

¿ACERCA DE QUÉ NOS HABLA LA QUÍMICA? NUEVOS ARGUMENTOS EN FAVOR DE LA AUTONOMÍA ONTOLÓGICA DEL MUNDO QUÍMICO¹

ABOUT WHAT DOES CHEMISTRY SPEAK? NEW ARGUMENTS FOR THE ONTOLOGICAL AUTONOMY OF THE CHEMICAL WORLD

Olimpia Lombardi²

RESUMEN

Si bien la química como disciplina tiene una larguísima historia, los impresionantes éxitos de la mecánica cuántica en el siglo XX han conducido a concebirla como una rama de la física sobre la base de un enfoque netamente reduccionista. El propósito del presente trabajo consiste en abordar el tema de la relación entre química y física tal como ha sido discutido en la reciente filosofía de la química. El objetivo final, en sintonía con artículos previos, es defender la autonomía ontológica del mundo químico desde una perspectiva anti-reduccionista, tomando en consideración ciertas críticas directas a tales trabajos formuladas durante los últimos años.

Palabras clave: química, física, reducción, autonomía, ontología.

ABSTRACT

Although chemistry as a scientific discipline has a very long history, the impressive success of quantum mechanics during the 20th century has led to conceiving it as a branch of physics, on the basis of a markedly reductionist approach. The purpose of the present work consists in facing the issue of the relationship between chemistry and physics as it has been discussed in the present-day philosophy of chemistry. The final goal, in line with previous articles, is to advocate for the autonomy of chemistry from an anti-reductionist perspective, taking into account certain direct criticisms directed to those works during the last years.

Keywords: chemistry, physics, reduction, autonomy, ontology.

1 Recibido: febrero 25 de 2013. Aceptado: mayo 30 de 2013.

2 CONICET - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Argentina. Correo electrónico: olimpiafilo@arnet.com.ar

1. INTRODUCCIÓN

Sin duda, la química como disciplina tiene una larguísima historia que encuentra sus raíces en la alquimia de la baja Edad Media. Por otra parte, la posición relevante de la química en el presente contexto de las ciencias naturales, así como su omnipresencia en el mundo actual son innegables. Sin embargo, la filosofía de la química, en comparación con las filosofías de otras ciencias particulares como la física y la biología, es una subdisciplina muy reciente. En efecto, no sólo existen únicamente dos revistas especializadas en los problemas filosóficos de la química (*Hyle y Foundations of Chemistry*), sino que hasta hace muy poco —e incluso en algunos casos aún hoy— los filósofos de la química solían ser confinados a las secciones correspondientes a la filosofía de las ciencias físicas en los encuentros académicos.

Tal vez la causa de esta situación se encuentre en ciertos supuestos acerca de la relación entre química y física. En particular, si se supone que los ítems —objetos, propiedades, relaciones, etc.— de los que habla la química son, en última instancia, ítems de la ontología física, es fácil concluir que la química no posee problemas filosóficos propios, pues se trata de problemas que, analizados en profundidad, pertenecen al ámbito de la física. En este contexto, no resulta sorprendente que la cuestión de las relaciones entre química y física se haya convertido en uno de los temas candentes en la joven filosofía de la química.

El propósito del presente trabajo consiste en abordar el tema de la relación entre química y física tal como ha sido discutido en la reciente filosofía de la química. El objetivo final, en sintonía con artículos previos, será defender la autonomía ontológica del mundo químico, tomando en consideración ciertas críticas directas a tales trabajos. Para ello, el artículo se estructura del siguiente modo. En primer lugar se considerará la perspectiva que prevaleció en la filosofía de la química hasta hace aproximadamente una década: en contra de los supuestos tradicionales, se señalaba la irreductibilidad interteórica entre teorías químicas y físicas, admitiendo no obstante la reducción ontológica del dominio de la química a la realidad física. A continuación se recordarán ciertas posiciones que abordan la cuestión ontológica desde una perspectiva no reduccionista, y se presentará la defensa original de la autonomía ontológica del mundo químico sobre la base de un realismo pluralista de raigambre kantiana. Esta tesis tuvo una rápida e importante repercusión en el ámbito de la filosofía de la química, despertando tanto adhesiones como críticas: aquí nos ocuparemos de responder las objeciones dirigidas a la tesis de la autonomía ontológica desde diferentes perspectivas teóricas.

2. AUTONOMÍA TEÓRICA PERO REDUCCIÓN ONTOLÓGICA

Si bien la química siguió un desarrollo histórico independiente de la física (*cf.* Nye), el impactante éxito de la mecánica cuántica alimentó el supuesto de que la química puede reducirse completamente a la física. Desde esta perspectiva, la química se convierte en una rama de la física que se ocupa de sistemas complejos, los cuales, no obstante, ‘en principio’ podrían describirse mediante la mecánica cuántica. La famosa cita de Paul Dirac resulta paradigmática en este sentido: “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 714). Esta idea se propagó rápidamente en el seno de la comunidad científica, y aún en la actualidad sigue siendo ampliamente aceptada (*cf.*, *v.g.*, Wasserman & Schaefer). A su vez, en el ámbito de la filosofía la relación entre química y física se convirtió en un ejemplo de reducción interteórica. Por ejemplo, en su famoso trabajo sobre reducción, John Kemeny & Paul Oppenheim afirman explícitamente: “Hay muchos ejemplos de reducciones que se han conseguido. Por ejemplo, una gran parte de la química clásica se ha reducido a la física atómica” (7). Por su parte, en el texto que constituye el *locus classicus* del tema, Ernst Nagel (366) también menciona la reducción de la química a la física junto con su ejemplo paradigmático de reducción, el de la termodinámica a la mecánica estadística. Si esta posición se defiende consistentemente, no sólo se priva de legitimidad a la filosofía de la química como campo de interés filosófico, sino que también se atenta contra el estatuto de la química como disciplina científica: mientras que la física pasaría a concebirse como una ciencia “fundamental” que describe la realidad en sus aspectos más profundos, la química resultaría ser una ciencia meramente “fenomenológica” o “secundaria” que sólo describe los fenómenos tal como se nos presentan.

Durante las últimas décadas, coincidiendo con el establecimiento de la filosofía de la química como subdisciplina filosófica, algunos autores han comenzado a intentar “liberar” a la química de las formas de pensamiento de la física. En algunos casos, la autonomía de la química como disciplina científica se defiende en términos históricos, enfatizando las diferentes tradiciones históricas que marcaron la evolución de la física y de la química (Vancik). Sin embargo, la más frecuente línea de argumentación 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 interteórica —también llamada ‘reducción epistemológica’— de la química a la física. Si bien los argumentos particulares difieren entre sí, 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 tradicional.

Una de las primeras y más influyentes obras que pone en cuestión la supuesta reducción de la química a la física es el libro de Hans Primas, *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism* (1983). En esta obra y en trabajos posteriores, el autor subraya que la relación entre teorías diferentes es mucho más sutil que lo que supone la perspectiva tradicional: en general, los nexos interteóricos involucran procedimientos de paso al límite o introducción de grano grueso, aproximaciones y otras técnicas matemáticas mucho más complejas que la simple deducción lógica propuesta por Nagel. Respecto del caso particular de la relación entre química y física, Primas sostiene que la mecánica cuántica no puede operar como teoría reductora pues involucra conceptos incompatibles con la química molecular. El holismo o no-separabilidad de la mecánica cuántica implica la existencia de correlaciones que impiden concebir los subsistemas cuánticos como entidades independientes que preservan su individualidad en el sistema compuesto. Por el contrario, “[e]l alfa y omega de la química molecular es la doctrina según la cual las moléculas existen como objetos individuales y que cada molécula posee una forma, caracterizada por su estructura nuclear” (Primas 1994, 216). En particular, para recuperar el concepto de forma molecular, basada en la individualidad del núcleo y los electrones en la molécula, la química molecular debe ignorar las correlaciones cuánticas: “las correlaciones holísticas entre los núcleos y los electrones quedan suprimidas y la descripción de una molécula se reduce a la descripción del movimiento de electrones en el campo eléctrico de un núcleo clásico” (Primas 1998, 91). Siguiendo los trabajos de Primas, Robert Bishop & Harald Atmanspacher proponen el concepto de “emergencia contextual”, aplicable al caso de la relación entre química y física, ya que “[e]s imposible derivar la estructura molecular de la mecánica cuántica a partir solamente de primeros principios, porque en una descripción completamente mecánico-cuántica los electrones y los núcleos se encuentran en estados entrelazados —entangled—” (Bishop & Atmanspacher 1975).

Las complejidades propias de las relaciones entre química y física cuántica comienzan también a ser reconocidas en la propia comunidad de los químicos profesionales. Por ejemplo, R. Guy Woolley recuerda que el concepto de forma o estructura molecular “es el dogma central de la ciencia molecular” (Woolley 1978, 1073), y las moléculas de las que se ocupa la química molecular son objetos sustanciales y locales “que existen separada e independientemente en el sentido de que puede decirse consistentemente que ‘tienen’ ciertas propiedades, sea que interactúen o no con alguna otra cosa” (Woolley 1978, 1074);

pero puesto que la mecánica cuántica no puede dar cuenta de la estructura molecular, en el ámbito cuántico el concepto de estructura molecular no sería más que una “poderosa e iluminadora metáfora” (Woolley 1982, 4) sin referente real. Por su parte, Anton Amann encuentra en la superposición y el holismo cuánticos los principales escollos para una explicación de la química molecular en términos cuánticos: “La forma de un estado molecular, por supuesto, debería no mostrar correlaciones holísticas con otras cantidades moleculares y, por tanto, debería estar definida de un modo no ambiguo y debería ser estable” (Amann 32). El autor ilustra el problema con el ejemplo de los isómeros químicos — moléculas con los mismos átomos pero con diferente estructura molecular— como el orto- y el para-diclorobenceno: si cada uno de ambos tipos de moléculas tiene una forma definida por su vector de estado en el mismo espacio de Hilbert, su superposición también es un estado posible según la mecánica cuántica; frente a ello se pregunta: “¿Hay alguna razón apropiada para excluir tales superposiciones? ¿Qué razón puede darse —desde un punto de vista mecánico-cuántico— en favor de la sistemática química?” (Amann 32). Mucho más recientemente, el Premio Nobel de química Roald Hoffmann adopta una posición sumamente clara respecto del tema de la reducción:

Mi afirmación más fuerte es que la mayor parte de los conceptos en química que se han mostrado productivos en el diseño de nuevos experimentos no son reductibles a la física. Con esto quiero decir que no pueden ser redefinidos adecuadamente utilizando solamente el lenguaje de la física (Hoffmann 329).

Esta idea de la diferencia entre los lenguajes de la química y de la física se presenta en el ámbito de la filosofía de la química en un influyente texto de Jaap van Brakel (2000a), cuando se afirma que

deben distinguirse más de dos discursos, no sólo ‘químico’ y ‘físico’: hay agua manifiesta, hay propiedades físicas, físico-químicas, químicas y bioquímicas del agua, hay un microdiscurso molecular (químico) y un discurso mecánico-cuántico. Y esto es sólo el comienzo. Debe encararse la completa diversidad de relaciones inter-discurso y la cuestión de la reducción debe hacerse mucho más concreta que hablar acerca de química y física” (van Brakel 2000a, 122).

Frente a esta diversidad de discursos, van Brakel adopta una postura claramente anti-reduccionista que rechaza, en particular, la reducción de las teorías químicas a la química cuántica. Según el autor, los cálculos de la química cuántica resultan prácticamente irrelevantes en el trabajo diario de los químicos, puesto que la química es principalmente una ciencia de las sustancias y sus transformaciones (van Brakel 1997). Por otra parte, los cálculos de la química

cuántica siempre requieren información proveniente de la química; en particular, los cálculos ab initio “están regidos por qué dato experimental debe predecirse” (van Brakel 2000a, 139) y, por lo tanto, los argumentos químicos son ineliminables.

La necesidad de integrar datos específicamente químicos para la derivación de resultados químicos es también señalada por Krishna Vemulapalli & Henry Byerly, quienes afirman que las propiedades macroscópicas de un sistema químico no pueden derivarse de las propiedades de los microcomponentes físicos sin supuestos adicionales relacionados con el fenómeno macroscópico a explicar. Una de 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. Esta situación se repite en muchos casos en los que se pretende derivar, a partir de propiedades microscópicas, las propiedades macroscópicas de un sistema compuesto, que son las utilizadas por la química, como la energía macroscópica, el calor, la temperatura o la capacidad calorífica. Sobre la base de estos ejemplos, los autores 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 datos químicos” (Vemulapalli & Byerly 37). En la misma línea de argumentación, Theodor Benfey 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” (Benfey 198).

Desde una perspectiva similar, Eric Scerri & Lee McIntyre introducen la distinción entre “reducción cuantitativa” y “reducción conceptual”. La primera se refiere al cálculo de propiedades químicas a partir de teorías físicas, en particular, de la mecánica cuántica. Esta clase de reducción requiere técnicas de aproximación que sólo pueden justificarse sobre una base *post hoc*, esto es, sobre la base de datos observados experimentalmente. Por otra parte, la reducción conceptual se refiere a la definición de conceptos químicos en términos de conceptos físicos. Según los autores, esta forma de reducción no es posible debido a la propia naturaleza de los conceptos químicos: los conceptos de composición, enlace o estructura molecular no pueden expresarse sino sólo en un nivel químico. Como

resultado de la imposibilidad de ambas reducciones, deberíamos “renunciar a reducir epistemológicamente la química a la física” (Scerri & McIntyre 220). Scerri (1997) vuelve sobre este tema en relación con la Tabla Periódica de los elementos: según el autor, una de las características más importantes de la Tabla Periódica, la longitud de los períodos, no puede derivarse de la mecánica cuántica salvo que cierta información química obtenida por medios experimentales se introduzca específicamente. Por este motivo, a pesar de los esfuerzos de muchos físicos y químicos cuánticos, la mecánica cuántica no puede explicar la configuración electrónica exacta de los átomos que determina las propiedades químicas y, como resultado, tampoco el lugar de cada elemento en la tabla periódica (Scerri 2004). Además, el autor sostiene que los cálculos mecánico-cuánticos de los espectros atómicos exigen aproximaciones altamente idealizadas acerca de la estructura de los sistemas multi-electrónicos: si bien tales aproximaciones están correctamente motivadas en términos pragmáticos, no permiten hablar de reducción ya que los errores que introducen no pueden ni siquiera ser estimados (Scerri 1991, 1994).

En el ámbito de la filosofía de la química reaparece el concepto de estructura molecular como obstáculo a la reducción de la química molecular a la física cuántica. En este sentido, Robin Hendry sostiene que, en algunos casos, el hecho de que una molécula particular posea una estructura molecular específica no puede ser explicado por la física. Esta situación surge cuando se considera la descripción mecánico-cuántica de los isómeros. Por ejemplo, el éter dimetílico y el alcohol etílico o etanol tienen el mismo Hamiltoniano y, por tanto, la misma descripción mecánico-cuántica de sus propiedades energéticas. Sin embargo, las moléculas son distintas estructuralmente, y esto se manifiesta en diferentes propiedades macroscópicas: mientras el etanol es extremadamente soluble en agua, el éter dimetílico es parcialmente soluble en agua; el punto de ebullición del etanol es 78,4°C, mientras que el del éter dimetílico es 34,6°C. La ingesta de etanol produce intoxicación, pero la de éter dimetílico no tiene el mismo efecto. Hendry concluye que, dado que la mecánica cuántica no puede explicar por qué una dada colección de átomos adopta una estructura molecular (y un conjunto de propiedades químicas) u otra, las propiedades químicas no pueden recobrase a partir de la mecánica cuántica (Hendry 1998, 2006, 2010)

Estos argumentos ponen de manifiesto que actualmente prevalece la idea de la imposibilidad de reducir epistemológicamente la química a la física. Sin embargo, en general no se ha dudado acerca de la reducción ontológica: cuando se las analiza en profundidad, las entidades químicas no son más que entidades físicas. Por ejemplo, Vemulapalli & Byerly adoptan una posición

fiscalista 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 respecto de procesos físicos constituyentes, ha sido un programa de investigación altamente exitoso” (Vemulapalli & Byerly 18). Para estos autores, la emergencia de entidades y propiedades químicas debería ser interpretada sólo en un sentido epistemológico: la tesis ontológica del fiscalismo evita el surgimiento de entidades “dudosas”, carentes de respaldo científico. Desde una perspectiva similar, Scerri & McIntyre consideran que “la dependencia ontológica de la química respecto de la física parece ser casi un resultado inevitable” (Scerri & McIntyre 215); 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, Pier Luigi Luisi 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 192). Según el autor, si bien las propiedades de un sistema químico no son deducibles *a posteriori* de las propiedades de sus componentes físicos, la predictibilidad *a priori* no puede negarse sin reintroducir una suerte de vitalismo inaceptable en ciencia, ya que implicaría admitir la existencia real de entidades no físicas. Otro autor que, si bien reconoce la imposibilidad de reducción epistemológica, adopta explícitamente un reduccionismo fiscalista es Robin Le Poidevin: sobre la base de suponer el reduccionismo ontológico como una “fuerte intuición”, se propone defender la reducción ontológica independientemente de la reducción epistemológica desde una perspectiva fuertemente metafísica. Incluso mucho después de que estallara la discusión acerca de la ontología de la química (a la cual nos referiremos en las próximas secciones), Hinne Hettema sostiene que

el ‘sustrato’ estudiado tanto por la química como por la física —esto es, moléculas, electrones, átomos y cosas similares— permanece. La materia no se convierte en algo diferente cuando traspasa la puerta del laboratorio de química y le hace una visita al físico” (Hettema 2012, 412).

En definitiva, aun admitiendo la imposibilidad de reducción epistemológica, la reducción ontológica del mundo químico al mundo físico ubica las entidades químicas en el reino de lo ilusorio o subjetivo; las propiedades químicas

sólo se nos manifiestan debido a nuestras limitaciones técnicas o intelectuales. En otras palabras, si la “verdadera” realidad está poblada por las entidades y las propiedades de la física fundamental, la física estudia la única ontología objetiva —esto es, la realidad tal como es en sí misma—, mientras que la química es una disciplina meramente fenomenológica que estudia los fenómenos tal como se presentan a nuestros limitados poderes de observación y cálculo. Es este supuesto ontológico el que durante los últimos años ha comenzado a ser objeto de una profunda reconsideración.

3. UNA PERSPECTIVA INCIPIENTE:

EL RECHAZO DE LA REDUCCIÓN ONTOLÓGICA

Como se desprende de la sección anterior, las discusiones acerca de la supuesta reducción de la química a la física han seguido el camino de la tradicional filosofía de la ciencia del siglo XX al circunscribirse al plano epistemológico y evitar la discusión sobre ontología: la conclusión es que no todos los conceptos y las leyes químicas pueden obtenerse a partir de los conceptos y las leyes de la física. En este contexto, las consideraciones ontológicas suelen no avanzar más allá que aceptar la reducción ontológica sin cuestionamiento. Como afirma van Brakel, si bien “la cuestión de la reducción se encuentra ligada a la de la autonomía”, no obstante los temas abordados por la filosofía de la química en general “tienen poca influencia en las discusiones acerca de la autonomía ontológica de la química” (van Brakel 2000a, 121, énfasis del autor).

Si bien esta situación es la aún que prevalece en la comunidad de los filósofos de la química, desde hace poco más de una década dos autores comenzaron a prestar atención a la pregunta acerca del carácter referencial de las descripciones químicas. Uno de ellos es el propio van Brakel (2000a, b), quien analiza la referencia de los discursos físico y químico bajo el paradigma de los espejos de la naturaleza: “cada espejo brinda una imagen diferente y autónoma de (parte del) mundo, pero un espejo, —el ideal de la física— refleja la realidad tal como es (ontológicamente hablando). Todos los otros espejos ... reflejan meras apariencias, sin significación cósmica” (van Brakel 2000b, 169). De acuerdo con el autor, este paradigma debe ser abandonado como resultado del rechazo de la asimetría de la relación entre química y física: “El mismo evento puede tener una descripción física y una química ... pero no existe una descripción privilegiada” (van Brakel 2000b, 171). En consecuencia, los vínculos entre química y física “son mejor concebidos como relaciones simétricas” (van Brakel 2000b, 177). Sobre esta base, van Brakel subraya que, si no hay descripción privilegiada, tanto los conceptos químicos como los

mecánico-cuánticos pueden ser “poderosas e iluminadoras metáforas”. En consecuencia, deberíamos

ser suficientemente tolerantes para dejar igual espacio ontológico para el agua tal como se manifiesta, el agua en términos de la teoría termodinámica de las sustancias, la estructura molecular del agua (‘construida’ a partir de mediciones espectroscópicas), las ecuaciones mecánico-cuánticas ‘adecuadas’ para una molécula de agua aislada, y los experimentos con moléculas aisladas de agua” (van Brakel 2000a, 147-148, énfasis del autor).

Otro autor que se abre hacia la discusión ontológica es Scerri: si bien durante la década de 1990 asumía una postura ontológicamente reduccionista acrítica, durante la década siguiente comienza a revisar su posición, admitiendo que, bajo el supuesto de reducción ontológica, términos como ‘orbital’ o ‘forma molecular’ “filosóficamente hablando, serían términos sin referencia” (Scerri 2000b, 51). Sin embargo, en general los químicos son realistas en el sentido de que creen en la existencia real de los orbitales; los químicos y los educadores en química muestran una gran resistencia a abandonar esa interpretación realista, a pesar del supuesto reduccionista según el cual, si los conceptos de orbital y de forma molecular no pueden ser explicados correctamente por la mecánica cuántica, entonces los términos correspondientes son semánticamente vacíos. Scerri (2000a, b) propone una posición intermedia entre realismo y reduccionismo ontológico, la cual conduce a la autonomía de la química como resultado de una forma de liberación del “imperialismo de la física”. De acuerdo con esta nueva perspectiva, la interpretación de los términos científicos es contextual, esto es, relativa a una teoría:

No sólo la cuestión de la interpretación realista del concepto de orbital como opuesta a la interpretación anti-realista es contextual respecto de si se considera la química o la física teórica, sino incluso en el seno de la química sucede que profesionales en diferentes subáreas generalmente adoptan interpretaciones opuestas (Scerri 2000a, 421).

En otras palabras, no existe una única ontología a la cual todo el conocimiento científico refiere. Por el contrario, cada disciplina científica, e incluso cada teoría, opera en su propio dominio ontológico, donde las entidades y regularidades descritas teóricamente pueden ser legítimamente consideradas reales: no se cae en contradicción al considerar los orbitales como entidades existentes en el dominio químico pero no en el mundo cuántico. En este sentido, Scerri aboga por la imagen de “niveles de realidad autónomos si bien interrelacionados” (Scerri 2000a, 412), en términos de los cuales la autonomía de las ciencias secundarias puede defenderse consistentemente.

En las afirmaciones de van Brakel y Scerri no es difícil identificar un implícito rechazo de la reducción ontológica de la química a la física. Ambas posiciones parecen tender hacia un pluralismo ontológico que permitiría a las entidades químicas y físicas existir con el mismo grado de realidad. Sin embargo, en ninguno de los dos casos se propone un marco general que brinde fundamentos filosóficos a tal posición. Este marco será precisamente aquello que viene a brindar el pluralismo ontológico de raigambre kantiana.

4. PLURALISMO ONTOLÓGICO DE RAIGAMBRE KANTIANA

La explícita defensa de la autonomía *ontológica* del mundo químico fundada en un marco filosófico pluralista aparece por primera vez en un artículo de Olimpia Lombardi & Martín Labarca (2005), donde la argumentación toma como punto de partida el realismo internalista de Hilary Putnam.

Putnam comienza su libro *Razón, Verdad e Historia* afirmando que la aceptación de la dicotomía objetivo-subjetivo conduce inevitablemente a la elección entre dos alternativas excluyentes: o bien la adopción de la teoría de la verdad-copia, que presupone la existencia de un mundo objetivo, independiente de la mente humana, que admite como única descripción la “Teoría Verdadera”, o bien el rechazo de la teoría de la verdad-copia, que conduce a una perspectiva relativista según la cual sistemas de pensamiento, ideologías y aún teorías científicas son consideradas inevitablemente subjetivas. La estrategia de Putnam consiste en rechazar la tradicional dicotomía objetivo-subjetivo; su propósito es encontrar un término medio entre realismo metafísico y relativismo radical. Putnam denomina su postura “internalismo” o “realismo internalista”, que se opone al “externalismo” o “realismo metafísico” al cual suele referirse como “la perspectiva del Ojo de Dios” (Putnam 49).

Según el externalismo, los objetos del mundo existen independientemente de nuestro conocimiento —mente, lenguaje, esquemas conceptuales— y constituyen una totalidad fija. Por lo tanto, existe una única descripción verdadera y completa del mundo ‘tal como es en sí mismo’, cuya verdad consiste en la correspondencia entre las palabras y los objetos. Al presuponer que la referencia del lenguaje es una cierta relación entre las palabras y una ontología independiente, el externalismo requiere un punto de vista no humano, el Ojo de Dios, para determinar la referencia de las palabras y, con ello, el valor de verdad de sus enunciados.

Como afirma Pérez Ransanz, la clave para comprender los desacuerdos entre externalistas e internalistas se encuentra en la noción de *objeto*. Para

el internalista, “los ‘objetos’ no existen independientemente de los esquemas conceptuales. Desmenuzamos el mundo en objetos cuando introducimos uno u otro esquema descriptivo” (Putnam 52). A esto se refiere Putnam cuando afirma que la pregunta “¿de qué objetos consta el mundo?” sólo tiene sentido si se formula dentro de una teoría o descripción. Es siempre a través de un esquema conceptual que nos enfrentamos al mundo y lo categorizamos: de tal síntesis surgen los objetos. En otras palabras, los objetos dependen de los esquemas conceptuales en un sentido fuerte, que incluye existencia. Esto significa que los esquemas conceptuales no son meros intermediarios entre sujetos y objetos, sino que juegan un papel esencial en la *constitución* de los objetos (Pérez Ransanz 209).

Si la ontología sólo surge como resultado de la síntesis entre esquema conceptual y realidad independiente, debe admitirse que diferentes esquemas conceptuales definen ontologías distintas; esta conclusión conduce a la conocida tesis del *pluralismo ontológico*, aspecto central del internalismo de Putnam. El pluralismo ontológico apunta en la misma dirección que la tesis de la subdeterminación de las teorías por los datos, según la cual pueden existir teorías científicas incompatibles que den cuenta del mismo conjunto de fenómenos: tales teorías son empíricamente indistinguibles pero refieren a ontologías completamente distintas. Ambas tesis han sido empleadas en contra del realismo externalista de corte científicista, según el cual la ciencia converge hacia la descripción última de la “verdadera” ontología —hacia la única “Teoría Verdadera” —.

A partir de esta primera inspiración en las tesis de Putnam, durante los últimos años se ha ido configurando un *pluralismo ontológico de raíz kantiana*, que finalmente ha quedado plasmado en el libro de Olimpia Lombardi & Ana Rosa Pérez Ransanz, *Los Múltiples Mundos de la Ciencia* (2012; cf. Lombardi & Pérez Ransanz 2011). Esta perspectiva introduce nuevas tesis respecto del internalismo de Putnam, como la distinción clara entre teoría y esquema conceptual. Aquí nos detendremos en los aspectos que resultan más relevantes para el problema que nos ocupa, la relación entre química y física.

En primer lugar, cabe destacar que la nueva perspectiva enfatiza la raigambre kantiana del enfoque. Esto significa que, aun cuando existe una realidad independiente del sujeto, la ontología sólo surge desde un esquema conceptual. Los objetos que resultan de la síntesis entre cada esquema conceptual y la realidad independiente son los únicos objetos. Por lo tanto, la objetividad no significa independencia del sujeto, sino que resulta de nuestros esquemas conceptuales aplicados a lo real. Se trata de una objetividad para nosotros, pero es la única objetividad posible una vez que hemos renunciado al punto

de vista del Ojo de Dios. En otras palabras, desde esta perspectiva enraizada en la filosofía de Kant, la realidad independiente es un dominio *nouménico*, que no es objeto de nuestro conocimiento. Como afirma Roberto Torretti, no sólo no hay una correspondencia biunívoca entre cosas-en-sí y objetos de la experiencia, sino que menos aún puede suponerse que cada una de las determinaciones de los objetos empíricos encuentra su razón de ser en la cosa-en-sí. Quien asumiera este supuesto —como lo hace el realista metafísico— tendría que admitir que “Kant ha derogado de una plumada toda su enseñanza acerca de la limitación de nuestro conocimiento” (Torretti 2005, 664-665). En definitiva, no tiene sentido concebir una ontología independiente, puesto que no hay entidades en la realidad nouménica: en la filosofía kantiana lo nouménico no es un ámbito poblado de ítems determinados, sino que sólo puede ser concebido como un límite de pensamiento. Por lo tanto, la ontología que surge de la síntesis entre un esquema conceptual y la realidad nouménica es la única ontología, el único dominio donde los *entes* existen como tales. La ontología constituida como síntesis no puede interpretarse como una ontología “epistemologizada”, consecuencia de nuestros contingentemente limitados medios de acceso a la realidad, del mismo modo que el sistema kantiano no es una posición epistemológica sino un amplio marco filosófico que establece las *condiciones necesarias* para el conocimiento y, por tanto, para todo discurso científico significativo.

Otro aspecto central del nuevo enfoque pluralista consiste en su aplicación *sincrónica*. El pluralismo ontológico de Putnam ha jugado un papel relevante en las discusiones acerca del realismo y del cambio científico; sin embargo, ha sido escasamente aplicado para analizar la relación entre teorías aceptadas simultáneamente en un mismo momento histórico. Pero cuando se considera esta situación de coexistencia teórica, debe aceptarse que en una misma época, e incluso en el marco de lo que podría caracterizarse en términos kuhnianos como un mismo paradigma, pueden coexistir diferentes ontologías que incluyen sus propias entidades básicas. Y si las distintas teorías aceptadas no pueden vincularse mediante reducción epistemológica, no hay razón alguna para creer que una determinada ontología tiene prioridad metafísica sobre las restantes. En la medida en que no existe el punto de vista privilegiado del Ojo de Dios, no existe argumento que respalde la idea de una única ontología “verdadera”: todas las ontologías tienen el mismo estatuto metafísico, puesto que todas ellas están constituidas por descripciones científicas igualmente legítimas en tanto pragmáticamente exitosas.

Esta última observación nos conduce a un nuevo aspecto central del pluralismo ontológico de raíz kantiana: su importante componente realista

pragmático. Si bien se considera el papel del lenguaje en el esquema conceptual constitutivo de la ontología, esta forma de pluralismo no es una postura de corte idealista, ya que la práctica científica cumple un papel central en la imposición de un esquema conceptual. Cuando en la actividad experimental dirigimos nuestras preguntas a la realidad independiente del sujeto, la forzamos a responder en el mismo lenguaje en que la pregunta fue formulada; no obstante, la realidad siempre conserva la capacidad de responder negativamente. Es precisamente este hecho lo que permite al pluralismo ontológico de raíz kantiana no caer en un relativismo radical, esto es, el relativismo que carece de recursos para explicar por qué una ontología constituida por un esquema conceptual puede invalidar empíricamente una teoría formulada en tal esquema. En otras palabras, si los hechos sólo tuvieran un componente lingüístico y no un componente que proviene de la realidad extralingüística, entonces la ciencia se convertiría en un mero discurso sin referente y la existencia de laboratorios experimentales perdería su sentido. Siguiendo una vez más a Torretti, “el realismo pragmático —y no la criptoteología nostálgica del realismo científico— es la concepción que mejor expresa la verdadera índole del conocimiento humano y de la realidad como la entienden los científicos practicantes” (Torretti 2000, 82).

El pluralismo ontológico de raíz kantiana ha sido recientemente aplicado de un modo fructífero a diferentes problemas de la filosofía de la física. Por ejemplo, se lo ha utilizado para analizar la compatibilidad entre descripciones deterministas e indeterministas en sistemas altamente inestables (Lombardi 2002), para explicar la compatibilidad entre las macroevoluciones termodinámicas irreversibles y las microevoluciones mecánicas reversibles en el ámbito de la mecánica estadística (Labarca & Lombardi 2007), así como para dar cuenta de cómo surge el mundo macroscópico local y separable que describimos con nuestras teorías clásicas a partir de una realidad cuántica no-local y holista (Castagnino & Lombardi). Los problemas del determinismo en sistemas altamente inestables, de la irreversibilidad y de la no-localidad comparten una característica común: en los tres casos el macronivel de descripción introduce una propiedad cuya objetividad no estamos dispuestos a poner en duda; el problema consiste en explicar el carácter objetivo de tal propiedad cuando el micronivel subyacente carece de ella. Es precisamente esta característica común lo que permite suponer que el pluralismo ontológico brinda el contexto filosófico adecuado para abordar los tres problemas.

Si bien los recién mencionados son problemas propios de la filosofía de la física, no es difícil reconocer que argumentos análogos pueden aplicarse al problema de la relación entre química y física (Labarca & Lombardi 2008, 2011).

La adopción acrítica de la reducción ontológica de la química a la física se basa implícitamente en un realismo metafísico según el cual existe una única ontología “verdadera”: todas las entidades, propiedades y regularidades que no pertenecen a ella tienen una existencia aparente o “secundaria”, que depende de las entidades, propiedades y regularidades fundamentales de la única ontología real. Puesto que la prioridad ontológica se adjudica al mundo físico de un modo indiscutible, las entidades y propiedades de la química adquieren sólo una existencia derivada. Esto implica aceptar que, mientras que la física estudia la única ontología objetiva —esto es, la realidad como es en sí misma—, la química describe un ámbito meramente fenomenológico que resulta de nuestras limitaciones intelectuales, perceptuales y técnicas. Pero este enfoque tradicional puede ser rechazado desde un pluralismo ontológico consistente. Cuando se abandona la idea del punto de vista del Ojo de Dios, ya no es posible concebir la descripción de la realidad en sí misma: aún la teoría cuántica involucra un esquema conceptual particular que constituye la ontología cuántica. Por otra parte, la química posee su propio esquema conceptual y, en consecuencia, constituye su propia ontología. Si los conceptos químicos pudieran reducirse epistemológicamente a los conceptos cuánticos, tendríamos una buena razón para creer en la reducción ontológica del mundo químico a la ontología de la mecánica cuántica. Pero cuando se acepta la irreductibilidad epistemológica de la química y se admite el avasallante éxito pragmático de la química, no hay otro argumento más que el prejuicio del realismo metafísico para suponer la reducción ontológica. En definitiva, desde el punto de vista pluralista, conceptos químicos tales como composición, enlace químico y geometría molecular refieren a entidades pertenecientes a la ontología química, la cual depende de la teoría que la constituye pero no se deriva de un nivel más fundamental de la realidad (Labarca & Lombardi 2010). De este modo, se preserva la autonomía ontológica del mundo químico sin la intrusión de entidades “fantasmales” o propiedades carentes de respaldo científico.

5. CRÍTICAS AL PLURALISMO ONTOLÓGICO

El artículo original de aplicación del pluralismo ontológico al ámbito de la química (Lombardi & Labarca 2005), así como los trabajos subsiguientes (Lombardi & Labarca 2006, Labarca & Lombardi 2008, 2010, 2011), tuvieron rápidas e importantes repercusiones, despertando tanto adhesiones como críticas. Ya en la editorial que introduce el número del *Foundations of Chemistry* donde apareció el trabajo, Eric Scerri, en tanto editor de la revista, lo menciona explícitamente considerándolo “una contribución que bien puede convertirse en

un punto de referencia en la filosofía de la química” (Scerri 2005a, 123). Poco después, el mismo autor vuelve a comentar el trabajo en el contexto de la discusión acerca de la reducción ontológica de la química a la física:

Esta aceptación acrítica de la reducción ontológica de la química ha sido subsecuentemente cuestionada, y con razón, por dos filósofos de la ciencia argentinos, quienes sugieren que la cuestión ontológica es de particular interés para los filósofos en otras áreas, y que hemos estado equivocados al adoptar tal posición acrítica acerca de esta cuestión (Scerri 2008a, 7).

A su vez, en 2007 la revista *Synthese* dedicó un número especial a repasar lo sucedido en la filosofía de la química durante los diez años transcurridos desde un número especial análogo publicado en 1997, que marcó un punto de inicio en el área; en la breve introducción, de apenas dos páginas, redactada por Lee McIntyre (2007a), el único artículo que se menciona es el original de 2005:

un artículo reciente de Olimpia Lombardi y Martín Labarca (que apareció recientemente en *Foundations of Chemistry*) llegó tan lejos como para argumentar en favor de la autonomía ontológica de la química, lo cual ha causado un gran revuelo en el campo y actualmente es objeto de mucho debate (McIntyre 2007a, 292).

Además, los trabajos han sido citados en muchas ocasiones, no sólo en medios específicamente filosóficos (Scerri 2005b, 2006, 2007, Cat, McIntyre 2007b, Newman, Vihalemm, Estany, Hettema 2012), sino también en revistas de química (Schuster, Schwarz & Wang, Ströhle, Pagliaro, Wang & Schwarz 2009, Koolage & Hall) y de educación en química (Hawkes, Scerri 2008b, Vesterinen y Aksela 2009, 2011, 2012, Chamizo).

A pesar de la amplia repercusión del pluralismo ontológico en los diferentes ámbitos vinculados con la química, también surgieron rápidamente objeciones y críticas. En esta sección nos ocuparemos de considerar y responder algunas de ellas.

5.1. Needham: la impugnación de sentido

La primera crítica a la presentación de la idea de la autonomía ontológica del mundo químico fue inmediata: provino de Paul Needham (2006), quien también en el *Foundations of Chemistry*, en el número siguiente al que apareció el artículo original, presentó un trabajo completamente dedicado a su crítica. Una de las objeciones de Needham gira en torno al sentido del concepto de reducción ontológica.

Dado el fracaso de la reducción epistemológica concebida como una relación deductiva entre teorías, se han propuesto diferentes estrategias, como interpretar los vínculos interteóricos como leyes-puente no identificatorias, concebir la emergencia de ciertos ítems, o postular una relación de superveniencia entre dominios ontológicos. Si bien abandonando la posición fuertemente eliminativista de la concepción deductivista de la reducción epistemológica, todas estas estrategias asumen una cierta dependencia ontológica de ciertos ítems pertenecientes a un nivel considerado no-fundamental de la realidad respecto de los ítems pertenecientes al estrato supuestamente fundamental. De este modo,

la química nos dice que un pedazo de madera es ‘realmente’ un complicado arreglo de muchos tipos de moléculas unidas entre sí; la física atómica nos dice que las moléculas son ‘realmente’ varios átomos mantenidos juntos por fuerzas atómicas; la teoría de partículas nos dice que los átomos son ‘realmente’ partículas elementales en interacción, y así sucesivamente (Rohrlich 295-296).

El supuesto metafísico detrás de esta jerarquía implica que los ítems referidos por la teoría “menos fundamental” están dotados de una existencia secundaria, dependiente de la existencia los ítems de la teoría “más fundamental”.

Needham parece suponer que no es necesario perder el tiempo con esta cuestión, en la medida en que la noción de dependencia ontológica no es filosóficamente clara o suficientemente coherente como para ser seriamente considerada. En particular, se pregunta si la idea de una existencia de “segunda clase” es coherente, y sostiene que “lo que se necesita para que la tesis sea clara es una noción aceptable de dependencia ontológica, en términos de la cual pueda decirse que la ontología de la teoría reducida depende de la de la teoría reductora, pero no viceversa” (Needham 2006, 78; ver también Needham 2010). Esta observación resulta bastante curiosa cuando se considera que la noción de dependencia ontológica tiene una venerable historia en el desarrollo de la filosofía. En la relación platónica entre Ideas y cosas sensibles, o en la distinción aristotélica entre sustancia primera y atributos, hay siempre ciertos ítems —Ideas, sustancias primeras— que tienen prioridad ontológica en el sentido de que no necesitan de otra cosa para existir; esto es, son autosubsistentes. Todo lo demás tiene una existencia secundaria, posibilitada por la existencia de los ítems primarios. A comienzos de la Modernidad, la dependencia ontológica se presenta como la relación entre cualidades primarias, dotadas de prioridad ontológica en tanto pertenecen al objeto en sí mismo, y cualidades secundarias, que resultan del modo en que el objeto afecta nuestra sensibilidad. En formulaciones más recientes, la noción de dependencia ontológica se ha planteado en términos de condicionales

contrafácticos o hipotéticos, tal como el propio Needham reconoce: “si la ontología reductora no existiera, entonces la ontología reducida tampoco existiría” (Needham 2006, 78). Por lo tanto, la cuestión no estriba en privar de sentido a la relación de dependencia ontológica, como sugiere Needham, sino en preguntarnos qué razones tenemos para admitirla.

Ciertamente, no hay métodos para decidir el valor de verdad de un condicional contrafáctico más allá de toda duda. Sin embargo, lo que de hecho sucede en el plano de la evaluación de teorías puede suministrarnos buenos argumentos para defender ciertas conclusiones en el plano ontológico. Esto es, podríamos reformular el condicional ontológico ‘Si B no existiera, A tampoco existiría’ en el plano epistemológico: ‘Si la teoría B estuviese equivocada, la teoría A también lo estaría’. Y también, desde luego, en el plano pragmático: ‘Si se rechazara la teoría B, también se rechazaría la teoría A’. Por esta vía, el condicional en su versión epistemológica pierde gran parte de su carácter indecible, en la medida en que podemos consultar a la ciencia misma para estimar su valor de verdad. Es precisamente sobre la base de argumentos científicos que Jaap van Brakel consideraría tal enunciado como falso en muchos casos de interés:

Si la mecánica cuántica resultara equivocada, esto no afectaría todo (o incluso ningún) conocimiento químico acerca de las moléculas (unión, estructura, valencia, etc.). Si la química molecular resultara equivocada, esto no descalificaría todo (o incluso ningún) conocimiento acerca, digamos, del agua (van Brakel 2000b, 177).

Por otra parte, cuando prestamos atención a la historia de la ciencia, la idea de van Brakel no queda confinada al ámbito de lo hipotético. Tomemos como ejemplo el desarrollo de la termodinámica, que nace como teoría propiamente dicha —sin considerar las máquinas de vapor de Watt y Newcombe, construidas sin un marco teórico que las respaldara— con el trabajo de Sadi Carnot de 1824, y a partir de ese momento continúa desarrollándose en su descripción de los fenómenos térmicos. Dado el éxito hasta ese momento incuestionado de la mecánica clásica, en las últimas décadas del siglo XIX se impone la idea de reducción en el nuevo campo de investigación: los fenómenos térmicos deberían poder ser explicados sobre la base del comportamiento mecánico de las partículas que componen el sistema bajo estudio. A la luz de esta idea, Ludwig Boltzmann y Josiah Willard Gibbs, entre otros, formularon la mecánica estadística clásica así como los nexos entre esta nueva teoría y la termodinámica macroscópica. Tales nexos, si bien no eran de tipo reductivo en el sentido de Nagel (*cf.* Sklar), “funcionaron” bastante bien desde

un punto de vista teórico y fueron incorporados al cuerpo de conocimiento de la física. En ese momento, quien creyera en nexos ontológicos de dependencia, habría hallado en las relaciones interteóricas recién formuladas el síntoma inequívoco de la dependencia ontológica de los fenómenos térmicos respecto de los hechos mecánicos subyacentes.

Sin embargo, desde las primeras décadas del siglo XX, la mecánica clásica comenzó a ser desplazada por la mecánica cuántica en tanto teoría fundamental, lo cual impulsó el desarrollo de la mecánica estadística cuántica, y a partir de ese momento los nexos interteóricos se establecieron con la nueva mecánica estadística, una vez más con resultados científicamente convincentes. Pero entonces, ¿qué queda del supuesto acerca de la dependencia ontológica de los fenómenos térmicos respecto de la ontología clásica? Justamente, el hecho a destacar aquí es que la termodinámica macroscópica, en tanto teoría científica que se ocupa de entidades y propiedades como el calor, la temperatura, la entropía, etc., no resultó afectada en el transcurso de este proceso histórico: el reemplazo de la teoría “fundamental” no modificó los conceptos ni las leyes básicas de la termodinámica. Recordemos, además, que las primeras formulaciones teóricas en termodinámica, propuestas por Carnot, fueron desarrolladas adoptando la teoría del calórico como descripción de la ontología subyacente: nada cambiaría en los textos de termodinámica “fenomenológica” si postuláramos que el calor es un fluido elástico y sutil que llena todos los cuerpos, tal como afirmaba la teoría del calórico. Sobre esta base, no hay razón alguna para pensar que un eventual cambio futuro en la teoría supuestamente fundamental afectará de manera significativa las descripciones termodinámicas. Si mañana se sustituyera la mecánica cuántica por una nueva teoría, esto no modificaría nuestro conocimiento sobre el calor, la temperatura o la entropía, ni nuestra manera de manipular y predecir fenómenos térmicos, en la medida en que tales conocimientos y prácticas responden a una teoría bien articulada y empíricamente exitosa como lo es la termodinámica macroscópica.

En definitiva, podríamos tener buenas razones para admitir la dependencia ontológica de los ítems “secundarios” si el abandono o la modificación de la teoría supuestamente fundamental implicaran cambios sustanciales en la teoría que los describe. En tal caso podría sostenerse que las características de la ontología “secundaria” dependen, o de algún modo resultan, de las características de la ontología “fundamental”. Pero si la suerte de la teoría “secundaria” —macroscópica o fenomenológica— es inmune a la suerte que corra la teoría “fundamental”, no parece haber buenos argumentos filosóficos para sostener que la ontología de la primera deriva su existencia de la ontología de la segunda. Por lo tanto, si los términos de la química no adquieren

su significado a través de sus relaciones —reductivas o no— con los términos de la mecánica cuántica —sea clásica o cuántica—, es razonable admitir que la existencia de los ítems químicos no depende de la existencia de los ítems mecánico-cuánticos. En otras palabras, los hechos químicos no requieren de una ontología subyacente para establecerse como realmente existentes.

5.2. Needham y Hettema: el temor a una ciencia disgregada

En su comentario crítico al pluralismo ontológico aplicado a la defensa de la autonomía ontológica del mundo químico, Needham considera que se trata de una alternativa demasiado radical, un remedio difícil de tragar (*unpalatable*) para enfrentar el problema del carácter “secundario” de la química respecto de la física. El autor agrega que, desde la perspectiva pluralista, las diferentes ontologías se encuentran “en cierto sentido reñidas [at odds] entre sí, de modo que sencillamente no pueden amalgamarse en una ontología omniabarcadora [all-embracing ontology]” (Needham 2006, 73). Sin embargo, si bien el pluralismo ontológico se encuentra en conflicto con la idea metafísica de una ontología omniabarcadora en la cual pudieran subsumirse las diferentes ontologías, actuales o posibles, científicas o no, esto de ninguna manera significa afirmar que tales ontologías están “reñidas” entre sí. Tal vez Needham teme que una postura pluralista implique una suerte de “esquizofrenia” ontológica, la cual nos conduciría a una imagen fragmentada de la ciencia donde las teorías nada tienen que ver unas con otras. Pero el fantasma de la desintegración puede conjurarse, como veremos, cuando se reconoce que las teorías, incluso no vinculadas reductivamente, pueden encontrarse relacionadas mediante nexos nomológicos significativos.

Si bien no en diálogo directo con el pluralismo ontológico de raíz kantiana, este temor a la disgregación también se manifiesta en el reciente libro de Hinne Hettema, *Reducing Chemistry to Physics*. En esta obra, el autor defiende explícitamente una postura reduccionista respecto de la relación entre química y física, una postura que se manifiesta claramente en la última oración del libro: “La reducción de la química a la física es en este sentido incluso un caso paradigmático para la noción de reducción” (Hettema 410). Lo curioso es que, para alcanzar esta conclusión, el libro nos conduce a través de un largo camino plagado de las múltiples complejidades de la supuesta reducción. Los nexos reductivos no suministran una reducción global sino sólo reducciones locales y parciales de las teorías particulares de la química. A su vez, introducen idealizaciones y aproximaciones relevantes que establecen conexiones débiles y discontinuas entre teorías. Tales nexos extraen incluso los conceptos fuera de su contexto original y los reutilizan de un modo inadmisibles desde el

punto de vista de la teoría a la cual originalmente pertenecen. De este modo, los vínculos interteóricos operan una transformación de la teoría reductora mediante supuestos que son externos y frecuentemente incompatibles con la propia teoría reductora. Los nexos de los que nos habla Hettema suministran, según el propio autor, una noción de reducción tal liberal que puede incluso compatibilizarse con posturas no-reduccionistas. Pero una vez que el concepto de reducción se ha relajado y flexibilizado de este modo, podemos preguntarnos por qué se insiste en usar el término ‘reducción’ en lugar de hablar sencillamente de “vínculos interteóricos”.

Parte de la respuesta puede hallarse en la perspectiva “naturalista” o “pragmática” adoptada por el autor, de acuerdo con la cual “la reducción entre química y física debería ser el ejemplo paradigmático de aquello que esperamos que logre una reducción exitosa” (Hettema 8), y “las condiciones de la reducción son lo que debe probarse en casos efectivos de reducción (como el de la química a la física), en lugar de ser impuestas desde el inicio” (4). Podría replicarse que esta perspectiva equivale a poner el carro delante del caballo: la reducción de la química a la física se postula desde el comienzo, y sobre esta base la noción de reducción se “flexibiliza” lo suficiente como para adaptarse a la postulación original. Sin embargo, la estrategia de Hettema no parece deberse a un desliz argumentativo del autor, sino a un propósito que subyace a lo largo de todo su libro: la defensa de la unidad de la ciencia, a la que se concibe como un “*corolario*” de la noción de reducción (Hettema 11). Según el autor, rechazar la reducción de la química a la física conduce a la “perezosa conclusión de que la química y la física ocupan diferentes ‘nichos’ o ‘paradigmas’, sin posibilidad alguna de comunicación significativa entre ellas” (Hettema 413); si esto sucede entre dos áreas cercanas como la química y la física, “¿qué esperanza hay entre áreas donde las dificultades son mucho más desalentadoras, como las ciencias médicas y la biología? [...] ¿Qué sucede con la unidad de la ciencia?” (413). Queda claro, entonces, que según el autor la reducción entre teorías e incluso entre disciplinas científicas debe ser postulada para evitar la disgregación de la ciencia que atenta contra el ideal de unificación. Pero la pregunta es: ¿la unificación de la ciencia exige reducción?

A lo largo de la historia de la ciencia, los científicos recurrentemente han intentado la unificación de diferentes teorías —al menos dentro de su campo de especialización— bajo la convicción de que la realidad es un todo armónico y no una mera totalidad inconexa. Sin duda, este ideal de unificación ha operado como un potente motor de la investigación científica. Y también es cierto que, en la mayoría de los casos históricos, este ideal se ha concebido en términos de reducción o dependencia ontológica. El pluralismo ontológico de

raigambre kantiana no renuncia al ideal de unificación, si bien lo mantiene bajo una idea de unificación más flexible, que se inscribe en la perspectiva abierta por Otto Neurath, quien argumenta que la ciencia no se orienta hacia un sistema único, sino que procede mediante sistematizaciones locales, por lo cual tiene un carácter plural y siempre incompleto. De aquí que Neurath utilice la imagen de la ciencia como *enciclopedia*, dado que las conexiones entre teorías pueden ser más estrechas o más débiles y de diverso tipo, además de que “la conexión total no es transparente” (Neurath 107).

Cuando las relaciones interteóricas se estudian en la ciencia de “carne y hueso”, se comprueba la necesidad de múltiples recursos de muy diferente naturaleza para establecer los vínculos. No se trata de meras herramientas a las que recurrimos en respuesta a nuestras limitaciones perceptuales o tecnológicas, sino que introducen contenido nomológico significativo al cuerpo teórico de la ciencia. Esto implica abandonar un supuesto tradicional, aquél que concentra el contenido nomológico de la ciencia en las leyes propias de las teorías, considerando que toda condición “auxiliar”, incluidas las necesarias para establecer los vínculos, representan los aspectos contingentes de sus distintas aplicaciones (*cf.* Wilson). Desde la perspectiva del pluralismo ontológico, las relaciones interteóricas, y por ende las condiciones que permiten su formulación, no juegan un papel tan accesorio como sugiere el enfoque tradicional, sino que forman una parte sustancial del conocimiento científico. Estas relaciones constituyen *nexos nomológicos* de carácter *simétrico*, los cuales funcionan como “puentes” que pueden “recorrerse” en ambos sentidos; en consecuencia, no imponen relaciones de prioridad o dependencia entre las ontologías de las teorías así vinculadas y, en consecuencia, permiten establecer una articulación no reductiva ni jerárquica entre las teorías físicas vigentes.

La relación entre dos teorías y sus correspondientes ontologías es un vínculo local en una estructura plural y compleja. Desde la perspectiva pluralista, las relaciones interteóricas, cuando pueden establecerse, no conducen necesariamente a una jerarquía de niveles, a una “cadena” de teorías donde cada “eslabón” se conecta sólo con los dos inmediatamente adyacentes. Por el contrario, las teorías simultáneamente aceptadas conforman una “red”, donde una misma teoría puede conectarse con dos o más teorías, relacionándose de un modo diferente con cada una de ellas. Por ejemplo, la mecánica clásica se vincula mediante nexos completamente diferentes con la mecánica estadística clásica, con la relatividad especial y con la mecánica cuántica. Las correspondientes teorías forman, así, una estructura reticular basada en los puentes nomológicos que las conectan. En este reticulado, las fronteras disciplinares pierden importancia. Éste es precisamente el caso de la relación entre química y física: en el

ámbito considerado propio de la química reaparece una estructura de red con sus nexos interteóricos que, en algunos casos, atraviesan los límites tradicionales de la disciplina para establecer vínculos con teorías propiamente físicas, como la mecánica cuántica —sin que por ello las teorías químicas involucradas, ni las correspondientes ontologías, pierdan su autonomía.

En definitiva, lejos de conducir a una ciencia disgregada, el pluralismo ontológico de raigambre kantiana permite establecer una articulación, una forma de unificación que, al reconocer la variedad de relaciones interteóricas posibles en la ciencia, trasciende las fronteras convencionales que suelen separar más que vincular las diferentes disciplinas científicas.

5.3. Hetteema y Mulder: ¿qué son los orbitales?

Durante el segundo semestre de 1999, una noticia sacudió al mundo de la química y de la física: los orbitales habían sido observados y fotografiados por primera vez (Zuo et ál.). El resultado experimental, anunciado en la tapa de la prestigiosa revista científica *Nature* bajo el inequívoco título “*Orbitals observed*”, es descrito por los autores en los siguientes términos: “Todos nuestros mapas muestran fuertes distribuciones no-esféricas de carga alrededor de los átomos de cobre, con la forma [*shape*] característica de los orbitales d” (Zuo et ál. 51). La “visualización” de orbitales fue rápidamente comunicada a través del mundo científico (*cf.*, *v.g.*, Jacoby, Yam, Zurer) y fue nominada como uno de los cinco *highlights* del año en la química (Zurer). A su vez, científicos de prestigiosas universidades señalaron de inmediato la utilidad de este trabajo experimental como punto de partida para la comprensión de otros fenómenos, como la superconductividad de óxidos de cobre a altas temperaturas (Humphreys). Algunos libros de texto no tardaron en reproducir las fotografías obtenidas en los experimentos, como confirmación experimental de las predicciones teóricas (Tinoco Jr. et ál.). Mientras tanto, otro grupo experimental comunicó la visualización de orbitales en otro compuesto poco después de la publicación del primer artículo (Pascual et ál.).

A pesar del impacto y la expectativa que generó el resultado de la observación de orbitales, algunos químicos y filósofos de la química objetaron rápidamente las conclusiones obtenidas por los investigadores responsables de la experiencia, señalando un supuesto error conceptual cometido en la interpretación de las visualizaciones (Scerri 2000c, 2001, Wang & Schwarz 2000). Por ejemplo, Scerri insistió en que los orbitales no pueden ser visualizados, 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. El error conceptual, señala el autor, consiste en confundir el concepto de orbital con el concepto de densidad de carga (o de densidad de electrones) el cual, efectivamente, sí se observa durante los experimentos.

Sin embargo, algunos químicos y educadores en química han reaccionado frente a este enfoque normativista, señalando que la interpretación no realista tendrá muy poco impacto en la utilización de los orbitales en la práctica de la química y la enseñanza de la disciplina (Richman 1999a, b, Emerson). A partir de ésta y otras críticas, Scerri comenzó a mitigar su posición, adoptando una “posición intermedia” entre normativismo y naturalismo: si bien los orbitales no pueden ser observados de acuerdo con la mecánica cuántica, los educadores pueden emplearlos de manera realista, pero señalando cuidadosamente sus limitaciones (Scerri 2006). Cuando el debate parecía comenzar a mitigarse, se anunció la visualización de orbitales moleculares del nitrógeno en fase gaseosa (Itatani et ál.).

Si hasta el momento de las primeras noticias la discrepancia acerca del significado del término ‘orbital’ podía quedar confinada al plano epistemológico, con el anuncio de la observación de orbitales la discusión ingresa decididamente en el terreno ontológico. Ya no se trata de establecer el papel explicativo del concepto de orbital o la posibilidad de su descripción en términos mecánico-cuánticos: a partir de ese momento el problema se convierte en la cuestión de decidir si los orbitales existen o no. En este contexto, el artículo “Why orbitals do not exist?” (Labarca & Lombardi 2010) ingresa explícitamente en la discusión para defender la existencia objetiva de los orbitales en química desde la perspectiva del pluralismo ontológico de raigambre kantiana. En este trabajo se parte de señalar el *doble significado* del término ‘orbital’: mientras en *mecánica cuántica* ‘orbital’ refiere a la función de onda de un electrón, según el significado propio de la *química* refiere a la región de mayor densidad electrónica, esto es, la región del espacio donde es más probable encontrar al electrón (típicamente, con una probabilidad del 90%). Pero el artículo también se señala la profunda ruptura ontológica entre los dos dominios. La *contextualidad* cuántica, esto es, la imposibilidad de asignar de un modo consistente un valor preciso a todos los observables de un sistema que se encuentra en un cierto estado cuántico (Kochen & Specker), así como la *indistinguibilidad* de las “partículas elementales” que conduce a las peculiares estadísticas cuánticas (*cf.* French & Krause), ponen en crisis la noción filosófica tradicional de *objeto individual*, que posee todas sus propiedades determinadas y que preserva su identidad a través del cambio. Por otra parte, la *no-localidad* cuántica (Einstein, Podolsky & Rosen) impide considerar a un sistema cuántico con independencia de las correlaciones cuánticas —debidas

al entrelazamiento (*entanglement*) que mantiene con otros sistemas cuánticos con los que ha interactuado, aun cuando tales interacciones hayan cesado en el presente—, y con ello desafía la noción tradicional de *objeto local*, esto es, que puede identificarse por su *localización espacial* definida. La química, en cambio, utiliza nociones clásicas o semi-clásicas para caracterizar a sus objetos: la molécula es concebida como un objeto individual, compuesto de núcleos clásicos espacialmente localizados, y electrones que resultan ser semi-clásicos ya que, si bien son individuos con ubicaciones espaciales definidas, su movimiento no se encuentra regido por las ecuaciones clásicas sino por la ecuación de Schrödinger bajo su interpretación gnoseológica. Cada átomo es, entonces, un objeto individual —el núcleo— espacialmente localizado, compuesto de otros objetos individuales —los electrones— que se disponen a su alrededor de un modo que la teoría determina sólo probabilísticamente.

Ahora bien, lejos de considerar esta ruptura como un síntoma de las limitaciones de la descripción semi-clásica que brinda la química y, con ello, concluir la inexistencia de los orbitales, Labarca & Lombardi (2010) adoptan un pluralismo ontológico que les permite admitir la existencia de los orbitales en la ontología química. Puesto que toda ontología surge de la síntesis entre realidad nouménica y esquema conceptual, el dominio ontológico de la cuántica resulta tan constituido como el de la química molecular y, en consecuencia, no cuenta con privilegio alguno. Por lo tanto, puede afirmarse de un modo consistente que los orbitales —así como otras entidades cuya existencia resulta conflictiva desde el punto de vista cuántico, como la forma molecular y el enlace químico— no existen en la ontología cuántica pero sí existen en la ontología de la química molecular: el mundo de la química preserva su autonomía ontológica puesto que las entidades químicas no necesitan de las entidades cuánticas para legitimar su existencia.

En su ya mencionado libro *Reducing Chemistry to Physics*, Hettema dedica el Capítulo 9 al problema ontológico de los orbitales y critica largamente las conclusiones pluralistas de Labarca & Lombardi. El autor comienza reconstruyendo el problema:

El tema es que parece haber una discontinuidad ontológica entre el término ‘orbital’ tal como se lo usa en muchas teorías de la química, y el término ‘orbital’ tal como se lo usa en teoría cuántica; mientras la química ha sido exitosa al adquirir el término ‘orbital’ de la física, ha dado al término un uso que es inconsistente con el uso del término en teoría cuántica y, por tanto, podría argumentarse que la inconsistencia epistémica se traduce en una inconsistencia ontológica (Hettema 352).

Cabe señalar que la mencionada “traducción” de lo epistémico a lo ontológico no es tal, sino que las conclusiones ontológicas resultan de una perspectiva de corte kantiano. Pero, además, Hetteema supone equivocadamente que el término ‘orbital’ pertenece a la física cuántica, ignorando que se origina en los albores de la química cuántica: el término ‘orbital’ es acuñado por Robert Mulliken en la década de 1920, época de la “*Old Quantum Mechanics*”, para referir a “algo parecido a una órbita” donde hay una alta probabilidad de que se encuentre un electrón (Mulliken 13). Pero mientras la mecánica cuántica siguió un desarrollo teórico más formal y abstracto donde el término ‘orbital’ pasó a ser reemplazable por ‘función de onda monoeléctronica’, el concepto de orbital continuó omnipresente en la química.

Según Hetteema, Labarca & Lombardi realizan “una significativa prestidigitación cuando interpretan los orbitales como ‘las regiones espaciales donde la posición de los electrones es más probable’, ya que en la expansión de la función de onda los orbitales son más adecuadamente descriptos como una base” (Hetteema 354). Hasta aquí parece que la prestidigitación se debe a que los orbitales son funciones de onda monoeléctronicas y, por ello, afirma que los autores “confunden el concepto de ‘orbital’ per se (el concepto de orbital como una ‘base’) con el concepto de la densidad electrónica que resulta de un orbital *ocupado*” (354, énfasis del autor). Tal vez para enmendar tal confusión, a continuación Hetteema nos explica la diferencia entre la función de onda de un sistema multielectronico y el observable densidad electrónica, y llama ‘orbitales’ a los elementos de la base ortonormal de funciones de onda monoeléctronicas sobre la cual se expande la función de onda original. Sobre esta base, concluye que “no podemos igualar ‘orbitales’ a ‘regiones espaciales del átomo donde la ubicación de los electrones es más probable’, como hacen Labarca & Lombardi. Este papel es jugado por la densidad” (358).

En primer lugar, resulta bastante arriesgado acusar a dos autores de desconocer la distinción teórica entre estado cuántico y observable cuántico, una distinción tan básica que figura en las primeras páginas de cualquier libro de texto sobre mecánica cuántica. No se trata aquí de una confusión conceptual, sino de elucidar el significado de un término tal como se lo *utiliza* en el contexto teórico compartido por una cierta comunidad científica. En este sentido, nótese que la noción misma de “orbital ocupado” remite a una noción espacial, completamente ajena a la mecánica cuántica: en física no tiene sentido afirmar que una función de onda está “ocupada”, y menos aún que está “desocupada”. Pero, además, el autor no ha brindado hasta aquí otro argumento para decir por qué los orbitales no son regiones espaciales más que la propia afirmación dogmática de que son algo diferente: los orbitales no

son regiones del espacio —a pesar de poder encontrarse ocupados y desocupados— sencillamente porque son funciones de onda monoeléctricas.

Algo más parecido a un argumento aparece a continuación, cuando Hettema menciona un caso del fenómeno de estereo-selección, en que el signo de los orbitales explica la diferencia entre dos tipos de estructura molecular, lo cual no sería posible si los orbitales fueran regiones espaciales (Hettema 358-361). Si bien aparentemente convincente, lo que en realidad este argumento muestra son las limitaciones del concepto de orbital como región espacial: en este caso, la explicación mecánico-cuántica en términos de orbitales-funciones de onda resulta más adecuada para explicar el fenómeno de interés. Pero esto no implica impugnar el significado químico del término orbital, y ello por diversos motivos. En primer lugar, porque todos los conceptos científicos tienen un rango de aplicabilidad más allá del cual ya no resultan adecuados; por ejemplo, los conceptos clásicos de espacio, tiempo y simultaneidad absoluta ya no son aplicables para objetos que se mueven a velocidades cercanas a la de la luz, o los conceptos de partícula y de onda como entidades claramente diferentes pierden su aplicabilidad en el ámbito subatómico. Por lo tanto, si priváramos de referente a los conceptos científicos debido a sus límites de aplicabilidad, nos quedaríamos con una ciencia completamente vacía. En segundo lugar, no se trata de que la mecánica cuántica viene a resolver las “deficiencias” propias de la química: las limitaciones se dan también en sentido contrario, cuando los conceptos mecánico-cuánticos no son aplicables para dar cuenta de fenómenos químicos, como la forma molecular. Finalmente, cuando Hettema nos habla de cómo la “forma [*shape*]” de los orbitales moleculares “ocupados” y “desocupados” se utilizan “para determinar la propensión de una reacción química” (360), se pone de manifiesto el modo en que la concepción espacial de orbital se cuele incluso en esta explicación supuestamente mecánico-cuántica del fenómeno de estereo-selección. Esta yuxtaposición de conceptos clásicos y cuánticos es una característica propia de la química cuántica como disciplina (*cf.* Lombardi & Martínez González 2012).

A diferencia de Hettema, Peter Mulder (2010, 2011) admite que hay dos sentidos del término ‘orbital’. Si bien toma como significado primario el de “funciones de onda monoeléctricas en general, de las cuales los orbitales hidrogenoides son meramente un subconjunto” (Mulder 2010, 178), también reconoce su uso como denotando una región de alta densidad electrónica, y critica a Scerri (2002) por “subestimar qué tan extendido se encuentra este uso del término” (Mulder 2010, 31). En efecto, el autor recuerda que el *Oxford Dictionary of Chemistry* brinda la siguiente definición: “alternativamente, el orbital puede pensarse como una distribución de carga eléctrica” (Daintith 409) y concluye

que: “debe quedar claro que la interpretación de los orbitales como regiones de densidad electrónica impregna toda la química” (Mulder 2011, 31).

No obstante, Mulder también objeta la posición de Labarca & Lombardi (2010). En primer lugar, la considera “incoherente. Esto se debe a que sostienen que también en química los electrones no tienen trayectorias definidas, i. e. no tienen posiciones definidas en todo instante” (Mulder 2011, 32). Puesto que no cita textualmente el pasaje criticado, y ni siquiera indica el número de página, es difícil entender a partir de qué afirmación Mulder puede haber extraído esta conclusión, ya que Labarca & Lombardi sostienen todo lo contrario: mientras que los ítems cuánticos no son individuos localizados espacialmente, los electrones en química, si bien regidos por una ley que determina su posición sólo de un modo estadístico, son objetos individuales a la manera clásica. Tal vez la lectura de Mulder se deba a que en un momento se afirma que “los electrones no siguen órbitas definidas” (Labarca & Lombardi 2010, 154). Pero esto no significa, como interpreta Mulder, que se niegue a los electrones “químicos” una trayectoria definida: no toda trayectoria es una órbita; una órbita es una trayectoria cerrada que, en general, se encuentra regida por alguna ley simple. Lo que se afirma en el artículo de Labarca & Lombardi es que, si bien la química no adopta ya un modelo atómico “planetario”, donde los electrones siguen órbitas a distancias del núcleo bien definidas, continúan siendo pensados como objetos clásicos, individuales, locales, con una ubicación espacial definida.

Luego de esto, Mulder se pregunta: “¿Significa esto que la química es ‘falsa’ porque considera los electrones como individuos? Creo que debe concederse que, en la medida en que los químicos hablan de electrones como individuos, lo que dicen no es en efecto literalmente verdadero.” (Mulder 2011, 32). Según el autor, el “individualismo acerca de los electrones en química” tiene un carácter meramente pragmático, diferente del “no-individualismo en mecánica cuántica” que resulta del análisis filosófico del formalismo matemático (33). Tenemos aquí una clara declaración de reduccionismo ontológico: mientras los electrones son realmente como los describe la mecánica cuántica, su tratamiento en química molecular es estrictamente falso y sólo pragmáticamente útil; la química sólo brinda herramientas útiles, la descripción de la “verdadera realidad” es una tarea de la física. Pero es precisamente a este tipo de supuesto que se opone el pluralismo ontológico, y aún no queda claro cuál es la crítica que le dirige Mulder.

La crítica más seria no es, sin embargo, la de incoherencia. Como señalamos, Mulder coincide con Labarca & Lombardi acerca de la existencia de dos significados del término ‘orbital’. Sin embargo, disiente con los autores acerca de

una discontinuidad entre ambos significados, basada en la ruptura conceptual entre química molecular y mecánica cuántica. Según el autor, “si existe algún tipo de “ruptura conceptual”, ésta aparece dentro de la mecánica cuántica”, y se debe a la utilización de aproximaciones, en particular la que introduce la supresión de todas las interacciones excepto aquéllas con los núcleos (Mulder 2011, 33): “Las aproximaciones se realizan por tanto dentro de la mecánica cuántica, como resultado de las cuales surge el concepto mecánico cuántico de orbital” (33). A su vez, el concepto de orbital como región de alta densidad electrónica “se sigue bastante directamente de su significado como función de onda [...]. Los dos conceptos son por lo tanto continuos entre sí” (33).

Es muy interesante analizar esta crítica puesto que pone de manifiesto una confusión muy común en la discusión acerca del modo en que se utiliza la mecánica cuántica en química. La confusión consiste, principalmente, en no distinguir entre *ruptura conceptual* y *aproximación*. Cuando en el ámbito de la mecánica clásica se estudia el movimiento de un cuerpo sobre una superficie con bajo rozamiento, la situación puede *aproximarse* a otra sin rozamiento que, si bien no existe en la realidad empírica, es una situación admisible en mecánica clásica. Por el contrario, si en una aplicación de la relatividad especial debe suponerse la existencia de una partícula que se mueve a una velocidad superior a la de la luz, tal situación implica una *ruptura conceptual* respecto de la relatividad especial puesto que introduce un supuesto contradictorio con uno de los propios principios de la teoría. Volviendo al caso que nos ocupa, la supresión de interacciones y la consideración de las funciones de onda de los electrones aislados es efectivamente una aproximación, y se efectúa dentro de la mecánica cuántica. Pero éste no es el caso cuando se pasa a pensar la densidad electrónica como resultado de una “nube” de partículas individuales cargadas que se mueven alrededor del núcleo. Sobre esta base se interpreta la densidad de probabilidad r que se obtiene como el cuadrado de la función de onda de un electrón:

si pudiera efectuarse una serie de mediciones sobre x sin perturbar el movimiento de la partícula, la distribución resultante sería r . Entonces, ésta reflejaría el movimiento de la partícula del mismo modo que la densidad de la imagen sobre una fotografía de larga exposición refleja el movimiento de un objeto macroscópico” (Nelson 643).

Pero aquí ya no se trata de una mera aproximación: estamos suponiendo la existencia de objetos clásicos, cuya existencia es contradictoria con la “no-individualidad” cuántica que resulta de los diversos principios de la teoría. Por lo tanto, a diferencia de lo que afirma Mulder, el paso del concepto de orbital

como función de onda al concepto de orbital como región de alta densidad de probabilidad de presencia del electrón no es una mera aproximación ni una transformación continua, sino una ruptura conceptual respecto de la teoría supuestamente “fundamental”.

Más allá de la respuesta detallada a las críticas de Hettema y Mulder, es interesante preguntarse por qué éstos y otros autores dedican tanto esfuerzo a negar sentido a la idea de “región del espacio donde es más probable que se encuentren los electrones en un átomo”, o al menos a insistir en su “continuidad” respecto del concepto cuántico de función de onda. Y no es difícil suponer que ello se debe precisamente al supuesto ontológicamente reduccionista que adjudica al mundo físico el carácter fundante de la realidad toda. Si un concepto químico no se ajusta a dicho mundo, es estrictamente falso; por lo tanto, o bien se niega su significatividad, o bien se intenta demostrar que en realidad sí se ajusta gracias a una aproximación continua. La perspectiva del pluralismo ontológico corta el problema de raíz al rechazar la reducción ontológica: en la medida en que tanto la ontología química como la ontología cuántica pueden coexistir con el mismo estatuto ontológico, la aceptación de conceptos incompatibles en diferentes contextos teóricos ya no resulta conflictiva. De este modo, podemos brindar un fundamento filosófico a la utilización no contradictoria de los dos sentidos del concepto de orbital.

5.4. Manafu: condiciones para la autonomía ontológica

En un breve y bien escrito artículo, Alexander Manafu discute la propuesta del artículo original sobre pluralismo ontológico de Lombardi & Labarca (2005). El autor no cuestiona la propuesta pluralista; su objetivo consiste en poner de manifiesto que el realismo internalista no es *suficiente*, por sí mismo, para asegurar la autonomía ontológica de la química.

Luego de reconstruir adecuadamente las tesis del artículo original del 2005, Manafu admite la posibilidad de coexistencia de esquemas conceptuales diferentes. Sin embargo, tal coexistencia no es suficiente para afirmar que las ontologías definidas por tales esquemas poseen el mismo estatuto ontológico: es necesario argumentar que todas ellas tienen, en términos de Quine, los mismos “derechos ontológicos” (Manafu 3). En efecto, pueden darse dos situaciones. En primer lugar, “[d]os esquemas conceptuales diferentes pueden diferir respecto de sus virtudes teóricas: uno puede ser más simple, más sistematizado, o puede tener más poder explicativo” (3). En este caso, no es correcto afirmar que las correspondientes ontologías son igualmente objetivas. En segundo lugar,

los esquemas conceptuales pueden no ser lógicamente independientes entre sí. Por ejemplo, si un esquema conceptual puede deducirse de otro mediante la ayuda de principios de correspondencia ..., la aseveración de que diferentes esquemas conceptuales definen ontologías distintas se torna problemática” (3).

En esta situación, claramente, tampoco sería legítimo negar la prioridad ontológica de uno de los dominios respecto del otro.

El argumento de Manafu es estrictamente correcto, incluso respecto del pluralismo ontológico de raigambre kantiana que supera la posición internalista de aquel primer artículo (Lombardi & Labarca 2005). Sin embargo, no desmonta las conclusiones pluralistas. Veamos por separado cada una de las dos situaciones que el autor menciona.

Admitiendo el punto de vista de Manafu, no sólo puede hablarse de diferentes “virtudes teóricas” de dos esquemas conceptuales, sino que, desde una perspectiva aún más general, pueden considerarse diferentes virtudes pragmáticas, entre las cuales se incluyen las teóricas, pero también las empíricas: algunos esquemas conceptuales pueden dar lugar a teorías más exitosas en lo que Ian Hacking denomina la *intervención* sobre la realidad. Como afirma este autor, hemos reflexionado demasiado acerca del plano de la representación, descuidando la intervención en la práctica efectiva de la ciencia; es en este ámbito donde debemos encontrar el criterio de existencia de las entidades de las que nos hablan nuestras teorías. Si atendemos, entonces, al cambio de perspectiva que nos propone Hacking, nuestras conclusiones ontológicas acerca del dominio referido por la química molecular debe dejar de basarse en consideraciones formales acerca de relaciones interteóricas, para tomar en cuenta la manipulación de entidades químicas en la práctica tecnológica. Pero cuando adoptamos esta perspectiva pragmática, la química molecular lleva las de ganar, puesto que ha desarrollado un vasto edificio teórico mediante el cual ha logrado explicar un sinnúmero de fenómenos observables y reproducibles en el laboratorio. Conceptos como orbital atómico, enlace químico y forma molecular no sólo han colaborado en la sistematización de la química y han incrementado su poder explicativo, sino que también se han demostrado empíricamente exitosos en la práctica de la disciplina y han resultado extremadamente fructíferos en la manipulación y obtención de diferentes sustancias químicas, tanto naturales como artificiales. En definitiva, la asombrosa fecundidad de la química molecular en la manipulación de sustancias conocidas y en la creación de nuevas sustancias se convierte en el mejor argumento en favor de la existencia de las entidades que pueblan su ontología.

En cuanto a la segunda situación considerada con Manafu, si bien es cierto que la existencia de una relación de deducción entre esquemas conceptuales bloquea la autonomía ontológica, éste no es el caso de la relación entre química y física. El argumento de Manafu saca de contexto la conclusión del artículo original de Lombardi & Labarca (2005). En efecto, ese trabajo comenzaba pasando revista al amplio consenso entre los filósofos de la química acerca de la irreductibilidad epistemológica de la química a la mecánica cuántica. Y precisamente sobre esa base se afirmaba:

Si los conceptos químicos pudieran reducirse epistemológicamente a conceptos cuánticos, habría una buena razón para creer en la reducción del mundo químico a la ontología de la mecánica cuántica. Pero cuando se acepta la irreductibilidad epistemológica de la química, no hay otro argumento más que el realismo metafísico para postular la reducción ontológica (Lombardi & Labarca 2005, 139-140).

En definitiva, si bien la argumentación de Manafu no tiene fisuras lógicas, ninguna de las dos situaciones que el autor menciona resultan críticas graves para la autonomía ontológica del mundo químico fundado sobre la perspectiva pluralista.

6. CONCLUSIONES

Luego de largo tiempo de verse postergada, durante las últimas décadas la filosofía de la química ha experimentado un rápido crecimiento, ocupando en la actualidad una posición reconocida en el ámbito de las filosofías de las ciencias especiales. Si bien sus intereses y temáticas se han diversificado durante este proceso, el problema de las relaciones entre física y química siguen concentrando la atención de los investigadores. Esto se debe no sólo a que el problema se vincula estrechamente con discusiones tradicionales de la filosofía de la ciencia, sino al hecho de que las posturas a este respecto influyen decisivamente sobre el modo de concebir la química como disciplina científica y sobre la propia legitimidad de la filosofía de la química como ámbito de reflexión filosófica.

En este artículo hemos presentado un examen crítico del modo en que la concepción de las relaciones entre química y física ha ido variando durante las últimas décadas. En particular, hemos señalado que sólo muy recientemente se han presentado posiciones capaces de defender la autonomía ontológica del mundo químico y, con ello, de revertir la tradicional visión de la química como disciplina secundaria respecto de la física. El objetivo principal de este trabajo ha consistido continuar articulando la defensa de un pluralismo onto-

lógico de raigambre kantiana, en este caso frente a críticas recientes. Este pluralismo permite la coexistencia de ontologías diferentes pero igualmente objetivas, interconectadas por relaciones objetivas no-reductivas. Sobre la base de este marco de referencia puede justificarse la autonomía ontológica del mundo químico mediante argumentos filosóficos consistentes. Tal autonomía coloca a la química en la misma posición jerárquica que la física dentro del contexto de las ciencias naturales. En la medida en que la química sea concebida no como una ciencia subordinada dedicada al estudio de entidades secundarias y derivadas, sino como una disciplina científica referida a un ámbito ontológicamente autónomo, habrá de adquirir también legitimidad como un área de interés filosófico: los problemas químicos merecen atención filosófica particular, dado que no pueden reducirse a los problemas tradicionalmente discutidos en la filosofía de la física. Por ello, es de esperar que, en el futuro, las discusiones ontológicas adquieran un papel aún más relevante en la filosofía de la química, a fin de contribuir a esclarecer la naturaleza de aquello de lo que nos habla una disciplina tan fecunda y pragmáticamente exitosa como la química.

TRABAJOS CITADOS

- Amann, A. "Must a molecule have a shape?". *South African Journal of Chemistry* 45 (1992): 29-38.
- Baird, D., Scerri, E. & McIntyre, L., Eds. *Philosophy of Chemistry: Synthesis of a New Discipline*. Dordrecht: Springer, 2006. Boston Studies in the Philosophy of Science 242.
- Benfey, T. "Reflections on the philosophy of chemistry and a rallying call for our discipline". *Foundations of Chemistry* 2 (2000): 195-205.
- Bishop, R. & Atmanspacher, H. "Contextual emergence in the description of properties". *Foundations of Physics* 36 (2006): 1753-1777.
- Castagnino, M. & Lombardi, O. "Self-induced decoherence: A new approach". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 35 (2004): 73-107.
- Cat, J. "The unity of science". *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Ed. E. N. Zalta. 2007. <<http://plato.stanford.edu/archives/fall2010/entries/scientific-unity/>>.
- Chamizo, J. A. "The public image of chemistry". *Educacion Química* 22 (2011): 320-331.

- Daintith, J. *Dictionary of Chemistry*. Oxford: Oxford University Press, 2004.
- Dirac, P. A. M. "Quantum mechanics of many-electron systems". *Proceedings of the Royal Society* A338 (1929): 714-733.
- Emerson, K. "The quantum mechanical explanation of the periodic system". *Journal of Chemical Education* 76 (1999): 1189.
- Einstein, A., Podolsky, B. & Rosen, N. "Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?". *Physical Review* 47 (1935): 777-780.
- Estany, A. "¿Es posible una filosofía de la química?". *Investigación y Ciencia* 420 (2011 septiembre): 52-53.
- French, S. & Krause, D. *Identity in Physics: A Historical, Philosophical and Formal Analysis*. Oxford: Oxford University Press, 2006.
- Hacking, I. *Representing and Intervening*. Cambridge: Cambridge University Press, 1983.
- Hawkes, S. J. "Unsaturated bonds should not be represented in introductory chemistry by orbital overlap". *Chemistry. Bulgarian Journal of Chemical Education* 16 (2007): 90-91.
- Hendry, R. "Models and approximations in quantum chemistry". *Idealization IX: Idealization in Contemporary Physics*. Ed. N. Shanks. Amsterdam: Rodopi, (1998): 123-42. *Poznan Studies in the Philosophy of the Sciences and the Humanities* 63.
- . "Is there downwards causation in chemistry?". *Philosophy of chemistry: synthesis of a new discipline*. Berlin: Springer (2006): 173-189.
- . "Ontological reduction and molecular structure". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41 (2010): 183-191.
- Hettema, H. *Reducing Chemistry to Physics: Limits, Models, Consequences*. Groningen: Rijksuniversiteit Groningen, 2012.
- Hoffmann, R. "What might philosophy of science look like if chemists built it?". *Synthese* 155 (2007): 321-336.
- Humphreys, C. J. "Electron seen in orbit". *Nature* 401 (1999): 49-52.
- Itatani, J., Levesque, J., Zeidler, D., Niikura, H., Pépin, H., Kieffer, J. C., Corkum, P. B. & Villeneuve, D. M. "Tomographic imaging of molecular orbitals". *Nature* 432 (2004): 867-871.
- Jacoby, M. "Picture-perfect orbitals". *Chemical & Engineering News* 77 (1999): 8.

- Kemeny, J. G. & Oppenheim, P. "On reduction". *Philosophical Studies* 7 (1956): 6-19.
- Kochen, S. & Specker, E. "The problem of hidden variables in quantum mechanics". *Journal of Mathematics and Mechanics* 17 (1967): 59-87.
- Koolage, W. J. & Hall, R. "Chemical action: what is it, and why does it really matter?". *Journal of Nanoparticle Research* 13 (2011): 1401-1417.
- Labarca, M. & Lombardi, O. "Irreversibilidad y pluralismo ontológico". *Scientiae Studia* 5 (2007): 139-167.
- . "The end of the dream of unity". *Current Science* 94 (2008): 438-439.
- . "Why orbitals do not exist?". *Foundations of Chemistry* 12 (2010): 149-157.
- . "On the autonomous existence of chemical entities". *Current Physical Chemistry* 1 (2011): 69-75.
- Le Poidevin, R. "Missing elements and missing premises: A combinatorial arguments for the ontological reduction of chemistry". *The British Journal for the Philosophy of Science* 56 (2005): 117-134.
- Lombardi, O. "Determinism, internalism and objectivity". *Between Chance and Choice: Interdisciplinary Perspectives on Determinism*. Eds. H. Atmanspacher & R. Bishop. Thorverton: Imprint-Academic, 2002.
- Lombardi, O. & Labarca, M. "The ontological autonomy of the chemical world". *Foundations of Chemistry* 7 (2005): 125-148.
- . "The ontological autonomy of the chemical world: A response to Needham". *Foundations of Chemistry* 8 (2006): 81-92.
- Lombardi, O. & Martínez González, J. C. "Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica?", *Scientiae Studia* 10 (2012): 649-670.
- Lombardi, O. & Pérez Ransanz, A. R. "Lenguaje, ontología y relaciones interteóricas: en favor de un genuino pluralismo ontológico". *Revista Arbor. Ciencia, Pensamiento y Cultura* 187 (2011): 43-52.
- . *Los Múltiples Mundos de la Ciencia. Un Realismo Pluralista y su Aplicación a la Filosofía de la Física*. México: UNAM-Siglo XXI, 2012.
- Luisi, P. L. "Emergence in chemistry: Chemistry as the embodiment of emergence". *Foundations of Chemistry* 4 (2002): 183-200.

- Manafu, A. "Internal realism and the problem of ontological autonomy: A critical note on Lombardi and Labarca". *Foundations of Chemistry* 15 (2012): 225-228.
- McIntyre, L. "The philosophy of chemistry: ten years later". *Synthese* 155 (2007a): 291-292.
- . "Emergence and reduction in chemistry: ontological or epistemological concepts?". *Synthese* 155 (2007b): 337-343.
- Mulder, P. "On the alleged non-existence of orbitals". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41 (2010): 178-182.
- . "Are orbitals observable?". *Hyle - International Journal for Philosophy of Chemistry* 17 (2011): 24-35.
- Mulliken, R. S. *Life of a Scientist*. New York: Springer-Verlag, 1986.
- Nagel, E. *The Structure of Science*. New York: Harcourt, Brace & World, 1961.
- Needham, P. "Ontological reduction: A comment on Lombardi-Labarca". *Foundations of Chemistry* 8 (2006): 73-80.
- . "Nagel's analysis of reduction: Comments in defense as well as critique". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41 (2010): 163-170.
- Nelson, P. "How do electrons get across nodes?". *Journal of Chemical Education* 67 (1990): 643-647.
- Neurath, O. "Pseudorracionalismo de la falsación". *Redes* 10 (2002): 87-118. Trad. de "Pseudorationalism of falsification". 1935. *Philosophical Papers 1913-1946*. Ed. R. Cohen y M. Neurath. Dordrecht: Reidel, 1983. 121-131.
- Newman, M. "Chemical supervenience". *Foundations of Chemistry* 10 (2008): 49-62.
- Nye, M. J. *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry - Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines 1800-1950*. Berkeley: University of California Press, 1993.
- Pagliaro, P. "On shapes, molecules and models: an insight into chemical methodology". *European Journal of Chemistry* 1 (2010): 276-281.
- Pascual, J. I., Gómez-Herrero, J., Rogero, C., Baró, A. M., Sánchez-Portal, D., Artacho, E., Ordejón, P. & Sovvler, J. M. "Seeing molecular orbitals". *Chemical Physical Letters* 321 (2000): 78-82.
- Pérez Ransanz, A. R. *Kuhn y el Cambio Científico*. México: Fondo de Cultura Económica, 1999.

- Primas, H. *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*. Berlin: Springer, 1983.
- . “Hierarchic quantum descriptions and their associated ontologies”. *Symposium on the Foundations of Modern Physics 1994*. Ed. K. V. Laurikainen, C. Montonen y K. Sunnarborg. Gif-sur-Yvette: Editions Frontières, 1994.
- . “Emergence in exact natural sciences”. *Acta Polytechnica Scandinavica* 91 (1998): 83-98.
- Putnam, H. *Reason, Truth and History*. Cambridge: Cambridge University Press, 1981.
- Richman, R. “In defense of quantum numbers”. *Journal of Chemical Education* 76 (1999a): 608.
- . “The use of one-electron quantum numbers to describe polyatomic systems”. *Foundations of Chemistry* 1 (1999b): 175-83.
- Rohrlich, F. “Pluralistic ontology and theory reduction in the physical sciences”. *The British Journal for the Philosophy of Science* 39 (1988): 295-312.
- Scerri, E. “The electronic configuration model, quantum mechanics and reduction”. *The British Journal for the Philosophy of Science* 42 (1991): 309-25.
- . “Has chemistry been at least approximately reduced to quantum mechanics?”. *PSA 1994*. Vol. 1. Eds. D. Hull, M. Forbes & R. Burian. East Lansing: Philosophy of Science Association, 1994. 160-170.
- . “The periodic table and the electron”. *American Scientist* 85 (1997): 546-553.
- . “The failure of reduction and how to resist disunity of the sciences in the context of chemical education”. *Science & Education* 9 (2000a): 405-425.
- . “Realism, reduction and the ‘intermediate position’”. *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*. Eds. N. Bhushan & S. Rosenfeld. New York: Oxford University Press, 2000b. 51-72.
- . “Have orbitals really been observed?”. *Journal of Chemical Education* 77 (2000c): 1492-1494.
- . “The recently claimed observation of atomic orbitals and some related philosophical issues”. *Philosophy of Science* 68 (2001): S76-S88.
- . “Have orbitals really been observed? (author reply)”. *Journal of Chemical Education* 79 (2002): 210.

- . “Just how ab initio is ab initio quantum chemistry?”. *Foundations of Chemistry* 6 (2004): 93-116.
- . “Editorial 20”. *Foundations of Chemistry* 7 (2005a): 119-123.
- . “Some aspects of the metaphysics of chemistry and the nature of the elements”, *Hyle - International Journal for the Philosophy of Chemistry* 11 (2005b): 127-145.
- . “Normative and descriptive philosophy of science and the role of chemistry”. Baird, Scerri & McIntyre. 119-128.
- . “The ambiguity of reduction”. *Hyle - International Journal for Philosophy of Chemistry* 13 (2007): 67-81.
- . “General introduction to the papers”. *Collected Papers on Philosophy of Chemistry*. Londres: Imperial College Press, 2008a. 1-22.
- . “Philosophy of chemistry, reduction, emergence and chemical education”. *Advances in Teaching Physical Chemistry*. Eds. M. Ellison & T. Schoolcraft. Washington: American Chemical Society, 2008b. 59-72.
- Scerri, E. & McIntyre, L. “The case for the philosophy of chemistry”. *Synthese* 111 (1997): 213-232.
- Schuster, P. “‘Less is more’ and the art of modeling complex phenomena: simplification may but need not be the key to handle large networks”. *Complexity* 11 (2005): 11-13.
- Schwarz, W. H. E. & Wang, S. G. “Some solved problems of the periodic system of chemical elements”. *International Journal of Quantum Chemistry* 110 (2010): 1455-1465.
- Sklar, L. *Physics and Chance*. Cambridge: Cambridge University Press, 1993.
- Ströhle, A. “Molecularization in nutritional science: a view from philosophy of science”. *Molecular Nutrition & Food Research* 54 (2010): 1385-1404.
- Tinoco Jr. I., Sauer, K., Wang, J. C. y Puglisi, J. D. *Physical Chemistry - Principles and Applications in Biological Sciences*. New Jersey: Prentice Hall, 2002.
- Torretti, R. “El realismo científico y la ciencia como es”. *Escritos Filosóficos 1986-2006*. Santiago de Chile: Universidad Diego Portales, 2007. 75-98. Trad. de “Scientific realism and scientific practice”. *The Reality of the Unobservable: Observability, Unobservability and their Impact on the Issue of*

- Scientific Realism*. Ed. E. Agazzi & M. Pauri. Dordrecht: Kluwer, 2000. 113-122.
- . *Manuel Kant*. Santiago de Chile: Ediciones Universidad Diego Portales, 2005.
- Van Brakel, J. "Chemistry as the science of the transformation of substances". *Synthese* 111 (1997): 253-282.
- . *Philosophy of Chemistry. Between the Manifest and the Scientific Image*. Leuven: Leuven University Press, 2000a.
- . "The nature of chemical substances". *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*. Eds. N. Bhushan & S. Rosenfeld. New York: Oxford University Press, 2000b. 162-184.
- Vancik, H. "Opus magnum: An outline for the philosophy of chemistry". *Foundations of Chemistry* 1 (1999): 242-256.
- Vemulapalli, G. K. y Byerly, H. "Remnants of reductionism". *Foundations of Chemistry* 1 (1999): 17-41.
- Vesterinen, V. M. & Aksela, M. "A novel course of chemistry as a scientific discipline: how do prospective perceive nature of chemistry through visits to research groups". *Chemistry Education Research and Practice* 10 (2009): 132-141.
- . "Quantitative analysis of representations of nature of science in nordic upper secondary school textbooks using framework of analysis based on philosophy of chemistry". *Science & Education* 22 (2013): 1839-1855.
- . "Design of chemistry teacher education course on nature of science". *Science & Education* 22 (2013): 2193-2225.
- Vihalemm, R. "The autonomy of chemistry: old and new problems". *Foundations of Chemistry* 12 (2010): 97-107.
- Wang, S. G. & Schwarz, W. H. E. "On closed-shell interactions, polar covalences, d shell holes, and direct images of orbitals: the case of Cuprite". *Angewandte Chemie International Edition* 39 (2000): 1757-1762.
- . "PSE - Icon of chemistry: The periodic system of chemical elements in the new century". *Angewandte Chemie International Edition* 48 (2009): 3404-3415.
- Wasserman, E. & Schaefer, H. F. "Methylene geometry". *Science* 233 (1986): 829.
- Wilson, M. "John Earman's A Primer on Determinism". *Philosophy of Science* 56 (1989): 502-532.

- Woolley, R. G. "Must a molecule have a shape?". *American Chemical Society* 100 (1978): 1073-78.
- . "Natural optical activity and the molecular hypothesis". *Structure and Bonding* 52 (1982): 1-35.
- Yam, P. "Seeing the bonds". *Scientific American* 281 (1999): 28.
- Zuo, J. M., Kim, M., O'Keefe, M. & Spence, J. C. H. "Direct observation of d-orbital holes and Cu-Cu Bonding in Cu₂O". *Nature* 401 (1999): 49-52.
- Zurer, P. "Chemistry's top five achievements". *Chemical & Engineering News* 77 (1999): 38-40.