

ACERCA DE LA UNICIDAD DE LA SUSTANCIA EN QUÍMICA¹

ON THE UNIQUENESS OF THE SUBSTANCE IN CHEMISTRY

Mariana Córdoba²

Martín Labarca³

Alfio Zambón⁴

RESUMEN

El problema de determinar en qué consiste la sustancia química ha sido ampliamente debatido en el campo de la filosofía de la química. Dado el desacuerdo respecto del significado de la expresión “sustancia química”, nos preguntamos si es posible hallar un único criterio para identificar cada sustancia química. Abordar este problema conduce a distinguir entre los distintos dominios de la química: macroscópico, molecular y cuántico. Esta distinción pone en evidencia que no es posible identificar unívocamente la sustancia química en todos los dominios; se evalúan entonces los problemas que surgen de esta imposibilidad.

Palabras clave: sustancia química, elemento, dominio macroquímico, dominio molecular, dominio cuántico.

ABSTRACT

The problem of determining the nature of chemical substance has been widely discussed in philosophy of chemistry. Since there is no agreement about the meaning of the expression ‘chemical substance’, we consider if it is possible to reach a single criterion to identify each chemical substance. The analysis of this problem leads us to distinguish among three different domains in chemistry: macroscopic, molecular, and quantum. This distinction allows us to assert that it is not possible to identify univocally a chemical substance in every level; we evaluate, then, the problems derived from this impossibility.

Keywords: chemical substance, element, macrochemical level, molecular level, quantum level.

1 Recibido: abril 9 de 2013. Aceptado: mayo 30 de 2013.

2 CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina.

3 CONICET - Universidad Nacional de Quilmes, Argentina. Correo electrónico: mglabarca@unq.edu.ar

4 Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina. Correo electrónico: azambon@infovia.com.ar

1. INTRODUCCIÓN

Las tres categorías fundamentales del mundo químico son sustancia, elemento y estructura ya que desempeñan un papel central en las explicaciones de las reacciones químicas y en la comprensión de la tabla periódica. También son nociones importantes en la filosofía de la química por su función en las discusiones acerca de la naturaleza del sistema periódico y de las clases naturales.

Con el establecimiento social de la filosofía de la química como disciplina legítima de investigación a mediados de 1990, una nueva generación de filósofos de la química, químicos e historiadores intentaron clarificar los conceptos de sustancia y elemento. Sorprendentemente, esta tarea puso en evidencia los fuertes desacuerdos existentes sobre el tema: si bien hay un amplio consenso acerca de la extensión de dichos términos, no sucede lo mismo respecto a su intensión, ni aun a la terminología empleada (*cf.* Bent, Hendry 2006, Schwarz, Earley, Ruthenberg, Vihalemm, Scerri, Labarca & Zambón).

La intensión del término ‘sustancia’ en química se ha interpretado desde puntos de vista fisicalistas hasta empiristas o instrumentalistas. Desde una perspectiva pragmática, consideraremos que una *sustancia química* es aquello a lo que la comunidad química denomina ‘sustancia’. El objetivo no será entonces elucidar la naturaleza de la sustancia química analizando sus distintas caracterizaciones en la filosofía contemporánea de la química. En el presente trabajo estamos interesados en discutir, dada una determinada sustancia química, si es posible establecer un único criterio para identificarla y, consecuentemente, distinguirla de cualquier otra sustancia química. Con este objetivo, evaluaremos distintas propuestas acerca de los criterios para identificar las sustancias químicas. A partir del estudio de los dominios en los que se manifiesta la ciencia química —macroquímico, molecular y cuántico—, analizaremos si puede hallarse un criterio de identificación para una determinada sustancia química en los tres dominios.

2. LA SUSTANCIA EN QUÍMICA: MATERIA Y *STUFF*

De acuerdo con la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, por su sigla en inglés), *sustancia* es cualquier unidad de materia que existe sobre el nivel atómico: debe tener composición homogénea y no ser separable por métodos mecánicos. En particular, un conjunto de cuerpos puros con propiedades intensivas iguales se denomina *sustancia*; se clasifica en *sustancia simple* o *elemento*, formada por un solo tipo de átomos (oro, oxígeno, por

ejemplo), y *sustancia compuesta*, constituida por más de un tipo de átomo (agua, amoníaco).

Un primer inconveniente de esta caracterización consiste en que define la sustancia química como “materia”, y uno de los problemas que se debate en la actualidad en el ámbito de la filosofía de la química es precisamente qué se entiende por “materia”. Abordar esta cuestión implica discutir cómo caracterizar la ontología de la macroquímica. Se afirma que, en el contexto de la química, las sustancias son concebidas como *stuff* (cf. Van Brakel & Ruthenberg), término que no se traducirá para evitar connotaciones como ‘cosas’ o ‘materia’.

Joachim Schummer afirma que durante el siglo XIX se impuso una imagen según la cual el mundo presenta un orden jerárquico que, en el dominio ontológico, va desde el nivel más básico (partículas subatómicas) hasta los siguientes niveles, compuestos en cada caso por átomos, moléculas, organismos biológicos, entre los que cuentan los seres humanos y, eventualmente, las sociedades. En el plano de la ciencia, estos niveles corresponden a cada una de las disciplinas científicas, lo cual las ordena jerárquicamente desde la física de partículas hasta las restantes disciplinas: química, biología, psicología y sociología. De acuerdo con Schummer, un problema de esto es la ausencia de la categoría materia o *stuff* en la jerarquía ontológica tradicional, lo cual conduce a ignorar el conocimiento acerca del *stuff* que nos brinda la química. Esto se debe a que, en la historia de la filosofía, las nociones de materia y de forma fueron consideradas excluyentes. Schummer señala la profunda diferencia entre la ontología química y la ontología física precisamente en cuanto a la oposición entre materia y forma: mientras los ítems químicos pueden ser pensados de acuerdo con la perspectiva de la materia, los físicos se ajustan a la perspectiva de la forma.

Según el autor, la perspectiva de la forma destaca las propiedades geométricas espaciales para describir los cuerpos. Por su parte, la perspectiva de la materia se ocupa de la composición de los cuerpos, es decir, de los materiales particulares que los conforman. En cada perspectiva, las propiedades esenciales de lo real son diferentes. En la metafísica de la forma, las propiedades esenciales de los cuerpos o geométricas intrínsecas, como el tamaño y la forma, siempre se manifiestan en un objeto, con independencia de las condiciones contextuales. Por el contrario, en la metafísica de la materia, las propiedades esenciales del mundo son disposiciones, es decir, describen el comportamiento de un objeto bajo ciertas condiciones contextuales; el ejemplo típico de propiedad disposicional es la solubilidad en agua. Tal como afirman Lucía Lewowicz y Olimpia Lombardi, tanto en la ciencia occidental como en la metafísica occidental ha prevalecido una de estas dos perspectivas:

El hecho de que la metafísica de la forma haya prevalecido en el pensamiento occidental hasta el siglo XX posiblemente haya incidido en los intentos de la filosofía analítica de reducir las propiedades disposicionales, y aun otras propiedades no disposicionales, definiéndolas exclusivamente en términos de propiedades físicas de forma (Lewowicz & Lombardi 3).

Schummer señala que las perspectivas de la materia y de la forma son complementarias, y ambas presentan limitaciones en el contexto de la química. La perspectiva de la materia o del *stuff* se enfrenta al problema de que las propiedades de *stuff* de los sólidos, como los metales y los semiconductores, no dependen únicamente de su composición química. De hecho, si se reduce el tamaño de las partículas de la misma sustancia química hasta la escala nanométrica, sus propiedades *stuff* empiezan a variar con el tamaño. Para la perspectiva de la forma, el problema es la imposibilidad de reducción, o de explicar o reformular las propiedades de *stuff* a partir de propiedades tal como son concebidas por la perspectiva de la forma.

Lewowicz & Lombardi retoman la propuesta de Schummer pero, en lugar de distinguir entre *metafísica de la materia* y *metafísica de la forma*, se refieren a *ontología de stuff* y *ontología de individuos*. Aquí nos interesa esta distinción. Para comprender qué es *stuff*, Lewowicz & Lombardi proponen diferenciar esta categoría de la categoría de individuo. Por su parte, la categoría *stuff* no resulta tan clara ya que, como señala Schummer, no existe una fuerte tradición científica ni filosófica que ayude a comprenderla.

¿Qué se entiende por *stuff*, la categoría ontológica que corresponde a la sustancia química? Sin duda, al igual que en el caso de los individuos, debe existir un principio que distinga un *stuff* de otros; pero dicho principio nada tiene que ver con el espacio ni el tiempo. En efecto, la distinción entre agua y cobre no se basa en posiciones espacio-temporales. Sin embargo, porciones de *stuff* existen en el espacio y en el tiempo: una porción de agua puede ubicarse espacio-temporalmente. A diferencia de lo que sucede con los individuos, una porción de *stuff* puede ser dividida en porciones de la misma clase de *stuff*. Sin embargo, un *stuff* no es un mero agregado de sus porciones. El agua en tanto sustancia química no es el mero agregado de todas las porciones o muestras de agua que existen en el universo, y esto por dos motivos. En primer lugar, las propiedades esenciales de la sustancia química agua no dependen de que existan efectivamente muestras de agua, del mismo modo que la validez de la ley de inercia no depende del hecho de que exista en el universo algún cuerpo sometido a una fuerza neta nula. En segundo lugar, las diferentes muestras de agua difieren de una manera suficientemente relevante respecto de su composición de modo que no podrían asimilarse como para que su agregado definiera

una única sustancia química. Como afirma Michael Weisberg, el agua no es H_2O en tanto no puede pensarse como un agregado de moléculas o de porciones, lo cual corresponde a aquello que, desde las posturas de Putnam (1975) o Kripke, se ha considerado tradicionalmente en filosofía como una clase natural. Un *stuff* es al mismo tiempo uno y múltiple: si bien constituye una unidad, es múltiple porque hay diversas manifestaciones en el sentido de porciones de *stuff*. Pero los agregados de porciones de *stuff* no se comportan como las agrupaciones de individuos puesto que, dado un agrupamiento de porciones de *stuff*, estas no pueden ser contadas. El agregado de dos porciones de un determinado *stuff* X no equivale a “dos X”, sino a “más X”. A su vez, las porciones de *stuff* no pueden volver a ser identificadas en el agrupamiento: una vez que el agregado de dos porciones de *stuff* está formado, las porciones originales componentes no pueden ser identificadas.

Estas consideraciones ponen de manifiesto la profunda diferencia entre la categoría de individuo, propia de la física, y la categoría de *stuff*, propia de la química macroscópica. Asimismo, evidencian la dificultad presente para caracterizar la noción de *stuff* y, por ende, para comprender lo que nos ocupa en el presente trabajo: la sustancia química. En consecuencia, por el momento parece que solo podemos contribuir en la búsqueda de una caracterización de la sustancia química.

3. ¿CÓMO IDENTIFICAR UNA SUSTANCIA QUÍMICA?

La filosofía moderna de la química ha retomado el problema de la sustancia química con interesantes discusiones en los últimos años. Muchas de ellas versan fundamentalmente sobre la intensión del término ‘sustancia química’, tema en el cual no hay acuerdo. En efecto, se han propuesto diversos criterios de identificación para abordar el problema. En lo que sigue nos dedicaremos a ellos.

Dos autores proponen un criterio de identificación de la sustancia química en el plano macroscópico. Según Paul Needham, el concepto de sustancia es una noción genuinamente macroscópica y su criterio de identificación descansa sobre una teoría macroscópica (la termodinámica), en particular, vía la llamada regla de las fases de Gibbs que establece las condiciones de equilibrio en un sistema heterogéneo. Esta regla se expresa mediante la siguiente ecuación:

$$F + V = C + 2$$

donde F denota el número de fases del sistema, V la varianza o grados de libertad y C el número de componentes. Esta teoría termodinámica deter-

mina mediante la regla de las fases que diferentes microestructuras dinámicas corresponden a la misma sustancia macroscópica.

Por su parte, Jaap Van Brakel (2008) afirma que, aunque una sustancia pura es a menudo definida sobre la base de su estructura molecular, también puede ser identificada en función de ciertas propiedades macroscópicas, como la densidad, que no varía durante el cambio de fase⁵. Con esto sugiere que el mejor criterio de identificación de una sustancia pura es el *punto triple*⁶ (o un conjunto de puntos triples), ya que es el único estado termodinámico donde la sustancia está presente en las tres fases, confirmando así que las tres fases corresponden a la misma sustancia⁷. Van Brakel brinda además un sustento adicional (o “circunstancial”, en sus propias palabras) basado en la metrología: en el Sistema Internacional de Unidades (SI), el punto triple del agua es la base de la definición del grado Kelvin, la unidad de temperatura termodinámica. Tal temperatura es de 273,16 K por definición y 0,01 °C (a una presión de 611,73 Pa).

Ahora bien, ¿son los criterios de identificación propuestos por Needham y Van Brakel en el plano macroscópico suficientes para caracterizar una sustancia química dada? Dichos autores utilizan dos criterios adecuados y genuinamente químicos, pero una sustancia química posee, además, propiedades microscópicas. En este dominio sería posible adoptar una posición microestructuralista. Según esta tesis, las extensiones de los nombres de las sustancias químicas están determinadas por sus propiedades microestructurales y, en ese sentido, la estructura molecular establece la identidad de las sustancias compuestas (*cf.* Hendry 2008). La idea remite a la teoría causal de la referencia de los términos de clase natural, desarrollada por Putnam y Kripke, con los ejemplos de la química “agua” y “oro”, que ha sido fuertemente cuestionada, entre otros, por Van Brakel (2000) y Needham. Dicha tesis parece implicar la idea de que las sustancias químicas tienen esencias microestructurales. Hendry enfrenta tres posibles objeciones a la tesis de que la estructura molecular determina la identidad de las sustancias, argumentando a partir del ya clásico ejemplo “agua = H₂O”: complejidad molecular, vaguedad y bases mecánico-cuánticas de la estructura molecular.

Sin embargo, el criterio microestructural de identificación presentado se torna cuanto menos inexacto. De acuerdo con Hendry (2008), la estructura molecular es la propiedad que permite caracterizar la sustancia en cuestión; pero para

5 Van Brakel (2008, 45) emplea el término ‘sustancia pura’ en el sentido de ‘químicamente pura’.

6 Condiciones de presión y temperatura donde coexisten los estados de agregación sólido, líquido y gaseoso.

7 Needham (102-103) admite también que el punto triple es adecuado como criterio de identificación macroscópico de una sustancia pura.

una cierta molécula, la única de las múltiples estructuras moleculares posibles que cumple con el requisito bajo estudio es aquella que presenta una mínima energía, ya que en las moléculas se puede proponer diferentes conformaciones interconvertibles que dan lugar a los denominados isómeros conformacionales. Por ejemplo, en el caso del ciclohexano, existe la conformación bote como la de mayor energía, y la conformación silla como la de menor energía, siendo también posibles las múltiples formas estructurales entre ambas. De este modo, desde una perspectiva microestructural es necesario señalar que la *estructura de mínima energía* —en el caso del ciclohexano, la forma silla— resulta el criterio de identificación adecuado para el plano microquímico.

Hasta aquí una sustancia química puede identificarse mediante propiedades pertenecientes a los planos macroscópico y microscópico. Ahora bien, ¿es posible establecer un nexo reductivo entre los criterios identificatorios de dichos dominios? Es decir, a partir de la estructura molecular de una sustancia química dada, ¿puede determinarse ab initio su punto triple o su densidad en el cambio de fase? La bien conocida imposibilidad de relacionar tales dominios por vía reductiva permite diferenciar claramente los dos planos en los que se manifiesta el mundo químico: el macroscópico y el microscópico.

4. EL ANÁLISIS DEL MUNDO MICROQUÍMICO

En la sección anterior analizamos las distintas maneras de identificar una sustancia química. Como hemos visto, los criterios de identificación aplicables al plano macroquímico son diferentes de los criterios empleados en el microquímico, quedando claramente de manifiesto la imposibilidad de unificar en el plano epistemológico estos dos dominios.

Un problema adicional que surge de este análisis es que el llamado plano microquímico no es único. Tal como mostraron Labarca & Lombardi (2010a, b) para el caso de los orbitales atómicos, se hace evidente la necesidad de diferenciar los dominios de la química molecular y de la mecánica cuántica. La molécula en química molecular se concibe como una configuración tridimensional de átomos en un espacio clásico euclídeo, unidos entre sí por enlaces químicos. En este contexto, las moléculas son objetos clásicos en un sentido sustancial y local, individuos en términos filosóficos: son entidades que poseen todas sus propiedades definidas en cada instante, que conservan su identidad a través de los cambios de sus propiedades y poseen una ubicación espacial determinada. En el ámbito de esta ontología clásica, es razonable que los átomos componentes de la molécula sean concebidos en términos compatibles

con dicha ontología. Si bien los electrones ya no giran en órbitas definidas en torno a los núcleos, sigue hablándose de la probabilidad de que se encuentren en una región del espacio en torno al núcleo. En otras palabras, la molécula es concebida como un objeto compuesto de núcleos clásicos y electrones semi-clásicos, cuya “semi” clasicidad se debe exclusivamente a que no se encuentran regidos por las ecuaciones clásicas de movimiento sino por la ecuación de Schrödinger bajo su interpretación probabilística. Un átomo es entonces un objeto individual (el núcleo) localizado en el espacio, con otros objetos individuales (los electrones) que se disponen a su alrededor de un modo que la teoría determina solo de manera probabilística. Esta imagen del átomo es del todo ajena a la mecánica cuántica, donde estrictamente solo podría hablarse del sistema-molécula, descrito por su función de onda no separable, con sus correlaciones cuánticas con los restantes sistemas con los que ha interactuado, y cuyos “componentes” no son los objetos individuales, sustanciales y locales de la física clásica.

Asimismo, de acuerdo con cierto reduccionismo physicalista, las entidades químicas, cuando se analizan en profundidad, no son otra cosa que entidades físicas muy complejas. Es decir, la química molecular refiere a la ontología cuántica; por lo tanto, los compromisos ontológicos de la química resultan estar basados finalmente en la mecánica cuántica. Pero la principal dificultad de esta posición radica en el conocido problema de cómo caracterizar la ontología cuántica. Como afirman Olimpia Lombardi & Mario Castagnino, la ontología de la mecánica cuántica no es la ontología de la química molecular; el mundo de la mecánica cuántica no es un mundo de objetos. Según los autores, la confianza en la existencia de las entidades físicas descritas por la mecánica cuántica no tiene en cuenta los problemas de interpretación de la teoría: en las discusiones sobre la relación entre química y física, las dificultades se observan solamente del lado de la química, mientras que las cuestiones altamente controversiales del lado de la física se toman como cosa juzgada. Lombardi y Castagnino analizan como ejemplo el caso de la aproximación de Born-Oppenheimer (Born & Oppenheimer) que se utiliza para sistemas moleculares de N -partículas, y cuya ecuación, como es sabido, no tiene solución analítica. La separación de los movimientos nucleares y electrónicos depende de concebir los núcleos como partículas clásicas en reposo y en una posición definida. Esta aproximación puede pensarse teniendo en cuenta que la masa nuclear M es mucho mayor que la masa electrónica m , de manera que dicha relación es aproximadamente $M / m \rightarrow \infty$. Es decir, el límite $m / M \rightarrow 0$ es con frecuencia el supuesto que conduce al concepto de estructura molecular. Pero las masas nunca son infinitas: esto es lo que hace a la aproxi-

mación de Born-Oppenheimer una aproximación y no un método preciso. Es en este punto donde las discusiones por lo general se focalizan.

El problema es determinar los límites de aplicabilidad de la aproximación de Born-Oppenheimer dentro del grado de precisión que se requiere en cada caso. Sin embargo, Lombardi y Castagnino señalan que una importante cuestión del lado de la física permanece inadvertida: el hecho de que los núcleos puedan ser tratados como partículas clásicas no puede deducirse solamente de la aproximación de Born-Oppenheimer, sino que requiere interpretar un postulado de la mecánica cuántica mediante un recurso que, a su vez, presenta dificultades cuando se aplica a la explicación del modelo más simple del átomo de hidrógeno.

5. LOS TRES DOMINIOS DE LA QUÍMICA

De acuerdo con estas consideraciones, el análisis del mundo microquímico nos ha conducido a la distinción conceptual entre los planos molecular y cuántico, que también pueden diferenciarse energéticamente. De manera esquemática, caracterizaremos los tres dominios en los que se manifiesta la ciencia química.

Dominio macroquímico o macroscópico. Está conformado por las sustancias que el químico maneja cotidianamente en el laboratorio. Es el plano fenomenológico, donde residen todas las propiedades físicas y químicas que suelen determinarse en el laboratorio (densidad, índice de difracción, características organolépticas, entre otras).

Dominio molecular. Lo componen las estructuras químicas con las que usualmente se describen los cambios que ocurren en las reacciones y se explican muchas de las propiedades y características de las sustancias químicas. Este plano posee una entropía mínima y la estructura más estable tiene una mínima energía. A este dominio corresponde, por ejemplo, el estudio de los grupos funcionales, isómeros conformacionales, efectos inductivos, de resonancia, momento dipolar y características de los enlaces.

Dominio cuántico. Está constituido por el conjunto de las partículas subatómicas y las posibles interacciones entre ellas. Concentra la máxima energía admisible por partícula sin perder su identidad como tal. En este plano rigen las leyes de la mecánica cuántica.

Conceptualizados los tres dominios del mundo químico, y analizados ya los criterios de identificación propuestos en los planos macroscópico y molecular que se debaten en la filosofía contemporánea de la química, nos preguntamos

si es posible encontrar también un criterio para caracterizar una sustancia química en el ámbito cuántico.

Es sabido que, sobre la base de los trabajos del radioquímico austriaco Fritz Paneth, la IUPAC modificó en 1923 la propiedad esencial del elemento químico (o sustancia simple): pasó de ser el peso atómico a ser el número atómico (Paneth; véase detalles históricos en Kragh y Holden). Esto significa que el número atómico del elemento involucrado es el que determina su propiedad esencial, actuando como criterio de identificación. Esta propuesta brinda un buen criterio identificatorio cuando la composición de la especie química es monoatómica. Ahora bien, cuando la especie presenta dos o más tipos de átomos, el criterio no se aplica. Sin embargo, es posible adoptar como criterio de identificación lo que denominamos el *número molecular*, entendido como la sumatoria de los números atómicos de los átomos comprometidos en la especie bajo estudio. Este criterio no es otra cosa que una extensión del criterio del número atómico para sistemas poliatómicos, y permite resolver todos los casos, excepto el de los isómeros estructurales. No obstante, para esta categoría de compuestos es posible brindar un criterio de identificación secundario: el mínimo de la superficie de energía potencial del sistema. Como para los isómeros estructurales los átomos de partida son los mismos pero se obtienen estructuras moleculares diferentes, esos mínimos de energía deben ser necesariamente distintos.

En el tratamiento que usualmente se realiza en química, se da un significado unívoco al concepto de sustancia. Las diferenciaciones que proponemos suelen concebirse como estadios de un continuo en la descripción de la sustancia. De esta forma, es común encontrar desarrollos donde las interacciones cuánticas anteceden a las estructuras, y también donde se considera que las estructuras de las moléculas químicas, en una gran acumulación de materia, forman directamente las sustancias tal como a menudo se encuentran en los frascos de laboratorio. Es verdad que en la ciencia química se realizan estudios que consideran relaciones entre los planos, los cuales proveen explicaciones acordes con comportamientos empíricos que, a menudo, tienen una importante utilidad práctica. Pero también es cierto que muchas veces la traslación libre de conclusiones obtenidas del estudio de un plano a otro produce inconsistencias que no pueden ser explicadas con el bagaje teórico de la química.

Dada la distinción conceptual presentada, puede formularse entonces la siguiente pregunta: ¿es posible la reducción entre los ítems ontológicos de los tres dominios presentados? El análisis de unos pocos casos muestra que no puede considerarse que las propiedades inherentes a cada uno de los dominios expliquen las propiedades de los restantes. Por ejemplo, del estudio de la

estructura de una sustancia no es posible justificar sus propiedades macroscópicas como la polaridad, índice de difracción o viscosidad. Del mismo modo, a partir de estudios mecánico-cuánticos no es posible dar cuenta acabadamente de la estructura química. Y asimismo, a partir del número atómico de un elemento no es posible determinar, por ejemplo, su punto de fusión. Por lo tanto, la idea de que existe un concepto unívoco de sustancia aplicable a todos los ámbitos de la química parece exigir una profunda revisión.

6. CONCLUSIONES

Las afirmaciones anteriores nos permite concluir que, en el estudio de la química, la articulación o unificación de los tres dominios, esto es, cómo se pasa del nivel cuántico al nivel molecular, o cómo se pasa de la estructura química a una muestra macroscópica contenida en un frasco que tenemos en el laboratorio, resulta problemática. Hemos señalado que no hay acuerdo en la solución que se ofrece a la búsqueda de un criterio de identificación unívoco para cada sustancia química. En el dominio macroquímico, se propone el punto triple o la regla de las fases de Gibbs; en el dominio molecular, la estructura molecular de mínima energía, y en el dominio cuántico, el número atómico o el número molecular. En la química contemporánea es usual realizar análisis teóricos donde las conclusiones obtenidas en algunos de los planos se trasladan libremente a los otros, lo que conduce a menudo a inconsistencias. Si existieran nexos interteóricos claros, si, por ejemplo, a partir de la estructura molecular pudiera obtenerse el resultado de la regla de las fases, estas inconsistencias desaparecerían; pero hemos visto que no es este el caso.

¿Qué puede concluirse frente a la imposibilidad de determinar un criterio de identificación unívoco para la sustancia química? ¿Qué líneas de posibles soluciones se abren ante este problema? Podríamos, por ejemplo, resignarnos a aceptar la imposibilidad de identificar la sustancia química: aceptar que existen criterios que riñen entre sí, distintos e irreconciliables. Podríamos también confiar en que el desarrollo de la disciplina permitirá alcanzar en algún momento una unificación y se clarificarán los nexos entre los dominios macroscópico, molecular y cuántico. Otra posibilidad es aceptar alguna salida pluralista como la delineada, por ejemplo, por Olimpia Lombardi y Ana Rosa Pérez Ransanz cuando afirman que no hay por qué esperar una convergencia y aceptan que es posible referir a la sustancia química en los tres dominios, en la medida en que la praxis química así lo permite. No desarrollaremos aquí en detalle esta posición; solo señalaremos que, de acuerdo con el pluralismo ontológico desarrollado por las autoras, los objetos de conocimiento son

fenómenos en sentido kantiano, resultantes de la síntesis entre un esquema conceptual y los insumos provenientes de una realidad independiente. A esta noción kantiana de objeto, el pluralismo agrega la visión historicista de Putnam (1981), según la cual no hay conceptos ni categorías absolutas, sino que esquemas conceptuales alternativos, que no tienen por qué converger o reducirse a un esquema único. Esto abre la posibilidad de una visión pluralista de acuerdo con la cual hay una diversidad de ontologías fenoménicas a las que la ciencia refiere y que son inconmensurables en un sentido fuerte. El pluralismo permitiría afirmar que las propiedades esenciales identificatorias de cada sustancia química en cada uno de los dominios resultan constituidas por distintos esquemas conceptuales que determinan, por medio de sus categorías y conceptos, cómo identificar *cada* sustancia en *cada* dominio. Queda pendiente para un próximo trabajo la tarea de evaluar si una posición pluralista basada en la praxis científica permite arrojar luz sobre el resultado negativo al que aquí hemos arribado.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a Paul Humphreys (University of Virginia), Olimpia Lombardi (CONICET-Universidad de Buenos Aires), Hernán Miguel (Universidad de Buenos Aires) y Eric Scerri (University of California, Los Angeles) sus comentarios y sugerencias en el marco del Simposio *Interrelations among Philosophy, Physics, and Chemistry*, Buenos Aires, Argentina, 11 al 13 de julio de 2011.

El presente trabajo ha sido realizado gracias al apoyo de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (FONCyT), del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) de la Universidad de Buenos Aires y la Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco de Argentina.

TRABAJOS CITADOS

Bent, H. *New Ideas in Chemistry from Fresh Energy for The Periodic Law*. Bloomington: Author House, 2006.

Born, M. & Oppenheimer, J. R. "Zur quantentheorie der molekeln". *Annalen der Physik* 84 (1927): 457-484.

Earley, J. "How chemistry shifts horizons: element, substance, and the essential". *Foundations of Chemistry* 11 (2009): 65-77.

- Hendry, R. "Substantial confusion". *Studies in History and Philosophy of Science* 37 (2006): 322-336.
- . "Microstructuralism: problems and prospects". *Stuff - The Nature of Chemical Substances*. Eds. J. Van Brakel & K. Ruthenberg. Würzburg: Königshauen & Neumann, 2008. 107-121.
- Holden, N. "Atomic weights and the International Committee - a historical review". *Chemistry International* 26 (2004 January-February). En línea.
- Kragh, H. "Conceptual changes in chemistry: The notion of a chemical Element, ca. 1900-1925". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* B 31 (2000): 435-450.
- Kripke, S. *Naming and Necessity*. Oxford: Blackwell, 1980.
- Labarca, M. & Lombardi, O. "Why orbitals do not exist?". *Foundations of Chemistry* 12 (2010a): 149-157.
- . "Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos". *Principia - Revista Internacional de Epistemología* 14 (2010b): 309-333.
- Labarca, M. & Zambón, A. "Un reconceptualización del concepto de elemento como base para una nueva representación del sistema periódico". *Educación Química* 24 (2013): 63-70.
- Lewowicz, L. & Lombardi, O. "Stuff versus individuals". *Foundations of Chemistry* 15 (2013): 65-77.
- Lombardi, O. & Castagnino, M. "Matters are not so clear on the physical side". *Foundations of Chemistry* 12 (2010): 159-166.
- Lombardi, O. & Pérez Ransanz, A. R. *Los múltiples mundos de la ciencia. Un realismo pluralista y su aplicación a la filosofía de la física*. México: UNAM-Siglo XXI, 2012.
- Needham, P. "A critique of the Kripke-Putnam conception of water". *Stuff - The Nature of Chemical Substances*. Eds. J. Van Brakel & K. Ruthenberg. Würzburg: Königshauen & Neumann, 2008. 93-105.
- Paneth, F.A. "The epistemological status of the chemical concept of element". *British Journal for the Philosophy of Science* 13 (1962): 1-14 (Part I) y 144-160 (Part II) [reimpr. en *Foundations of Chemistry* 5 (2003): 113-145].

- Putnam, H. "The meaning of 'meaning'". *Mind, Language and Reality, Philosophical Papers*. Vol. 2, Cambridge: Cambridge University Press, 1975. 215-271.
- . *Reason, Truth and History*. Cambridge: Cambridge University Press, 1981.
- Ruthenberg, K. "Paneth, Kant and the philosophy of chemistry". *Foundations of Chemistry* 11 (2009): 79-91.
- Scerri, E. R. "What is an element? What is the periodic table? And what does quantum mechanics contribute to the question?". *Foundations of Chemistry* 14 (2012): 69-81.
- Schwarz, W. H. E. "Recommended questions on the roads towards a scientific explanation of the periodic system of the chemical elements with the help of the concepts of quantum physics". *Foundations of Chemistry* 9 (2007): 139-188.
- Schummer, J. "Matter versus form, and beyond". *Stuff- The Nature of Chemical Substances*. Eds. J. Van Brakel & K. Ruthenberg. Würzburg: Königshauen & Neumann, 2008. 3-18.
- Van Brakel, J. *Philosophy of Chemistry - Between the Manifest and the Scientific Image*. Leuven: Leuven University Press, 2000.
- . "Pure chemical substances". *Stuff- The Nature of Chemical Substances*. Eds. J. Van Brakel & K. Ruthenberg. Würzburg: Königshauen & Neumann, 2008. 145-161.
- Van Brakel, J. & Ruthenberg, K. (eds.) *Stuff- The Nature of Chemical Substances*. Würzburg: Königshauen & Neumann, 2008.
- Vihalemm, R. "The autonomy of chemistry: old and new problems". *Foundations of Chemistry* 13 (2011): 97-107.
- Weisberg, M. "Water is not H₂O". *Philosophy of Chemistry: Synthesis of a New Discipline*. Eds. D. Baird, E. Scerri & L. McIntyre. Dordrecht: Springer, 2006. 337-345. Boston Studies in the Philosophy of Science 242.