, 2000).

cular), y c) el nivel simbólico y matemático (Johnstone, 2000). Durante los últimos años, la investigación sobre la educación en química ha realizado grandes avances, entre ellos, la utilización de herramientas tecnológicas, la modificación de la estructura de la disciplina, la incorporación de resultados de los estudios cognitivos, el recurso al constructivismo en química, la mejora del trabajo de laboratorio, la utilización de modelos de procesamiento de la información, etc. Sin embargo, tales avances han tenido poca influencia sobre la enseñanza efectiva de la química: los libros de texto no han acompañado, en las últimas cuatro décadas, los progresos alcanzados por la pedagogía (Gabel, 1999).<sup>10</sup>

Por otra parte, el gran éxito alcanzado por la mecánica cuántica ha tenido y aún tiene un enorme impacto sobre la enseñanza de la disciplina: en particular, existe un uso creciente de los principios de la física fundamental para explicar la estructura atómica y el sistema periódico de los elementos. Este enfoque en la enseñanza solapa un aspecto que debería ser tenido en cuenta: incluso si se admite la tesis según la cual la química se encuentra esencialmente gobernada por las leyes de la mecánica cuántica, es necesario, además, enfatizar los aspectos cualitativos de los procesos químicos y la diversidad de los fenómenos químicos observados, manteniendo un balance entre los dos enfoques (Scerri, 2000a). Estas dos concepciones, ambas vigentes en la metodología de la enseñanza de la química en la actualidad, son objeto de un continuo debate en la literatura contemporánea (cf., Scerri, 1991; Gallup, 1988; Zuckerman, 1986; Sanderson, 1986; Bent, 1984; Pilar, 1981).

Frente a esta situación, la filosofía de la química puede (y debe) convertirse en un nuevo recurso para los docentes de ciencias, específicamente de química. Dado que la historia y la filosofía de la ciencia se encuentran *implícitas* en la propia química (Niaz y Rodríguez, 2001), los educadores deberían contar con los medios para hacer *explícitos* argumentos filosóficos en sus clases, junto con recursos matemáticos y físicos. Como ya ha sido demostrado empíricamente en otras disciplinas científicas, la reflexión filosófica acerca de la naturaleza del campo de estudio facilita el aprendizaje conceptual de la química por parte de los alumnos (Lombardi y Labarca, 2005b). Como afirma Scerri (2001b, p. 168): “No es suficiente entrenar a los educadores en química sólo en los contenidos de química de los cursos, y quizás brindarles algo de psicología educativa. Los docentes de química necesitan ser introducidos en el estudio de la propia naturaleza de la química”. Por ello, es deseable que los avances en la investigación de los diferentes tópicos actuales en la

<sup>10</sup> Un análisis del estado actual de la investigación en la educación en química y, en particular, del constructivismo en química, puede verse en Scerri (2003b).

filosofía de la química, puedan tener efectos positivos sobre la educación. De este modo, los docentes podrán incorporar no sólo una nueva herramienta pedagógica, sino también, una concepción más abarcativa y profunda de su propia disciplina.

#### 4. CONCLUSIONES

Desde el sentido común suele creerse que la filosofía y la química son disciplinas completamente ajenas entre sí. Por otra parte, en general los propios químicos consideran fútil el aporte de la filosofía a lo que ellos consideran como problemas específicos que requieren soluciones específicas. Sin embargo, esta perspectiva limita fuertemente su propio trabajo científico. El mundo químico es mucho más que reflexionar acerca de síntesis de sustancias, instrumental, ecuaciones, experimentación e informática (Scerri, 2003b). La química, como cualquier disciplina científica, posee su complejidad y sus propias peculiaridades que la caracterizan como tal. La introducción de la filosofía en la química provee una herramienta de análisis útil tanto a los químicos como a los educadores en química. Afortunadamente, durante los últimos años han comenzado a superarse los obstáculos que impedían la reflexión filosófica acerca de la química: el creciente interés de los filósofos de la ciencia ha logrado que la filosofía de la química haya adquirido un fuerte impulso, siendo la subdisciplina de más rápido crecimiento dentro de la filosofía de la ciencia contemporánea. Es de esperar, entonces, que los trabajos aportados por los filósofos de la química brinden dividendos no sólo para comprender mejor y más abarcativamente una ciencia natural como la química, sino también, para nuestra comprensión general del pensamiento científico.

#### BIBLIOGRAFÍA

- Benfey, T. (2002), "Reflections on the Philosophy of Chemistry and a rallying call for our discipline", *Foundations of Chemistry* 2, pp. 195-205.
- Bent, H. A. (1984), "Should Orbitals Be X-Rated in Beginning Chemistry Courses?", *Journal of Chemical Education* 61, 5, pp. 421-423.
- Bunge, M. (1982), "Is Chemistry a Branch of Physics?", *Zeitschrift fur allgemeine Wissenschaftstheorie* 13, pp. 209-223.
- Christie, J. y Christie, M. (2003), "Chemical Laws and Theories: A Response to Vihalemm", *Foundations of Chemistry*, 5, pp. 165-174.
- Crasnow, S. (2000), "How Natural Can Ontology Be?", *Philosophy of Science* 67, pp. 114-132.

- Dirac, P. A. M. (1929), "Quantum Mechanics of Many-Electron Systems", *Proceedings of the Royal Society*, A338, pp. 714-733.
- Erduran, S. (2001), "Philosophy of Chemistry: An Emerging Field with Implications for Chemistry Education", *Science & Education* 10, pp. 581-593.
- Gabel, D. (1999), "Improving Teaching and Learning through Chemistry Education Research: A Look to the Future", *Journal of Chemical Education* 76, pp. 548-554.
- Gallup, G. A. (1988), "The Lewis Electron-Pair Model, Spectroscopy, and the Role of the Orbital Picture in Describing the Electronic Structure of Molecules", *Journal of Chemical Education* 65, pp. 671-674.
- Hettema, H. y Kuipers, T. A. (1988), "The Periodic Table -Its Formalization, Status, and Relation to Atomic Theory", *Erkenntnis* 28, pp. 387-408.
- (2000), "The Formalization of the Periodic Table", en *Structuralist Knowledge Representation: Paradigmatic Examples*, Poznan Studies 75, Rodopi, Amsterdam, pp. 285-305.
- Humphreys, C. J. (1999), "Electrons See in Orbit", *Nature* 401, 2 de septiembre, pp. 21-22.
- Jacoby, M. (1999). "Picture-Perfect Orbitals", *Chemical & Engineering News* 77, 6 de septiembre, p. 8.
- Jenkins, Z. (2002), "Do You Need to Believe in Orbitals to Use Them?: Realism and the Autonomy of Chemistry", *Philosophy of Science Association 18<sup>th</sup> Biennial Mtg-PSA 2002*.
- Johnstone, A. (2000), "Teaching of Chemistry – Logical or Psychological?", *Chemistry Education: Research and Practice in Europe* 1, pp. 9-15.
- Justi, R. y Gilbert, J. (1999), "A Cause of Ahistorical Science Teaching: Use of Hybrid Models", *Science Education* 83, 2, pp. 163-177.
- Kemeny, J. G. y Oppenheim, P. (1956), "On Reduction", *Philosophical Studies* 7, pp. 6-19.
- Lombardi, O. y Labarca, M. (2005a). "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *Foundations of Chemistry*, a aparecer en número a designar.
- (2005b), "The philosophy of chemistry as a new resource for chemistry education", enviado a *Journal of Chemical Education*.
- Luisi, P. L. (2002), "Emergence in Chemistry: Chemistry as the Embodiment of Emergence", *Foundations of Chemistry* 4, pp. 183-200.
- Melrose, M. P. y Scerri, E. R. (1996), "Why the 4s Orbital Is Occupied Before the 3d", *Journal of Chemical Education* 73, pp. 498-503.
- Nagel, E. (1961), *The Structure of Science*, Harcourt, Nueva York, Brace & World.

- Niaz, M. y Rodríguez, M. A. (2001), "Do We Have to Introduce History and Philosophy of Science or Is It Already 'Inside' Chemistry?", *Chemistry Education: Research and Practice in Europe* 2, pp. 159-164.
- Ogilvie, J. F. (1990), "The Nature of the Chemical Bond-1990: There Are No Such Things as Orbitals!", *Journal of Chemical Education* 67, pp. 280-289.
- Paneth, F. (2003), "The Epistemological Status of the Chemical Concept of Element", *Foundations of Chemistry* 5, pp. 113-145. Reimpreso del *British Journal for the Philosophy of Science*, 1962, Parte I, 13, pp. 1-14, y Parte II, 13, pp. 144-160.
- Pascual, J. I., Gómez-Herrero, J., Rogero, C., Baró, A. M., Sánchez-Portal, D., Artacho, E., Ordejón, P. y Soler, J. M. (2000), "Seeing Molecular Orbitals", *Chemical Physical Letters* 321, pp. 78-82.
- Pilar, F. (1981), "Damn the Permanganate Volcanoes: Full Principles Ahead!", *Journal of Chemical Education* 58, 10, p. 803.
- Primas, H. (1983), *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*, Springer, Berlín.
- Ramsey, J. (1997), "Molecular Shape, Reduction, Explanation and Approximate Concepts", *Synthese*, 111, pp. 233-251.
- Richards, G. (1979), "Third Age of Quantum Chemistry", *Nature* 278, 5 de abril, p. 507.
- Sanderson, R. T. (1986), "Is the Theoretical Emperor Really Wearing Any Clothes?", *Journal of Chemical Education* 63, pp. 845-846.
- Scerri, E. (1989), "Transition Metal Configurations and Limitations of the Orbital Approximation", *Journal of Chemical Education* 66, pp. 481-483.
- (1991), "Chemistry, Spectroscopy, and the Question of Reduction", *Journal of Chemical Education* 68, pp. 122-126.
- (1994), "Has Chemistry Been at Least Approximately Reduced to Quantum Mechanics", *Philosophy of Science Association* 1, pp. 160-170.
- (1997), "Has the Periodic Table been successfully axiomatized?", *Erkenntnis* 47, pp. 229-243.
- (1998), "How Good is the Quantum Mechanical Explanation of the Periodic System?", *Journal of Chemical Education* 75, pp. 1384-1385.
- (2000a), "Philosophy of Chemistry: A New Interdisciplinary Field?", *Journal of Chemical Education* 77, pp. 522-525.
- (2000b), "Have Orbitals Really Been Observed?", *Journal of Chemical Education* 77, pp. 1492-1494.

- (2000c), “Realism, Reduction and the ‘Intermediate Position’”, en Bhushan, N. y Rosenfeld, S. (eds.), *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*, Nueva York, Oxford University Press, pp. 51-72.
- (2001a), “The Recently Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues”, *Philosophy of Science* 68, pp. S76-S78.
- (2001b), “The New Philosophy of Chemistry and Its Relevance to Chemical Education”, *Chemistry Education: Research and Practice in Europe* 2, pp- 165-170.
- (2003a), “Philosophy of Chemistry”, *Chemistry International*, mayo-junio, pp. 7-9.
- (2003b), “Philosophical Confusión in Chemical Education Research”, *Journal of Chemical Education* 80, pp. 468-474.
- (2004), “Just How Ab Initio is Ab Initio Quantum Chemistry?”, *Foundations of Chemistry* 6, pp. 93-116.
- Scerri, E. y McIntyre, L. (1997), “The Case for the Philosophy of Chemistry”, *Synthese* 111, pp. 213-232.
- Simoes, A. (2002), “Dirac’s Claim and the Chemists”, *Physics in Perspective* 4, pp. 253-266.
- Spence, J. C., O’Keefe, M., Zuo, J. M. (2001), “Have Orbitals Really Been Observed?”, *Journal of Chemical Education* 78, p. 877.
- Tomasi, J. (1999), “Towards ‘Chemical Congruence’ of the Models in Theoretical Chemistry”, *Hyle* 5 (2), pp. 79-115.
- Trindle, C. (1984), “The Hierarchy of Models in Chemistry”, *Croatica Chemica Acta* 57 (6), pp. 1231-1245.
- Tsarpalis, G. (1997), “Atomic and Molecular Structure in Chemical Education”, *Journal of Chemical Education* 74, pp. 922-925.
- Vancik, H. (1999), “Opus Magnum: An Outline for the Philosophy of Chemistry”, *Foundations of Chemistry* 1, pp. 242-256.
- Vanquickenborne, L.G., Pierloot, K. y Devoghel, D. (1989), “Electronic Configuration and Orbital Energies: The 3d-4s Problem”, *Inorganic Chemistry* 28 (10), pp. 1805-1813.
- Vemulapalli, G. K. y Byerly, H. (1999), “Remnants of Reductionism”, *Foundations of Chemistry* 1, pp. 17-41.
- van Brakel, J. (1986), “The Chemistry of Substances and the Philosophy of Mass Term”, *Synthese* 69, pp. 291-323.
- (1997), “Chemistry as the Science of the Transformation of Substances”, *Synthese* 111, pp. 253-282.

- (2000), “The Nature of Chemical Substances”, en Bhushan, N. y Rosenfeld, S. (eds.), *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*, Nueva York, Oxford University Press, pp.162-184.
- Vihalemm, R. (2003), “Are Laws of Nature and Scientific Theories Peculiar in Chemistry? Scrutinizing Mendeleiev’s Discovery”, *Foundations of Chemistry* 5, pp. 7-22.
- Wang, S. G. y Schwarz, W. H. E. (2000), “On Closed-Shell Interactions, Polar Covalences, d Shell Holes, and Direct Images of Orbitals: The Case of Cuprite”, *Angewandte Chemie Int. Edition* 39, pp. 1757-1762.
- Weininger, S. J. (1984), “The Molecular Structure Conundrum: Can Classical Chemistry be Reduced to Quantum Chemistry?”, *Journal of Chemical Education*, 61: 939-943.
- Wooley, R. G. (1978). “Must a Molecule Have a Shape?”, *American Chemical Society* 100, pp. 1073-1078.
- (1985), “The Molecular Structure Conundrum”, *Journal of Chemical Education* 62, pp. 1082-1084.
- Yam, P. (1999), “Seeing the Bonds”, *Scientific American* 281, noviembre, p. 28.
- Zuckerman, J. J. (1986), “The Coming Renaissance of Descriptive Chemistry”, *Journal of Chemical Education* 63, 10, pp. 829-833.
- Zuo, J. M., Kim, M., O’Keefe, M., y Spence, J. C. H. (1999), “Direct observation of *d*-orbital holes and Cu-Cu bonding in Cu<sub>2</sub>O”, *Nature* 401, 2 de septiembre, pp. 49-52.
- Zurer, P. (1999), “Chemistry’s Top Five Achievements”, *Chemical & Engineering News* 77, 29 de noviembre, pp. 38-40.