



Introducción a la Filosofía de la Química

Martín Labarca - Sebastian Fortin (Eds.)

En la filosofía contemporánea de las ciencias, una de las subdisciplinas de mayor crecimiento en las últimas décadas ha sido la filosofía de la química, cuyo origen se remonta a mediados de la década de 1990. El gran interés que ha despertado la disciplina en América Latina ha sido muy significativo para el campo.

Este libro pretende llenar un vacío en el ámbito latinoamericano, colocando en primer plano las perspectivas que emergen de diferentes enfoques disciplinarios. El volumen incluye colaboraciones de investigadores de Chile, Brasil y Argentina. Los trece capítulos se proponen reflejar el estado del arte de cada uno de los tópicos tratados, mostrando aspectos de la ciencia química desde diferentes perspectivas de análisis. El propósito general es introducir a educadores y estudiantes de química, así también como a químicos, historiadores y filósofos de la ciencia en los debates actuales más relevantes en el ámbito de la filosofía contemporánea de la química.



Introducción a la Filosofía de la Química / Labarca, Martín; Fortin, Sebastian (Editores). 1º edición, Sociedad Chilena de Didáctica, Historia y Filosofía de la Ciencias Bella Terra Ltda., Santiago de Chile, Chile, 2023.

1. Filosofía de la química. 2. Historia de la química. 3. Fundamentos de la química.

Editores

Martín Labarca

CONICET y Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires, Argentina.

Sebastian Fortin

CONICET y Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires, Argentina.

Autores

Ronei Mocellin, Universidade Federal do Paraná, Brasil.

Luciana Zaterka, Universidade Federal do ABC, Brasil.

Alfio Zambon, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina.

Fiorela Alassia, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina.

Cristian López, Universidad de Buenos Aires, Argentina y Universidad de Lausanne, Suiza.

María José Ferreira Ruiz, Universität Bielefeld, Alemania.

Hernán Accorinti, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Mario Quintanilla-Gatica, Universidad Católica de Chile, Chile.

Mariana Córdoba, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Martín Labarca, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Sebastian Fortin, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Título: Introducción a la Filosofía de la Química

Editores: Labarca, Martín; Fortin, Sebastian

Editorial: Sociedad Chilena de Didáctica, Historia y Filosofía de la Ciencias Bella Terra Ltda.

Lugar: Santiago de Chile, Chile

Año: 2023

Número de inscripción 2023-A-12437

ISBN 978-956-416-697-1

Diseño editorial: Martín Labarca y Sebastian Fortin

Diseño de portada: Nicolás Martínez - Maximiliano Martínez - Martín Labarca

Coordinación editorial: Martín Labarca y Sebastian Fortin

Las opiniones expuestas en los trabajos publicados en esta colección son de la exclusiva responsabilidad de sus autores.

ÍNDICE

PRÓLOGO	v
INTRODUCCIÓN	vii
ÍNDICE	xii
1. Una breve introducción a la Filosofía de la Química	1
Ronei Mocellin y Luciana Zaterka	
2. La concepción de ‘elemento químico’: desde la antigüedad a las discusiones actuales	34
Alfio Zambon y Fiorela Alassia	
3. Problemas en la tabla periódica de los elementos	53
Martín Labarca	
4. Reducccionismos en filosofía de las ciencias y sus problemas	70
Cristian López	
5. Relaciones entre química y física I: El problema de la naturaleza de los orbitales	91
Martín Labarca	
6. Relaciones entre química y física II: El problema de la estructura molecular ...	106
Sebastian Fortin	
7. Clases naturales en química: esencialismo y antiesencialismo microestructural	125
María José Ferreira Ruiz	
8. Modelos en química: el problema de la electronegatividad	142
Hernán Accorinti y Martín Labarca	
9. El problema de las leyes químicas	159
Hernán Accorinti	
10. Nanoquímica y química supramolecular: algunas consideraciones filosóficas	177
Alfio Zambon y Fiorela Alassia	
11. Historia de la química, filosofía de la química y didáctica de la química. Una triada virtuosa	197
Mario Quintanilla-Gatica	
12. Racionalismo categórico y racionalismo moderado. Perspectivas, contradicciones y propuestas para la formación del profesorado y la enseñanza de la química	212
Mario Quintanilla-Gatica	
13. ¿Es posible una filosofía feminista de la química?	229
Mariana Córdoba	

CAPÍTULO 8

Modelos en química: el problema de la electronegatividad

Hernán Accorinti y Martín Labarca

CONICET – Universidad de Buenos Aires

1. Introducción

La electronegatividad (EN) se ha constituido gradualmente en una herramienta indispensable en cada campo teórico y experimental de la química, y ha encontrado aplicaciones también en física, ingeniería y biología. En el ámbito de la química, el concepto de EN ha sido utilizado para explicar propiedades como la acidez de los solventes, los mecanismos de reacción, la distribución electrónica, las polaridades de enlace y la periodicidad química, entre otros. Sin embargo, el hecho de que la EN no pueda medirse directamente sino sólo indirectamente a través de otras propiedades como la entalpía, la afinidad electrónica o la energía de ionización, ha dado lugar a una proliferación de modelos muy diversos y, junto con ello, a un incomprendimiento respecto de lo que la noción misma de EN implica.

El conjunto de modelos desarrollados ha dado lugar a varios trabajos de revisión y clasificación (*cfr.* Batsanov y Batsanov, 2012; Cherkasov, Galkin, Zueva y Cherkasov, 1998; Mullay, 1987; Politzer y Murray, 2018; Pritchard y Skinner, 1955; Ruthenberg y Martínez González, 2017). En términos generales, es posible afirmar que es posible agruparlos en modelos termoquímicos, modelos espectroscópicos o geométricos y modelos cuánticos. Los valores numéricos de los múltiples modelos existentes generan una escala (denominada escala de EN) en la que se muestra, en general, un mismo ordenamiento de todos los elementos de la tabla periódica. Esta propiedad periódica muestra que la EN aumenta de izquierda a derecha a lo largo de un periodo y generalmente disminuye en un grupo de arriba hacia abajo.

Sin embargo, eso no generó una mejor comprensión respecto de la *intensión* y la *extensión* del concepto. En relación con su intensión, la EN ha sido definida de diversos modos ya sea como una propiedad, una capacidad, un poder de atracción, un poder de expulsión o como el resultante de una tensión entre propiedades del átomo. Asimismo, la

extensión, es decir la referencia del concepto tampoco es clara: ¿es el átomo, la molécula, un grupo, un ión o bien la especie química?

En el presente capítulo presentaremos y analizaremos tres modelos especificando los problemas que presentan. Lo particularmente inquietante en relación con los modelos es que los mismos brindan descripciones diferentes, y en algunos casos incompatibles, de la EN. Siendo que, según la literatura estándar (Contessa, 2007; Frigg, 2002; Frigg y Hartmann, 2006; Giere, 2004), los modelos científicos generan algún tipo de conocimiento en tanto y en cuanto representan al sistema que pretenden estudiar, en los casos de modelos incompatibles se hace difícil entender qué y cómo aprendemos de ellos (Morrison, 2011). Estas temáticas serán abordadas del siguiente modo. En el apartado dos describiremos tres modelos clásicos de la EN: Pauling, Mulliken y Allred-Rochow. En el tercer apartado, comenzaremos reseñando el problema de la representación. A continuación, abordaremos la problemática en torno al carácter representativo de modelos empíricamente equivalentes pero incompatibles, analizando precisamente los tres modelos mencionados. Algunas alternativas de solución a este problema son revisadas y, finalmente, esbozaremos algunas reflexiones finales sobre este tópico.

2. Modelos clásicos

2.1. El enfoque termoquímico: el modelo de Pauling

Si bien el término ‘electronegatividad’ se asocia naturalmente al nombre de Linus Pauling, su origen puede encontrarse en los trabajos de Avogadro y Berzelius en las primeras décadas de 1800. Según Jensen (1996), el concepto probablemente debe su nombre a este último, quien en su libro *Lehrbuch der Chemie* (1836) publicó una lista de 54 elementos ordenados en una escala. Las primeras mediciones empíricas de la electronegatividad fueron realizadas por Worth Rodebush en 1925 y Groves Cartledge en 1928 (Jensen, 2012). En 1932 fue precisamente el premio Nobel Linus Pauling el primero en cuantificar una escala de electronegatividad sobre la base de un enfoque termoquímico utilizando los calores de disociación o formación de sustancias heteronucleares del tipo A_nB_m .

Su punto de partida es un enlace covalente en el cual no hay transferencia de electrones. Dicho enfoque sigue dos supuestos. El primero es el de enlace covalente simple normal entre dos sustancias A y B sin ningún componente iónico. El segundo

supuesto está basado en el llamado ‘postulado de aditividad’ (Pauling y Yost, 1932), según el cual la energía de un enlace covalente simple normal en un enlace heteronuclear era muy cercana al promedio aritmético de las energías de los enlaces entre los átomos iguales (enlace homonuclear); de este modo, resulta:

$$E(A:B) = \frac{1}{2} (E[A:A] + E[B:B])$$

Sobre esta base, la escala de Pauling se construye en términos de la diferencia entre la energía actual del enlace covalente y la energía del enlace covalente normal, cualesquiera sean las dos sustancias. La energía actual del enlace covalente se obtiene termoquímicamente considerando la energía requerida para romper el enlace molecular. La energía del enlace covalente normal se calcula teóricamente mediante el postulado de aditividad. Para Pauling

“si el postulado de aditividad es correcto, la diferencia (Δ) entre la energía actual del enlace covalente y la que predice el postulado de aditividad debe ser cero o positiva, y a mayor carácter iónico del enlace, mayor será el valor de Δ [...] los valores de Δ suelen conocerse con mayor precisión que las propias energías de enlace, ya que pueden medirse como calores de reacción” (Pauling 1932, p.3572).

De este modo entonces, Pauling generaba la primera escala de EN sobre la base de los valores de Δ . Asumiendo que Δ está relacionado a las diferentes formas en que los electrones de enlace se comparten en las sustancias A y B, Δ se constituye como una medida de la EN (χ) de los elementos. Las diferencias de EN entre A y B se definen formalmente como:

$$\Delta E = E_{AB} = E_{(AB)\ exp} - \frac{1}{2} [E_{AA} + E_{BB}]$$

$$\Delta E = (\chi_A - \chi_B)^2$$

$$|\chi_A - \chi_B| = 0,208 \Delta E^{1/2} \text{ (eV)} \quad (1)$$

donde χ_A y χ_B son las electronegatividades de los átomos A y B, respectivamente. Esta descripción brinda solamente diferencias de EN. Para obtener el valor absoluto es necesario postular a un elemento como valor de referencia. Para ello, Pauling adoptó el elemento hidrógeno con un valor de $\chi = 0$. Posteriormente, en función de los datos obtenidos por Mulliken en 1934 (Bergmann y Hinze, 1996) y para evitar valores negativos de χ para la mayoría de los metales, dicho valor se modificó a $\chi = 2,1$. Allred

(1961) actualizó las EN de 69 elementos a partir de datos termodinámicos más adecuados y el hidrógeno adoptó un valor final de 2,2.

Los valores de electronegatividad de Pauling para los elementos fueron aceptados rápidamente por la comunidad química porque una gran cantidad de información química podía ser correlacionada y racionalizada en términos de electronegatividades. Al mismo tiempo, Pauling definía entonces los valores de EN como “*números que representan el poder [que poseen los elementos] de atraer electrones en un enlace covalente, por medio del cual se puede estimar la cantidad de carácter iónico parcial del enlace*” (Pauling 1950, p.236).

La definición de Pauling dejaba naturalmente sin valores de EN a los elementos pertenecientes a la familia de los gases nobles. Allen y Huheey (1980) abordaron el problema proponiendo modificar la definición anterior como “*el poder de un átomo en una molécula para atraer o retener electrones*” (p.1523). Esta extensión en la conceptualización brindó significado físico para poder asignar valores numéricos de EN a los gases nobles en dicho modelo, tarea que llevaron adelante varios autores a través de distintos procedimientos (*cfr.* por ejemplo, Allen y Huheey, 1980; Fung, 1965; Meek 1995).

2.2. *El enfoque espectroscópico: el modelo de Mulliken*

El siguiente intento de cuantificación fue llevado a cabo por el premio Nobel Robert Mulliken (1934), quien dos años más tarde diseñó una escala sobre un dominio geométrico o espectroscópico. A diferencia de Pauling, Mulliken construyó su escala utilizando dos propiedades atómicas: la energía de ionización (I) y la afinidad electrónica (A). Su punto de partida fueron dos sistemas neutros X e Y que tienen iguales valores de EN. En este caso, los cambios de energía en las dos reacciones deberían ser idénticos:



Por el principio de igual energía (si X e Y tienen la misma EN)

$$X^+ + Y^- = X^- + Y^+$$

De manera que: $Ix - Ay = Iy - Ax$ y del mismo modo $Ix + Ay = Iy + Ax$

De donde resulta la expresión formal:

$$\chi_M = \frac{1}{2} (Iy + Ax) \quad (2)$$

De acuerdo con esta nueva conceptualización, afirmaba: “*dos átomos univalentes tienen la misma electronegatividad si la suma (o promedio) del potencial de ionización más la afinidad electrónica es la misma para cada uno*” (Mulliken, 1934, p. 783). Mulliken establecía así una escala de electronegatividades atómicas (es decir, ‘absolutas’) ya que no dependía de un valor arbitrario de referencia, como sucedía en la escala de Pauling. Teniendo en cuenta las propiedades atómicas empleadas, intuitivamente este enfoque describe la tensión de un átomo entre su tendencia a ganar o a perder electrones. Mulliken denomina a esta tendencia ‘electroafinidad’. Dado que el potencial de ionización (I) y la afinidad electrónica (A) son propiedades atómicas, por lo tanto, la electronegatividad es también una propiedad del átomo.

La escala de Mulliken tuvo una amplia aceptación ya que empleaba un formalismo muy sencillo y razonable. Se determinaron los valores de EN de 11 elementos para los cuales existían valores de afinidad electrónica. Otra ventaja es que con este enfoque es posible determinar valores de EN para átomos en cualquier estado de valencia en la molécula. Sin embargo, la escala se vio limitada durante mucho tiempo porque aún en 2006 existían sólo los valores de afinidad electrónica de 57 elementos (Salas-Bannuet, Ramírez-Vieyra y Noguez-Amaya, 2011).

2.3. El enfoque espectroscópico: el modelo de Allred-Rochow

Algunos años más tarde, varios autores proponían definir la EN como la relación Z_{eff} / r^n , donde Z_{eff} representa la carga nuclear efectiva, r el radio atómico y n el número de electrones de valencia. La idea era reconciliar la EN termoquímica con estas escalas denominadas ‘geométricas de electronegatividad’ a partir de distintos valores de n . Uno de los pioneros fue Walter Gordy (1946), quien examinó la posibilidad de definir la EN de un átomo neutro en una molécula. El formalismo general es el siguiente:

$$\chi = a Z_{eff} / r^n + b \quad (3)$$

donde a y b son los coeficientes lineales que relacionan los valores de EN con las mediciones electroquímicas. La ‘electronegatividad geométrica’ relaciona la disposición geométrica del núcleo con los electrones de valencia.

En la misma dirección, otro modelo ampliamente conocido y muy citado es el que propusieron Louis Allred y Eugene Rochow (1958). Este modelo tiene la misma base que el de Gordy aunque la diferencia radica en la forma en que se obtienen los valores de Z .

Para estos autores, los valores de n en la ecuación (3) se obtienen utilizando las reglas de Slater. Estas dos escalas fueron las primeras en introducir el concepto de ‘fuerza’ para la cuantificación de electronegatividades. En particular, Allred y Rochow afirmaron que el uso de la fuerza electrostática era consistente con la definición de Pauling, ya que medida la tendencia a atraer electrones. Y, en efecto, ajustaron los valores de los coeficientes a y b para establecer una correlación lineal con la escala de Pauling, que veremos más adelante.

3. Modelos incompatibles y representación

3.1. ¿Qué es representar?

La literatura epistemológica de los últimos años se focalizó específicamente en dos conceptos claves para dar cuenta del modo de producción actual del conocimiento científico: la noción de modelo y la noción de representación. Tanto la concepción semántica (da Costa y French, 2000; Frigg, 2006; Stegmuller, 1979; Suppe, 1989; van Fraassen, 1989), al definir las teorías a partir del conjunto de sus modelos, como la concepción modelística (Morgan y Morrison, 1999), que aboga en favor de pensar los modelos como agentes autónomos del conocimiento, coadyuvaron a canonizar los modelos como el principal elemento articulador del conocimiento científico. Sin embargo, fue esta última tradición de investigación la que más contribuyó a imponer una imagen científica en donde ya no sean las leyes fundamentales de las teorías sino los modelos parciales los auténticos portadores del conocimiento. Los modelos científicos, haciendo uso de los principios teóricos generales, generan marcos de referencias más específicos para dar cuenta de situaciones concretas. Esta capacidad de los modelos para circunscribir las generales y abstractas leyes científicas a aspectos específicos del mundo se interpretó como un indicio de la capacidad representativa de los modelos. En este sentido, la potestad cognoscitiva de estos radicaba en su representatividad. Siendo así, la discusión en torno de los modelos científicos derivó en una discusión vinculada a la noción misma de representación.

Dos grandes líneas de investigación surgieron en relación con esta problemática. Desde una concepción estructuralista (da Costa y French, 2000; French, 2003, 2013; van Fraassen, 1989) se supuso que la garantía del representar estaba dado por algún tipo de morfismo (ya sea isomorfismo, isomorfismo parcial u homomorfismo) entre el modelo y el sistema de estudio. Otra forma de entender la representación fue pensar que la

propiedad distintiva para determinar la capacidad representativa de los modelos era la similitud (Giere, 2004). Sin embargo estas caracterizaciones no resultaron por sí mismas satisfactorias. Por un lado, las propiedades lógicas de los diferentes morfismos y de la similitud diferían respecto a las de la representación (*cfr.* para más detalles, Suárez, 2003). Por otro lado, ninguna distinción establecía condiciones suficientes ni necesarias del representar ya que existen situaciones en donde hay similitud o isomorfismo sin representación y situaciones en donde hay representación sin similitud ni isomorfismo (Frigg, 2002; Suárez, 2003). El problema general estriba en que el isomorfismo oscila entre la rigurosidad propia del formalismo que supone y la problemática flexibilidad y laxitud inherente a la similitud. En efecto, el enfoque basado en el isomorfismo, motivado por la idea de establecer la relación de representación sobre rigurosas relaciones formales, se encuentra, precisamente como consecuencia de tal rigurosidad, con sus propias limitaciones. Por ejemplo, entre otras cosas no puede dar cuenta de las distorsiones dadas por los procesos de idealización y abstracción inherentes a todo modelo científico (*cfr.* Frigg, 2002; Lombardi, Accorinti y Martínez González, 2016; Suárez, 2003). Pero en su intento por dar respuesta de tales limitaciones mediante la postulación de isomorfismos parciales u homomorfismos, el enfoque estructural flexibiliza de tal modo los criterios que contrae los mismos problemas propios de la similitud que en un principio pretendía evitar. La similitud establece débiles criterios, ya que siendo que todo puede ser trivialmente similar a todo en algún sentido no relevante, se establecería como condición tanto de la representación como de la no representación. Del mismo modo, como afirma Contessa (2006), dos estructuras parciales cualesquiera son trivialmente isomorfas siempre que los aspectos discordantes se mantengan indeterminados en los respectivos sistemas. En este sentido, el isomorfismo parcial o el homomorfismo también se muestran en sí mismos infructíferos, ya que bajo tales criterios cualquier modelo podría representar cualquier sistema.

Algunos autores (Callender y Cohen, 2006) asimilan el golpe y adoptan una postura extrema asociando la representación con la mera estipulación o denotación. Sin embargo, esta no es la posición dominante. Steven French (2003), por ejemplo, critica esta postura apelando a la necesaria objetividad propia de los modelos científicos afirmando que “*no cualquier cosa sirve como un modelo científico de un sistema físico: si no se cumplen las relaciones apropiadas entre las propiedades relevantes entonces el modelo no será considerado científico*” (p.1478).

La solución a las problemáticas planteadas recientemente se erigieron sobre la base de dos pilares diferentes aunque convergentes. El primero de ellos fue adoptar una perspectiva pragmática de modo tal que la representación ya no se constituya mediante una relación diádica entre sistema y modelo, sino como una relación triádica en donde el agente usa un modelo para representar al sistema. Desde esta perspectiva, Giere (2010) condujo a fundar la peculiaridad de la representación en la intencionalidad del agente al modo de “C usa S para representar T con un propósito X”. El segundo pilar que vino a complementar esta caracterización evidenciando que la denotación, si bien necesaria no es suficiente, es la capacidad de establecer inferencias desde el modelo hacia el sistema que se está estudiando. En esta línea, Suarez (2004) afirma que A representa B si (1) la fuerza representacional de A nos orienta o apunta a B (o sea, si la fuente A es capaz de guiar a un usuario competente e informado para poner en consideración al sistema B), y si (2) A permite hacer inferencias científicas sobre B. El primer punto rescata el aspecto intrínsecamente denotativo del acto de representar, es decir que la representación tiene un componente intencional y no puede reducirse al mero análisis de las propiedades objetivas que pueden presentar modelo y sistema. El segundo, también con fuertes consideraciones pragmáticas, identifica la capacidad de realizar inferencias desde la fuente (el modelo) al sistema como el rasgo distintivo de la representación.

No obstante, la perspectiva deflacionaria promulgada por Suárez precisamente por no brindar condiciones suficientes y necesarias para la representación no fue unánimemente aceptada. Según Contessa (2007), un buen criterio de la representación, además de brindar condiciones necesarias y suficientes, debe también explicar cómo es que los usuarios están habilitados a formular razonamientos subrogantes válidos (RSV). Un RSV se produce cuando dados dos objetos distintos A y B (en donde en este contexto A es un modelo y B el sistema a estudiar) la premisa de la inferencia es una proposición acerca de A y la conclusión un proposición acerca de B. Es esta capacidad de establecer RSV lo que, de acuerdo con Contessa, sigue siendo un misterio inexplicado en Suarez. Para saldar esta cuestión es que Contessa desarrolla su concepción interpretativa en donde presenta a los RSV como síntomas de la representación y apela a las nociones de interpretación y denotación para explicar el proceso por el cual se produce el acto de la representación. En este sentido el autor afirma que un modelo es una representación epistémica de cierto sistema si y sólo si: (i) El usuario elige un vehículo para representar el sistema (denotación) y (ii) el usuario adopta una interpretación del modelo en términos

del sistema. Para el autor estas condiciones precisamente explican lo que Suárez no hacía: no sólo dan cuenta de los elementos necesarios y suficientes de la representación sino que también explican el proceso de producción de los RSV.

Hasta aquí hemos realizado un breve recorrido del modo en que ha sido tratada la noción de representación; partiendo de *concepciones naturalistas o sustantivas* que consideraban que la representación se debía, exclusivamente, a la existencia de ciertas relaciones dadas entre el modelo y el sistema de estudio, hasta llegar a *concepciones pragmáticas* que evidenciaban la necesidad de introducir el agente como parte estructural del proceso representativo. Asimismo hemos explicado que para algunos autores un elemento fundamental que se constituye como signo de la representación es la posibilidad de establecer RSV (mediante la interpretación de ciertos elementos del modelo como elementos del sistema). A continuación, analizaremos concretamente los diferentes modelos presentados sobre la EN. El objetivo será mostrar que la fuerte incompatibilidad existente entre ellos no sólo enturbia el concepto mismo de EN, sino que dado el carácter fundamental que la EN juega en el proceso de producción del conocimiento químico, cuestiona la idea misma de que los modelos generan conocimientos *porque* representan.

3.2. Modelos incompatibles de electronegatividad

Si retomamos el análisis de los diversos modelos sobre EN presentados en la segunda sección, advertiremos que los mismos presentan ciertas peculiaridades en función de las inferencias que podemos extraer de ellos. Siendo que estas inferencias son incompatibles entre sí, parecería ser entonces que la posibilidad de establecer RSV no garantiza la representación.

El análisis revela que los tres modelos suponen fuertes diferencias procedimentales, conceptuales y categoriales (Accorinti y Labarca, 2020). Respecto a las diferencias procedimentales podemos afirmar que mientras que los modelos de Mulliken y de Allred-Rochow definen EN desde un dominio espectroscópico, Pauling desarrolla su modelo sobre la base de procedimientos termoquímicos. Un hipótesis posible sería entonces evaluar si la incompatibilidad se debe precisamente a las diferentes técnicas procedimentales utilizadas (*cfr.* Accorinti, 2019; Fisher, 2017).

Sin embargo, trabajos recientes parecen desafiar esta hipótesis: los nexos entre EN y el enfoque FSGO (Floating Spherical Gaussian Orbital), un método poco conocido en

química cuántica que surgiera a fines de la década de 1960, fueron explicitados a partir del trabajo de Simons *et al.* (1976), quienes construyeron la primera escala de EN *ab initio*. Sobre la base de dicho método, fueron propuestas dos escalas empíricas de EN que emplean la polarizabilidad (Tandon, Labarca y Chakraborty, 2021) y la dureza (Kumari, *et al.* 2022). Cuando se comparan entonces los tres modelos, la única diferencia existente es procedimental.

Respecto a las diferencias conceptuales, mientras que Pauling y Allred-Rochow definen la EN en la misma dirección, como un poder de atracción de electrones, en el modelo de Mulliken, por el contrario, se la conceptualiza como la tensión existente en un átomo entre la tendencia a ganar y perder electrones. Lo que esto evidencia por el momento es la incomprendición que actualmente se tiene del significado o sentido de la EN. Como afirma Mullay “*aún en estos días no hay una respuesta definitiva a la pregunta ¿qué es la electronegatividad? ¿por qué la electronegatividad es tan útil para los químicos? y ¿por qué existe hace tanto tiempo?*” (Mullay, 1987, p.2).

Pese a ello, lo más interesante surge cuando evaluamos o intentamos pensar, a partir de los modelos dados, qué tipo de propiedad es la EN. En efecto, la propiedad que instancia la EN es una propiedad categorialmente diferente en cada uno de los modelos reseñados. Mientras que el modelo de Pauling supone que la EN es una *propiedad extrínseca*, los modelos de Mulliken y Allred-Rochow suponen que la EN se constituye como una *propiedad intrínseca*. La diferencia e importancia de nociones como ‘intrínseca’ y ‘extrínseca’ se ha discutido ampliamente en el campo de la filosofía (*cfr.* Lewis, 1983, 1986; Rae y Lewis, 1998; Sider, 1996; Vallentyne, 1997). Tal distinción aparece a través de diferentes categorías (propiedades categóricas o disposicionales o propiedades intrínsecas o relacionales) en temas relacionados con la filosofía de la identidad (Lewis, 1983, 1986), la filosofía de la ética (Moore, 1903) o la filosofía de ciencia (Kim, 1982; Mumford, 2011). Para el propósito de este trabajo, tomaremos la noción preteórica propuesta por David Lewis (1983), quien define una propiedad intrínseca como una propiedad “*que las cosas tienen en virtud de lo que son*” mientras que una propiedad extrínseca se define como una propiedad “*que las cosas tienen en virtud de sus relaciones o falta de relaciones con otras cosas*” (p.197) .

Comúnmente, las propiedades extrínsecas (o externas) e intrínsecas se entienden, respectivamente, como ‘relacionales’ y ‘no relacionales’. No obstante, las dos clasificaciones no son estrictamente idénticas y la distinción entre ellas ha sido

ampliamente debatida (*cfr.* para mayores detalles, Marshall y Weatherson, 2018). Sin embargo, no entraremos en esta discusión aquí porque no es un punto crucial para el propósito del presente capítulo: supondremos que la clasificación de propiedades en *propiedades intrínsecas o no relacionales*, por un lado, y *propiedades extrínsecas o relacionales*, por el otro, es suficiente para advertir los diferentes e incompatibles modos en que lo modelos actuales piensan la EN.

Evaluemos entonces esta distinción en el contexto de los modelos sobre la EN presentados previamente. Si observamos el modelo de Pauling podemos inferir que tal modelo supone que la EN es una *propiedad externa o extrínseca* que no pertenece a los átomos aislados sino a la molécula como un todo. Por un lado, en Pauling los enlaces covalentes juegan un papel central. Pero por otro lado, y fundamentalmente, el análisis de la ecuación que permite calcular la EN (ver ecuación 1) muestra que dicho cálculo se realiza en función de la relación entre dos sustancias A y B. Hay que advertir, pues esto puede generar alguna confusión, que si en la escala brindada por Pauling se asigna un valor de EN a cada uno de los elementos aisladamente eso se produce sólo porque se toma, de modo convencional, al hidrógeno como valor de referencia.

Por el contrario, tanto el modelo de Mulliken como el de Allred-Rochow nos brindan una imagen muy diferente. En ambos formalismos (ver ecuaciones 2 y 3) la EN se define para cada átomo aislado en función de ciertas propiedades características de los átomos mismos. En Mulliken, la EN es una *propiedad intrínseca* de los átomos en tanto depende de la tensión para atraer o perder electrones. En efecto, en el modelo de Mulliken la EN se determina en función de dos propiedades características de los átomos: el potencial de ionización y la afinidad electrónica. Asimismo, en Allred y Rochow también la EN se constituye en función de la propiedad de los átomos de atraer electrones, medida, en este caso, a partir de la carga efectiva debida al núcleo y a los electrones que lo rodean, y del radio covalente existente entre el electrón y el núcleo de su átomo.

Resumiendo y considerando entonces las características recientemente identificadas podemos encontrar similitudes y diferencias que nos permitirán proporcionar una mejor comprensión del problema del concepto de EN. Comparando el modelo de Pauling con el modelo de Allred y Rochow, encontramos que hay una coincidencia conceptual con respecto al significado de EN pero una diferencia procedural y categorial. Ambos, como dijimos, conciben EN en la misma dirección; sin embargo, el primero se calcula mediante técnicas termoquímicas y la considera una

propiedad extrínseca, mientras que el segundo modelo requiere técnicas espectroscópicas conceptualizándola como una propiedad intrínseca. Por el contrario, la EN de Pauling y la EN de Mulliken no tienen nada en común: no coinciden en términos procedimentales, ni categoriales, ni en términos conceptuales.

La estrategia usual para obviar estas dificultades teóricas es desestimar estas diferencias advirtiendo que, en tanto que existen correlaciones entre las escalas, los problemas aquí presentados no serían relevantes; más aún, ni siquiera serían problemas reales. Pese a ello, es importante aclarar dos cuestiones fundamentales que debilitan este modo peculiar pero recurrente que suele utilizarse para desestimar el problema.

En primer lugar, independiente a la mentada correlación lineal entre escalas, perdura el inconveniente de entender cuál es el portador al cual se le atribuye la propiedad de EN; es decir, cuál es el referente de la EN: ¿Es una propiedad atómica, por tanto, se refiere al átomo o bien es una propiedad relacional, en cuyo caso el referente lo constituiría la molécula como un todo? (*cfr.* Accorinti y Labarca, 2020; Ruthenberg y Martínez González, 2017)

En segundo lugar, siendo que una correlación entre las escalas no es una equivalencia conceptual, su análisis no puede consumar el concepto mismo. Detengámonos un momento para evaluar lo que esto implica. En primer lugar, consideremos la correlación lineal estipulada entre el modelo de Pauling y el de Mulliken:

$$\chi_P = 1,35[\chi_M]^{1/2} - 1,37$$

en donde χ_P denota a la EN de Pauling y χ_M a la EN de Mulliken. Esta correlación numérica que supone, por supuesto, una convergencia respecto de los resultados empíricos, difiere tanto en relación con la unidades de medida comparadas como a las estrategias de medición utilizadas. Mientras que en Pauling la unidad de medida es energía^{1/2}, en Mulliken la unidad de medida es energía. Asimismo, los dominios involucrados son diferentes: Pauling trabaja en un dominio termoquímico y Mulliken en un dominio espectroscópico o geométrico.

Algo similar sucede cuando se comparan las escalas de Pauling y Allred-Rochow:

$$\chi_P = 0,359\chi_{A-R} + 0,744$$

en donde χ_P refiere a la EN de Pauling y χ_{A-R} refiere a la EN de Allred y Rochow. En este caso, pese a que, como habíamos señalado anteriormente, ambos modelos conciben conceptualmente la EN en términos de un poder de atracción, mientras que Pauling piensa ese poder en términos de energía^{1/2}, Allred y Rochow la piensan como una fuerza. Nuevamente aquí la correlación lineal no implica tampoco una correlación en términos de los dominios desde el cual trabajan: el primero, como dijimos, trabaja en un dominio termoquímico y el segundo lo hace desde un dominio espectroscópico.

3.3. Posibles opciones filosóficas frente al problema

La existencia de modelos incompatibles pero empíricamente exitosos dificulta la tarea de poder traducir la información que brindan en información sobre el sistema. Ello significa que no es posible especificar cuál es el modelo correcto o cómo es el sistema que pretendemos describir. De este modo, el éxito en la aplicación de los distintos modelos no implica un mayor conocimiento de la naturaleza del fenómeno que queremos estudiar. A la luz de esta situación, pueden diseñarse diferentes estrategias de solución que presentaremos muy sucintamente a continuación.

Una alternativa plausible sería asumir un tipo de *perspectivismo* (Giere, 2006), según el cual los distintos modelos nos brindan múltiples visiones que describen diferentes aspectos del sistema. En este sentido, las diferentes perspectivas de análisis adjudicarán diferentes características y así podríamos usar diferentes modelos para hablar del mismo sistema. Considerando que aquí estamos ante modelos incompatibles la factibilidad de tal proyecto exigiría que: (a) se abandone la pretensión representacionalista; (b) se reconsideren los elementos involucrados en el proceso de representación a fin de dar cuenta de tal diversidad; o bien (c) se abandone el monismo ontológico a favor de algún tipo de pluralismo ontológico.

La primera opción supone asumir que el conocimiento científico no es esencialmente representativo sino que construye constructos teóricos útiles que sirven para establecer predicciones. Esta opción supone adoptar una perspectiva *instrumentalista* (Lombardi *et al.*, 2016; Sober, 2018) anulando el proceso inferencial que concluye posiciones realistas a partir del éxito predictivo.

La segunda opción exige una reconfiguración del proceso de representación. Dada la incompatibilidad mencionada parecería difícil traducir la existencia de los RSV como

síntomas de la capacidad representativa. Un salida posible sería afirmar que la representación no se define simplemente como “C usa S para representar T con un propósito X” (Giere, 2010). Estas categorizaciones no son suficientes ya que como vimos para el caso de la EN un agente puede usar tanto el modelo de Pauling como el modelo de Mulliken para representar el mismo sistema T con el mismo propósito X. Siendo que ambos modelos adscriben propiedades diferentes e incompatibles, el salvoconducto sería afirmar entonces que habría que completar el diagrama de la siguiente forma: “C usa S para representar T a través de la técnica experimental Z con un propósito X” (Accorinti, 2019; Fisher, 2017). La idea sería disolver la incompatibilidad afirmando que las técnicas experimentales son aspectos que condicionan la representación del fenómeno.

La tercera opción sería adoptar un *pluralismo ontológico* (Carnap 1950, Cartwright 1994, Lombardi y Pérez Ransanz 2012). Desde esta perspectiva se disolvería la incompatibilidad ya que cada fenómeno se configuraría en función del marco conceptual con el cual se lo interprete; vale decir, ni siquiera serían propiedades del mismo sistema. De esta forma sería entonces posible afirmar la existencia de entidades y/o propiedades incompatibles siempre que se lo haga desde disímiles esquemas conceptuales. Siendo así, la pregunta por lo existente sólo tiene sentido en un sentido interno (Carnap, 1950), ya que en definitiva lo que las teorías científicas describen no es la realidad trascendente sino una ontología que se constituye a partir de un proceso de síntesis entre ciertos esquemas conceptuales y la realidad. Mientras que una postura monista y reduccionista supone que sólo existe una única realidad y que ésta puede conocerse, la postura pluralista implica no solamente la negación de una realidad absoluta, sino la postulación de múltiples realidades relativas a los diferentes esquemas conceptuales (Lombardi y Pérez Ransanz, 2012).

Otra alternativa frente al problema planteado sería afirmar que, ante la multiplicidad de modelos, *solamente uno de ellos puede ser el correcto*. Desde esta perspectiva, mientras que un modelo sería el modelo ‘objetivo’, los otros modelos serían meros instrumentos. Si bien esta es un postura plausible, no hay criterios epistémicos para justificar tal decisión: los tres modelos presentados son empíricamente adecuados, establecen predicciones exitosas y permiten realizar inferencias sobre el sistema. En este sentido, tales motivaciones no estarían legitimadas por los criterios de corrección estándares que la ciencia (y esta particular perspectiva) utiliza para la aceptación de una

teoría, sino que emergen como consecuencia de ciertos supuestos realistas que exceden el campo de la práctica científica misma.

En esa dirección, algunos de los más renombrados especialistas en el campo de la electronegatividad adoptan una perspectiva reduccionista, según la cual la EN atómica debe expresarse en términos mecánico cuánticos. Argumentan que a la luz de las dificultades que presenta la EN en relación con una única definición, y frente a las limitaciones de la escala de Pauling para establecer valores para los elementos del grupo de los gases nobles, toda definición de EN debe ser compatible con los conceptos cuánticos elementales utilizados para describir la estructura electrónica de los átomos (configuraciones electrónicas, números cuánticos y niveles de energía) (*cfr.* Murphy, Meek, Allred y Allen, 2000).

Frente a este enfoque, y sobre la base de un estudio de los modelos de Pauling y Mulliken, Lombardi y Martínez González (2019) argumentan con algunas notas acerca de métodos de cuantificación vigentes desde una perspectiva anti-reducciónista. En particular, los autores desarrollan los siguientes argumentos: (i) las descripciones formales de las electronegatividades de Pauling y Mulliken están basadas en los modelos orbitales de enlace, y estos modelos se construyen gracias a una aproximación incompatible con la mecánica cuántica, donde reside la clasicidad de la química cuántica; y (ii) la electronegatividad en química cuántica no es derivable de las leyes de la mecánica cuántica, sino que requiere supuestos como los provenientes de la teoría estructural química de Lewis.

4. Conclusiones

En este capítulo hemos analizado tres modelos clásicos de electronegatividad que suelen utilizarse habitualmente en la práctica química, mostrando las fuertes diferencias conceptuales existentes entre ellos, así como la problemática vinculada al carácter representativo de modelos empíricamente exitosos pero incompatibles entre sí. Asimismo, hemos analizado distintas alternativas de solución frente al problema planteado. Dado que la reflexión filosófica sobre este tópico es muy reciente, es de esperar que investigaciones posteriores arrojen luz sobre una noción central y, a su vez, profundamente compleja del mundo químico.

Referencias bibliográficas

- Accorinti, H. (2019). "Incompatible models in chemistry: the case of electronegativity". *Foundations of Chemistry* 21: 71–81.
- Accorinti, H. y Labarca, M. (2020). "Commentary on the models of electronegativity", *Journal of Chemical Education* 97: 3474–3477.
- Allen, L. C. y Huheey, J. E. (1980). "The definition of electronegativity and the chemistry of noble gases". *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 42: 1523–1524.
- Allred, A. L. (1961). "Electronegativity values from thermochemical data". *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 17: 215–221.
- Allred, A. L. y Rochow, E. G. (1958). "A scale of electronegativity based on electrostatic force". *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 5: 264–268.
- Batsanov, S. S. y Batsanov, A. S. (2012). *Introduction to Structural Chemistry*, Springer: Dordrecht.
- Bergmann, D. y Hinze, J. (1996). "Electronegativity and molecular properties". *Angewandte Chemie International Edition in English* 35: 150–163.
- Callender C. y Cohen J. (2006). "There is no special problem about scientific representation". *Theoria* 55: 67–81.
- Carnap, R. (1950). "Empiricism, Semantics, and Ontology". *Revue Internationale de Philosophie* 4: 20-40. [Reimpreso en el suplemento a *Meaning and Necessity: A Study in Semantics and Modal Logic*. University of Chicago Press: Chicago, 1956]
- Cartwright, N. (1994). "The metaphysics of the disunified world". *Proceedings of the Biennial Meeting of the Philosophy of Science Association* 2: 357–364.
- Cherkasov, A. R.; Galkin, V. I.; Zueva, E. M. y Cherkasov, R. A. (1998). "The concept of electronegativity. The current state of the problem". *Russian Chemical Reviews* 67: 375–392.
- Contessa, G. (2006). "Scientific models, partial structures and the new received view of theories". *Studies in History and Philosophy of Science* 37: 370–377.
- Contessa, G. (2007). *Representing reality: The ontology of scientific models and their representational function*. London: London School of Economics.
- da Costa, N. y French, S. (2000). "Models, theories and structures: Thirty years on". *Philosophy of Science* 67: 116–127.
- Fisher, G. (2017). "Content, design, and representation in chemistry". *Foundations of Chemistry* 19: 17–28.
- French, S. (2003). "A model-theoretic account of representation (Or, I don't know much about art... but I know it involves isomorphism)". *Philosophy of Science* 70: 1472–1483.
- French, S. (2013). "The structure of theories". En: M. Curd y S. Psillos (eds.). *The Routledge Companion to Philosophy of Science*. London: Routledge, pp. 301–312.
- Frigg, R. (2002). "Models and representation: why structures are not enough." *Measurement in Physics and Economics Project Discussion Paper Series*. DP MEAS 25/02. London School of Economics.
- Frigg, R. (2006). "Scientific representation and the semantic view of theories". *Theoria*. 55: 46–65.
- Frigg, R. y Hartmann, S. (2006). "Models in science". *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2020 Edition), E. N. Zalta (ed.), <<https://plato.stanford.edu/archives/spr2020/entries/models-science/>>.
- Fung, B-M. (1965). "The electronegativity of noble gases". *The Journal of Physical Chemistry* 69: 596–600.
- Giere, R. (2004). "How models are used to represent physical reality." *Philosophy of Science* 71: 742–752.
- Giere, R. (2006). *Scientific Perspectivism*, Chicago: The University of Chicago Press.
- Giere, R. (2010). "An agent-based conception of models and scientific representation". *Synthese* 172: 269–281.
- Gordy, W. (1946). "A new method of determining electronegativity from other atomic properties". *Physical Review* 69: 604–607.
- Jensen, W. (1996). "Electronegativity from Avogadro to Pauling. Part I: Origins of the concept of electronegativity". *Journal of Chemical Education* 73: 11–20.
- Jensen, W. (2012). "The quantification of electronegativity: some precursors". *Journal of Chemical Education* 89: 94–96.
- Kim, J. (1982). "Psychophysical supervenience". *Philosophical Studies* 41: 51–70.
- Kumari, V.; Singh, T.; Devi, S.; Tandon, H.; Labarca, M. y Chakraborty, T. (2022). "Atomic electronegativity based on hardness and Floating Spherical Gaussian Orbital approach". *Journal of Mathematical Chemistry* 60: 360–372.
- Lewis, D. (1983). "Extrinsic properties". *Philosophical Studies* 44: 197–200. Lewis D. (1986). *On the plurality of worlds*. Oxford: Blackwell.

- Lombardi, O. y Martínez González, J. C. (2019). Aproximaciones, clasicidad y electronegatividades: la reducción vía química cuántica, En: Vergne, R. (ed.), *El Orden de los Elementos. El Sistema Periódico de los Elementos y sus Problemas*, Mendoza: Universidad Nacional de Cuyo, pp. 69-101.
- Lombardi, O. y Pérez Ransanz, A. R. (2012). *Los Múltiples mundos de la ciencia. Un realismo pluralista y su aplicación a la filosofía de la física*. México: UNAM-Siglo XXI.
- Lombardi, O.; Accorinti, H. y Martínez González, J. C. (2016). “Modelos científicos: el problema de la representación”. *Scientiae Studia* 14: 151–174.
- Marshall, D. y Weatherston, B. (2018). “Intrinsic vs. extrinsic properties”. *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2018 Edition), En E. N. Zalta (ed.), <<https://plato.stanford.edu/archives/spr2018/entries/intrinsic-extrinsic/>>.
- Meek, T. (1995). “Electronegativities of noble gases”. *Journal of Chemical Education* 72: 17–18.
- Moore, G. E. (1903). *Principia ethica*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Morgan, M y Morrison, M. (1999). *Models as mediators*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Morrison, M. (2011). “One phenomenon, many models: Inconsistency and complementarity”. *Studies in History and Philosophy of Science* 42: 342–351.
- Mullay, J. (1987). “Estimation of atomic and group electronegativities”. *Structure and Bonding* 66: 1–25.
- Mulliken, R. (1934). “A new electronaffinity scale; together with data on valence states and on valence ionization potentials and electron affinities”. *Journal of Chemical Physics* 2: 782–793.
- Mumford, S. (2011). *Getting causes from power*. Oxford: University Press.
- Murphy, L.; Meek, T.; Allred, A. y Allen, L. (2000). “Evaluation and test of Pauling’s electronegativity scale”. *Journal of Physical Chemistry A* 104: 5867–5871.
- Pauling, L. (1932). The nature of the chemical bond. IV. The energy of single bonds and the relative electronegativity of atoms. *Journal of American Chemical Society* 54: 3570–3582.
- Pauling, L. (1950). *College Chemistry: An Introductory Textbook of General Chemistry*, 2nd ed. San Francisco: W. H. Freeman & Company.
- Pauling, L. y Yost, D. M. (1932). “The additivity of the energies of normal covalent bonds”. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 18: 414–416.
- Politzer, P. y Murray, J. S. (2018). Electronegativity—a perspective. *Journal of Molecular Modeling* 24: 214–222.
- Pritchard, H. O. y Skinner, H. A. (1955). “The concept of electronegativity”. *Chemical Reviews* 55: 745–786.
- Rae, L. y Lewis, D. (1998). “Defining ‘intrinsic’”. *Philosophy and Phenomenological Research* 58: 333–345.
- Ruthenberg, K y Martínez González, J. C. (2017). “Electronegativity and its multiple faces: persistence and measurement”. *Foundations of Chemistry* 19: 61–75.
- Salas-Bannuet, G.; Ramírez-Vieyra, J. y Noguera-Amaya, M. E. (2011). “La incomprendida electronegatividad (trilogía). II. Evolución en la cuantificación de la electronegatividad”. *Educación Química* 22: 155–161.
- Sider, T. (1996). “Intrinsic properties”. *Philosophical Studies* 83: 1–27.
- Sober, E. (2018). “Instrumentalism revisited”. *Crítica. Revista Hispanoamericana de Filosofía* 31: 3–39.
- Stegmüller, W. (1979). *The structuralist view of theories*. New York: Springer.
- Suárez, M. (2003). “Scientific representation: against similarity and isomorphism”. *International Studies in the Philosophy of Science* 17: 225–244.
- Suárez, M. (2004). “An inferential conception of scientific representation”. *Philosophy of Science* 71: 767–779.
- Suppe, F. (1989). *The semantic conception of theories and scientific realism*. Urbana: University of Illinois Press.
- Tandon, H.; Labarca, M. y Chakraborty, T. (2021). “A scale of atomic electronegativity based on Floating Spherical Gaussian Orbital Approach”, *ChemistrySelect – Chemistry Europe* 6: 5622–5627.
- van Fraassen, B. C. (1989). *Laws and symmetry*. Oxford: Clarendon Press.
- Vallentyne, P. (1997). “Intrinsic properties defined”. *Philosophical Studies* 88: 209–219.