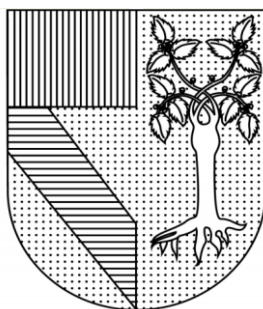


**UNIVERSIDAD PANAMERICANA**

---

**FACULTAD DE FILOSOFÍA Y CIENCIAS  
SOCIALES**

**ESCUELA DE FILOSOFÍA**



**“El estatuto ontológico de la Química:  
un análisis de su posición epistémica a través de la historia de  
sus conceptos”**

**T E S I S**

**Q U E P R E S E N T A**

**GABRIELA GARCÍA ZERECERO**  
PARA OBTENER EL GRADO DE:  
**DOCTOR EN HISTORIA DEL PENSAMIENTO**  
**DIRECTOR DE LA TESIS**  
DR. LEONARDO RUÍZ GÓMEZ  
DRA. MA. DE LOS ÁNGELES PADILLA LAVÍN

Ciudad de México

2017



Dedico esta tesis,

A mis padres Juan e Irma,  
y a mis hermanos: Juan Carlos, Martín, Enrique, Irma, Ma. José,  
Marisol, Manolo, Elsa y Mariano



# Índice

<b>Introducción General .....</b>	<b>9</b>
<b>Capítulo I: La constitución histórica de la química moderna .....</b>	<b>23</b>
1. Introducción .....	27
2. Los orígenes de la química .....	29
3. La constitución de una tradición química y su comprensión de los cuerpos inanimados .....	32
3.1 La iatroquímica .....	32
3.2. El desarrollo de la química bajo el paradigma de la cualidad .....	35
3.3. Stahl y la teoría del flogisto.....	38
4. Lavoisier y la revolución química: el desarrollo de la química bajo el paradigma de la masa.....	42
5. La introducción del atomismo en química .....	48
5.1 Átomos y mixtos .....	51
5.2 El corpuscularismo vitalista.....	51
5.3 El atomismo molecular de Gassendi .....	54
5.4 El atomismo mecanicista y su contribución a la formación de la química moderna .....	56
5.5 El atomismo de Newton.....	60
5.6 El atomismo químico en el siglo XIX. La teoría atómica de Dalton y la atomización de las sustancias.....	62
6. Conclusiones.....	67
<b>Capítulo II: Estructura molecular y enlace químico .....</b>	<b>69</b>
1. Introducción .....	73
2. La analítica y sus límites.....	76
3. Génesis de la teoría estructural en química molecular .....	81
4. El enlace químico.....	86

4.1 La evolución del concepto de enlace químico.....	87
4.2 La teoría de los electrones de valencia. El enlace covalente .....	91
4.3 Aproximación al concepto de enlace químico.....	96
4.4 El concepto de enlace y la química cuántica.....	99
4.4.1 Principios generales de la mecánica cuántica y su aplicación al concepto de enlace químico .....	101
4.4.1.1 La teoría del enlace de valencia desde la perspectiva de la mecánica cuántica .....	103
4.4.1.2 La teoría del orbital molecular.....	105
4.4.2 Partículas indiscernibles e interacciones localizadas .....	108
5. El isomerismo y la estereoquímica.....	109
5.1 El isomerismo.....	109
5.2 La estereoquímica.....	110
6. La cuestión de la realidad objetiva de los modelos moleculares .....	112
7. Conclusiones.....	116
<b>Capítulo III: La tabla periódica de los elementos .....</b>	<b>119</b>
1. Introducción .....	123
2. Los elementos químicos .....	125
2.1 Acerca de la caracterización de los elementos: Lavoisier y Mendeleiev .....	125
2.2 El descubrimiento de los elementos .....	134
2.3 La tabla periódica moderna .....	135
3. Relaciones cuantitativas entre los elementos y los orígenes de la tabla periódica .....	138
3.1 Pesos equivalentes y pesos atómicos .....	139
3.2 La hipótesis de Prout.....	141
3.3 Las triadas de Döbereiner.....	142
4. Los descubridores del sistema periódico .....	145
4.1 Alexandre Emile Béguyer De Chancourtois y su sistema helicoidal .....	148
4.2 Las octavas de Newlands .....	149
4.3 William Odling.....	152
4.4 Gustavus Detfel Hinrichs .....	153

4.5 Julius Lothar Meyer .....	155
5. Dimitri Ivanovich Mendeleiev .....	157
5.1 Primeros años de vida y trabajo científico .....	158
5.2 Mendeleiev y la ley periódica.....	161
5.3 Predicciones y la tabla periódica.....	165
6. La física y la tabla periódica.....	168
6.1 El descubrimiento del núcleo.....	170
6.2 El número atómico .....	171
6.3 Henry Moseley.....	174
6.4 El electrón y la periodicidad química.....	176
6.5 La teoría cuántica del átomo .....	178
7. Conclusiones.....	182
<b>Capítulo IV: La reducción de la Química a la Física .....</b>	<b>185</b>
1. Introducción .....	189
2. ¿Qué tipo de ciencia es la química?.....	193
3. Reduccionismo y no reduccionismo en la filosofía de la química .....	195
3.1 El modelo de reducción de Nagel.....	195
3.2 La propuesta de Needham.....	199
3.3 El no reduccionismo ontológico y la autonomía de la química.....	200
3.3.1 El estatuto ontológico del mundo químico.....	202
3.3.2 El pluralismo ontológico .....	204
3.3.3 Orbitales y ontología en la filosofía de la química .....	208
4. Valoración crítica del pluralismo ontológico.....	213
5. Filosofía de la ciencia y ontología .....	221
6. El realismo científico.....	227
7. Conclusiones.....	230
<b>Conclusiones .....</b>	<b>233</b>
<b>Bibliografía .....</b>	<b>245</b>



# **INTRODUCCIÓN GENERAL**



Desde el planteamiento original hasta su culminación, este trabajo ha seguido un itinerario complejo. Posiblemente esta complejidad surgió desde el momento mismo en el que intenté delimitar el ámbito de este estudio. Complejo también porque el tema exigía ser abordado desde diversas perspectivas: la propia de la química como ciencia experimental, la histórica, en cuanto a que aporta elementos claves para entender la identidad de la química, y la filosófica, a fin de intentar delimitar el tipo de actualidad ontológica que nos revela la química a través de la construcción e interpretación de sus objetos.

Complejo finalmente en cuanto a la elección del título pues este, en principio, debería expresar en una sola frase el contenido de esta investigación. De manera más inmediata se me presentaban dos posibilidades: “El estatuto epistemológico de la Química” o “El estatuto ontológico de la química”. La diferencia aquí entre el término epistemológico y ontológico es significativa. Si bien el término epistemológico inicialmente me parecía más adecuado, pues finalmente incluye también al ontológico, opté por el término ontológico, ya que el intento por profundizar en el estatuto ontológico de la química proporciona elementos importantes para la determinación de su identidad epistemológica. Al final del trabajo vi oportuno añadir un subtítulo con el fin de mostrar que la aproximación histórica realizada en los tres primeros capítulos determina, de alguna manera, la naturaleza de esta investigación y conduce a su objeto, el cual queda enunciado en el título.

Tal vez uno de los temas que ha suscitado particular interés entre los filósofos de la química ha sido el problema de la autonomía de la química respecto de la física. Si bien es cierto que muchos fenómenos químicos han podido ser explicados exitosamente por medio de la aplicación de la teoría cuántica, de este hecho no puede afirmarse, sin más, que la química puede ser reducida a la física. Aunque el famoso aforismo de Paul Dirac (1929) “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”,<sup>1</sup> expresa claramente este supuesto reduccionista, esta relación de reducción no parece ser tan simple después de todo. En efecto, existen problemas significativos en torno

---

<sup>1</sup> Cfr. *infra*, 202.

a una serie de cuestiones como, por ejemplo, la noción de estructura molecular y el papel exacto desempeñado por la teoría cuántica en la reducción de la química a la física, por lo que la idea de que la química no es sino una rama de la física que trata de sistemas complejos, que, en principio, pueden ser explicados por la teoría cuántica, ha comenzado a ser cuestionada.<sup>2</sup>

Hace tres décadas, la filosofía de la química era un área a la que se prestaba poca atención. Esta situación ha cambiado radicalmente. Más de 700 disertaciones y cerca de 40 monografías y colecciones aparecidas desde 1990, muestran el rápido crecimiento de este campo de investigación.<sup>3</sup> Se han propuesto muchas explicaciones de por qué durante tanto tiempo se descuidó la reflexión filosófica sobre la química. ¿Fue debido a la falta de interés por cuestiones metafísicas? ¿A su arraigado pragmatismo o a su estrecha relación con la tecnología? ¿O ha sido el principal problema la consideración de que la química no es sino una rama de la física, dado que ha sido supuestamente reducida a la física desde la mecánica cuántica, y, por tanto, no puede haber una verdadera consideración filosófica de ella?<sup>4</sup>

Teniendo en cuenta la ubicación única de la química entre la física y la biología en la jerarquía tradicional de las ciencias, no es razonable asumir que la química carece de temas que merezcan una atención filosófica. Ciertamente se podría señalar que la química ha sido y continúa siendo la ciencia que se ocupa de la naturaleza de los elementos, de la sustancia y de la naturaleza de la materia, cuestiones todas que son de índole filosófica.<sup>5</sup>

¿De qué trata la química? ¿Cuál es el objeto específico que distingue a la química de otras ciencias? Diversos textos nos dicen que la química trata de sustancias, reacciones químicas, moléculas y átomos pero, ¿qué son una sustancia,

---

<sup>2</sup> Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*, Rijksuniversiteit Groningen, Groningen 2012, xvii y LABARCA, M., “La Filosofía de la Química en la Filosofía de la ciencia contemporánea”, *Redes*, Vol. 11, No. 1 (2005), 160.

<sup>3</sup> Cfr. SCHUMMER, J., “La Filosofía de la Química. De la infancia hacia la madurez”, en BAIRD, D. & SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (coords.), *Filosofía de la química. Síntesis de una nueva disciplina*, FCE, México 2011, 36.

<sup>4</sup> Cfr. *idem*, 39.

<sup>5</sup> Cfr. SCERRI, E. & MCINTYRE, L., “The Case for the Philosophy of Chemistry”, *Synthese*, No. 111 (1997), 214.

una reacción química, una molécula, un átomo y cómo se relacionan estos conceptos entre sí?<sup>6</sup> Una sustancia química es una porción de materia de cualquier tamaño, forma y estado de agregación con propiedades químicas únicas y claramente definidas, distintas de las propiedades químicas de otras sustancias. Una propiedad química es la capacidad de una sustancia de transformarse en otras sustancias bajo ciertas condiciones, cambio que se denomina reacción química. A diferencia de lo que sucede en el ámbito filosófico en el que la sustancia es lo que permanece, en química, el cambio es esencial y radical pues es debido a las reacciones químicas que todas las propiedades cambian radicalmente.<sup>7</sup>

La química se define, pues, como una ciencia de la materia y de sus transformaciones. En tanto que ciencia moderna comienza a constituirse con Boyle en el siglo XVII; y con la publicación del *Tratado Elemental de Química* de Lavoisier, a finales del siglo XVIII, se presenta como una ciencia madura, bien formada, con paradigmas propios y una fuerte capacidad de predicción. A pesar de que Kant había asegurado que nunca podría llegar a ser una ciencia, pues no era susceptible de formulación matemática, esta formulación comienza precisamente con el libro de Lavoisier.<sup>8</sup>

---

<sup>6</sup> Se consultaron varios textos tanto de Química como de Física y nos encontramos con definiciones como las siguientes: “La química puede definirse como la ciencia que se ocupa de la caracterización, composición y transformaciones de la materia” (MORTIMER, CH. E., *Química*, versión española de la 5ª. ed., Grupo Editorial Iberoamérica, México 1983, 1). “La química se ocupa del estudio de la composición de la materia, los cambios que ésta experimenta y las relaciones entre los cambios en la composición y los cambios en la energía” (CHANG, R. & COLLEGE, W., *Química*, 7ª. ed., McGraw-Hill, México 2002, 2). “La física es la ciencia que investiga los conceptos fundamentales de la materia, la energía y el espacio, y las relaciones entre ellos” (TIPPENS, P. E., *Física. Conceptos y aplicaciones*, 6ª. ed., McGraw-Hill, México 2001, 2). “La física trata de la materia y la energía, los principios que gobiernan el movimiento de las partículas y las ondas, las interacciones de las partículas y las propiedades de las moléculas, los átomos y los núcleos atómicos y los sistemas de mayor escala como los gases, los líquidos y los sólidos” (TIPLER, P. A., *Física para la ciencia y la tecnología*, 4ª. ed., Reverté, S.A., Barcelona 1999, vol. I, 2). Como puede verse, el elemento que parece distinguir los objetos de ambas ciencias es el tema del cambio, de las transformaciones de las sustancias.

<sup>7</sup> Cfr. SCHUMMER, J., “The Philosophy of Chemistry”, en ALLHOFF, F. (ed.), *Philosophies of the Sciences*, Blackwell-Wiley, New Jersey (2010), 164.

<sup>8</sup> Cfr. VILLAVECES, J.L., “Química y Epistemología, una relación esquiiva”, *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, Vol. 1, No. 2-3 (2000), 10-11. Sobre la influencia kantiana respecto a la

Así pues, aunque se formó progresivamente a partir de un conjunto heterogéneo de conocimientos sobre propiedades de la materia y técnicas experimentales, actualmente la química proporciona las estructuras dotadas de propiedades y elabora los procesos de síntesis de dichas estructuras. Por su método, la química es la ciencia de las interacciones, de las transformaciones y de los modelos. La realidad química, tal como se presenta al conocimiento del hombre de hoy, es, sin duda, una realidad compleja. Toda tentativa de inteligibilidad científica se convierte hoy en un desafío intelectual apasionante a causa de dicha complejidad.<sup>9</sup>

Dado que la química estudia las propiedades y las transformaciones de la materia y la energía, y la física se ocupa de las leyes y teorías que rigen la materia y la energía, no es de extrañar que se considere a la química y a la física como dos áreas de la ciencia íntimamente relacionadas. Incluso un examen superficial de la historia de ambas ciencias podría mostrar que avances importantes de la química se han producido como consecuencia de la física. Sin embargo, los adelantos de la química no son meras extensiones de ideas concebidas en la física, como tampoco lo son las teorías fisicoquímicas usadas en la explicación de nuevos avances de la química. Paradójicamente, aunque la química tenga una fuerte dependencia de la física, al mismo tiempo es independiente de ella.<sup>10</sup>

---

consideración entre la física y la química puede consultarse VAN BRAKEL, J., "El legado de Kant a la filosofía de la química", en BAIRD, D. *et al.*, *op. cit.*, 108-139.

<sup>9</sup> Cfr. MANFREDI, A., *Le caractère holistique des systèmes matériels en chimie moléculaire*, Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita, Pontificia Università della Santa Croce, Romae 2003, 1.

<sup>10</sup> Cfr. VEMULAPALLI, G. K., "La física en el crisol de la química. Fronteras ontológicas y modelos epistemológicos", en BAIRD, D. *et al.*, *op. cit.*, 281. Como ejemplos de esta postura podemos citar, entre otros, a Wooley que muestra que el concepto de estructura no puede deducirse de la mecánica cuántica (Cfr. WOOLEY, R. G., "Must a Molecule Have a Shape?", *Journal of Chemical Education*, No. 61 (1984), 1073-1078), Primas para quien el holismo mecánico cuántico no permite inferir aseveraciones sobre objetos químicos sin presupuestos adicionales (Cfr. PRIMAS, H., *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism. Perspectives in Theoretical Chemistry*, Springer, Berlín/Heidelberg/Nueva York 1981), Del Re y Liegener quienes consideran que los fenómenos químicos se dan en un nivel de complejidad superior que se deriva del nivel mecánico cuántico, mas no se reduce a él (Cfr. DEL RE, G., "The Historical Perspective and the Specificity of Chemistry", *Epistemología*, No. 10 (1987), 231-240; LIEGENER, C. & DEL RE, G., "Chemistry vs. Physics, the reduction Myth, and the Unity of Science", *Journal for General Philosophy of Science*, Vol. 18, No. 1/2 (1987), 165-174).

Ya en el siglo XIX los químicos habían demostrado la naturaleza atómica y eléctrica de la materia, el carácter atómico de la electricidad, el carácter eléctrico del enlace químico, la necesidad de que los átomos tuvieran una estructura interna, la posibilidad de poner y quitar electricidad a los átomos y moléculas y, por tanto, la no-indivisibilidad de estas partículas.<sup>11</sup> Cuando los físicos debatían sobre la oportunidad que representaba la teoría atómica, los químicos ya habían pesado los átomos, medido la velocidad con la que se transportan en soluciones y habían comenzado a desbaratarlos y a mirar en su interior. En el lapso de un siglo, la teoría de la constitución de la materia había sido dotada de un sólido fundamento matemático y experimental, se había puesto orden en el mundo material y se mostraron también las relaciones existentes entre miles de sustancias conocidas. En un proceso intencional de búsqueda de propiedades se pudieron producir muchas sustancias absolutamente nuevas.<sup>12</sup>

Hasta hace algunos años se había dado por supuesta la perspectiva fisicalista que garantiza a la química un estatus autónomo solo a nivel experimental. Se asumía que las teorías de la física podían dar una explicación satisfactoria y completa de los hechos químicos y que el único papel de los químicos teóricos consistía en superar las dificultades computacionales que surgieron de aplicar las teorías físicas a predicciones específicas. Por ejemplo, en el prefacio de un texto de química cuántica se anota: “En la medida en que la mecánica cuántica es correcta, las preguntas químicas son problemas de matemáticas aplicadas. A pesar de esto, la química por su complejidad, no dejará de ser en gran medida una ciencia experimental (...)”.<sup>13</sup> Actualmente han ido surgiendo posturas más moderadas, como las de quien destaca la existencia de

---

<sup>11</sup> Como tendré ocasión de mostrar en los capítulos 1 y 3 de este trabajo, Dalton consiguió calcular el peso de los átomos partiendo de la Ley de las Proporciones Definidas y predijo una Ley de las Proporciones Múltiples. Junto con Gay-Lussac y Avogadro, puso las bases para la elaboración de una ciencia de la medida de lo atómico misma que cristalizó con la posibilidad proporcionada por Cannizzaro de elaborar una tabla coherente de pesos atómicos. La formulación de la Ley periódica —variación periódica de las propiedades de los elementos en función de su peso atómico— se constituyó en una poderosa herramienta de predicción que no solo permitió encontrar nuevos elementos, sino que mostró una relación de orden entre los átomos y una estructura interna que diera cuenta de dicho orden.

<sup>12</sup> Cfr. VILLAVECES, J.L., *op. cit.*, 11.

<sup>13</sup> EYRING, H. & WALTER, J. & KIMBAL, G.E., *Quantum Chemistry*, Wiley, New York 1944, iii.

conceptos específicamente químicos, así como diferencias en las interpretaciones proporcionadas por la química y la física;<sup>14</sup> o bien, quien sostiene que muchos de los conceptos teóricos de la química aún no han sido reducidos de manera exitosa a la mecánica cuántica, e incluso considera que aún permanece abierta la pregunta de si esta reducción puede conseguirse.<sup>15</sup>

En las últimas dos décadas la reflexión sobre las bases de la química ha resurgido de manera importante. En septiembre de 1996 tuvo lugar en Marburgo el tercer coloquio Erlenmeyer para la filosofía de la química. En este coloquio, la tendencia mayoritaria de químicos y físicos interesados en el tema de la autonomía de la química fue el rechazo del fisicalismo. Sin embargo, es claro que hay muchas cuestiones abiertas en orden a la comprensión de los temas fundamentales de la química. A continuación se enuncian, a modo de ilustración, algunos temas de orden epistemológico, dejando claro que existen muchos otros de gran interés:<sup>16</sup>

-Si la química es irreductible a la física, entonces, ¿qué es lo esencial de la química?

-El concepto de estructura es central en química; sin embargo, hay diferentes interpretaciones sobre el mismo. Para los químicos clásicos, la estructura está relacionada con la fórmula estructural. Para los químicos computacionales y los espectroscopistas, la estructura química no se reduce a su relación con una representación gráfica, sino que se entiende como un objeto geométrico, sólido, con distancias y ángulos perfectamente definidos. Más recientemente, ha ido tomando forma la postura que considera que la estructura química no puede corresponder a un objeto geométrico rígido, sino a un objeto

---

<sup>14</sup> Cfr. THEOBALD, D. W., "Some considerations on the Philosophy of Chemistry", *Chemical Society Reviews*, No. 5 (1976), 203.

<sup>15</sup> Cfr. PRIMAS, H., *op. cit.*, 8-9. Quizás un ejemplo paradigmático podría ser el sistema de fórmulas estructurales y mecanismos de reacción desarrollados en la química orgánica. Constituyen un mapa sistemático de la red química de sustancias orgánicas que permite la predicción de nuevas sustancias químicas e incluso proporciona reglas de laboratorio para realizarlas. El sistema de signos químicos se ha desarrollado desde 1860 solo por métodos químicos, es metodológicamente independiente de la mecánica cuántica y es un instrumento clave para la producción de millones de nuevas sustancias químicas. Cfr. SCHUMMER, J., "Towards a Philosophy of Chemistry", *Journal for General Philosophy of Science*, Vol. 28. No. 2 (1997), 323.

<sup>16</sup> Cfr. VILLAVECES, J.L., *op. cit.*, 20.

topológico. ¿Cuáles son las bases matemáticas de una concepción topológica de estructura química?

-Teniendo en cuenta que el tema de la predicción se ha considerado como una de las condiciones de la calidad del conocimiento, la predicción por clasificación propuesta por Mendeleiev resulta un campo interesante de análisis epistemológico. ¿Cuál es la estructura matemática presente detrás de la tabla periódica que permite explicar que la predicción se hizo posible cuando se consideró el conjunto de todos los elementos y las clases de equivalencia entre ellos? En otras palabras, ¿cuál es la estructura lógica del conocimiento químico?

Es una realidad que la química y la física se entrelazan a tal grado que a veces es difícil, por no decir imposible, imaginar a la química sin la física. Esta situación plantea la cuestión de cómo se relacionan estas dos ciencias. En el marco del desarrollo de la filosofía de la ciencia, el principal mecanismo de conexión entre las teorías es una variedad de intentos de reducción interteórica, aun cuando la interpretación del término reducción abarca diversos sentidos. En la filosofía de la química, en cambio, se asume que las perspectivas de reducción son algo sombrías. La motivación principal de esta opinión es que el uso que la química hace de las nociones físicas frecuentemente difiere del uso de esas mismas nociones en física. Uno de los desafíos que presenta esta apreciación es la especificación de qué tipo de relación interteórica puede existir entre la química y la física. Estas consideraciones son las que han motivado el presente estudio.<sup>17</sup>

La filosofía de la química abarca, en términos generales, dos grandes ámbitos: por una parte, la reflexión sobre las cuestiones particulares de la química como, por ejemplo, la naturaleza de las sustancias, el atomismo, el enlace químico, la síntesis; y, por otra parte, la reflexión sobre temas tradicionales de la filosofía como son el realismo, el reduccionismo, la modelización, entre otros. En el presente trabajo ambos ámbitos se ven implicados. Por otra parte, la estructura de la tesis pretende afrontar también los aspectos de orden epistemológico señalados en los párrafos anteriores.

---

<sup>17</sup> Cfr. HETTEMA, H., "Reduction for a Dappled World: Connecting Chemical and Physical Theories", en SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (eds.), *Philosophy of Chemistry. Growth of a New Discipline*, Springer, Dordrecht / Heilderberg / New York / London 2015, 5.

En un esfuerzo por definir su identidad, en el primer capítulo se lleva a cabo una rápida presentación histórica de la constitución de la química como ciencia, intentando mostrar que el desarrollo de la misma hasta Lavoisier puede ser considerado como un esfuerzo por desprenderse de una concepción puramente filosófica de la naturaleza. A partir de la revolución iniciada por Lavoisier, la concepción de elemento entendido como principio de potencialidades, es reemplazada por una visión de tipo empírico que lo entiende como una sustancia material irreducible a otros componentes más fundamentales, compaginando un modo teórico de entenderlo y un aspecto práctico más acorde con el trabajo de laboratorio. Análisis y síntesis se combinan para conseguir una mejor intelección de las sustancias químicas. Este capítulo dedica un espacio al atomismo ya que esta teoría juega un papel importante en la constitución de la química moderna.

El objetivo del segundo capítulo es mostrar el significado de las concepciones actuales que los químicos tienen de sus objetos principales: los átomos y las moléculas. Para ello se realiza una presentación del desarrollo progresivo de los conceptos y modelos teóricos fundamentales para la química moderna y contemporánea como son el de enlace químico y estructura. La investigación química ha revelado una diversidad potencialmente infinita de la materia y una gran complejidad en su organización a nivel molecular. Los resultados obtenidos de la aplicación de métodos analíticos para establecer la identidad molecular, junto con la posibilidad de interpretar un gran número de fenómenos en términos de estructura molecular, indican que la materia realmente posee una estructura que puede reorganizarse de acuerdo con una disposición formal inherente a la materia misma. En este capítulo se hace una breve referencia a la aplicación de la mecánica cuántica a la química molecular. Se incluye también una breve reflexión sobre la cuestión de la realidad objetiva de los modelos moleculares.

La tabla periódica constituye uno de los íconos más potentes de la ciencia; se encuentra en el centro de la química, captura su esencia y constituye una poderosa herramienta para su estudio. Para entender tanto el desarrollo del sistema periódico como la clasificación de los elementos, es importante la evolución del concepto de elemento, misma que se examina en el tercer capítulo

de este trabajo. La ley periódica, que es una ley fundamental en la ciencia química, constituye la ley central de la tabla periódica. Algunos autores se han cuestionado si se trata de una auténtica ley de la naturaleza pues no tiene la misma estructura y precisión que las leyes del mundo físico. Lo anterior plantea un interesante problema epistemológico. En el marco de las tesis reduccionistas, lo consecuente sería afirmar que las leyes químicas no existen como tales. Al igual que en los dos capítulos anteriores, un recorrido histórico permitirá entender el itinerario que hizo posible su descubrimiento. Se mostrará también la especial relevancia de las predicciones de Mendeleiev sobre la existencia de nuevos elementos aún no descubiertos y su ordenación de los elementos existentes. Un aspecto importante a considerar es determinar en qué medida la mecánica cuántica moderna puede explicar el sistema periódico. Por último, se señalará que la aproximación filosófica a la tabla periódica es interesante desde diversos puntos de vista, entre ellos porque se constituye como la plataforma adecuada para plantear la pregunta sobre si la química no es, en el fondo, pura física o, en otros términos, si la química es reducible a la física.

El tema de la relación interteórica entre la química y la física, y el papel que juega la mecánica cuántica como una teoría entre ellas, ha sido un tema que tradicionalmente se ha discutido bajo la perspectiva de la reducción. Recientemente, sin embargo, esta relación se ha convertido en un tema controvertido en la filosofía de la química, dado que la aplicación de los principios reduccionistas a la química ha resultado problemática. La reivindicación de la reducción lleva consigo muchas preguntas por resolver. Los ámbitos de la física y de la química son muy cercanos, incluso en algunos casos se traslapan; hay una gran continuidad entre ambas ciencias además de elementos teóricos y ontológicos comunes. Para poder profundizar en la posibilidad o imposibilidad de la reducción de la química a la física, en este cuarto capítulo se abordan, en primer lugar, dos propuestas que establecen las condiciones necesarias para establecer la facticidad de dicha reducción. La imposibilidad de la reducción epistemológica de la química a la física es, quizá, la línea de argumentación más utilizada por los filósofos de la química para defender tanto la autonomía de la química como ciencia, como la posibilidad de que esta pueda ser objeto de especulación filosófica. De una u otra manera, todos los autores parecen estar de acuerdo en

que las descripciones y los conceptos químicos no pueden derivarse de los conceptos y las leyes de la física, tal como lo supone el reduccionismo epistemológico.<sup>18</sup> Dado que la no reducción epistemológica parece sostenerse sin mayor dificultad, este capítulo se centra en el estudio de si es posible sostener la reducción ontológica. Finalmente se hace una referencia a la filosofía de la ciencia como la perspectiva que, en mi opinión, permite enfocar mejor el problema de la relación entre la química y la física.

Tanto la química como la física tratan de la materia, ambas expresan su visión sobre ésta con teorías más o menos compatibles, incluso es reconocido el papel que desempeñan en algunas explicaciones químicas teorías físicas como la mecánica cuántica, por lo que se podría esperar que esta situación diera lugar a un tipo paradigmático de reducción. Sin embargo, si uno es sensible a los problemas planteados por ambas ciencias, el de la relación, sin duda, se torna un problema interesante.

Fue posible iniciar esta investigación gracias al estímulo del Dr. Jorge Morán y Castellanos a quien agradezco que me haya animado a emprender la maravillosa aventura del doctorado y las innumerables horas de diálogo en los primeros meses de esta andadura. No tengo palabras para expresar mi agradecimiento al Dr. Leonardo Ruíz Gómez. Su calidez humana, el interés con el que me ha acompañado a lo largo de este itinerario, su profundo rigor intelectual, su profesionalismo y su generosa dedicación han hecho posible la realización de este trabajo. Igualmente agradezco a la Dra. Ma. de los Ángeles Padilla Lavín por saber estar ocultamente presente, por su amistad y cariño.

Escribir una tesis doctoral supone la confianza de muchas personas. Aunque en justicia debería mencionar a todos los que trabajan en el campus y en el Departamento de Humanidades, quiero agradecer especialmente al Dr. Juan de la Borbolla Rivero, al Maestro Roberto Rojas Tapia, al Dr. Rafael Hernández Cazares y al Dr. Humberto Ramírez Ulloa. Una mención especial merece el Dr. Sergio Villanueva Varela quien fue, para mí, ejemplo de integridad de vida.

---

<sup>18</sup> Cfr. LABARCA, M., "La Filosofía de la Química en la Filosofía de la ciencia contemporánea", *Redes*, Vol. 11, No. 1 (2005), 160-161.

También debo mucho al Dr. Juan Andrés Mercado, al Dr. Pedro Pallares, a la Dra. Rocío Mier y Terán y a la Maestra Laura Salgado.

Mi agradecimiento también al personal de Biblioteca, especialmente a Adriana Gabriela Blanco, por las facilidades prestadas para conseguir la bibliografía necesaria. Por último, pero no menos importante, al Centro Educativo Jaltepec por las innumerables ocasiones en las que me fue necesario abusar de su hospitalidad en las diversas etapas de redacción de este trabajo.



# CAPÍTULO I



**LA CONSTITUCIÓN  
HISTÓRICA DE LA QUÍMICA  
MODERNA**



## 1. Introducción

Disciplinas como la física y la química no existen desde siempre, sino que se han constituido poco a poco. ¿Cómo se convirtió la química en ciencia? La mayoría de las historias de la química han dado más o menos la misma respuesta a esta pregunta: la química se convirtió en ciencia al desprenderse del envoltorio de prácticas arcaicas y saberes ocultos propios de la alquimia.<sup>19</sup>

Si concedemos que la ruptura con un pasado de tradiciones artesanales y con la alquimia marca el origen de la historia de la química como ciencia, ¿cuál es el acontecimiento que genera tal ruptura? Algunos autores lo sitúan en el siglo XVIII y consideran como el padre de la química moderna a Ernst Georg Stahl (1660-1734), o bien, a Antoine-Laurent de Lavoisier (1743-1794); otros prefieren remontarse al siglo XVII y señalan el cambio de rumbo con Robert Boyle (1627-1691).

Así como el acontecimiento que generó el nacimiento de la ciencia química no aparece muy claro, tampoco lo es la cuestión sobre su identidad. ¿Es una ciencia o un arte?, ¿un saber discursivo o un conjunto más o menos coherente de prácticas? ¿Constituye un sistema autónomo o un cuerpo de doctrinas? ¿Nace con la elaboración y transmisión de saberes prácticos? ¿Empieza con la articulación entre teoría y experiencia? ¿Existe una filosofía subyacente implícita a la química? ¿Su progreso científico se realiza en torno a estos presupuestos filosóficos? Todas estas interrogantes remiten en el fondo a una misma cuestión: ¿qué es la química?

De entre todas las ciencias, la química presenta una peculiaridad respecto a la definición de su territorio; nos encontramos ante una ciencia que traspasa las fronteras entre lo inerte y lo vivo, entre lo microscópico y lo macroscópico. Podemos decir que la química es una ciencia intermedia entre la física y la biología en el sentido de que, mientras que admite la cuantificación —fin de la descripción física— permanece, sin embargo, como una disciplina en la que la caracterización cualitativa continúa siendo muy importante. La multiplicidad del territorio de la

---

<sup>19</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *Historia de la Química*, Ed. Addison-Wesley Iberoamericana, S. A., Madrid 1997, 8-11.

química rebasa cualquier definición *a priori* e impone el desafío de construir una identidad.<sup>20</sup>

¿Cómo abordar entonces una historia de la química? Algunos historiadores consideran que posiblemente un buen hilo conductor sería el de la búsqueda de su identidad, porque precisamente este cruce entre espacios heterogéneos de conceptos y métodos es lo que ha llevado a los químicos a defender la autonomía y la racionalidad específicas de la química.<sup>21</sup>

La química configura su objeto en relación con un conjunto de doctrinas basadas en conceptos, operaciones y técnicas. Los procedimientos experimentales (pesar, refinar o purificar, por ejemplo) pueden no solamente hacer evolucionar o modificar las normas o requisitos de explicación, sino incluso provocar la caída de ciertas doctrinas. Del atomismo a la química molecular los científicos reconocen la existencia de diversos niveles de complejidad y organización de la materia. De cada uno de estos niveles emergen propiedades nuevas no observables en los niveles más elementales. Lo anterior sugiere la idea de que la aparición de propiedades nuevas de la materia y la irreductibilidad de un nivel a otro son enteramente reales. Como veremos, la adquisición de un saber químico verdadero se ha conseguido mucho antes del devenir científico en el sentido moderno del término.<sup>22</sup>

Una presentación sucinta pero significativa de algunos ejemplos concretos de químicos que, en un momento dado, con sus prácticas, sus descubrimientos o sus enseñanzas, contribuyeron a dilucidar lo que es propio de la química, nos puede dar luz para entender el carácter más riguroso de esta ciencia a partir de Lavoisier y nos permitirá evaluar mejor las aportaciones y los límites de orden epistemológico del desarrollo de la química hasta su culminación en la teoría atómica de John Dalton (1766-1844).<sup>23</sup>

---

<sup>20</sup> Cfr. HORNE, R. A., "Aristotelian Chemistry", *Chymia*, Vol. 11 (1966), 21.

<sup>21</sup> Es el caso, por ejemplo, de Bernadette Bensaude-Vincent e Isabelle Stengers: cfr. BERTOMEU SÁNCHEZ, J. R. & GARCÍA BELMAR, A., "La historia de la química: Pequeña guía para navegantes", *Anales de la Real Sociedad Española de Química*, No. 1 (2008), 56-63.

<sup>22</sup> Cfr. BENSAUDE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 13 y MANFREDI, A., *op. cit.*, 8.

<sup>23</sup> Cfr. *infra*, 63-64. Al introducir el concepto de átomo y darle una fundamentación empírica, Dalton proporcionó una determinación teórica al objeto fundamental de la química. La composición atómica se convirtió entonces, y continúa siendo aún hoy, el principio central de

## 2. Los orígenes de la química

¿Dónde situar los orígenes de la química? Hay que remitirse a las doctrinas que podríamos asimilar a una química pre-científica. Desde el famoso enunciado de Tales, “el agua es el principio de todas las cosas”, hasta la doctrina de los elementos de Aristóteles, se formulan y se confrontan entre sí los conceptos que han aparecido y siguen apareciendo al hablar de química (principios, elementos, átomos, problema de la diferenciación, relaciones entre lo uno y lo múltiple, el cambio interpretado como la transgresión efímera de un orden en permanente conflicto).<sup>24</sup>

¿Podemos ver en los antiguos átomos de Demócrito, de Epicuro o de Lucrecio, los “precursores” de nuestros átomos? La respuesta apunta a ser afirmativa si pensamos que estas doctrinas atomistas oponen a la idea cualitativa del cambio una idea de tipo combinatorio, y que esa oposición reaparecerá en el seno de la química del siglo XVII.

Elementos, principios y átomos nos acompañan a lo largo de toda la historia de la química, pero no se refieren a un mismo objeto, no hay una continuidad conceptual. Sin embargo, la recuperación de estos términos designa la tensión entre las diversas explicaciones de las cualidades y sus transformaciones que constituyen un problema insistente hasta el siglo XX.<sup>25</sup>

En Alejandría, punto de encuentro de las tradiciones griegas (pitagórica, platónica, estoica), egipcias y orientales (gnosticismo), se halla el origen del

---

organización de toda la química. Cfr. SIEGFRIED, R., “The Chemical Revolution: Essays in Reinterpretation”, *Osiris*, Vol. 4 (1988), 36.

<sup>24</sup> Cfr. HORNE, R.A., *op. cit.*, 21-27, en donde el autor hace una exposición detallada de los fenómenos químicos presentes en la filosofía natural tanto de los presocráticos como del mismo Aristóteles.

<sup>25</sup> Cfr. *idem*, 22. Según Horne, los elementos de los antiguos griegos no eran de naturaleza química. Tierra, aire y agua representaban estados físicos de la materia —sólido, gas y líquido— más que sustancias químicas. El fuego sería más bien un conglomerado de propiedades físicas que posee calor y conductividad térmica y tiene que ver más con el proceso de la combustión que con un elemento químico en sí. Por su parte, Aristóteles entiende por elemento “lo primero de lo cual algo se compone, siendo aquello inmanente «en esto» y no pudiendo descomponerse, a su vez, específicamente en otra especie distinta”, ARISTÓTELES, *Metafísica*, V, 1014a 26-34. Ver también CROWLEY, T., “Aristotle’s ‘So Called-Elements’”, *Phronesis*, Vol. 53, No. 3 (2008), 223-242.

carácter específico de la alquimia. El conjunto del corpus alejandrino que ha llegado hasta nosotros y cuyo representante máximo es Zósimo (s. IV d.C.) contiene las referencias más importantes de la alquimia tradicional. En él figura tanto la asociación entre procedimientos, simbolismo místico y doctrina cosmogónica, con la que se identifica la alquimia, como la descripción de procedimientos (destilación, sublimación, filtración, disolución, calcinación, etc.) que establecen una continuidad práctica entre alquimia y química.<sup>26</sup>

A pesar de su falsa creencia en la posibilidad de la transmutación y en la existencia de un saber oculto, los alquimistas perfeccionaron técnicas que serán las técnicas de la química moderna. A partir del siglo XIV, los alquimistas europeos aprendieron a preparar y condensar ácidos fuertes: nítrico, clorhídrico, sulfúrico, etc., con los que pudieron elaborar y caracterizar gran variedad de sales y “espíritus” (gases) cada vez más numerosos, y que fue posible separar gracias a los procesos de destilación. A raíz del examen al que sometieron al oro para confirmar su autenticidad, desarrollaron también las prácticas que confieren una identidad operacional a las sustancias, centrada en la diferencia entre las propiedades secundarias (que pueden ser imitadas, es decir, que no cualifican a la sustancia) y las propiedades que se podrían llamar intrínsecas.

La combinación es, quizá, el problema teórico fundamental que se plantea la química. ¿Cómo es posible que, al combinarse dos sustancias distintas entre sí, formen una tercera que, a su vez, es diferente de las otras dos? ¿Cómo y por qué ocurre esto? ¿Qué nos revela sobre nuestro modo de entender la identidad y las propiedades de una sustancia?<sup>27</sup>

Si bien los atomistas pretendieron dar respuesta a estas preguntas basándose en supuestas combinaciones de átomos individuales e indestructibles, un análisis cuidadoso ha demostrado que este enfoque es incompleto y que no consigue dar una explicación totalmente satisfactoria. Por su parte, Aristóteles sostuvo que, cuando se combinan los elementos, sus propiedades se pierden, pero

---

<sup>26</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 19-20.

<sup>27</sup> Cfr. BAIRD, D. & SCERRI, E. & MCINTYRE, L., “La invisibilidad de la Química”, BAIRD, D. *et al.*, *op. cit.*, 20.

permanecen como una especie de potencialidad dado que se restablecen cuando estos se separan mediante el análisis.<sup>28</sup>

Aunque algunos aspectos importantes del pensamiento griego relacionados a la estructura de la materia subsisten en la química moderna,<sup>29</sup> en la breve presentación sobre el desarrollo histórico de la química que se expone a continuación no se incluye la formulación racional de las teorías sobre la constitución de la materia (elementos y átomos) propuestas por los griegos, ni tampoco las teorías sobre la manipulación de la materia de los alquimistas pues las conexiones formales de éstas con la química resultan complejas, aunque fuera la alquimia la que proporcionó a los primeros químicos muchos de sus aparatos y técnicas así como la noción de un lenguaje simbólico formal.<sup>30</sup>

Desde que la química se opone a la alquimia, es tradicional identificar esta última como una ciencia errónea, que debía ser abandonada para que la química moderna, la química verdaderamente científica, fuera posible. Sin embargo, los historiadores de las ciencias están de acuerdo en reconocer a la rica tradición alquímica un papel innegable en la génesis de la química moderna, en particular en lo que se refiere al desarrollo del saber hacer práctico y de las técnicas de separación de numerosas sustancias.<sup>31</sup>

Diversos factores como son la falta de criterios y estándares de pureza, la gran complejidad de los fenómenos químicos, la dificultad para definir e identificar los elementos, así como la falta de nociones acerca del estado gaseoso de la materia, hicieron que la química fuera considerada hasta el s. XVIII una especie de rompecabezas que formaba parte de la filosofía de la naturaleza.<sup>32</sup>

---

<sup>28</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>29</sup> Por ejemplo, la doctrina de los elementos de Aristóteles, el problema de la diferenciación, las relaciones entre lo uno y lo múltiple, la idea cualitativa del cambio.

<sup>30</sup> Cfr. BROCK, W.H., *Historia de la Química*, Alianza Ed., Madrid 1998, 20.

<sup>31</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 19. Para profundizar en tema de la relación alquimia-química desde el punto de vista historiográfico puede consultarse ABBRI, F., "Alchemy and Chemistry: Chemical Discourses in the Seventeenth Century", *Early Science and Medicine*, Vol. 5, No. 2 (2000), 214-226, en donde el autor explica que la alquimia no se transformó sin más en química; más bien la química fue delimitando su campo de estudio y definiendo su objeto propio. La química en el siglo XVII era un fenómeno complejo y fue necesaria la construcción histórica de un espacio específico para que pudiera desarrollarse como ciencia.

<sup>32</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 18.

Que los químicos franceses contribuyeron de manera decisiva a la formación del estatuto científico de la química es un hecho bien establecido. Con Lavoisier, por ejemplo, el concepto de elemento adquiere un carácter definitivamente empírico. Sin embargo, las doctrinas químicas anteriores a Lavoisier, a pesar de su complejidad, no pueden ser enteramente ignoradas; son una muestra de que los conocimientos químicos de la naturaleza no se iniciaron con la fisicalización del atomismo mecanicista filosófico. Éste será introducido progresivamente en el mundo de la química.<sup>33</sup>

### 3. La constitución de una tradición química y su comprensión de los cuerpos inanimados

#### 3.1 La iatroquímica

En el siglo XVI hicieron su aparición algunas teorías de carácter químico como resultado del estudio de los cuerpos inertes. Las consideraciones teóricas y sobre todo el “saber-hacer” práctico detentaron también un carácter químico tanto en las investigaciones medicinales, farmacológicas, mineralógicas, alquímicas, como en la artesanía relacionada con la fabricación de objetos metálicos (metalurgia, orfebrería...)<sup>34</sup>

Una figura que encarna bien el fenómeno de convergencia de las experiencias del saber hacer sobre la materia inerte es sin duda Philipp Aureolus Theophrast von Hohenheim (1493-1541) mejor conocido como Paracelso.<sup>35</sup>

Paracelso se veía a sí mismo principalmente como un reformador de la medicina, como alguien destinado a refutar las enseñanzas ancestrales y basar la práctica médica en medicinas minerales que consideraba más efectivas. Relacionó la medicina con la química como alternativa a una medicina muy especulativa que, según su punto de vista, estaba poco orientada hacia la práctica experimental. Surgió así una nueva ciencia, la iatroquímica que tuvo como principal objetivo la

---

<sup>33</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 15.

<sup>34</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>35</sup> Cfr. *idem*, 56-61.

preparación de sustancias terapéuticas eficaces teniendo en cuenta elementos de magia, astrología y alquimia. Paracelso sostenía la idea que las sustancias químicas actúan y que en virtud de sus propiedades pueden influir y modificar la naturaleza; es decir, sus propiedades activas pueden actuar sobre la salud del hombre y curarlo de la enfermedad.

La necesidad creciente por encontrar y preparar remedios útiles llevó a los iatroquímicos a interesarse por saber cómo reconocer y preparar sustancias químicas determinadas con propiedades repetibles. Se puede decir que Paracelso redescubrió, por expresarlo de algún modo, las concepciones terapéuticas de la tradición galénica e incrementó la farmacopea tradicional (a base de plantas) con productos químicos hechos en los laboratorios de los alquimistas.

Paracelso introdujo en la química teórica la doctrina de los *tria prima* o los tres principios. Mantuvo que las sustancias medicinales estaban compuestas, en última instancia, por los cuatro elementos aristotélicos, los cuales formaban los receptáculos para las cualidades universales de una trinidad de cuerpos primarios a los que llamó sal (cuerpo), azufre (alma) y mercurio (espíritu). Estos principios, según Paracelso, son los que confieren a todos los cuerpos sus funciones y propiedades. Además, propuso la noción de quintaesencia o quinto elemento, que resulta de la unión de las cuatro cualidades elementales de la materia (frío, caliente, húmedo y seco) y que él considera la sustancia primordial que puede ser extraída de cualquier cosa que produce la naturaleza.

Para extraer la quintaesencia, el procedimiento técnico por excelencia es la destilación. La quintaesencia juega un auténtico papel de paradigma, siendo la clave interpretativa de la comprensión de las sustancias químicas y de su manipulación. Para Paracelso, quien quiere comprender, debe experimentar y no solamente considerar o contemplar la realidad. Por primera vez en la historia occidental, comprender teóricamente y experimentar se unen para conocer la verdad sobre las sustancias naturalmente inertes.

Se puede decir que el conocimiento de las sustancias químicas tal y como lo promovió Paracelso permitió reconocer que éstas poseen propiedades específicas, y que el hombre puede manipularlas y transformarlas. La formación progresiva de un saber químico que sostiene cierta racionalidad puede ser considerado como un lugar de encuentro de conocimientos diversos. Las

tradiciones alquímicas y hermético-místicas contribuyeron de manera importante a tomar conciencia que el conocimiento no se basa exclusivamente en una aproximación metodológica matemática. Estas tradiciones no han sido el patrimonio exclusivo de filósofos oscuros, sino también de los grandes protagonistas de la revolución científica como Johannes Kepler (1571-1630) e Isaac Newton (1643-1727). Los primeros intentos de unificación del conjunto de conocimientos diversos y el esfuerzo por una teorización racional para entender las sustancias corpóreas y sus transformaciones pueden considerarse como una gran mutación cultural en la historia moderna del conocimiento occidental.<sup>36</sup>

La iatroquímica conoció su máxima expresión en la obra del Jan Baptista van Helmont (1579-1644). Tras estudiar diferentes aspectos de la filosofía natural, van Helmont decidió dedicarse a la medicina y a la química. A diferencia de sus predecesores, rechaza tanto la teoría de los elementos como la de los principios, y hace del agua la sustancia primordial única. Sin embargo, según van Helmont, debe existir además otro principio organizativo activo que no puede identificarse con ninguna sustancia material y que es el que confiere su forma, su unidad y sus propiedades a los cuerpos naturales.<sup>37</sup>

Van Helmont observó que en ciertas reacciones químicas se desprendían fluidos “aéreos” a los que denominó gases, de la palabra griega *kaos*, porque carecían de forma. Fue el primero en diferenciar las diversas sustancias gaseosas (ácido carbónico, hidrógeno, ácido sulfuroso, etc.) basándose en sus propiedades, y en distinguir entre gases y vapores, estos últimos convertibles al estado líquido mediante mero enfriamiento. A pesar de lo anterior, se prestó poca atención a sus observaciones debido a que no existían aparatos adecuados para recoger y estudiar estas emisiones aéreas y caracterizarlas apropiadamente. Antes de él, todos los gases eran tenidos por sustancialmente idénticos y no distintos del aire.<sup>38</sup>

La práctica experimental de van Helmont se caracteriza por ser cuantitativa y controlada y se observa en ella las primeras tendencias de un método de investigación fundado en experimentos organizados y demostrados los cuales

---

<sup>36</sup> Cfr. *idem*, 22-23.

<sup>37</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 61 y BENSUAUDE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 29-30.

<sup>38</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 63.

marcarán la pauta del método experimental que llevó a la transformación de la química.<sup>39</sup>

### 3.2. El desarrollo de la química bajo el paradigma de la cualidad

A principios del siglo XVII encontramos todo un conjunto rico y complejo de doctrinas que se desarrollan a partir de Paracelso y Van Helmont, principalmente, que servirán de modelos interpretativos de las experiencias químicas hasta Lavoisier. Se puede decir que son doctrinas que se encuentran todavía vinculadas a principios y elementos relacionados con la categoría de cualidad, aunque se observa también un esfuerzo por liberarse progresivamente del carácter metafísico de los elementos explicativos de la realidad química.

Una de estas doctrinas es la de Nicaise Lefebvre (1615-1669), uno de los primeros profesores de química en el Jardín del Rey en París.<sup>40</sup> Lefebvre afirmaba que la fuente y la raíz de todas las cosas era una sustancia espiritual homogénea que denominó Espíritu Universal, del que se derivan los cinco principios o elementos: agua, azufre, mercurio, sal y tierra, producto de la descomposición de los mixtos. Para Lefebvre la tarea de la química es realizar por medio de la experimentación lo que los antiguos filósofos intentaron hacer por la simple contemplación. En su propuesta de una explicación unitaria de la naturaleza, se encuentra todavía una auténtica metafísica espiritualista, pues para Lefebvre la química tiene por objeto todas las cosas naturales que Dios ha sacado del caos por la creación.

El nombre de Nicolás Lemery (1645-1715) está relacionado con su curso de química: uno de los manuales más populares de todos los tiempos. Como buena parte de los autores de obras de química de esos años, Lemery había iniciado su formación como aprendiz de farmacia bajo las órdenes de un maestro boticario,

---

<sup>39</sup> Cfr. DUCHEYNE, S., “Algunas Notas Metodológicas sobre los Experimentos de Van Helmont”, *Azogue*, No. 5 (2007), 100-107.

<sup>40</sup> En París, los principales cursos de química fueron impartidos durante mucho tiempo en el *Jardin Royal de Plantes Medicinales*, hasta la introducción de la cátedra de química en la Facultad de Medicina bien entrado el siglo XVIII.

en este caso su tío materno. Tiempo después, en Montpellier, pudo seguir algunos cursos en su prestigiosa Facultad de Medicina.

Al igual que Lefebvre, Lemery consideraba que el primer principio de la química era un espíritu universal que daba lugar a la diversidad de las cosas. Sin embargo, Lemery pensaba que este espíritu tenía un carácter un poco menos metafísico, y que, por tanto, era mejor considerar principios más accesibles a los sentidos. Estos principios eran cinco, tres activos (el espíritu o mercurio, el aceite o azufre y la sal) y dos pasivos (el agua y la tierra). Para Lemery, estos principios o elementos debían reflejarse en los resultados obtenidos por el análisis químico pues constituyen los principios de las cosas naturales.

Lemery entendía por principios químicos sustancias separadas y divididas hasta el punto en el que los esfuerzos humanos eran capaces de hacerlo y su interpretación de los procesos químicos se situaba bajo una óptica corpuscular y mecanicista. Bajo esta perspectiva, las transformaciones no eran sino colisiones o combinaciones de partículas de diferentes formas, que seguían diversos movimientos o trayectorias en función del medio en el que se encontraban. Estas explicaciones mecanicistas fueron la clave de la popularidad del texto de Lemery, puesto que permitieron conectar la química con una de las principales corrientes filosóficas de su época. Sin embargo, aun cuando introdujo el atomismo mecanicista en sus explicaciones, construye también su doctrina sobre los principios de las cualidades últimas de las sustancias químicas.<sup>41</sup>

Lemery intentó integrar y armonizar una explicación atomista puramente teórica con la tradición química surgida de Paracelso. Para Lemery, la esencia de una sustancia química puede ser reconocida desde el momento en el que las propiedades observables de dicha sustancia pueden ser explicadas teóricamente por las características geométricas u otras de las partículas; la explicación es puramente especulativa ya que las partículas en cuestión no han sido observadas sino deducidas de sus propiedades observables a nivel macroscópico. El modelo atomista figurativo es un instrumento teórico justificado por su simple coherencia lógico racional sin afrontar el problema de la verdad de la figuración, de su adecuación a lo real. Es decir, pasa por alto la cuestión de saber si existe una

---

<sup>41</sup> Cfr. BERTOMEU SÁNCHEZ, J. R. & GARCÍA BELMAR, A., *op. cit.*, 22.

correspondencia real entre el modelo y los hechos experimentales. El carácter esencial de este atomismo químico consiste en la utilización instrumental de los conceptos mecanicistas.<sup>42</sup>

El examen del libro de Lemery pone de manifiesto, por una parte, el gran número de prácticas de laboratorio, recetas y productos que formaban parte del acervo de conocimientos químicos de su época pero, por otra parte, muestra las limitaciones de las explicaciones sobre la composición de las sustancias, la heterogeneidad del vocabulario químico y la carencia de interpretaciones satisfactorias de las transformaciones químicas.<sup>43</sup>

Otro ejemplo significativo del siglo XVIII es la teoría de Gabriel François Venel (1723-1775) profesor de química de la universidad de Montpellier y autor principal de los artículos de química de la Enciclopedia de Denis Diderot (1713-1784) y Jean le Rond d'Alembert (1717-1783). En estos artículos, Venel critica a los newtonianos que ven a la química simplemente como una rama de la física. La química si bien trata de las relaciones entre corpúsculos y principios, estos no se encuentran necesariamente sujetos a las mismas fuerzas que las grandes masas estudiadas por los físicos ya desde esta época.

Según Venel, el objeto principal de la química está constituido por los principios o elementos. Con estas nociones, sin embargo, no pretende designar a las sustancias químicas elementales experimentalmente aislables, sino a las cualidades inherentes a los cuerpos naturales. Para Venel la noción de principio es sinónimo de actividad, de propiedad específica en cuanto tal.

La mecánica, por tanto, no puede entender la naturaleza intrínseca de las sustancias corpóreas pues mientras la física solamente trata de construcciones abstractas, la química puede proporcionar una serie de datos que llegan al corazón de las sustancias químicas, sus cualidades íntimas e irreductibles. La conclusión es clara: la química se interesa por las cualidades internas de los cuerpos y, por consiguiente, debe seguir sus propios métodos de investigación independientemente de aquellos adoptados por la física.<sup>44</sup>

---

<sup>42</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 40-41.

<sup>43</sup> Cfr. BERTOMEU SÁNCHEZ, J. R. & GARCÍA BELMAR, A., *op. cit.*, 23-26.

<sup>44</sup> Cfr. MELHADO, E., "Chemistry, Physics, and the Chemical Revolution", *Isis*, Vol. 76, No. 2 (1985), 197.

### 3.3. Stahl y la teoría del flogisto

Georg Ernst Stahl (1660-1734) era a la vez médico y químico, es decir, lo que llamamos un iatroquímico. Su teoría del flogisto puede considerarse como la primera doctrina general, adoptada en toda Europa, que permitió interpretar un gran número de experiencias y será fuente de inspiración y discusión durante toda la segunda mitad del siglo XVIII.<sup>45</sup>

Stahl creía que la química no podía ser reducida a aspectos mecanicistas. Aunque defendía la existencia de átomos, fuertemente individualizados por sus cualidades, pensaba que las teorías atómicas no eran suficientes para explicar los procesos químicos. La química desarrollada por Stahl se basa en una filosofía de la materia corpuscular pero opuesta al mecanicismo.

Según Stahl, la materia estaba compuesta por partículas ordenadas jerárquicamente en grupos o montones para formar los compuestos o “mixtos”. Lo propio de la química es la “unión mixtiva” o mixtión, que debe distinguirse de la agregación pues ésta última solamente es una unión mecánica que remite a las propiedades de las masas y de los movimientos, es decir, a la mecánica. La mixtión, en cambio, implica la diversidad cualitativa de lo que solo puede analizarse cambiando de propiedades. Stahl reconocía dos principios para todos los mixtos que son el agua y la tierra. La identificación de estos principios se relaciona con la antigua teoría de la afinidad: por ejemplo, si los ácidos atacan los metales, es porque presentan una analogía con los metales, porque comparten con ellos un principio. Por lo tanto, conviene dar cuenta de las propiedades de los cuerpos en términos de cualidades absolutas de los principios.<sup>46</sup>

Dado que las fermentaciones eran procesos de gran interés industrial, Stahl dedicó sus primeros trabajos al estudio de las mismas. Como contaba con una buena base procedente de la práctica de la metalurgia, estableció una analogía entre la combustión orgánica y la calcinación de los metales, considerándolas como dos operaciones con características semejantes. Como en su época se utilizaba el carbón vegetal en la fundición como fuente de calor y para evitar que el metal se

---

<sup>45</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 53-56.

<sup>46</sup> Cfr. *idem*, 54.

abrasara, supuso que todos los cuerpos inflamables contenían flogisto, un principio ígneo, el cual se desprendía mediante la combustión.<sup>47</sup>

El químico alemán observó que al calentar un metal como el hierro o el plomo se producía una sustancia de aspecto terroso, denominada habitualmente cal metálica, que ya no poseía ninguna de las características metálicas (brillo, ductilidad, maleabilidad). Al igual que la combustión, la calcinación, es decir, la formación de la cal, podía explicarse como un desprendimiento de flogisto que dejaba la cal al descubierto al liberarse del metal.<sup>48</sup>

Stahl observó también que cuando se calentaba una cal con carbón vegetal, la reacción se invertía. Si una sustancia rica en flogisto, como el carbón, era puesta en contacto con una cal metálica, podía transferirle su flogisto y dar lugar a la formación del metal. Es decir, la reducción de la cal a metal, podía ser igualmente explicada como una adición de flogisto.<sup>49</sup>



Para la mentalidad actual, el principal inconveniente de la teoría del flogisto radica en que los metales y otros combustibles ganan peso al ser quemados en presencia de aire; sin embargo, según la teoría del flogisto, se producía una pérdida. ¿Por qué, entonces, no tenía lugar la correspondiente reducción en el peso? Stahl no proporciona explicación a este hecho pues, para él, el cambio de peso era un fenómeno físico y, aunque podía indicar un cambio químico, no desempeñaba ningún papel importante dentro de la química stahlina. Además, los químicos del s. XVIII no estaban ni mucho menos de acuerdo en que los metales ganaban peso durante la calcinación.<sup>50</sup>

El modelo explicativo de Stahl resultó ser bastante extenso. Hizo posible, por ejemplo, una inteligibilidad amplia y rigurosa de las reacciones de óxido-reducción, muy importantes en química. El éxito de la teoría del flogisto fue

<sup>47</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 85.

<sup>48</sup> Cfr. BERTOMEU SÁNCHEZ, J. R. & GARCÍA BELMAR, A., *op. cit.*, 40-41.

<sup>49</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 86.

<sup>50</sup> Cfr. *idem*, 87.

favorecido por el prestigio del químico alemán, pero también por la facilidad con la que explicaba de manera coherente y lógica las observaciones cualitativas hechas a lo largo de numerosas reacciones.

Uno de los responsables de la difusión de la teoría del flogisto entre los químicos franceses fue Guillaume François Rouelle (1703-1770) quien la integró a su propia teoría, más amplia. En esta, Rouelle defendía que los cuatro elementos tradicionales podían operar como elementos químicos o como instrumentos físicos. Así, el fuego o flogisto, cumplía una doble función: como componente de la materia y como instrumento capaz de alterar los estados físicos de esta. Disentía de Stahl, quien reconocía al aire y al fuego solamente funciones instrumentales. De forma análoga, el aire, el agua y la tierra podían servir respectivamente como instrumentos para la presión, la disolución y la fabricación de recipientes, a la vez que intervenían en la composición de las sustancias.<sup>51</sup>

En otras palabras, Rouelle rearticula la doctrina de Stahl en torno a una asociación sistemática de los conceptos de elemento-principio y de instrumento. Rouelle adjudica a los principios dos funciones: la de constituyente de los mixtos y la de agente o instrumento de las reacciones químicas. En tanto que elementos constituyentes, no contradicen la química de los desplazamientos, sino que la trascienden: el químico nunca aislará o caracterizará un elemento como lo haría con un cuerpo; el elemento no es aislable porque no se le puede separar de un mixto sin volver a crear un nuevo mixto.<sup>52</sup>

---

<sup>51</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op.cit.*, 93 y BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 56-58. Los predecesores de Lavoisier, considerado generalmente como el fundador de la química moderna, han sido comúnmente relegados a una época oscura en la historia de la ciencia. Esto significa ignorar la continuidad histórica en orden a sostener la creencia de que la química nació de nuevo en el siglo XVIII. El estudio reciente de personajes como John Mayow (1640-1679), Stephen Hales (1667-1771), Joseph Black (1728-1799) y Rouelle, por mencionar algunos, ha contribuido a entender mejor los orígenes de la así llamada Revolución química. Un estudio completo, bien documentado desde el punto de vista histórico y que muestra las principales aportaciones de Rouelle, así como su método científico, puede verse en RAPPAPORT, R., "G. F. Rouelle: An Eighteenth-Century Chemist and Teacher", *Chymia*, Vol. 6 (1960), 68-101.

<sup>52</sup> Cfr. RAPPAPORT, R., "Rouelle and Stahl: The Phlogistic Revolution in France", *Chymia*, Vol. 7 (1961), 75-76. En este artículo se detalla la teoría de Rouelle sobre la constitución de la materia, la cual puede considerarse newtoniana más que corpularista. Según Rouelle, el químico extrapola sus conclusiones sobre las partículas últimas de sus conocimientos de masas grandes. Aunque estas partículas no puedan ser percibidas individualmente, pueden describirse como simples,

Así pues, el fuego o el calor, es el instrumento; el fuego es el elemento que entra en la composición de los mixtos. El flogisto, en tanto que elemento, permite explicar la combustión, al igual que las transformaciones de cal en metal y de metal en cal. Que la tierra y el agua son elementos, es algo evidente. Que el aire sea un elemento es una innovación respecto a las doctrinas de Stahl. Al conferir un papel químico al aire, Rouelle es deudor del trabajo del inglés Stephen Hales (1677-1761) quien estudió el aire desprendido por la fermentación de los vegetales y por ciertas reacciones químicas.

Si el papel de elemento constituyente del aire, tierra, agua y fuego es fácil de entender, la posibilidad de definirlos todos en tanto que instrumentos es más difícil. Con el fuego no hay mucho problema, pues es el elemento más tradicional del químico. En cambio, el papel del agua, la tierra y el aire como instrumentos no es evidente. La asociación entre elemento e instrumento establecida por Rouelle no solo es nueva, sino que ilustra la autonomía de la química con respecto a la mecánica: el químico se interesa por lo íntimo de la materia, por el elemento que no puede representarse porque pertenece al orden de la cualidad.

Entre las innovaciones introducidas por Rouelle se encuentra también una nueva teoría de las sales, que no coincide ni con la teoría de Paracelso, según la cual éstas son variaciones de un principio salino, ni con la de Stahl de combinaciones de agua con una o más tierras. En su lugar, Rouelle clasificó las sales según sus formas cristalinas y de acuerdo con los ácidos y bases que participaban en su preparación.

La teoría de Rouelle no se centra exclusivamente alrededor del flogisto, pero el flogisto sigue siendo el elemento revolucionario, puesto que se asocia con el descubrimiento de la identidad entre combustión y corrosión y la identificación de la operación inversa (la reducción) lo que demuestra que la química stahliana se niega a someterse al modelo mecanicista.

Las doctrinas prelavoisierianas están fundadas, en última instancia, sobre la categoría de la cualidad, que es una categoría filosófica. Tratan de dar una

---

homogéneas, indivisibles, inmutables y sensibles, y más o menos móviles, de acuerdo a sus diferentes formas, naturalezas y masas. Más aún, son duras e impenetrables, y se unen, más que por interpenetración, por yuxtaposición. Si estas partículas últimas tuvieran diferentes formas, lo cual es muy probable, éstas no serían ni podrían ser conocidas.

explicación por una causa material de orden físico a las observaciones de orden cualitativo y cuantitativamente reproducibles. Las cualidades son erigidas como principios y percibidas como teniendo cierta consistencia. Es una especie de operación de hipóstasis de las cualidades físicas atribuyéndoles cierto carácter de sustancia material.<sup>53</sup>

Estas doctrinas tienen el mérito de señalar el hecho de que la química se fundamenta sobre la observación de la transformación de las propiedades de la materia, siendo que una propiedad o cualidad dada es una realidad perteneciente a una sustancia química como tal. Para estas doctrinas, la sustancia química, compuesta o no, tiene una cierta unidad manifestada en el carácter omnipresente de cualidades esenciales que, transformables por el cambio químico, son irreducibles a principios más elementales. Se trata, en definitiva, de un esfuerzo por liberarse progresivamente del carácter metafísico de los elementos explicativos de la realidad química.<sup>54</sup>

#### **4. Lavoisier y la revolución química: el desarrollo de la química bajo el paradigma de la masa**

La revolución química es un ejemplo paradigmático de las revoluciones en ciencia, aunque los historiadores no consiguen ponerse de acuerdo sobre su naturaleza, alcance y significado. Tradicionalmente se ha considerado que consiste en la sustitución de la teoría stahlina del flogisto por la teoría de la combustión de Lavoisier. Sin embargo, a partir de numerosos estudios historiográficos realizados durante el siglo XX, se han manifestado diversas opiniones sobre si dicha sustitución es realmente el hecho que caracteriza esta revolución. Para algunos, dado que Lavoisier era deudor de dos tradiciones químicas distintas —la de la química analítica continental y la química pneumática inglesa—, la clave metodológica de la revolución química fue la aplicación sistemática de la balanza

---

<sup>53</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 27.

<sup>54</sup> Cfr. *idem*, 18.

tanto a los gases, como a los sólidos y líquidos. Para otros no fue la combustión sino la naturaleza de los vapores y del aire y la relación entre ellos; es decir, el problema del estado gaseoso; para otros más lo fue la introducción de la nueva nomenclatura química. En síntesis, la revolución química supuso tanto la incorporación de una nueva nomenclatura como un nuevo modo de intelección.<sup>55</sup>

Durante veinte años Lavoisier acomete un vasto programa de investigación alrededor de los procesos de fijación y liberación del aire. Estos procesos incluyen la combustión, la calcinación, la fermentación, la respiración y un cierto número de otras combinaciones químicas. De esta investigación continuada emergen, entre otros, la sustitución de un sistema químico por otro basado en una nueva teoría general de la combustión; un nuevo modelo de análisis basado en la convicción de que nada se gana o se pierde en las operaciones químicas; una nueva definición de acidez; una definición pragmática de elemento químico y nuevos principios de composición química; la calorimetría y los fundamentos para una futura físico-química; las bases para la futura química orgánica; una teoría sobre la respiración y la comprensión de los efectos de las plantas en la atmósfera; y una teoría de la fermentación que da origen al prototipo de ecuación química. Además, sus teorías sobre el calor, los ácidos, los estados de la materia, los elementos, así como la propuesta de una nomenclatura química.<sup>56</sup>

Lavoisier comienza a preguntarse sobre la función del flogisto en 1772, al estudiar la calcinación. El principal inconveniente de la teoría del flogisto radicaba en que los metales y otros combustibles ganaran peso al ser quemados en presencia del aire, cuando, de acuerdo con la teoría del flogisto, debería producirse una pérdida. ¿Por qué no tenía lugar la correspondiente reducción en el peso?<sup>57</sup>

Para intentar encontrar una explicación, Lavoisier realiza dos experimentos: quema azufre y después fósforo en recipientes cerrados y constata, mediante mediciones minuciosas de pesos, antes y después de la reacción, de todo el conjunto y de cada parte por separado, que el peso total se conserva, el peso del

---

<sup>55</sup> Cfr. HOLMES, F. L., "The Boundaries of Lavoisier's Chemical Revolution", *Revue d'histoire de sciences*, Vol. 48 (1995), 11.

<sup>56</sup> Cfr. HOLMES, F. L., "Lavoisier's Conceptual Passage", *Osiris*, Vol. 4 (1988), 82.

<sup>57</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 74-77.

recipiente permanece igual y que el peso del azufre y del fósforo ha aumentado. A raíz de sus reflexiones acerca del papel del aire, Lavoisier dedujo que, de alguna forma, el aire se fijaba durante el proceso de la combustión, y este aire era la causa del aumento de peso. Lavoisier dedica varios años a elaborar su teoría sobre la combustión y la calcinación.

Sin embargo, para derribar la teoría del flogisto no fue suficiente la teoría lavoiseriana de la combustión y calcinación, sino que fue necesario el descubrimiento del papel del oxígeno en la combustión. En un ensayo publicado en 1777, Lavoisier explicó que el principio que se une a los metales durante la calcinación, que aumenta su peso y que es parte constituyente de la cal es un aire eminentemente respirable, el cual, después de entrar en combinación con un metal, puede liberarse de nuevo alimentando la ignición y la combustión. Este aire eminentemente respirable quema el carbón para formar dióxido de carbono (ácido débil), mientras que los no metales generalmente forman óxidos ácidos. Lavoisier lo denominó oxígeno, término que significa formador de ácidos. No sería sino hasta dos décadas más tarde cuando Lavoisier demostró que el agua estaba compuesta de hidrógeno y oxígeno.

El problema del abastecimiento de agua en París, cuando se cuestionaba la pureza de la misma que llegaba a esta ciudad, atrajo la atención de Lavoisier. Las pruebas para determinar la potabilidad del agua incluían un proceso de evaporación a sequedad, con el fin de analizar sus contenidos sólidos. Como era obvio, la determinación de contenidos sólidos disueltos en el agua no revelaría nada acerca de su pureza, sin embargo esta técnica recordaba la larga tradición a lo largo de la química de la transmutación del agua en tierra, principio básico de la teoría aristotélica de los cuatro elementos y un factor crucial en la decisión de van Helmont de que el agua era el único elemento que constituía la base de todas las cosas.<sup>58</sup>

En 1764, el químico alemán Johann Theodor Eller (1689-1760), en contra de la opinión de la mayoría de los químicos de su época, sostuvo que el agua podía transformarse tanto en tierra como en aire por la acción del fuego o flogisto. Para Eller solo existían dos elementos: el fuego y el agua. El elemento activo del fuego

---

<sup>58</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 98. Cfr. *supra*, 30-31.

actuaba sobre el elemento pasivo del agua para producir todas las demás sustancias. En cambio, Lavoiser sospechaba que la tierra descrita en el experimento de Eller realmente provenía del vidrio del aparato utilizado debido a un efecto de lixiviación. Lavoisier reprodujo el experimento de Eller pesando el aparato antes y después, y pesando también el agua, antes y después de calentarla de forma continuada durante tres meses. Lavoisier demostró que el peso de la “tierra” que se formaba era aproximadamente igual a la pérdida de peso del aparato. Esto fue suficiente para probar que la transmutación del agua en tierra no tenía sentido.<sup>59</sup>

Paralelamente y bajo la influencia de las teorías de Venel acerca de la disolución química de aire en líquidos y sólidos, Lavoisier supuso que existía una explicación más plausible del cambio aparente del agua en vapor o en aire al ser calentada: el agua y otros fluidos alcanzan la condición de aire debido a que, gracias a la acción del calor, sus partes se expanden. De manera inversa, cuando se priva al aire de su calor, pierde su estado aéreo y se colapsa o fija en condición líquida. Lavoisier tenía ahora la certeza de que existían tres estados distintos de la materia.<sup>60</sup>

En 1772 Lavoisier recopiló estas ideas en un ensayo sobre la naturaleza del aire que no llegó a publicarse, pero que fue la base de una teoría de los gases, aunque Joseph Priestley (1733-1804), Henry Cavendish (1731-1810) y Joseph Black (1728-1799), entre otros, habían realizado numerosos trabajos químicos acerca de los diferentes tipos de aires que se pueden producir en las reacciones químicas. El estudio de los gases fue un factor decisivo en la revolución química.<sup>61</sup>

Echar por tierra la teoría de los cuatro elementos no basta; es necesario un concepto distinto de elemento. Para Lavoisier, todas las sustancias que no se pueden descomponer por medio alguno serán elementos. No se trata de poder asegurar que estos cuerpos, que se consideran simples, no estén compuestos a su vez por dos o incluso un número mayor de principios, sino que, puesto que estos principios no se separan nunca, o, mejor dicho, puesto que no tenemos medio

---

<sup>59</sup> Cfr. *idem*, 99.

<sup>60</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>61</sup> Cfr. *ibidem*.

alguno para separarlos, actúan a la manera de los cuerpos simples, y solo se deben suponer compuestos en el momento en que la experiencia y la observación nos proporcionen la prueba. Es decir, el nombre de elementos o principios de los cuerpos se asocia a la idea del último término al que se llega con el análisis.<sup>62</sup>

Aunque esta caracterización aparece ya en Boyle, la novedad reside en que ya no se trata de elemento-principio como constituyente de los cuerpos, sino de una definición estrictamente operativa, que hace del elemento algo relativo y provisional sobre la que ha de construirse un nuevo sistema de química: la pretensión de buscar los constituyentes últimos de la materia es metafísica y vana. Lavoisier tiene sus raíces en la química de los principios y, al mismo tiempo, abre un nuevo campo de investigación al desplazar los objetivos. En su obra *Traité élémentaire de chimie* (1789) intenta una reorganización de la química en torno al análisis: la química, al someter a experimentos los diferentes cuerpos de la naturaleza, tiene como objeto descomponerlos. La química lavoisieriana confirma así una inteligibilidad de tipo analítico, es decir, un modo de leer en el interior de las sustancias que se efectúa por medio de su descomposición. Las causas últimas de la inteligibilidad de los elementos se encuentran al final de la descomposición.<sup>63</sup>

Por lo que respecta a la práctica de la química, Lavoisier modifica totalmente sus condiciones con la introducción de la balanza que pasa de ser un instrumento de precisión a un medio clave para descifrar la naturaleza. Teniendo como fundamento el principio de conservación (nada se crea, nada se destruye) el químico pesa todas las reacciones químicas sea cual sea su complejidad y la variedad de sus circunstancias. Pesar lo que entra y lo que sale del recipiente de reacción, hacer balance de la reacción, formularlo en ecuaciones ofrece la posibilidad del control de los fenómenos.<sup>64</sup>

---

<sup>62</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 77 y WEISBERG, M. & NEEDHAM, P. & HENDRY, R., "Philosophy of Chemistry", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Winter 2011 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL = <http://plato.stanford.edu/archives/win2011/entries/chemistry/> [consultada el 12-marzo-2015]. En lo anotado en este párrafo se perfila muy bien la diferencia conceptual entre el "elemento" de la química (lo simple como opuesto a compuesto), el "átomo" de la física clásica (lo simple como lo opuesto a divisible) y la "sustancia metafísica" (lo simple como unidad radical).

<sup>63</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B., *op. cit.*, 80.

<sup>64</sup> Cfr. *ibidem*.

Esta nueva especificación experimental del principio de la conservación y de la inmutabilidad de aquello que es material en las realidades corporales condujo a la formación de una nueva metodología basada en medidas más precisas, más rigurosas. El peso, la masa por su carácter estable y permanente a nivel de fenómeno químico fue el nuevo principio resolutorio de todos los experimentos químicos.<sup>65</sup>

El principio de la conservación de la materia era aceptado tanto por Stahl como por Lavoisier. La diferencia se sitúa a nivel de la especificación de dicho principio. El dilema se encuentra entre una especificación cualitativa y una cuantitativa. La generalización de la indestructibilidad de la materia por una especificación cualitativa no es posible, pues no es de orden físico sino metafísico. Lavoisier generaliza el carácter inmutable de la materia por el peso. Se puede afirmar que Lavoisier fue el iniciador de una revolución de orden esencialmente metodológico que consistió en reformular la química aplicando una de las categorías fundamentales de la física newtoniana (la masa o el peso) así como sus métodos.<sup>66</sup>

Algunos autores consideran que la revolución química realizada por Lavoisier no debe entenderse como una revolución en la ciencia sino más bien como una revolución que hizo de la química una ciencia. En este último sentido resulta importante considerar que el desarrollo de la química debe encuadrarse en un marco más amplio que es el desarrollo de la ciencia en general en el siglo XVIII así como el papel relevante que cobran teoría y experimentación.<sup>67</sup>

Después de que el estatus de muchos de los conceptos específicos y teorías asociadas con el éxito de Lavoisier dejaron de ser problemáticos o bien porque se aceptaron como verdaderos o porque se rechazaron, el punto de atención se centró en los aspectos metodológicos. Así, en la década de 1830 Lavoisier pasó de ser el autor de un conjunto de teorías novedosas al hombre que transformó la

---

<sup>65</sup> Cfr. DONOVAN, A., "Lavoisier and the Origins of Modern Chemistry", *Osiris*, Vol. 4 (1988), 214-231.

<sup>66</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 36.

<sup>67</sup> Cfr. DONOVAN, A., *op. cit.*, 215.

química en ciencia al considerar que esta debía desarrollarse tomando como modelo a la física experimental.<sup>68</sup>

En Francia, a mediados del siglo XVIII, la física experimental se consideraba como una etapa más en la evolución de la física desde su pasado aristotélico y cartesiano a la síntesis de matemáticas y experimentación que se consolidaría en el siglo XIX. Muchos químicos del siglo XVIII eran conscientes del papel central de las teorías en la investigación de la naturaleza y Lavoisier no fue el primer químico interesado en las cuestiones teóricas. De hecho, Lavoisier es reconocido por las novedosas teorías que plantea y el modo en el que las utiliza para transformar el estudio de la química. Las teorías del estado gaseoso, acidez, combustión, calcinación, por ejemplo, incorporan muchos descubrimientos experimentales como la descripción química del oxígeno y la descomposición del agua, pero previamente hubo de realizarse un profundo trabajo conceptual para hacerlas inteligibles y permitir que alcanzaran su pleno desarrollo.<sup>69</sup>

Asumir el modelo de la física experimental, junto con la determinación de desarrollar explicaciones generales de los fenómenos químicos, hicieron posible que Lavoisier formulara las teorías por las cuales se le considera el reformador de la química.<sup>70</sup>

En la química, como en la física experimental, la clave metodológica para adquirir el conocimiento confiable de las relaciones causales es la experimentación. Así, mediante el uso riguroso del método experimental, Lavoisier considera que ha superado las hipótesis y especulaciones que habían debilitado el desarrollo de la química.<sup>71</sup>

## 5. La introducción del atomismo en química

Los cambios respecto a la concepción de la materia son uno de los principales agentes de transformación del pensamiento científico. La teoría

---

<sup>68</sup> Cfr. *idem*, 217.

<sup>69</sup> Cfr. *idem*, 222.

<sup>70</sup> Cfr. *idem*, 227.

<sup>71</sup> Cfr. *ibidem*.

atomista de los antiguos griegos pretendía establecer afirmaciones sobre la naturaleza última de la realidad mediante una argumentación filosófica. Las versiones del atomismo desarrolladas por los filósofos mecánicos del siglo XVII comparten esta característica. No será sino hasta el siglo XIX cuando surgen diversas versiones del atomismo científico. La relevancia de este hecho estriba en que el conocimiento de los átomos —que la ciencia da por sentado— no está establecido por un argumento filosófico sino por resultados experimentales específicos interpretados por la mecánica cuántica. La relevancia filosófica de las doctrinas atomistas se vuelve epistemológica más que metafísica.<sup>72</sup>

Las versiones del atomismo mecanicista desarrolladas en el siglo XVII reviven el antiguo atomismo mecanicista griego; una teoría que explicaba que el mundo material en general estaba constituido solamente por átomos en el vacío. Los átomos se caracterizaban por unas cuantas propiedades básicas: forma, tamaño y movimiento. No tenían carga, no podían ser divididos en algo más pequeño y no tenían una estructura interna de la que dependieran sus propiedades. Este tipo de atomismo era anterior e independiente a la investigación empírica.<sup>73</sup>

Hubo muchas versiones de atomismo en el siglo XVII que no eran mecánicas y atribuían a los átomos algunas propiedades; por ejemplo, algunos asumían que las sustancias químicas se componían de porciones últimas (*minima naturalia*) que se combinan con las porciones últimas de otras sustancias químicas para formar compuestos. La consideración de potencialidades innatas en átomos, corpúsculos o semillas de sustancias vino a distinguir la influencia química de la orientación física de los filósofos mecanicistas.<sup>74</sup>

Varios pensadores mecanicistas estuvieron en contra del resurgimiento del atomismo porque conocían su relación con la filosofía química vitalista y les

---

<sup>72</sup> Cfr. CHALMERS, A., “Atomism from the 17th to the 20th Century”, The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Winter 2014 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL = <http://plato.stanford.edu/archives/win2014/entries/atomism-modern/> [consultada el 2 de marzo de 2015] e HIGUERAS, M., “El atomismo molecular de Gassendi y la concepción corpuscular de la materia en el joven Leibniz”, *Cultura. Revista de História e Teoria das Ideias*, Vol. 32 (2013), 255.

<sup>73</sup> Cfr. CHALMERS, A., “Atomism from the 17th to the 20th Century”, *op. cit.*

<sup>74</sup> Cfr. *ibidem*.

preocupaba que este hecho supusiera un daño potencial a la nueva ciencia orientada matemáticamente.<sup>75</sup>

La flexibilidad y la potencial capacidad explicativa del atomismo mecanicista aumentaron cuando Newton hizo posible incluir la fuerza como una más entre las propiedades de los átomos. Sin embargo, no había forma de especificar la naturaleza de esas fuerzas ni mediante el recurso a argumentos filosóficos ni tampoco empíricamente. En lo que se refiere a la ciencia experimental del siglo XVIII el influjo del atomismo de Newton no fue significativo.<sup>76</sup>

Es con el surgimiento de la química atómica y la teoría cinética de los gases cuando el atomismo comienza a cobrar importancia. El hecho de que las propiedades de los compuestos químicos se deben a su estructura atómica y que ésta puede representarse mediante fórmulas estructurales, está bien establecido a finales del siglo XIX. El atomismo se ha extendido desde la química y la teoría cinética a la estereoquímica, electroquímica, espectroscopia, etc. Sin embargo, algunos científicos y filósofos como Wilhelm Ostwald (1853-1932), Pierre Duhem (1861-1916) y Ernst Mach (1838-1916), basándose en el éxito de una termodinámica fenomenológica que permite explicar ciertos fenómenos térmicos y químicos sin el recurso a una subyacente estructura de la materia, rechazan el atomismo químico. La tarea de explicar las propiedades químicas en términos de átomos y sus estructuras será acometida por la ciencia del siglo XX; sin embargo, Jean Perrin (1870-1942) proporciona ya una base experimental con sus investigaciones sobre el movimiento browniano.<sup>77</sup>

---

<sup>75</sup> Cfr. BANCHETTI-ROBINO, M.P., "From Corpuscles to Elements: Chemical Ontologies from Van Helmont to Lavoisier" en SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (eds.), *Philosophy of Chemistry. Growth of a New Discipline*, *op. cit.*, 141.

<sup>76</sup> Cfr. CHALMERS, A., *op. cit.*, n. 1.

<sup>77</sup> Cfr. MAIOCCHI, R., "Pierre Duhem: "The Aim and Structure of Physical Theory": A Book Against Conventionalism", *Synthese*, Vol. 83, No. 3 (1990), 385-400; BRUSH, S. G., "Mach and Atomism", *Synthese*, Vol. 18, No. 2 (1968), 192-215 y HOLT, N., "A Note on Wilhelm Ostwald's Energism", *Isis*, Vol. 61, No. 3 (1970), 386-389. En estos trabajos los autores exponen (de manera muy desarrollada en los dos primeros) la complejidad del trasfondo científico en el que se fundamentan las posturas antiatomistas de Duhem, Mach y Ostwald.

## 5.1 Átomos y mixtos

En 1417 se descubre el *De rerum natura* de Lucrecio lo que origina una oleada de teorías atómicas o corpusculares.<sup>78</sup> La distinción entre cualidades primarias —propiedades de los átomos— y cualidades secundarias —que remiten al observador— será la fuente de numerosos debates no solamente en la química, sino en la física, la filosofía y la teología. Las operaciones químicas (evaporación, rarefacción, condensación, disolución) ocupan un lugar central entre los hechos empíricos que dan testimonio de la existencia de los átomos y pueden describirse en términos de materia discontinua. En el siglo XVII la química se convierte en un terreno privilegiado para los debates acerca del atomismo, ya que plantea el problema de la transformación de las sustancias, a partir del cual se puede discutir qué son los átomos, lo que éstos pueden explicar y lo que implica una explicación atomista.<sup>79</sup>

Las teorías atómicas que comenzaron a predominar en el siglo XVII, consideraron que los componentes últimos de la materia poseían una gran variedad de cualidades, así como fuerza y complejidad interna. El nuevo énfasis en la experimentación llevó a los proponentes de esas teorías a preocuparse menos por los sistemas filosóficos y más por la explicación de fenómenos específicos como la condensación y la rarefacción, la evaporación, la resistencia de los materiales y el cambio químico.<sup>80</sup>

## 5.2 El corpuscularismo vitalista

El vitalismo ha sido generalmente considerado como la postura que sostiene que las “fuerzas vitales” o “espíritus vitales” son causalmente operativas

---

<sup>78</sup> *De rerum natura* (“Sobre la naturaleza de las cosas” o “Sobre la naturaleza del universo”) es un poema didáctico escrito en el siglo I a.C. por Tito Lucrecio Caro; está dividido en seis libros y, entre otros temas, expone la física atomista de Epicuro que, a su vez, se basa en el atomismo de Demócrito. Este texto influyó decisivamente para la emergencia del atomismo moderno a principios de siglo XVII, principalmente con el atomismo de Pierre Gassendi.

<sup>79</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 30.

<sup>80</sup> Cfr. CHALMERS, A., “Atomism from the 17th to the 20th Century”, *op. cit.* e HIGUERAS, M., *op. cit.*, 256-257.

en la naturaleza. Las descripciones vitalistas de los fenómenos naturales tienden a ser cualitativas, y los procesos vitalistas suelen ser vistos como holísticos y teleológicos. En los siglos XV y XVI, sin embargo, era frecuente encontrar tanto a alquimistas como a químicos que admitían tanto una concepción vitalista de la naturaleza como una concepción corpuscularista de la materia. En efecto, el corpuscularismo no es solamente perfectamente compatible con una concepción vitalista de la naturaleza, sino que la teoría corpuscularista de la materia antecede, de hecho, el advenimiento de la filosofía mecanicista y del atomismo epicúreo moderno. No habría entonces problema para admitir una teoría corpuscular de la materia junto con la creencia en los *tria prima*: la forma sustancial, las razones seminales y los espíritus vitales. En realidad, una de las preocupaciones claves de los alquimistas y químicos de los siglos XV y XVI fue precisamente la de qué interpretación dar a los espíritus vitales.<sup>81</sup>

A finales del siglo XVI, la interpretación de los espíritus vitales se torna químicamente ambigua y esta ambigüedad es aún más evidente en la filosofía química de van Helmont quien desarrolla una teoría híbrida interesante al combinar explicaciones corpusculares y fisicalistas de numerosos fenómenos con algunos aspectos del vitalismo de Paracelso.<sup>82</sup>

La filosofía natural anterior a van Helmont tendía a distinguir entre las nociones de *minima naturalia* y *semina rerum*. Los *minima naturalia* se concebían como las partículas más pequeñas de la naturaleza que no son reducibles a otras partículas. Al interpretar la noción de *minima naturalia* como las partículas más pequeñas de los reactivos muchos alquimistas desarrollaron sus propias teorías corpusculares de la materia, lo que se llamó atomismo alquímico, como versiones cualitativas del atomismo clásico. La noción neoplatónica de *semina rerum*, por otra parte, fue interpretada como referente a los arquetipos espirituales en la naturaleza. En general, los filósofos naturales asumían una u otra de estas nociones, pero no ambas, dado que una era enteramente fisicalista mientras que la otra era espiritualista. A diferencia de sus predecesores, van Helmont asume ambos

---

<sup>81</sup> Cfr. BANCHETTI-ROBINO, M. P., *op. cit.*, 142.

<sup>82</sup> Cfr. *ibidem*.

conceptos, tanto el de *minima naturalia* como el de *semina rerum*, puesto que cada uno de ellos juega un papel diferente en su filosofía química.<sup>83</sup>

Van Helmont sigue a Paracelso al concebir las *semina rerum* como entidades espirituales no corpóreas y agentes principales en la naturaleza. Cree que las *semina rerum* dan cuenta de las propiedades no mecánicas, mientras que los *minima naturalia* se consideran, en términos estrictamente físicos, como corpúsculos. En consecuencia, las *semina* trabajan junto con los *minima* para originar los cambios en la naturaleza proporcionando la fuerza espiritual o acción que produce las alteraciones químicas cualitativas. Van Helmont rechaza el tipo de explicaciones estrictamente mecánicas de las alteraciones químicas ya que, para el modelo mecanicista, la mezcla de sustancias solamente se explica por medio de la yuxtaposición de las partes físicas, pero dicha yuxtaposición no puede explicar adecuadamente las reacciones químicas.<sup>84</sup>

Daniel Sennert (1572-1637) y Sebastián Basso (1573-?) son dos iatroquímicos que afrontaron también el problema del alcance y las implicaciones de una química corpuscular que se puede caracterizar como atomismo cualitativo. Para ellos la explicación de los fenómenos tampoco se reduce exclusivamente a las propiedades mecánicas de los átomos (tamaño, forma y movimiento); es decir, las cualidades de la materia no se explican reduciéndolas exclusivamente a aspectos cuantitativos. Tampoco se cuestionan sobre el número de elementos-principios o las propiedades operacionales a las que éstos remiten y que permiten explicarlos (solubilidad, volatilidad, combustibilidad), sino que más bien se preguntan sobre la relación que se establece entre los átomos (partículas últimas) y los corpúsculos (portadores de las propiedades químicas específicas).<sup>85</sup>

El motivo de la discusión de todos estos científicos es, en definitiva, la cuestión de la existencia actual o solo potencial de los elementos que integran los compuestos, es decir, el problema de lo que Aristóteles había denominado *mixis* (en latín, *mixtio*), modo de ser de los elementos en el sentido de que entran en la composición de una u otra sustancia. El concepto aristotélico de mixtión supone

---

<sup>83</sup> Cfr. *idem*, 143.

<sup>84</sup> Cfr. *idem*, 143-144.

<sup>85</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 30-34.

que toda sustancia es un compuesto y que la composición implica una transformación interna de los componentes, de los elementos constitutivos de un cuerpo. Sin embargo, Aristóteles afirma también que la *dynamis* de los elementos subsiste en el mixto; en otras palabras, las propiedades de un mixto de una u otra forma dan testimonio de las propiedades de sus elementos constitutivos. Cuando una reacción química produce una sustancia nueva, dotada de nuevas propiedades, debemos pensar que esta sustancia tiene una forma sustancial propia. ¿De dónde procede? Y cuando una sustancia se “destruye” porque entra a formar parte de un nuevo compuesto, ¿se destruye su forma o subsiste de manera potencial?<sup>86</sup>

La química corpuscular supone que los elementos componentes no subsisten en potencia, sino que son en acto, de aquí que el paso de la potencialidad al acto ya no tiene sentido. La transformación química debe pensarse en términos de separación y combinación de partículas invariantes, incorruptibles, que preexisten a la combinación y subsisten como tales en los mixtos. En otras palabras, el concepto de combinación química excluye la dimensión física (*physis*) o dinámica de las transformaciones.<sup>87</sup>

### 5.3 El atomismo molecular de Gassendi

Aunque se suele considerar que Pierre Gassendi (1592-1655) se dio a la tarea de recuperar el atomismo de Epicuro, en realidad su atomismo supone una

---

<sup>86</sup> Distintas respuestas se han dado a esta cuestión. Avicena postula que se conservan las formas de los elementos, pero que sus cualidades sufren una *remissio*, un debilitamiento de su identidad (*The Healing. Phys.* I, 10; *De Generatione* 6); Averroes propone una *remissio* de la forma misma de los componentes (*Comm. Magnum Metaph.* XII, 22); Santo Tomás de Aquino, la destrucción de estas formas, al integrarse las cualidades de los componentes en una *qualitas media*, que hace que el compuesto pueda recibir la *forma mixti*, la nueva forma sustancial (*De mixtione elementorum*, cfr. *Summa Theol.* I. q. 76 a. 4). Véase HASSE, D. N., "Influence of Arabic and Islamic Philosophy on the Latin West", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2014 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL= <http://plato.stanford.edu/archives/fall2014/entries/arabic-islamic-influence/> [consultada el 26-febrero-2015]. Para el estudio del tema de la mixtión de los elementos y de los elementos en composición con las sustancias físicas según Santo Tomás de Aquino, puede consultarse BOBIK, J., *Aquinas on Matter and Form and the Elements. A Translation and Interpretation of the de Principiis Naturae and the De Mixtione Elementorum of St. Thomas Aquinas*, University of Notre Dame Press, Indiana 1998.

<sup>87</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 32.

combinación de diversas perspectivas y tradiciones que no han sido claramente explicitadas por los estudiosos de su filosofía.<sup>88</sup>

La concepción gassendiana de la materia como algo esencialmente activo se opone diametralmente a la idea cartesiana de la materia como sustancia extensa. Al identificar materia con extensión y extensión con espacio, Descartes hace de la extensión la única cualidad de los cuerpos, por lo que estos se conciben como algo inerte y sin vida. Aunque al igual que Descartes, Gassendi considera que la extensión (tamaño o magnitud) es una propiedad esencial e inseparable de la materia, no es la única. Existe además la gravedad o peso (*gravitas seu pondus*) que es una fuerza o facultad interna mediante la cual los átomos pueden moverse por sí mismos y desplazarse de un lugar a otro. La materia, al poseer su propio dinamismo interno, se mueve por sí misma.<sup>89</sup>

Para Gassendi, la materia es esencial e intrínsecamente activa, y esto es así porque desde el momento mismo de la creación Dios infundió en ella una fuerza innata y natural. Esta fuerza, que está en el interior de los átomos, permite se muevan gracias a su propia naturaleza interna, es decir, el movimiento surge de ellos mismos. De lo anterior se sigue que las causas segundas tengan autonomía propia, es decir, no dependan directamente de Dios, causa primera, y funcionen con su propia lógica interna. Según Gassendi, el movimiento atómico es realmente la causa eficiente del mundo físico.<sup>90</sup>

Los átomos pueden agruparse formando moléculas (*moleculae*) debido a su fuerza interna. Estas moléculas son estables, compuestas de corpúsculos que no pueden ser sometidos a un ulterior análisis y que sirven de intermediarios entre los átomos indivisibles y los cuerpos tangibles. Las moléculas son las agrupaciones corpusculares que Gassendi interpone entre el mundo atómico y la realidad sensible. Dado que estas moléculas se producen por resolución química, son, en

---

<sup>88</sup> Cfr. HIGUERAS, M., “El atomismo molecular de Gassendi (...)”, *op. cit.*, 256. Según Johnson, Gassendi, más que un seguidor de Epicuro, debe considerarse uno de sus más agudos críticos. En este trabajo, el autor apunta los numerosos elementos de la filosofía de Epicuro con los que Gassendi no está de acuerdo y sostiene que la filosofía de Gassendi más que una versión del epicureísmo es una renovada versión de atomismo. Cfr. JOHNSON, M.R., “Was Gassendi an Epicurean?”, *History of Philosophy Quarterly*, Vol. 20, No. 4 (2003), 339.

<sup>89</sup> Cfr. HIGUERAS, M., *op. cit.*, 259-260.

<sup>90</sup> Cfr. *idem*, 256.

cierto sentido, elementales, aunque no son partículas simples. Aunque la noción de molécula será desarrollada más adelante por Lavoisier, hay que señalar que, según Gassendi, los verdaderos elementos son los átomos ya que éstos son las únicas partículas que son completamente indivisibles por medios naturales. Para Gassendi hay niveles intermedios de corpúsculos compuestos entre los átomos fundamentales y los cuerpos: las moléculas, las cuales componen los elementos químicos tradicionales (azufre, mercurio, sal, tierra y agua).<sup>91</sup>

Gassendi cree que las alteraciones en la estructura de las moléculas producen nuevas cualidades en las sustancias y que dichos cambios en las cualidades pueden ser inducidos por operaciones químicas; sugiere también que las moléculas de principios químicos caracterizan las diferentes especies de cuerpos dependiendo de sus proporciones y su composición. Sin embargo, tiene dificultad para distinguir cuerpos homogéneos formados por moléculas idénticas, de cuerpos mixtos, especialmente al determinar la naturaleza de los metales. Gassendi entiende la estructura corpuscular de las moléculas como una especie de sistema mecánico, por lo que, en cierto sentido, su noción de molécula química no es totalmente incompatible con el atomismo mecanicista. Sin embargo, por poseer también propiedades de tipo químico y biológico, las moléculas no se reducen al aspecto mecánico. En el nivel molecular es donde se produce el encuentro entre atomismo y química: la ciencia química se encarga del análisis molecular para explicar la complejidad de la materia desde su nivel más simple o elemental.<sup>92</sup>

#### **5.4 El atomismo mecanicista y su contribución a la formación de la química moderna**

El mecanicismo es la doctrina según la cual la materia es inerte y todas las interacciones en la naturaleza se producen por el impacto de partículas. En este sentido, el mecanicismo es también un reduccionismo en el que todas las cualidades (incluyendo las cualidades y reacciones químicas) pueden ser ontológica

---

<sup>91</sup> Cfr. BANCHETTI-ROBINO, M.P., *op. cit.*, 147-148.

<sup>92</sup> Cfr. *idem*, 148.

y epistémicamente reducibles a las propiedades mecánicas y cuantitativas de la materia. No es una coincidencia, por tanto, que el resurgimiento del atomismo clásico en el siglo XVII vaya de la mano con el desarrollo de la filosofía mecanicista.<sup>93</sup>

Para los mecanicistas, cualquier explicación de fenómenos naturales requiere la fabricación de un modelo mecánico que sustituya el fenómeno real a ser estudiado. Las explicaciones mecanicistas proveen una alternativa a las explicaciones vitalistas y teleológicas que dominaron la filosofía natural hasta el s. XVI. Dado que el mecanicismo niega cualquier movimiento intrínseco y auto-organización a la materia, atribuye el movimiento y la organización a causas externas, excluyendo así toda referencia a fuerzas vitales o causas finales.<sup>94</sup>

El atomismo mecanicista no se encuentra en los orígenes de la química, sino que se inserta paulatinamente en una tradición ya existente, bien desarrollada a nivel de conocimiento y práctica de la transformación de las sustancias.<sup>95</sup>

Hay que hacer notar que la explicación corpuscular y la de la filosofía atomista no coinciden. El atomismo filosófico reivindica la existencia de átomos en el sentido absoluto del término. Su definición tiene un carácter abstracto *a priori* que se establece por su singularidad. Esta definición no coincide necesariamente con la naturaleza de la realidad macroscópica donde los átomos así definidos son la causa material por agregación. Se trata de una inteligibilidad corpuscular de la naturaleza explicada en sí misma por la existencia de partículas que, agregadas o combinadas, vienen a formar la realidad macroscópica.<sup>96</sup>

Para comprender la revolución de la ciencia que se produce en el siglo XVII resulta imprescindible tener en cuenta la concepción acerca de la estructura última del mundo material. En esta época surge una dicotomía radical entre la concepción física cualitativa aristotélica y la atomista, mecanicista y cuantitativa influenciada por el mecanicismo materialista de corte eminentemente cartesiano. Aunque la transformación fue gradual y paulatina, el resurgimiento de la teoría atomista, con raíces profundamente filosóficas, marca un punto de inflexión clave

---

<sup>93</sup> Cfr. *idem*, 146-147.

<sup>94</sup> Cfr. *idem*, 147.

<sup>95</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 37.

<sup>96</sup> Cfr. *ibidem*.

a la base de la física moderna.<sup>97</sup> Se intentará mostrar que la recuperación de este atomismo diverge en una pluralidad de concepciones sobre la materia y los corpúsculos que la constituyen.<sup>98</sup>

El atomismo mecanicista filosófico fue introducido en el mundo de la química por el inglés Robert Boyle (1627-1691), quien vio en la química la ciencia con condiciones para proporcionar un fundamento empírico a la visión mecanicista de la naturaleza. Los intereses científicos de Boyle eran muy amplios: además de sus conocidos trabajos sobre mecánica, medicina, hidrodinámica y los numerosos experimentos realizados con la bomba de vacío, estaba también interesado teórica y prácticamente en la alquimia. Como defensor de la teoría corpuscular creía que la transmutación era físicamente posible.<sup>99</sup>

Boyle aparece en algunas historias de la química como el inventor del concepto moderno de elemento que definió como aquel cuerpo que no puede descomponerse y que a su vez compone los cuerpos mixtos y en el cual estos pueden descomponerse. Sin embargo, algunos autores proponen una lectura distinta de la definición de Boyle en la que consideran que el químico inglés, más que proponer un concepto moderno de elemento con respecto a la tradición aristotélica, se cuestiona la función del elemento en la práctica de los químicos.<sup>100</sup>

Hacia mediados del siglo XVII ya no existían dificultades conceptuales para aceptar la existencia de partículas diminutas, ya fueran átomos o corpúsculos, los cuales, aunque invisibles e intocables, se podía concebir uniéndose para formar

---

<sup>97</sup> Cfr. HIGUERAS, M., *op. cit.*, 256.

<sup>98</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>99</sup> Cfr. MACINTOSH, J. J. & ANSTEY, P., "Robert Boyle", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2014 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL = <http://plato.stanford.edu/archives/fall2014/entries/boyle/> [consultada el 26-febrero-2015].

<sup>100</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 35. La definición de elemento de Boyle, como aparece en su obra "El químico escéptico", es la siguiente: "Por elementos entiendo, al igual que aquellos químicos que hablan lisa y llanamente de principios, ciertos cuerpos primitivos y simples, o perfectamente inmiscibles, que, al no estar formados por ningún otro cuerpo son los ingredientes de que se componen todos aquellos cuerpos denominados perfectamente mixtos, y en los que se descomponen en última instancia. Lo que cuestiono ahora es si existe algún cuerpo tal que constantemente se encuentre en todos y cada uno de aquellos que se dice que son cuerpos formados por elementos". Citado en BROCK, W.H., *op. cit.*, 75. (Ni en este, ni en otros textos consultados, aparece la referencia al texto original).

sólidos tangibles. De hecho, los corpúsculos de Boyle son diferentes de los de Demócrito y Epicuro, parecidos a los *minima naturalia* cuya evidencia se encuentra en los fenómenos químicos. La forma, el tamaño y el grado de movimiento, así como la interacción entre los *minima naturalia*, son lo que explica las propiedades de la materia. La disposición de las partículas es la responsable de lo que llamamos cualidades. Todas las cualidades perceptibles, todas las propiedades que estudian los químicos se reducen a la asociación de partículas imperceptibles, a la configuración, a la textura y a la cohesión de sus diferentes disposiciones. La filosofía corpuscular podía dar explicación a un enorme abanico de fenómenos diferentes y era defendible experimentalmente.<sup>101</sup>

Para Boyle, el atomismo lleva a un escepticismo general en lo que se refiere al intento de elaborar una teoría sobre la materia y sus transformaciones relacionada con lo que el químico puede hacer u observar. En otras palabras, el atomismo conlleva la imposibilidad de que la química pueda convertirse en una ciencia provista de una teoría que fundamente y explique sus prácticas. Las prácticas del químico son contingentes, relativas a sus medios, y las distinciones que establece no tienen ningún valor esencial. No hay ninguna relación entre el elemento, como principio portador de inteligibilidad, y el elemento como cuerpo que el químico puede descomponer. El químico debe contentarse con definiciones y con los criterios de identificación operacionales propios del análisis: las demostraciones tienen lugar en el laboratorio. Según Boyle es esencial tener en cuenta los fenómenos químicos, ya que la filosofía mecanicista no puede entenderse de otra manera: los experimentos químicos pueden ser explicados por los conceptos corpuscularistas, y los conceptos corpuscularistas pueden ilustrarse o confirmarse mediante experimentos químicos.<sup>102</sup>

La filosofía corpuscular podía explicar las reacciones químicas, pero no predecirlas, ni diferenciar entre sustancias simples y complejas, lo elemental y lo compuesto. Por lo tanto, aunque los químicos posteriores no rechazaron abiertamente la teoría corpuscular y, a menudo, la aceptaron como una explicación del carácter físico de la materia, en la práctica ignoraron esta teoría. Para Boyle

---

<sup>101</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 73-74 y CHALMERS, A., *op. cit.*, n. 2.1.

<sup>102</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 36.

existe una sola sustancia universal común a todos los cuerpos que es la que da lugar, como consecuencia de la variación del tamaño, forma y movimiento de los corpúsculos, a la variedad de cuerpos naturales; para los químicos posteriores, en cambio, ya no se podía seguir argumentando seriamente que todos los posibles elementos, por muchos que pudieran postularse, se hallaban presentes en un material concreto. Los químicos siguen necesitando un concepto de elemento.<sup>103</sup>

### 5.5 El atomismo de Newton

Newton se interesó toda su vida por la química. Aunque solo publicó un artículo que trata específicamente de química, se encuentran importantes ideas químicas en los *Principia Mathematica* (1687) y en la *Óptica* (1704). Además, se han conservado miles de páginas manuscritas con anotaciones de química y alquimia, muchas de las cuales se han identificado como transcripciones de obras contemporáneas a Newton. Newton se adscribió a la teoría corpuscular de Boyle, a la que añadió los mecanismos de atracción y repulsión para explicar las afinidades químicas de las sustancias.<sup>104</sup>

Al final de la *Óptica* Newton aborda en forma de “cuestiones” una serie de temas problemáticos.<sup>105</sup> Trata especialmente de la química en la *Cuestión 31*. En su planteamiento experimental, Newton no ve los fenómenos no mecánicos como la expresión confusa de una realidad mecánica subyacente, sino que los considera capaces de probar sus propias hipótesis. De hecho, sus discípulos utilizarán los fenómenos químicos, eléctricos y magnéticos para intentar caracterizar las fuerzas que deben explicarlos. Es decir, dan particular relevancia a los aspectos de

---

<sup>103</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 76 y DI DONATO, M., “Boyle”, *Dizionario Interdisciplinare di Scienza e Fede. Cultura scientifica, filosofia e teología*. <http://disf.org/robert-boyle> [consultada el 26-febrero-2015].

<sup>104</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 80-81.

<sup>105</sup> En su estudio sobre la *Cuestión 31* de la *Óptica*, Cala Vitery considera que, como contrapunto a la unidad temática de los *Principia*, en las *Cuestiones* Newton muestra su interés por temas como “la acción a distancia, el movimiento animal, la fisiología de la visión, el éter, los efluvios magnéticos, las reglas de la química, las fuerzas atractivas y repulsivas, el método experimental e incluso algunos argumentos teológicos sobre la necesidad de la divinidad para preservar el orden y el movimiento, por referir algunos tópicos”. CALA VITERY, F. E., “La Cuestión 31 de la *Óptica* o el programa de las fuerzas en la filosofía mecánica”, *Scientiae studia*, Vol. 4, No. 2 (2006), 163.

fenómenos químicos que puedan explicar de forma clara la acción de una fuerza de atracción o repulsión. Las reacciones químicas permiten comparar entre sí las fuerzas que unen efectivamente las partículas de un compuesto y es la variedad de fuerzas la que permite comprender las posibilidades y los límites del análisis químico.<sup>106</sup>

La *Cuestión 31* se ha considerado como una extrapolación de la física gravitacional a la química. Podría decirse que, si dejamos momentáneamente de lado el concepto de fuerza introducido por Newton, su teoría sobre la materia puede considerarse como una versión del atomismo mejorada con los principios de la física. Mientras que el atomismo mecanicista anterior no se había pronunciado con claridad acerca de la naturaleza y el estatus de las leyes que gobiernan los átomos, Newton afirma que sus tres leyes del movimiento que se ha mostrado pueden aplicarse a una gran variedad de fenómenos astronómicos y terrestres, son igualmente aplicables a los átomos, mismos que concibe como partículas sólidas, con peso, duras, impenetrables, móviles. Sus leyes gobiernan el movimiento de las colisiones de los átomos entre sí.<sup>107</sup>

Newton introduce, además, la hipótesis de una fuerza de repulsión por inferencia a partir de los fenómenos luminosos y físico-químicos de modo que las partículas de los cuerpos se mantienen juntas por la atracción. En el caso de los cuerpos volátiles, las partículas, al traspasar el ámbito de la atracción, se alejan con rapidez; es decir, cuando cesa la fuerza de atracción comienza a actuar una fuerza de repulsión.<sup>108</sup>

Según Newton, las fuerzas de intensidades características (afinidades) actuaban entre las mínimas partes de las sustancias químicas. Los desplazamientos en una reacción química se explican simplemente en términos de las fuerzas relativas de las afinidades involucradas. La elasticidad, por ejemplo, se atribuye a fuerzas de atracción y repulsión que actúan entre partículas de una sustancia elástica.<sup>109</sup>

---

<sup>106</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 46-47.

<sup>107</sup> CHALMERS, A., *op. cit.*, n. 3.1.

<sup>108</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 47.

<sup>109</sup> CHALMERS, A., *op. cit.*, n. 3.1.

Es importante señalar que las teorías sobre propiedades químicas desarrolladas por Newton se consideran atomistas en el sentido débil del término, ya que se refieren a partículas e interacciones que están fuera del rango de observación. Sin embargo, también hay que tener en cuenta que las afinidades que se presume actúan entre “átomos” químicos fueron postuladas con base en el comportamiento químico de las sustancias en el laboratorio. Es decir, las propiedades observables de las sustancias químicas simplemente se proyectaron a los átomos. Los newtonianos no formularon una teoría química atómica que se pudiera utilizar como el fundamento de la predicción de los fenómenos químicos a nivel experimental.<sup>110</sup>

Además de las leyes relacionadas con la fuerza de gravedad, otro tipo de leyes como son las relacionadas con la elasticidad y la tensión superficial, así como las de las atracciones eléctricas y magnéticas, etc., fueron pronto identificadas experimentalmente. En el ámbito de las ciencias, el estatus ontológico de las fuerzas pasó al olvido y esta actitud se permeó también al ámbito filosófico. En el siglo XVIII el mecanicismo atomista incluye la gravedad y otras fuerzas entre las propiedades primarias de los átomos.<sup>111</sup>

## **5.6 El atomismo químico en el siglo XIX. La teoría atómica de Dalton y la atomización de las sustancias**

El atomismo sufrió una transformación cuando Dalton formuló su versión del atomismo químico a principios del siglo XIX. Antes de la aparición de Dalton se habían establecido numerosos hechos empíricos y creado muchas teorías que los relacionaban entre sí; sin embargo, la mayor parte de la actividad química del siglo XVIII había sido cualitativa. La teoría atómica daltoniana, con sus leyes de la combinación química, tuvo implicaciones en la consideración del peso en la combinación de las sustancias químicas y abrió el camino que llevó a los científicos a la medición experimental del peso relativo de los átomos, considerándolo como una propiedad que permite distinguirlos entre sí.<sup>112</sup>

---

<sup>110</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>111</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>112</sup> Cfr. *idem*, n. 4.1.

Asumir como ciertos algunos presupuestos que se habían mostrado fundamentales para el progreso de la química de Lavoisier, fue la clave para el desarrollo del atomismo químico daltoniano. En primer lugar, Dalton consideró que toda la materia estaba compuesta de átomos sólidos e indivisibles. A diferencia de las partículas del Newton y Priestley, los átomos de Dalton no contenían espacios interiores por lo que no podían comprimirse.<sup>113</sup> Además, consciente de la plausibilidad del modelo calórico de los cambios de fase propuesto por Lavoisier, Dalton supuso que los átomos estaban rodeados por una atmósfera de calor cuya cantidad difería según se tratara de la fase sólida, líquida o gaseosa de la agregación de átomos. En segundo lugar, Dalton creía que las sustancias, y por tanto sus átomos, eran indestructibles y conservaban su identidad en todas las reacciones químicas. En tercer lugar —teniendo en cuenta la definición operativa de elemento propuesta por Lavoisier— Dalton supuso que había tantos tipos diferentes de átomos como elementos. A diferencia de Boyle y Newton, Dalton pensaba que no existía una materia primaria homogénea, sino más bien partículas de hidrógeno distintas de las del oxígeno y de todas las demás partículas que hasta entonces se habían definido como elementos. Por tanto, Dalton se aparta de la teoría tradicional de la identidad de la materia y de todas las sustancias materiales.<sup>114</sup>

En su estudio de las propiedades físicas de los gases, anterior a la formulación de su teoría atómica, Dalton ya había utilizado los conceptos de peso y tamaño de los átomos para explicar las diferencias de solubilidad y había llegado a la conclusión de que los átomos de un gas se diferencian no solo por su tamaño

---

<sup>113</sup> Newton sostenía la existencia de verdaderos átomos, es decir, pequeñas partículas indivisibles base de toda la materia. Al igual que otros autores, creía que estos átomos unidos formaban partículas más complejas con varios grados de agregación. Las partículas o átomos finales eran sólidos duros en el sentido de que no tenían poros y eran completamente indivisibles. De la asociación de estos átomos o “partículas mínimas” surgen agregados de un orden superior de partículas. Por asociación, estos agregados primarios forman partículas más complejas que corresponden muy aproximadamente a las moléculas modernas. Estas partículas de mayor composición están compuestas de partículas más simples entre las que se encuentran espacios relativamente grandes. Toda la materia es extremadamente porosa e incluso los cuerpos sólidos contienen una gran cantidad de espacio vacío. Cfr. BOAS, M., “The Establishment of the Mechanical Philosophy”, *Osiris*, Vol. 10 (1952), 507-508.

<sup>114</sup> Cfr. BROCK, W.H., *op. cit.*, 129.

o forma, sino también por su peso. Al fijar el peso atómico relativo como una propiedad determinante de los átomos, Dalton liberó al atomismo de su intangibilidad. El peso atómico o equivalente pasó a convertirse en un concepto imprescindible para los químicos. En primer lugar, porque ofrece un valor numérico que permite identificar de manera positiva y exacta los diferentes cuerpos simples, y por este motivo permite establecer comparaciones entre ellos. En segundo lugar, porque proporciona también un modo de traducir en fórmulas los análisis efectuados en el laboratorio. Pero, ¿cómo determinar el peso relativo de los átomos?<sup>115</sup>

En 1802 Joseph Louis Proust (1754-1826) formuló una ley en la que establecía que “las relaciones de las masas según las cuales dos o más elementos se combinan son fijas y no susceptibles de variación continua”. Esta ley, conocida como de las proporciones definidas o constantes, extendió el concepto de “equivalente”, hasta entonces reservado a las reacciones de neutralización ácido-base, a todo tipo de reacciones. Al hacer de la ley de Proust la base de su propia hipótesis atómica en la que considera que las combinaciones químicas se efectúan mediante unidades discretas (átomo por átomo), y completándola con su propia ley de las proporciones múltiples (cuando dos o más elementos se combinan para originar distintos compuestos, dada una cantidad fija de uno de ellos, las diferentes cantidades del otro que se combinan con dicha cantidad fija para dar como producto los compuestos, establecen entre sí relaciones múltiples y simples), Dalton estuvo en condiciones de determinar los pesos relativos de los átomos midiendo los pesos relativos de los elementos en los compuestos.<sup>116</sup>

¿Cómo determinar, por ejemplo, la proporción exacta de hidrógeno que se une al oxígeno para formar agua? ¿Cuál es la fórmula correcta? La hipótesis de Dalton adopta una regla basada en la sencillez: cuando dos elementos forman un solo compuesto, éste es binario y combina un átomo de uno con un átomo de otro. Cuando forman dos compuestos, uno es binario, con un átomo de cada tipo, y el otro ternario con dos átomos de uno con uno de otro, y así sucesivamente. De este modo el agua se describe como un compuesto binario de hidrógeno y

---

<sup>115</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 97.

<sup>116</sup> Cfr. *ibidem*.

oxígeno y los pesos relativos de los dos átomos son 1 y 7. Para calcular los pesos atómicos Dalton tuvo que relacionarlos con una unidad establecida de manera convencional y escogió el hidrógeno como unidad. El peso atómico de cada elemento es la cantidad ponderal que se une con un gramo de hidrógeno para formar la combinación más estable.<sup>117</sup>

Esta es la hipótesis atómica en su versión primitiva. Los átomos de Dalton difieren de sus homónimos antiguos tanto por su definición como por su función. Por su definición porque ya no son considerados como unidades mínimas de composición de la materia sino unidades mínimas de combinación; por su función porque ya no tratan de explicar lo visible complejo por medio de lo invisible simple, sino de resolver los problemas de fórmulas y clasificación. Difieren también de los corpúsculos newtonianos, ya que no suponen ni el vacío ni la atracción y no tienen el objetivo de explicar las propiedades del cuerpo simple en términos de una arquitectura complicada cuyos átomos serían los constituyentes últimos.<sup>118</sup>

El gran mérito de Dalton consiste en haber sabido ajustar la teoría atomista a los más recientes conocimientos químicos de su época y haber conseguido un modelo interpretativo capaz de evolucionar en función de los avances experimentales posteriores. Su teoría consiguió, además, sintetizar el conjunto de los logros experimentales de sus contemporáneos y predecesores. Los átomos ya no son las partículas abstractas predeterminadas de manera *a priori* para justificar por deducción las observaciones macroscópicas hechas sobre las sustancias. En adelante, se mantendrá una cierta coincidencia entre los átomos y los elementos portadores de las propiedades o cualidades reales que la química ha descubierto de las sustancias corpóreas.<sup>119</sup>

El atomismo de Dalton está relacionado con importantes desarrollos en la ciencia. Al introducir el concepto de átomo y darle una fundamentación empírica, proporcionó una determinación teórica al objeto fundamental de la química. Algunos de los más importantes conceptos como el de molécula, valencia o

---

<sup>117</sup> Cfr. *idem*, 98.

<sup>118</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>119</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 42-43.

atomicidad de los iones, la relación periódica de los elementos, las nociones de estructura y partículas elementales, por ejemplo, están directamente relacionados con la concepción básica del átomo, se derivan y constituyen un desarrollo del atomismo daltoniano. La interrelación entre cambios cualitativos y cuantitativos en los compuestos químicos se apoya en la base de la ley de las proporciones múltiples.<sup>120</sup>

La teoría atómica de Dalton dividió a la comunidad química; así, mientras muchos químicos fueron partidarios de la misma, un número considerable permaneció anti-atomista. Jöns Jacob Berzelius (1779-1848), por ejemplo, sostuvo que el atomismo daltoniano no proporcionaba ninguna explicación sobre la combinación química, sobre el modo en que los elementos se unen para formar compuestos. Dado que Dalton consideraba que los átomos eran intrínsecamente invariables, éstos no podían sufrir las modificaciones necesarias para explicar el cambio del modo propuesto por Aristóteles. Al faltar la noción moderna de molécula, Dalton solamente podía explicar el cambio químico en términos de bloques de átomos.<sup>121</sup>

El escepticismo sobre el estatus del atomismo prevaleció a lo largo del siglo XIX, aunque algunos descubrimientos modernos como el comportamiento de los isómeros, se explicaron por medio de hipótesis atómicas o moleculares. Como ya se ha señalado, algunos escépticos como Mach, Georg Helm (1851-1923), Ostwald y Duhem, por ejemplo, no solo consideraron el atomismo como una explicación no adecuada de este tipo de fenómenos sino más aún sostuvieron que no existía suficiente evidencia para aceptar la existencia de los átomos; propusieron en su lugar teorías no atómicas del cambio químico fundamentadas en la termodinámica.<sup>122</sup>

En el siglo XIX existieron, pues, dos tipos de atomismo: un atomismo químico aceptado universalmente, aunque normalmente solo de forma implícita, que constituyó la base conceptual para asignar los pesos elementales relativos y las fórmulas moleculares; y un atomismo físico, sumamente controvertido que

---

<sup>120</sup> Cfr. KEDROV, B. M., "Dalton's Atomic Theory and Its Philosophical Significance", *Philosophy and Phenomenological Research*, Vol. 9, No. 4 (1949), 644.

<sup>121</sup> Cfr. WEISBERG, M. *et al.*, *op. cit.*

<sup>122</sup> Cfr. *supra*, 49.

reivindicaba la naturaleza mecanicista última de todas las sustancias. Aunque ambos tipos estaban muy relacionados y Dalton defendió implícitamente ambos, en general, los químicos dejaron el atomismo físico a los físicos. En la década de 1870 fue cada vez más clara la identidad entre estas dos teorías y su unificación se consiguió por fin en los primeros años del siglo XX, curiosamente, justamente en el momento en el que físicos y químicos comenzaban a explorar la estructura de los átomos.<sup>123</sup>

## 6. Conclusiones

El primer aspecto que conviene señalar es que la química no puede ser considerada como la consecuencia de la racionalización de la alquimia, siguiendo los criterios de matematización y sistematización propios de la ciencia moderna. La formación progresiva del saber químico está estrechamente relacionada con un fenómeno de convergencia de todo un conjunto de conocimientos varios y diversos que van desde la especulación filosófica sobre el constitutivo último de la sustancia corpórea hasta las explicaciones de tipo atomista. Y, aunque la química va incorporando paulatinamente la cuantificación propia de la descripción física, sin embargo, no deja de ser una disciplina en la que la caracterización cualitativa ocupa un lugar muy importante.

Los cambios respecto al modo de entender la materia son uno de los principales agentes de transformación del pensamiento científico. La concepción acerca de la estructura última del mundo material sufre una transformación a lo largo del desarrollo de la química: la noción de elemento-principio que inicialmente se entendía como principio último constituyente de los cuerpos, se va desplazando hacia una noción de elemento-instrumento de carácter más operativo.

El desarrollo de la química hasta Lavoisier puede considerarse como un esfuerzo por desprenderse de una concepción puramente filosófica de la naturaleza. A partir de Lavoisier, de ser una ciencia fundada esencialmente sobre la categoría filosófica de la cualidad, la química pasará a depender del paradigma

---

<sup>123</sup> Cfr. BROCK, W. H., *op. cit.*, 158.

de la masa. Bajo el paradigma de la cualidad, la inteligibilidad de las sustancias se enfocaba en el conocimiento de sus propiedades y en su capacidad de influir y modificar la naturaleza. Bajo el paradigma de la masa, se confirmará y consolidará una inteligibilidad de las sustancias de tipo analítico; es decir, un modo de leer en el interior de las sustancias que se efectuará por medio de la descomposición al determinar sus proporciones relativas en un momento dado.

El paso de un paradigma al otro supuso no solo un cambio en el modo de comprender las especies químicas, sino también la consecución de resultados fecundos pues los elementos químicos adquieren, de manera definitiva, su carácter totalmente empírico. En adelante, la práctica experimental cuantitativa y controlada, estará fundada en experimentos organizados y demostrados, y marcará la pauta del método experimental que llevará a la transformación de la química.

La combinación es, quizá, el problema teórico fundamental que se plantea la química. ¿Cómo es posible que, al combinarse dos sustancias distintas entre sí, formen una tercera que, a su vez, es diferente de las otras dos? Las respuestas a esta cuestión son diversas; desde las posturas que consideran que las sustancias químicas actúan en virtud de sus propiedades influyendo y modificando la naturaleza, hasta quienes interpretan los procesos químicos bajo una óptica corpuscular y mecanicista, en la que las transformaciones no son sino combinaciones o colisiones entre partículas.

La introducción de las explicaciones mecanicistas y atomistas en la química se dio de manera progresiva y el atomismo químico, para constituirse, tuvo necesidad de la formación de inteligibilidades diferentes de la naturaleza y de las entidades inertes.

# CAPÍTULO II



**ESTRUCTURA MOLECULAR Y  
ENLACE QUÍMICO**

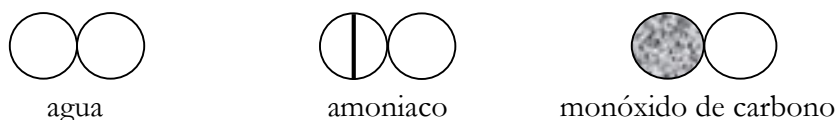


## 1. Introducción

A partir del siglo XVIII, la historia de la representación de las leyes de la composición química sufre una evolución incesante que atraviesa todos los campos de la química. Multiplicidad de términos y expresiones son utilizadas para expresar las cualidades y otras propiedades resultantes de la composición de la materia y de la reactividad de las estructuras moleculares.<sup>124</sup>

Cuando los químicos proponen una representación simbólica de un modelo molecular, hay que considerar que, detrás de tal representación, se encuentra todo un preámbulo explicativo de naturaleza histórica que hay que tener en cuenta para evaluar adecuadamente su contenido noético. Un ejemplo, entre los más conocidos, es la génesis del simbolismo (o de los simbolismos) de las estructuras llamadas aromáticas (benceno, etc.).<sup>125</sup>

La primera representación simbólica, imaginada por Dalton, es notable por su simplicidad. Cada elemento está representado por un círculo en cuyo interior figura un signo distintivo: un punto para el hidrógeno, un trazo vertical para el nitrógeno, un círculo en blanco para el oxígeno, etc. Así, tendríamos las siguientes figuras para las moléculas de agua, amoníaco y monóxido de carbono:



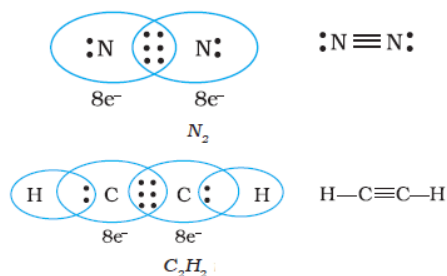
Esta representación simbólica se encuentra ligada a un sistema de átomos y a su tabla de pesos atómicos. El hecho de que tanto el agua como el amoníaco contengan un átomo de hidrógeno corresponde a la idea, expresada en la teoría atómica de Dalton, de que los átomos deben combinarse en la relación más simple posible. Como puede verse, se sugiere una cierta estructura molecular, aun cuando esta noción no aparecerá sino hasta un siglo después.<sup>126</sup>

<sup>124</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 53.

<sup>125</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>126</sup> Cfr. CRUZ-GARRITZ, D. & CHAMIZO, J.A. & GARRITZ, A., *Estructura atómica. Un enfoque químico*, Ed. Adisson-Wesley Iberoamericana, S.A., U.S.A. 1991, 5.

Desde el inicio de la teoría atómica moderna, los químicos han utilizado modelos para representar la estructura de las moléculas. Las estructuras de Gilbert Newton Lewis (1875-1946), por ejemplo, son representaciones gráficas que muestran los pares de electrones de enlace entre los átomos, utilizando los símbolos químicos de los elementos y líneas que los unen entre sí. En ocasiones, para representar cada enlace, se usan pares de puntos en vez de líneas. Estas estructuras posibilitan conocer la cantidad de electrones de valencia de un elemento que interactúa con otros elementos de su misma especie o de especies distintas formando los distintos tipos de enlace.<sup>127</sup>



Los modelos moleculares son generalmente estructuras tridimensionales que representan, a mayor o menor escala, la posición tridimensional de los átomos en una molécula y los enlaces entre ellos. Estas estructuras a menudo resultan del ensamblaje de componentes básicos que se conocen como “modelos atómicos”. Cada modelo atómico es un “bloque de construcción” que incorpora algunos de los atributos geométricos deseados de los átomos que lo constituyen como, por ejemplo, el ángulo de enlace, la longitud de enlace, el radio covalente o de van der Waals, etc. Así como la configuración de una molécula es el resultado de sus átomos constitutivos, también la configuración de un modelo molecular es el resultado de sus unidades atómicas constitutivas. La modelización molecular está directamente relacionada, por tanto, con el interés en que estas estructuras sean el

<sup>127</sup> Cfr. ROSEMBERG, J. & EPSTEIN, L. & KRIEGER, P., *Química*, 10ª. ed., McGraw-Hill, México 2013, 131. El esquema de las estructuras de Lewis está tomado de CHANG, R. & GOLDBY, K. A., *Química*, 11ª. ed., McGraw-Hill, México 2013, 381.

elemento clave para dar una explicación formal de las propiedades observables de los compuestos químicos.<sup>128</sup>

En química, la configuración molecular no es simplemente una representación geométrica *a priori*, sino que es el resultado de cálculos teóricos obtenidos a partir de las interacciones energéticas que constituyen el sistema molecular. Después de casi un siglo de un trabajo arduo y de numerosos debates, los químicos orgánicos han llegado a la conclusión de que la estructura es un hecho fundamental en el mundo de las moléculas.<sup>129</sup>

Actualmente, para los químicos, un simbolismo aplicado a la realidad reclama una coherencia lógica de los símbolos, una eficiencia experimental. En química la significación convencional de los símbolos debe corresponder generalmente a una realidad experimental reconocida, verificable y constatable. Los símbolos de la química no son meras imágenes, sino que designan teorías o modelos complejos y perfectibles. Es por eso que constantemente deben circunscribirse a una interpretación situada en el campo experimental que estas teorías y modelos intentan explicar.<sup>130</sup>

El objetivo de este capítulo es el de comprender el significado de las concepciones que los químicos tienen de sus objetos, por lo que se hará una breve presentación del desarrollo progresivo de conceptos y modelos teóricos fundamentales para la química moderna: el enlace químico y la estructura. La inteligibilidad de las sustancias químicas no se encuentra únicamente en el análisis, en su fragmentación, sino también en el proceso inverso, el de la síntesis, generadora de estructuras y necesaria para comprender su naturaleza. Con la introducción gradual del concepto de estructura molecular, la inteligibilidad química sufrió un cambio semejante al producido con la revolución lavoisierana.<sup>131</sup>

---

<sup>128</sup> Cfr. FRANCOEUR, E., "The Design and Use of Molecular Models", *Social Studies of Science*, Vol. 27, No. 1 (1997), 10-11.

<sup>129</sup> Cfr. DEL RE, G., "Ontological Status of Molecular Structure", *HYLE – International Journal for the Philosophy of Chemistry*, Vol. 4 (1998), 82.

<sup>130</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 54.

<sup>131</sup> Cfr. *idem*, 55.

## 2. La analítica y sus límites

A finales del siglo XVIII Lavoisier afirmó que la química molecular asume sus propias investigaciones a través del método analítico. La química tiene como fin descomponer los cuerpos que la naturaleza le presenta con el fin de poder examinar sus constituyentes últimos. El análisis se convirtió, para el químico francés, en el fin exclusivo de la química. Para el enfoque analítico, la química, por decirlo de algún modo, toca el fondo de la divisibilidad elemental que le es propia y la define y limita; su objeto es aislar, identificar y caracterizar los elementos de su dominio de estudio.<sup>132</sup>

El análisis químico de las sustancias consiste en la descomposición de las mismas en sus componentes elementales. El peso cuidadoso y la combinación de elementos, junto con la aplicación de la ley de las proporciones constantes, permitió a los químicos caracterizar a las sustancias en términos de las relaciones de masas de sus elementos constitutivos, que es lo que el químico entiende por la descomposición de un compuesto. Berzelius desarrolló una notación de fórmulas composicionales para las relaciones de masas en la que letras representan a los elementos y los índices numéricos a las proporciones, en una escala que facilita la comparación de las diferentes sustancias. Aunque estas proporciones reflejan la relación del peso en gramos, los números simples son el resultado de expresar proporciones gravimétricas en términos de equivalentes químicos. Por ejemplo, las fórmulas  $H_2O$  y  $H_2S$  indican que hay tanto oxígeno en combinación con hidrógeno en el agua, como azufre en combinación con hidrógeno en el sulfuro de hidrógeno. Sin embargo, cuando se mide en peso,  $H_2O$  corresponde a la

---

<sup>132</sup> Cfr. *ibidem*. Para Lavoisier, el elemento químico no es el corpúsculo completamente indivisible (el átomo “filosófico”) o el “átomo químico” que es difícil de analizar por medios naturales. El elemento es la sustancia que permanece como producto último del análisis. Con el fin de mantenerse al margen de las especulaciones metafísicas sobre la naturaleza última de la materia, Lavoisier evita cualquier referencia a los átomos o partículas más diminutas de la materia, y propone en su lugar una nomenclatura reformada de la química en la que los nombres de los compuestos de sustancias reflejarían su composición elemental. De hecho, Lavoisier se refiere a la descomposición de los cuerpos materiales en las sustancias de las que se componen como el principal objetivo de la química. Cfr. BANCHETTI-ROBINO, M., *op. cit.*, 151-152.

combinación de 8 gramos de oxígeno con un gramo de hidrógeno y  $\text{H}_2\text{S}$  corresponde a 16 gramos de azufre por 1 de hidrógeno en peso.<sup>133</sup>

Si Lavoisier llevó a cabo una redefinición de la química que considera que el análisis es su centro, sus colegas y sucesores mejoraron y diversificaron las prácticas de análisis. Claude Louis Berthollet (1748-1822) inició el análisis volumétrico<sup>134</sup> que fue perfeccionado por Louis Joseph Gay-Lussac (1778-1850) quien mostró, además, cómo, en torno al análisis, se produce la articulación entre la química pura y la aplicada. Gracias a sus mediciones químicas de precisión y a sus procedimientos exactos de trabajo, Gay-Lussac logró obtener varios elementos químicos y establecer las bases del análisis volumétrico convirtiéndolo en una disciplina independiente. Justus von Liebig (1803-1873) emprendió la ampliación del campo del análisis a los compuestos orgánicos, y William Nicholson (1753-1815) y Anthony Carlisle (1768-1840) utilizaron la pila eléctrica recientemente inventada por Alessandro Volta (1745-1827) para elaborar un nuevo procedimiento analítico: la electrólisis. Habiendo comprendido el poder de la pila, Humphry Davy (1778-1829) la utilizó para descomponer sustancias que hasta ese momento se resistían al análisis. Berzelius caracterizó cada cuerpo simple y cada compuesto por una polaridad eléctrica positiva o negativa cuya intensidad varía dependiendo de la naturaleza del cuerpo, y desarrolló una teoría electroquímica de la combinación sobre la base de los experimentos de descomposición electrolítica. Michael Faraday (1781-1867), por su parte, estableció una relación entre el grado de afinidad química de dos elementos y su facilidad para dirigirse a los polos opuestos durante la descomposición electrolítica introduciendo los términos ánodo y cátodo.<sup>135</sup>

La electrólisis supuso una multiplicación de los cuerpos simples. Entre 1807 y 1808, Davy aisló el sodio, el potasio, el estroncio, el boro, el calcio y el magnesio y, hacia 1810, el cloro, el yodo y el bromo. A su vez, Berzelius obtuvo el cerio, el selenio, el silicio, el circonio, el torio, el litio y el vanadio. Paralelamente surgió una multitud de nuevos aparatos que perfeccionaron los métodos

---

<sup>133</sup> Cfr. WEISBERG, M. *et al.*, *op. cit.*

<sup>134</sup> El análisis volumétrico o titulación es un método de análisis químico cuantitativo que se utiliza para determinar la concentración de un reactivo.

<sup>135</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 91-94.

cuantitativos y cualitativos del análisis. Lavoisier había confeccionado en 1789 una tabla de sustancias simples que incluía treinta y tres. En 1834 Louis Jacques Thénard (1777-1857) enumera cincuenta y cuatro, y en 1869 Dimitri Mendeleiev (1834-1907) clasifica setenta.<sup>136</sup>

Esta repentina multiplicación de las sustancias simples planteó a los químicos de la época algunas interrogantes sobre la transformación y constitución de los cuerpos. Ya Dalton había formulado una teoría en la que identificaba los cuerpos simples con átomos estableciendo que éstos pueden diferenciarse por su peso y determinando que las combinaciones químicas se efectúan mediante unidades discretas, átomo por átomo, siguiendo la ley de proporciones múltiples. El concepto de proporción, de combinación mediante unidades discretas es indiscutible, pero ¿cuántos átomos hay en un compuesto dado? Calcular con la mayor exactitud posible el valor del peso atómico, o equivalente, de cada elemento se convirtió entonces en un reto para los químicos.<sup>137</sup>

En 1808, Gay-Lussac observó que cuando dos gases reaccionan químicamente, sus volúmenes guardan una proporción simple entre uno y otro y con el producto de la reacción. Concluyó que, si los elementos gaseosos se unen en proporciones simples por volumen, también lo hacen por número de átomos, y que el número de átomos en volúmenes iguales de gases (a la misma presión y temperatura) también debería estar relacionado por proporción simple. Sin embargo, no había manera de determinar el valor numérico de esta relación y por consiguiente el descubrimiento de Gay-Lussac no fue útil para calcular los pesos atómicos relativos.<sup>138</sup>

Para explicar el hecho descubierto por Gay-Lussac, Amedeo Avogadro (1776-1856) sugirió, en 1811, la hipótesis de que, en condiciones iguales de presión y temperatura, volúmenes iguales de gases diferentes contienen el mismo número de moléculas. Se trata de una hipótesis simple para explicar la conjunción de propiedades ponderales y volumétricas: la densidad relativa de un gas es proporcional a su peso molecular. La determinación del peso molecular relativo

---

<sup>136</sup> Cfr. *idem*, 95.

<sup>137</sup> Cfr. *idem*, 97.

<sup>138</sup> Cfr. AMERICAN ASSOCIATION FOR THE ADVANCEMENT OF SCIENCE, "The Hypothesis of Avogadro", *The Scientific Monthly*, Vol. 2, No. 6 (1916), 618.

de un gas se reduce, entonces, a una sencilla medición de laboratorio: la medición de la densidad relativa de dicho gas.<sup>139</sup>

Avogadro se planteó el objetivo de poder determinar los pesos atómicos relativos de los cuerpos simples o compuestos, así como las proporciones según las cuales entran en combinación, para poder establecer las fórmulas químicas. En efecto, el conocimiento de los pesos atómicos y de las fórmulas era indispensable para proseguir con las investigaciones físico-químicas. Avogadro buscó la cuantificación de la química por medio de relaciones aritméticas simples entre los datos físicos.<sup>140</sup> En 1814, y de manera independiente, André Marie Ampère (1775-1836) formuló la misma hipótesis que la propuesta por Avogadro pero con el fin de construir una teoría geométrica sobre la combinación química.<sup>141</sup>

Tanto el trabajo de Avogadro como el de Ampère se inscriben en el marco de los debates de esa época sobre la distinción átomo-molécula y sobre la teoría de la combinación química: ¿es posible considerar una arquitectura interior a la materia tal como sugieren las formas de los cristales?; ¿la reacción química posee combinaciones en proporciones fijas y definidas o, por el contrario, variables e indefinidas?; ¿los procesos de reacción son continuos y reversibles o bien discontinuos e irreversibles? Las diferentes respuestas que Avogadro y Ampère dieron a estas cuestiones permitieron comprender mejor los motivos por los cuales era difícil, en ese entonces, llegar a una distinción adecuada entre átomo y molécula de una parte, y combinación química y mezcla, de otra.<sup>142</sup>

Para Avogadro, el átomo es el sujeto de la combinación y la molécula el sujeto de la reacción. Esta distinción entre átomo y molécula supone un avance importante, ya que a partir de ella se establecen las bases esenciales de la teoría atómica en química.<sup>143</sup>

---

<sup>139</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>140</sup> Cfr. SCHEIDECKER-CHEVALLIER, M., "L'hypothèse d'Avogadro (1811) et d'Ampère (1814): la distinction atome/molécule et la théorie de la combinaison chimique", *Revue d'histoire des sciences*, Vol. 50, No. 1 (1997), 187.

<sup>141</sup> Cfr. AMERICAN ASSOCIATION FOR THE ADVANCEMENT OF SCIENCE, "The Hypothesis of Avogadro", *op. cit.*, 618.

<sup>142</sup> Cfr. *ibidem*. Remito al presente artículo para el estudio detallado de las propuestas de Avogadro y Ampère ya que sobrepasan los límites de este trabajo.

<sup>143</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 103.

Después de la propuesta de la hipótesis de Avogadro se realizaron algunos esfuerzos para establecer un sistema confiable de pesos atómicos, pero los químicos persistieron en el uso y abuso de los términos “peso atómico”, “peso molecular”, “peso de combinación” lo que creó confusión la cual se incrementó por el intento de Avogadro de aplicar su hipótesis a sustancias que no podían ser vaporizadas. Esto fue causa del progresivo abandono de la hipótesis de Avogadro. Sin embargo, en los años 1840 dos químicos Charles Gerhardt (1816-1856) y Auguste Laurent (1807-1853) reconocieron el valor de esta hipótesis para la determinación de fórmulas. Finalmente fue Stanislao Cannizzaro (1826-1910) quien reivindicó la hipótesis de Avogadro en el Congreso de químicos celebrado en Karlsruhe en 1860 mostrando cómo la hipótesis molecular puede ser utilizada para resolver el problema de los pesos relativos de los átomos. Cannizzaro distinguió claramente la diferencia entre átomos y moléculas: “volúmenes iguales de gases, sean simples o complejos, contienen igual número de moléculas pero no igual número de átomos” y probó que la hipótesis molecular estaba en consonancia con los hechos conocidos.<sup>144</sup>

El enfoque analítico, si bien nos dice de qué cosa está hecha una sustancia química, no nos dice cómo está hecha, por qué tiene ciertas propiedades y no otras y de dónde le vienen estas propiedades. Un análisis químico que se limita únicamente a identificar los diferentes elementos y a determinar sus proporciones relativas, no es suficiente para dar cuenta de todas las propiedades, con frecuencia esenciales, de una sustancia.<sup>145</sup>

---

<sup>144</sup> Cfr. AMERICAN ASSOCIATION FOR THE ADVANCEMENT OF SCIENCE, “The Hypothesis of Avogadro”, *op. cit.*, 618. El Congreso Internacional de Karlsruhe (Alemania, septiembre de 1860) fue la primera reunión internacional de química del mundo. Muchos historiadores lo consideran como crucial para el desarrollo de la química en general y de la tabla periódica en particular. En una circular enviada por los organizadores del Congreso (fecha el 10 de julio de 1860) se subraya que su objetivo es la necesidad de conseguir un consenso para una definición más precisa de los conceptos de átomo, molécula, equivalente, atomicidad, alcalinidad, etc.; la discusión sobre los verdaderos equivalentes de los cuerpos y sus fórmulas; el inicio de un plan racional para una mejor nomenclatura. Cfr. DE MILT, C., “The Congress at Karlsruhe”, *Journal of Chemical Education*, No. 28 (1951), 155.

<sup>145</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 57.

### 3. Génesis de la teoría estructural en química molecular

Un siglo después de Lavoisier, Marcellin Berthelot (1827-1907) afirmó que la química es la ciencia de la síntesis.<sup>146</sup> El objetivo de los químicos de comprender los principios últimos de los cuerpos no se encuentra en una descomposición última elemental, sino en la recomposición. Dicho de otro modo, la inteligibilidad de los cuerpos no se encuentra únicamente en la búsqueda e identificación de los elementos, búsqueda fundada en una idea totalmente filosófica y de una filosofía de la naturaleza bien precisa —el atomismo—, que afirma que el conocimiento de los cuerpos se encuentra en sus principios elementales materiales. Una atomización a ultranza no desemboca en un contenido noético capaz de llevar a comprender la unidad de las sustancias y de sus propiedades. En adelante la recombinación y la reestructuración son las que darán cuenta de la inteligibilidad de la realidad química.<sup>147</sup>

La química estructural determina la estructura de las moléculas, es decir, la disposición geométrica espacial de los átomos en una molécula y sus relaciones mediante enlaces químicos. Incluye también la configuración electrónica y, en su caso, la estructura cristalina. Existen distintos métodos experimentales espectroscópicos para determinar la estructura de una molécula, como la resonancia magnético nuclear (RMN), la microscopía electrónica y la cristalografía de rayos X. Estos métodos se basan en el estudio de la interacción entre radiación y materia. En el caso de las moléculas orgánicas las estructuras tridimensionales desempeñan un papel fundamental en la determinación de su comportamiento

---

<sup>146</sup> El término síntesis tiene diferentes acepciones. Puede entenderse como la reproducción de una sustancia en el laboratorio y, según las categorías divulgadas por Berthelot, puede hablarse de síntesis completa cuando se fabrican sustancias partiendo de elementos (carbono, hidrógeno...) y de síntesis parcial cuando se fabrican sustancias partiendo de otros compuestos más simples. (Cfr. BENSUAUDE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 122). La síntesis puede entenderse también como la operación opuesta al análisis y en este caso equivale a recomposición.

<sup>147</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 57.

físico y químico permitiendo el desarrollo de explicaciones para una gran cantidad de conocimiento experimental.<sup>148</sup>

El desarrollo de la cristalografía invitó a los químicos a considerar la figura y la disposición de los átomos y atrajo su atención a los edificios moleculares. René Just Haüy (1743-1822), al caracterizar cada especie mineral por una fórmula poliédrica fija, postuló una correlación entre las propiedades macroscópicas de una sustancia y sus propiedades microscópicas. La molécula se considera como una unidad estructural subdividida en unidades más elementales. Es el caso, por ejemplo, de los cristales isomorfos que revelan la identidad de una estructura por la variación de los elementos constitutivos.<sup>149</sup>

Algunos científicos franceses intentaron aplicar estos conceptos cristalográficos de geometría molecular al estudio de la composición química. Ya señalamos que Ampère llegó por este camino a la misma conclusión que formuló Avogadro en su hipótesis acerca del desdoblamiento de las moléculas gaseosas cuando entran en combinación. Por su parte, Marc Antoine Gaudin (1804-1880) sugirió la idea de una arquitectura atómica esperando encontrar la clave de los fenómenos químicos en la disposición espacial de los átomos en el interior de la molécula, y Alexandre Edouard Baudrimont (1806-1880) intentó una interpretación de las combinaciones químicas en términos de re-disposición de los átomos.<sup>150</sup>

Laurent fue uno de los precursores que prepararon el camino para el surgimiento de la química estructural. Laurent tuvo la idea de oponer la aproximación de la cristaloquímica a las interpretaciones electroquímicas de la combinación proponiendo una teoría unitaria de la composición de los compuestos orgánicos y de sus transformaciones moleculares.<sup>151</sup> Audazmente

---

<sup>148</sup> BROWN, TH. L. & LEMAY, JR., H. E. & BURSTEN, B. & BURDGE, J., *Química. La ciencia central*, 9a. ed., Pearson, México 2004, 199 y 275.

<sup>149</sup> Cfr. BENSAUDE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 109.

<sup>150</sup> Cfr. *idem*, 110.

<sup>151</sup> Algunos historiadores han sostenido que Laurent se opuso abiertamente al dualismo electroquímico de Berzelius, como es el caso de B. Bensaude-Vincent e I. Stengers (cfr. BENSAUDE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 110); otros, en cambio, señalan que el mismo Laurent, en su tesis doctoral, menciona que lejos de negar la teoría electroquímica, considera que cuando se ha aplicado a la química orgánica, se han conseguido grandes progresos. "Laurent refers

planteó que, si no podíamos deducir la constitución molecular a partir de las reacciones, entonces deberíamos postular modelos plausibles para explicarla. Considerando la química orgánica en tres dimensiones, ideó modelos explicativos sobre la persistencia de estructuras específicas de hidrocarburos. Tal parece que, por primera vez, una teorización de la experiencia química propone que la función química y la geometría, la reactividad y la ordenación en el espacio, coinciden en la comprensión del hecho químico. Postulando que la forma, el número y el orden son más esenciales que la materia, Laurent se anticipa a las teorizaciones que conectan las funciones y los tipos estructurales.<sup>152</sup>

La química de Laurent estaba completamente permeada por su visión de estructuras tridimensionales, pero, precisamente por este motivo, sus modelos basados solamente en la experiencia, no podían ser inferidos de las reacciones químicas. August Kekulé (1829-1896) y Aleksandr Butlerov (1828-1886) no coincidieron con la propuesta de Laurent. Para Butlerov era natural que la química, que trata solamente con sustancias durante el curso de su transformación, no fuera capaz de hacer ninguna afirmación sobre la estructura mecánica de las mismas, al menos mientras no acudiera a la ayuda de investigación física. Según Butlerov, el concepto químico de estructura debía incorporar todas las interacciones atómicas que tuvieran lugar durante la transformación. Por su parte, Kekulé volvió a los elementos y aplicó un concepto mecánico de la estructura basado en las relaciones de valencia.<sup>153</sup>

En las primeras décadas del s. XIX, la naciente disciplina de química orgánica comenzó a identificar y sintetizar un número cada vez mayor de compuestos. Paralelamente comenzaron a surgir algunas tensiones metodológicas y epistemológicas ya que, aunque prácticamente todos los químicos reconocían la utilidad del razonamiento analógico, no todos estuvieron convencidos de aplicar analogías extraídas de la química inorgánica al ámbito orgánico y viceversa.

---

to the 'advantages immenses' that the electrochemical theory 'présente dans la nomenclature, dans l'étude de la chimie maintenant dans ses applications à la chimie organique...'. Cfr. BROOKE, J. H., "Laurent, Gerhardt, and the Philosophy of Chemistry", *Historical Studies in Physical Sciences*, Vol. 6 (1975), 408.

<sup>152</sup> Cfr. BROOKE, J. H., *op. cit.*, 416 y MANFREDI, A., *op. cit.*, 59-60.

<sup>153</sup> Cfr. BROOKE, J. H., *op. cit.*, 428.

Berzelius, por ejemplo, utilizó analogías de tipo eléctrico basadas en ideas dualistas que incluyen radicales y mecanismos de adición para construir teorías sobre química orgánica. Laurent, por su parte, consideró la sustitución orgánica como fenómeno químico primario, invirtiendo así el sentido de la analogía.<sup>154</sup>

Sustituir un elemento por otro en un compuesto, por ejemplo, un átomo de hidrógeno por un átomo de cloro en un hidrocarburo, trastornó todo el panorama de la química orgánica en la década de 1840 pues el campo de competencia de la explicación química se desplazó del cuerpo simple o del elemento hacia el concepto de agrupamiento o edificio molecular. El debate en torno a las combinaciones químicas, ya sea entendidas como la adición de dos elementos o dos radicales unidos por cargas eléctricas, ya sea por la sustitución de átomos sobre la base de un núcleo o tipo llevó al planteamiento de otra cuestión: ¿qué es un radical? ¿Un residuo de análisis inmediato, o bien, una estructura, una disposición molecular invariante? Interrogantes que en la práctica se tradujeron en: ¿cómo nombrar, escribir y clasificar los compuestos? Hacia mediados del siglo XIX se habían identificado entre siete y ocho mil compuestos, lo que llevó a la necesidad de contar con fórmulas racionales coherentes y con un principio de ordenación.<sup>155</sup>

Charles Gerhardt (1816-1856) se dedicó a estudiar la relación entre las sustancias para establecer una clasificación, y para ello adoptó el concepto de “tipo” químico definido por Alexander William Williamson (1824-1904). Según Williamson todos los compuestos se derivan por sustituciones progresivas de un tipo fundamental; el agua. Sobre la base del tipo agua, Williamson propone una nueva escritura de los radicales y los caracteriza por su “basicidad”, es decir, el número de átomos que se pueden sustituir, una especie de equivalente de sustitución. Así, la fórmula de los ácidos se deriva del agua mediante sustitución del hidrógeno por radicales. Gerhardt considera tres “tipos”: agua, amoníaco e hidrógeno, y lleva a cabo una clasificación de los compuestos orgánicos según la sustitución del hidrógeno por radicales en cada uno de los tipos. Los tipos o

---

<sup>154</sup> Cfr. ROCKE, A. J., “Kekulé, Butlerov, and the Historiography of the Theory of Chemical Structure”, *The British Journal for the History of Science*, Vol. 14, No. 1 (1981), 29.

<sup>155</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 113.

radicales actúan como un bloque que se traslada de un cuerpo a otro; cada uno de ellos se caracteriza por un valor de sustitución y actúan como unidades, elementos. Y aunque Gerhardt afirma que no se puede saber nada acerca de la constitución real de los cuerpos, pues las fórmulas que se pueden escribir no tienen ningún significado ontológico, en su teoría las estructuras desempeñan un papel real.<sup>156</sup>

Un aspecto quizá más importante que la discusión metodológica de la analogía es la cuestión epistemológica sobre la accesibilidad del ámbito microscópico de magnitudes atómico-moleculares. Fenómenos como el isomerismo y el polimorfismo parecían demostrar que el arreglo de los átomos en una molécula debe afectar las propiedades del compuesto, pero permaneció la discusión sobre si es posible conocer de manera cierta algo sobre dicho arreglo. En concreto, a raíz del reconocimiento del fenómeno del isomerismo se introdujeron las formulas estructurales para distinguir las sustancias con la misma fórmula composicional pero que difiere en sus propiedades macroscópicas.<sup>157</sup>

A partir de 1858 se produjo el punto de inflexión de la química orgánica hacia la química estructural. Los axiomas de la nueva teoría fueron propuestos por Jacobus Henricus van't Hoff (1852-1911), Kekulé y Archibald Couper (1831-1892). Kekulé notó que el carbón tendía a combinarse con elementos univalentes en proporciones de uno a cuatro. Señaló que esto se debía a que cada carbón podía formar enlaces con otros cuatro átomos, incluso otros átomos de carbono. Esta teoría del carbono tetraédrico solo pretendía justificar las síntesis en las que los átomos de otros elementos se asocian al carbono central en cuatro direcciones. El átomo de carbono, al enlazarse con otros átomos de carbono, es capaz de formar cadenas de longitudes variables, más o menos ramificadas, abiertas o cerradas en sí mismas. Se trata de la propiedad más determinante del átomo de carbono, la de la concatenación.<sup>158</sup>

En posteriores trabajos, Kekulé se enfocó a las excepciones aparentes a la valencia cuatro del carbón introduciendo el concepto de doble enlace entre los átomos de carbono. Extendió este concepto a los compuestos aromáticos,

---

<sup>156</sup> Cfr. *idem*, 114.

<sup>157</sup> Cfr. ROCKE, A. J., "Kekulé, Butlerov, and the Historiography of the Theory of Chemical Structure", *op. cit.*, 33.

<sup>158</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 60.

produciendo la famosa estructura hexagonal para el benceno, aunque esto crearía un nuevo problema para la valencia universal cuatro del carbono.<sup>159</sup>

El paso hacia la interpretación espacial de los átomos en una molécula fue dado por van't Hoff y Joseph Achille Le Bel (1847-1930) cuando postularon simultáneamente en 1874 la estructura tetraédrica del carbono. Los cuatro hidrógenos del metano ( $\text{CH}_4$ ), un compuesto simétrico, guardan la misma relación con respecto al átomo de carbono, de aquí que el metano puede representarse en el espacio por medio de un tetraedro regular, colocando al carbón en el centro y los cuatro átomos de hidrógeno en los cuatro ángulos, lo que dio lugar a la concepción tetraédrica del carbono. La noción de carbono tetraédrico implica cierta cuádruple orientación que geometriza la cuadrivalencia del carbono. Este fue el inicio de la estereoquímica del carbono, a partir de la cual se desarrolló la estereoquímica de muchos otros compuestos.<sup>160</sup>

El medio siglo que siguió a la teoría estructural de August Kekulé en 1859, fue el siglo de oro de la química orgánica estructural. Para 1900 esta era una ciencia altamente sofisticada que coronó sus esfuerzos con la síntesis de azúcares, purinas y proteínas por Emmil Fischer (1852-1919), y aunque continuó desarrollándose exitosamente en el siglo XX, para la década de 1920 el estudio de los mecanismos de reacción comenzó a atraer la atención de los químicos. Así, mientras que en el siglo XIX la química se desarrolló bajo el aspecto estático de la química estructural, en el siglo XX tuvo que enfrentar la dinámica del cambio químico. La clave para este nuevo enfoque de la química fue el enlace químico.<sup>161</sup>

## 4. El enlace químico

Si hubiera que elegir un único concepto básico sobre el que se construye la Química, optaríamos sin duda por el enlace químico. El desarrollo de este concepto a lo largo del siglo XX no solo nos conduce a la comprensión de la

---

<sup>159</sup> Cfr. WEISBERG, M. *et al.*, *op. cit.*

<sup>160</sup> Cfr. JONES, H. C., "Jacobus Henricus van't Hoff", *Proceedings of the American Philosophical Society*, Vol. 5, No. 20 (1911), v.

<sup>161</sup> Cfr. KOHLER JR., R., "The Origin of G. N. Lewis's Theory of the Shared Pair Bond", *Historical Studies in the Physical Sciences*, Vol. 3 (1971), 343.

estructura de las moléculas a través de la creación de pares de electrones y de las reglas de Lewis, sino también nos permite definir las reacciones químicas como el resultado de una reestructuración de uniones entre átomos. Quedarían así definidas y caracterizadas las unidades moleculares y el cambio entre ellas, es decir, las entidades básicas de la Química.<sup>162</sup>

Muchos de los principios generales sobre la estructura molecular y la naturaleza del enlace químico fueron formulados por los químicos por inducción a partir de un gran conjunto de hechos químicos. En décadas recientes y gracias al uso de métodos experimentales más desarrollados y teorías de la física moderna, estos principios se han hecho más precisos e incluso se han descubierto nuevos principios de la química estructural. Actualmente la cantidad de conocimiento sobre la estructura molecular y la naturaleza del enlace químico es muy grande. Se intentará mostrar la evolución del concepto de enlace químico —enteramente ligado al de estructura— y, posteriormente, se señalarán algunas implicaciones de carácter filosófico.<sup>163</sup>

#### 4.1 La evolución del concepto de enlace químico

El concepto de enlace químico aparece ya en la Antigüedad prácticamente junto con la noción de átomo. Desde el momento en que se admitió la existencia de partículas elementales, fue necesario también imaginar una fuerza capaz de unir las para asegurar la cohesión de la materia. Desde Demócrito, que pensaba que los átomos podían unirse por medio de pequeños ganchos, hasta las teorías de afinidad de la Edad Media, este conocimiento fue más bien poco científico. Hubo que esperar al siglo XIX para que aparecieran las primeras teorías físicas sobre el enlace. Surge entonces la noción de valencia que, según la naturaleza orgánica o inorgánica de los compuestos estudiados, conduce a dos tipos de enlace: el covalente y el electrovalente o iónico totalmente diferentes. Químicos

---

<sup>162</sup> Cfr. CONTRERAS GARCÍA, J. & OTERO-DE-LA-ROSA, A. & RECIO, J. M., “El enlace químico y su supervivencia en la química cuántica”, *Anales de Química*, Vol.110-2 (2014), 113.

<sup>163</sup> Cfr. PAULING, L., *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, 3a. ed., Cornell University Press, New York 1960, 3.

orgánicos e inorgánicos elaboraron, cada uno por su parte, modelos de enlace que les permitieran explicar los fenómenos observados.<sup>164</sup>

No obstante, algunos químicos se cuestionaron si no sería posible elaborar un modelo más amplio de enlace que englobara al conjunto de los diferentes tipos de enlace y mostrara que, de hecho, cada uno de ellos es un aspecto del enlace químico. De este planteamiento surgió un cambio importante sobre el modo de entender el enlace químico, fenómeno esencialmente electrostático que pasó a inscribirse dentro del marco más amplio de las interacciones electromagnéticas.<sup>165</sup>

Antes de intentar justificar el carácter unitario del enlace químico, puede ser útil considerar la génesis de los diversos modelos de enlace a lo largo de la historia. El primer paso importante para la comprensión del enlace químico fue dado a comienzos del siglo XX, tras el descubrimiento del electrón en 1897 por el físico inglés Joseph John Thompson (1856-1940). Solamente entonces fue posible comprender que el enlace no dependía de los átomos sino de los electrones.<sup>166</sup>

A partir del descubrimiento del electrón, fue posible demostrar que algunos compuestos pueden disolverse en agua liberando iones capaces de conducir la corriente eléctrica. La teoría electroquímica de Berzelius, basada en la descomposición electrolítica,<sup>167</sup> había asignado a los átomos unos polos eléctricos positivos o negativos y había reemplazado la noción de afinidad por la de atracción electrostática entre iones de carga opuesta. Esta teoría dio origen al enlace iónico aplicable esencialmente a los compuestos inorgánicos, fácilmente electrolizables.<sup>168</sup>

Jean-Baptiste Dumas (1800-1884) que trabajaba con compuestos orgánicos no electrolizables (no dissociables por tanto en iones) imaginó otro

---

<sup>164</sup> Cfr. LIVAGE, J., "El Enlace Químico", en ANDRÉS, J. & ANGLÉS, M. A. & OPIS, R. & NIEVES, M. & REMIRO, F., *Introducción a los modelos de enlace químico*, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 1993, 112-113. Pauling considera tres tipos generales de enlaces: los enlaces electrostáticos (dentro de este tipo incluye al enlace iónico y al enlace dipolo-dipolo, que ocurre cuando hay una atracción electrostática entre el extremo positivo de una molécula polar y el negativo de otra), los enlaces covalentes y los enlaces metálicos. Cfr. PAULING, L., *op. cit.*, 5-7.

<sup>165</sup> Cfr. LIVAGE, J., *op. cit.*, 113.

<sup>166</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>167</sup> Cfr. *supra*, 75.

<sup>168</sup> Cfr. LIVAGE, J., *op. cit.*, 113.

modelo de enlace: el covalente. La fuerza entre átomos que comparten dos o más electrones para formar el enlace covalente está relacionada con la deslocalización de dichos electrones sobre una región más amplia del espacio que la que ocupan los átomos separados. La deslocalización de los electrones es el resultado de que se encuentren en torno a dos núcleos y no solo a uno. La concentración de densidad de electrones entre los núcleos da pie a una fuerza neta de atracción que constituye el enlace que mantiene unida a la molécula.<sup>169</sup>

Según el modelo de Dumas, los átomos al formar una molécula pierden toda individualidad, lo que permite explicar que dos compuestos isómeros con la misma composición química puedan presentar propiedades totalmente distintas: las propiedades de un agregado molecular dependen de la forma en la que se enlacen los átomos. Sin llegar a imaginar la naturaleza misma de los enlaces, Dumas propuso representarlos mediante trazos. Cada átomo no se puede unir más que con un número limitado de enlaces, llamados enlaces de valencia. De ahí que el carbono, que se combina como máximo con cuatro átomos de hidrógeno para formar el metano (CH<sub>4</sub>) fuera tetravalente.<sup>170</sup>

Los numerosos intentos por desarrollar una teoría electrónica del enlace químico culminaron con el trabajo de Lewis quién, en un artículo publicado en 1916, que constituye la base de la teoría electrónica moderna, discute no solo la formación de iones al completar órbitas estables de electrones, sino también la formación del enlace covalente, que se produce, como se acaba de señalar, cuando se comparten dos electrones entre dos átomos. Lewis destacó, además, la importancia del fenómeno de emparejamiento de electrones no compartidos y compartidos y de la estabilidad del grupo de ocho electrones (compartidos o no compartidos) de los átomos más ligeros.<sup>171</sup> Las ideas de Lewis fueron

---

<sup>169</sup> Cfr. ROSEMBERG, J. *et al.*, *op. cit.*, 130 y BROWN, TH. *et al.*, *op. cit.*, 282.

<sup>170</sup> Cfr. LIVAGE, J., *op. cit.*, 113.

<sup>171</sup> El siguiente texto nos puede ayudar a visualizar la relevancia de la propuesta de Lewis. “Según W. B. Jensen, profesor de Historia de la química en la universidad de Cincinnati, hay tres revoluciones en la historia de la química moderna: la primera (1770-1790) llevó a la clarificación de los conceptos de sustancias simples y compuestos y explicó el papel del calor y conservación de la masa en los cambios de estado de las reacciones químicas. Esta primera revolución se realizó gracias a los trabajos de Lavoisier y algunos colaboradores y una síntesis puede encontrarse en el *Traité élémentaire de chimie* (1789) del mismo Lavoisier. La segunda revolución química (1855-1875)

desarrolladas posteriormente, entre otros, por Irving Langmuir (1881-1957) cuyo trabajo es especialmente significativo pues muestra que muchos hechos químicos pueden aclararse y explicarse con la aplicación de esta nueva teoría del enlace químico.<sup>172</sup>

Aunque desde el ámbito de la física, la teoría de Lewis ha sido cuestionada, es innegable que ha ejercido una notable influencia en el desarrollo de la química. En 1927, en una investigación que hizo época, Walter Heitler (1904-1981) y Fritz London (1900-1954) consiguieron formular la teoría del par electrónico de Lewis a una forma física más satisfactoria con la ayuda de la mecánica cuántica.<sup>173</sup>

Sin embargo, hay algunas cuestiones químicas en la teoría del par de electrones que no son resueltas satisfactoriamente ni en su forma original, ni en la formulación de la misma dada por la mecánica cuántica, entre ellas las que se refieren a compuestos insaturados. Para entender cómo pueden unirse los átomos en moléculas complejas es necesario primero tener una idea clara de la constitución de un átomo individual. La solución a este problema de química teórica fue dada por el físico Niels Bohr (1885-1962) quién, en 1922, mostró que los electrones en un átomo se mueven de tal manera que pueden ser asignados a diferentes capas con diversas distancias del núcleo. Los electrones de la capa más

---

condujo al cálculo de los pesos atómicos, al establecimiento de las fórmulas moleculares, al concepto de valencia, a la formulación de la ley periódica y a la teoría estructural clásica. Esta revolución fue realizada por varios químicos entre los que se encuentran Cannizzaro, Williamson, Frankland, Odling, Wurtz, Couper, Kekulé y van't Hoff. La monografía de Lothar Meyer (1864) *Die modernen Theorien der Chemie und ihre Bedeutung für chemische Statik*, es un texto característico de esta segunda revolución. Finalmente, la tercera revolución (1904-1924) condujo a la teoría electrónica moderna del enlace químico y reactividad, y puede considerarse como la obra paradigmática de esta revolución *Valence and the Structure of Atoms and Molecules* de G. N. Lewis (1923)". JENSEN, W. B., "The Traité of the Third Chemical Revolution. A Tribute to 'Valence and the Structure of Atoms and Molecules'", en:

<http://www.che.uc.edu/jensen/W.%20B.%20Jensen/Unpublished%20Lectures/Chemistry/05.%20G.%20N.%20Lewis%201'.pdf> [consultada el 17-IX-2015]. La traducción es mía.

<sup>172</sup> Cfr. PAULING, L., *op. cit.*, 4-5 y KOHLER JR., R., *op. cit.*, 343-344. Una síntesis sobre las aportaciones de Langmuir puede verse en LANGMUIR, I., "Types of Valence", *Science, New Series*, Vol. 54, No. 1386 (1921), 59-67.

<sup>173</sup> Cfr. FISHER-HJALMARS, I., *Presentation Speech to R. Mulliken Nobel Prize in Chemistry (1966)*, "Nobelprize.org". Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014, en: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html) [consultada el 22-IX-2015].

externa son los más libres y los responsables de las propiedades químicas del elemento.<sup>174</sup>

En 1925 el principio de Bohr sobre los átomos fue aplicado al problema molecular por Robert Mulliken (1896-1986).<sup>175</sup> Mulliken asumió una constitución de las moléculas semejante a la de los átomos, pero que difiere de ésta en que las capas de los electrones de una molécula deben incluir varios núcleos atómicos. El movimiento electrónico alrededor de toda la molécula fue descrito por Mulliken usando el concepto teórico de orbital molecular. El método del orbital molecular se constituyó en un nuevo modo de explicar la naturaleza del enlace químico.<sup>176</sup>

## 4.2 La teoría de los electrones de valencia. El enlace covalente

Lewis mostró que los conocimientos relativos a la estructura atómica podrían adaptarse para proporcionar una base adecuada para los conceptos de enlace en la química inorgánica y orgánica. Con frecuencia, los átomos ganan, pierden o comparten electrones tratando de obtener una configuración electrónica similar a la de los gases nobles más cercanos a ellos en la tabla periódica. Los gases nobles (con excepción del helio) tienen ocho electrones de valencia lo que les confiere una gran estabilidad. Esta observación dio lugar a la regla del octeto según la cual los átomos tienden a ganar, perder o compartir electrones hasta estar rodeados por ocho electrones de valencia. Con base en lo anterior, Lewis describió el enlace químico como un par de electrones compartidos por dos núcleos atómicos a fin de completar ocho electrones en la capa externa o capa de valencia de los átomos involucrados. El carácter polar o iónico de los compuestos químicos es una consecuencia de los diferentes modos en que los átomos comparten electrones.<sup>177</sup>

---

<sup>174</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>175</sup> Cfr. *ibidem*. Mulliken aportó una decisiva contribución al conocimiento de la estructura electrónica de las moléculas mediante el método orbital, según el cual los electrones atómicos amplían sus órbitas para extender su influencia al conjunto de la molécula de la que forman parte. En 1966 fue galardonado con el Premio Nobel de Química.

<sup>176</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>177</sup> Cfr. ROSEMBERG, J. *et al.*, *op. cit.*, 276 y 282 y LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 651.

El enlace iónico es el resultado de la atracción entre iones de carga opuesta. Las cargas de los iones se pueden determinar en términos de la configuración electrónica (estructura electrónica) de los átomos, comparándolos con la configuración electrónica de un gas noble. Los átomos de los elementos metálicos pierden sus electrones más externos fácilmente, mientras que los elementos no metálicos tienden a añadir electrones adicionales. De este modo, pueden formarse cationes y aniones estables y mantener esencialmente sus estructuras electrónicas mientras que se aproximan unos a otros para formar moléculas estables o cristales. El enlace iónico o electrovalente se da cuando se unen dos átomos como consecuencia de la presencia de atracción electrostática entre los iones de distinto signo. En este tipo de enlace uno de los átomos capta electrones del otro.<sup>178</sup>

En los compuestos iónicos, los iones cargados eléctricamente ordinariamente se encuentran distribuidos en una red cristalina neutral. La neutralidad se consigue cuando los iones cargados positivamente (cationes) son exactamente el número necesario para balancear los iones cargados negativamente (aniones). Los cristales de la sal común, por ejemplo, comprenden tantos cationes sodio ( $\text{Na}^+$ ) como aniones cloro ( $\text{Cl}^-$ ). Comparados con los átomos aislados, el catión sodio ha perdido un electrón y el anión cloro lo ha ganado.<sup>179</sup>

Lewis cuestionó la propuesta de representar el enlace en un compuesto polar con una flecha. En el caso del cloruro de potasio, por ejemplo, la representación  $\text{K} \rightarrow \text{Cl}$  significaría que un electrón ha pasado del K a Cl; sin embargo, Lewis sostiene que, aunque pudiéramos rastrear al electrón cuando pasa de K a Cl, el enlace no surge de este recorrido, ya que una carga positiva no atrae solo a una carga negativa, sino a todas las cargas negativas a su alrededor. En una sustancia polar no molecular como el cloruro de potasio, el enlace es electrostático y, en consecuencia, radialmente simétrico. Es decir, un ion individual no guarda ninguna relación especial con ninguno de sus vecinos. El enlace polar es no direccional.<sup>180</sup>

---

<sup>178</sup> Cfr. PAULING, L., *op. cit.*, 6.

<sup>179</sup> Cfr. WEISBERG, M. *et al.*, *op. cit.*

<sup>180</sup> Cfr. HENDRY, R. F., "Two Conceptions of the Chemical Bond", *Philosophy of Science*, Vol. 75, No. 5 (2008), 913.

El enlace covalente se produce cuando dos átomos se unen para alcanzar un octeto estable, compartiendo electrones de la última capa o capa de valencia, de modo que cada elemento que participa en el enlace cumple con la regla del octeto. Los compuestos covalentes son o moléculas individuales o estructuras repetidas indefinidamente. El gas hidrógeno, por ejemplo, consiste de moléculas compuestas de dos átomos de hidrógeno unidas entre sí por un enlace covalente simple; el gas oxígeno está formado por moléculas compuestas de dos átomos de oxígeno y un enlace doble; el metano, por moléculas compuestas de cuatro enlaces simples carbono-hidrógeno equivalentes, y los cristales de dióxido de silicio (arena) por un despliegue indefinido de unidades  $\text{SiO}_2$  unidas covalentemente.<sup>181</sup>

Para la comprensión del enlace que une a una molécula de dos átomos idénticos (enlace homopolar o covalente), Lewis supuso que la configuración más estable de los átomos que componen la molécula podría lograrse por la formación de pares de electrones compartidos por los átomos, de tal forma que para estos electrones ya no sería posible decir si pertenecen a uno u otro átomo. Es decir, se admite que los dos electrones, por el hecho de constituir un enlace, forman parte simultáneamente de las dos configuraciones atómicas. Para expresar de manera simbólica la idea de la combinación química, Lewis utilizó dos puntos como enlace de la unión entre dos átomos de manera que se puede escribir, por ejemplo,  $\text{H} : \text{H}$  para la molécula de hidrógeno. La química molecular se convirtió así en la ciencia del comportamiento de los electrones periféricos de la entidad química. Las propiedades del electrón o de los electrones, en tanto que tales, desaparecen. Es su configuración la que se reconoce como causa directa o indirecta de todas las propiedades químicas.<sup>182</sup>

La teoría de Lewis presenta algunas dificultades explicativas, dado que existen algunas excepciones a la regla del octeto. Por ejemplo, los metales de transición, al formar iones, pierden primero los electrones de la capa de valencia, por tanto, el átomo central no adquiere la configuración de ocho electrones en dicha capa según la regla del octeto. Además, hay especies químicas, como es el caso del ion molecular de hidrógeno ( $\text{H}_2^+$ ), en las cuales basta un solo electrón

---

<sup>181</sup> Cfr. WEISBERG, M. *et al.*, *op. cit.*

<sup>182</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 66-67.

para formar un enlace químico. La teoría de Lewis tampoco consigue dar una explicación para las uniones en las que no queda claro cuál átomo cede y cual recibe un electrón, como es el caso de las uniones químicas entre átomos iguales (unión homopolar), ni para aquellos enlaces en los que el par enlazante debería presentar una repulsión coulombiana. Estas dificultades permanecieron irresueltas hasta las primeras aplicaciones de la mecánica cuántica a los sistemas moleculares.<sup>183</sup>

En la primera parte de este capítulo se intentó mostrar que el análisis químico tenía como objeto el conocimiento de los componentes elementales de las sustancias caracterizándolos mediante las relaciones de masas de sus elementos constitutivos. No obstante, una vez que se hubo franqueado la etapa de la medición de los pesos, en la demarcación intelectual inductiva del químico aparece la idea de interacción, la categoría de relación entre los elementos (partes) de un mismo conjunto (todo). En esta categoría de relación interna es necesario distinguir entre la noción de fuerza de interacción (que puede ser más o menos intensa) y el concepto de valencia química. En efecto, toda representación de la realidad material corpuscular se relaciona con la idea de relación entre las partículas. Esta categoría de relación puede ser considerada ya sea bajo su aspecto de interacción, ya sea bajo su aspecto numérico y geométrico.<sup>184</sup>

A propósito de la intensidad o fuerza de interacción, muy pronto los químicos hablaron de afinidad química, noción que fue objeto de controversia. La afinidad química se refiere a la fuerza que origina una reacción química y la valencia, en cambio, es simplemente el número de enlaces que un átomo dado, en condiciones físico-químicas determinadas, puede establecer con otros elementos. Es particularmente con Edward Frankland (1825-1899) cuando se establece claramente la distinción entre la fuerza de enlace (la afinidad química) y el simple hecho que ese enlace existe.<sup>185</sup>

---

<sup>183</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 651.

<sup>184</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 64.

<sup>185</sup> Cfr. *ibidem*, 65 y FALK, G., "Some Further Considerations in the Development of the Electron Conception of Valence", *Proceedings of the American Philosophical Society*, Vol. 53, No. 213 (1914), 25-26.

La valencia de un átomo muestra el número de corpúsculos o electrones negativos ganados o perdidos por un átomo al formar un enlace químico. Lo importante en la noción de valencia no es tanto que el hidrógeno esté más fuertemente ligado al oxígeno en la molécula de agua que al nitrógeno en la molécula de amoníaco, sino que en el caso de la molécula de agua el oxígeno porta dos átomos de hidrógeno, mientras que en la de amoníaco, el átomo de nitrógeno está ligado a tres átomos de hidrógeno. Es decir, la valencia permite reconocer que los átomos tienen capacidades combinatorias numéricamente definidas.<sup>186</sup>

El enlace de valencia se suele representar por medio de una línea o guion entre los símbolos de dos elementos químicos, significando así la unión entre dos átomos y expresando de una manera concisa varios hechos químicos, aunque tiene una connotación únicamente cualitativa en lo que se refiere a la estructura molecular. Dicho de otro modo, el carácter cualitativo del simbolismo del enlace por medio de un guion tiene un significado propio y eficiente en tanto que sintetiza un conjunto de hechos físicos que serán explicitados ulteriormente como causa de dicho enlace. La explicación de esos hechos y su matematización precisa vendrán más adelante por la aplicación de la mecánica cuántica.<sup>187</sup>

Esta reintroducción del simbolismo del guion entre los átomos de un compuesto químico va acompañada de un nuevo significado. A partir de Lewis, el guion entre dos elementos significa interacción electrónica entre los dos átomos. El guion expresa no solo que hay un enlace sino el modo en que se realiza. El formalismo del guion significa una interacción recíproca de tipo electrónico entre dos átomos, interacción que por naturaleza implica un cambio físico de los átomos en cuestión, ya que cualquier interacción mutua entre dos objetos generalmente provoca una modificación más o menos significativa de las partes comprometidas.<sup>188</sup>

Este sencillo guion reclama una comprensión más profunda, una reflexión más amplia por parte de los químicos. Más allá de una explicación físico-matemática, el simple simbolismo del guion entre dos átomos conlleva a toda una

---

<sup>186</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 65.

<sup>187</sup> Cfr. PAULING, L., *op. cit.*, 4.

<sup>188</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 68.

comprensión de las entidades materiales e, implícitamente, a una visión de conjunto de la articulación en la Naturaleza, por la que se afirma una organización interna, un orden relacional intramolecular. Este orden remite, a su vez, a la estabilidad, a una cierta permanencia de las interacciones atómicas.<sup>189</sup>

La adopción del guion como representación del enlace no solo lleva a reconocer que la sustancia química está estructurada. Significa también que hay una heterogeneidad intrínseca a la molécula, que existen en ésta partes diferentes de otras partes, y que su contigüidad está, por decirlo de algún modo, asegurada por estos famosos guiones. La realidad de la unidad molecular está enteramente ligada a la de enlace químico y a la naturaleza de dicho enlace.<sup>190</sup>

Puede resultar interesante preguntarse cuáles fueron las posibles razones que movieron a los químicos a introducir la categoría de relación interna para una sustancia química caracterizada inicialmente como una composición de elementos. Una vez que se estableció que en una reacción química los pesos totales de los productos permanecen inalterados, se encontró que las sustancias se combinan solamente según proporciones simples expresadas en pesos. Estas regularidades se enunciaron en las leyes de proporciones constantes. Por otra parte, la fórmula empírica indica la composición elemental de una sustancia, pero no proporciona ninguna información sobre la interacción precisa entre los elementos que la constituyen. ¿Sobre qué fundamento categorial de razonamiento inductivo pudieron entonces los químicos proponer la idea de enlace? La única razón parece ser la existencia de la noción de orden estable, de arreglo ordenado permanente, de orden en la naturaleza, que conlleva la idea de relación entre las partes.<sup>191</sup>

### 4.3 Aproximación al concepto de enlace químico

El enlace es un elemento crucial para entender cómo se comporta la materia. El punto de partida de la explicación química es una estructura molecular de la sustancia en cuestión, una estructura molecular que acaba siendo un conjunto de átomos unidos entre sí de una manera determinada por medio de enlaces. Las

---

<sup>189</sup> Cfr. *idem*, 69.

<sup>190</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>191</sup> Cfr. *idem*, 70.

reacciones químicas se entienden en términos de ruptura y formación de enlaces. Los espectros moleculares se explican como surgiendo desde la vibración y rotación de los enlaces. A partir de la mitad del siglo XIX, los químicos comenzaron a explicar el comportamiento de las sustancias en términos de fórmulas estructurales. Estas, al principio, no se entendieron como la representación de hipótesis sobre la disposición de los átomos en el espacio, sino como la codificación de patrones de reacción química o, también, como las conexiones topológicas entre sus átomos. Con el progreso de la estereoquímica a finales del siglo XIX vino también un resurgimiento de las fórmulas estructurales.<sup>192</sup>

En su libro *Valence and the Structure of Atoms and Molecules* (1923), Lewis trata sobre la oposición de las dos grandes teorías del siglo XIX relacionadas con la afinidad. En la teoría electroquímica, la afinidad surge de la transferencia de electricidad entre átomos: la atracción entre cargas opuestas explica la estabilidad del compuesto. Según Lewis, la electrólisis permite establecer un vínculo entre la electricidad y la combinación química, aunque esto no aplica en especies homonucleares (compuestas por un solo elemento) como el H<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>. Por su parte, la tradición estructural, se centra en la capacidad de combinación de los átomos. Como ya se ha señalado, al introducir el concepto de valencia, Lewis explicó que, en una molécula orgánica, la valencia representa el número fijo de enlaces que une a un determinado átomo con otros átomos. El enlace no es para el químico orgánico una mera abstracción, sino una realidad física definida, un “algo” que une un átomo a otro, aunque aún queda por determinar la naturaleza física del enlace.<sup>193</sup>

El enlace juega un papel importante en las predicciones, intervenciones y explicaciones químicas, no obstante, es un concepto difícil de definir con precisión. Existen diferencias fundamentales entre la concepción clásica del enlace químico y la concepción de la mecánica cuántica, así como diferencias entre los diversos modelos de la mecánica cuántica. En la medida en que se profundiza en los distintos tratados sobre el tema, se van encontrando muchas aproximaciones

---

<sup>192</sup> Cfr. HENDRY, R. F., *op. cit.*, 909.

<sup>193</sup> Cfr. *idem*, 911.

teoréticas, pero pocas caracterizaciones directas sobre el enlace y casi ninguna definición del mismo. Esta situación parece poner de manifiesto la incertidumbre o tal vez la ambivalencia sobre el estatus del enlace químico.<sup>194</sup>

Este tipo de ambigüedades ha llevado a los químicos a diferentes conclusiones. Muchos químicos adoptan una postura pragmática y se conforman con que las teorías sobre el enlace sean útiles para hacer predicciones y contribuyan a la síntesis de nuevas moléculas. El estatus ontológico que subyace al enlace químico carece de interés, y no se da una respuesta a las cuestiones fundamentales sobre la naturaleza del enlace químico.<sup>195</sup>

Otros químicos asumen una postura escéptica, entre ellos algunos de los fundadores de la química cuántica. Mulliken, por ejemplo, afirmó que el enlace químico no es tan simple como parece pensarse, y Charles Coulson (1910-1974)<sup>196</sup> declaró que el enlace químico es “una ficción de nuestra imaginación”.<sup>197</sup> Estos químicos pensaban que el progreso de la mecánica cuántica mostraba que hay algo deficiente en la noción química de enlace lo cual parece difícil de aceptar dada la utilidad y omnipresencia del concepto de enlace.<sup>198</sup>

El escepticismo de Coulson y Mulliken lleva a plantear algunas cuestiones filosóficas sobre la naturaleza del enlace químico y de la estructura molecular. ¿Son reales los enlaces químicos? Si lo son, ¿debemos pensar en ellos como una entidad? Si los enlaces no son reales, ¿lo es el fenómeno del enlace? En caso de serlo, ¿cómo debe ser caracterizado este fenómeno? ¿Cuál es la relación entre estructura molecular y enlace? El intento de respuesta a estas preguntas necesariamente debe tener en cuenta tanto el análisis y la argumentación filosófica como un examen

---

<sup>194</sup> Cfr. WEISBERG, M., “Challenges to the Structural Conception of Chemical Bonding”, *Philosophy of Science*, No. 75 (2008), 933.

<sup>195</sup> Cfr. *idem*, 934.

<sup>196</sup> Coulson fue un pionero en la aplicación de la teoría cuántica de valencia a problemas de estructura molecular, dinámica y reactividad. Cfr. COULSON, CH. A., *Early Ideas in the History of Quantum Chemistry* en:

<http://www.quantum-chemistry-history.com/Coulson1.htm> [consultada el 17-IX-2015].

<sup>197</sup> Tal parece que, para estos autores, el enlace químico cumple una función de cualidad oscura que nos permite generar modelos funcionales, pero cuya matriz ontológica es dudosa o, al menos, incognoscible.

<sup>198</sup> Cfr. WEISBERG, M., *op. cit.*, 934-935.

cuidadoso de la teoría química misma. Este último aspecto se presenta complicado dadas las numerosas teorías de variada complejidad que se han desarrollado para explicar la estructura molecular y la naturaleza del enlace.<sup>199</sup>

#### 4.4 El concepto de enlace y la química cuántica

La concepción de enlace covalente como un par de electrones compartidos resultó ser muy útil para los químicos, en concreto para el desarrollo de los mecanismos de reacción en la química orgánica. Sin embargo, la idea fundamental sobre la concepción de enlace de Lewis resulta paradójica si se tienen en cuenta las leyes clásicas de la física que se refieren a las propiedades de las partículas cargadas eléctricamente. ¿Cómo pueden dos electrones cargados negativamente formar un enlace cuando, de acuerdo con la ley de Coulomb, deberían repelerse entre sí?<sup>200</sup>

Una posible solución a este problema parecía encontrarse en la aplicación de la mecánica cuántica ya que esta considera las moléculas como sistemas de electrones y núcleos que interactúan electrostáticamente. Bajo esta premisa, el enlace covalente podría explicarse como la participación de una acumulación de carga electrónica entre los núcleos, lo que permitiría a los electrones ser atraídos por ambos núcleos al mismo tiempo a la vez que se reduciría su energía potencial.<sup>201</sup>

Linus Pauling (1901-1994) fue uno de los primeros químicos en aplicar las nociones de la mecánica cuántica para explicar la naturaleza del enlace químico. Para Pauling “existe un enlace químico entre dos átomos o grupos de átomos cuando las fuerzas que actúan entre ellos son tales que dan lugar a la formación de un agregado con la suficiente estabilidad para que el químico pueda considerarlo una especie molecular independiente”. Con esta definición se incluyen dentro de la categoría “enlace químico” no solo el enlace de valencia dirigido, de los químicos orgánicos, sino también aquellos enlaces en los que se

---

<sup>199</sup> Cfr. *idem*, 935.

<sup>200</sup> Cfr. NEEDHAM, P., “The Source of Chemical Bonding”, *Studies in History and Philosophy of Science*, No. 45 (2014), 1. Cfr. también *supra* 89.

<sup>201</sup> Cfr. *ibidem*.

puede asignar a cada uno de dos átomos o grupos de átomos una estructura electrónica definida, esencialmente independiente de la presencia del otro átomo o grupo, y de tal manera que las interacciones electrostáticas conducen a una fuerte atracción y a la formación de un enlace químico.<sup>202</sup>

La definición de Pauling manifiesta también la existencia de fuerzas entre los átomos o las agrupaciones de átomos en cuestión y que la existencia del enlace es concomitante a las fuerzas que actúan. Hay una relación de causa efecto entre la existencia de fuerzas actuantes o interacciones y el enlace. El autor no nos dice que el enlace es una fuerza o un conjunto de fuerzas, sino que el enlace existe cuando estas fuerzas actúan. Es decir, el enlace es un efecto de la acción de fuerzas, es el resultado de una actualización de lo que los físicos llaman fuerza. Estas fuerzas son de naturaleza electromagnética. Siendo el enlace el resultado de interacciones recíprocas, hablar de cambio cualitativo no es inexacto. El enlace químico puede entenderse como una alteración física, un cambio que hace posible que exista un cierto tipo de unidad.<sup>203</sup>

La formación de un enlace puede considerarse como un evento estabilizante, de hecho, como un efecto definitorio. El enlace químico es el proceso físico responsable de las interacciones entre átomos y moléculas, y confiere estabilidad a los compuestos químicos. Si dos átomos pueden alcanzar la energía para formar un enlace, entonces los átomos serán más estables juntos de lo que serían cada uno por separado. Por lo anterior, se puede hablar de molécula cuando la estabilidad del agregado es suficiente, y cuando ésta existe, entonces se puede hablar de independencia. La independencia se funda sobre la estabilidad del compuesto químico.<sup>204</sup>

Pero la interacción enlazante tiene un límite. Según Pauling, no toda interacción entre dos átomos o grupos de átomos es necesariamente un enlace

---

<sup>202</sup> Cfr. PAULING, L., *op. cit.*, 6: *We shall say that there is a chemical bond between two atoms or groups of atoms in case that the forces acting between them are such as to lead to the formation of an aggregate with sufficient stability to make it convenient for the chemist to consider it as an independent molecular species.* La traducción es mía.

<sup>203</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 73.

<sup>204</sup> Cfr. BERSON, J. A., "Molecules with Very Weak Bonds: The Edge of Covalency", *Philosophy of Science*, Vol. 75, No. 5 (2006), 952.

químico. Es el caso, por ejemplo de las fuerzas de Johannes Diderik van der Waals (1837-1923), que son distintas y relativamente débiles comparadas con las de los enlaces químicos.<sup>205</sup>

#### 4.4.1 Principios generales de la mecánica cuántica y su aplicación al concepto de enlace químico

Louis de Broglie (1892-1987) propuso que no solo la luz tiene las propiedades duales de ondas y partículas, sino que también las partículas de la materia poseen propiedades ondulatorias. Por tanto, para describir las propiedades de la materia, así como las de la luz, las ondas y los corpúsculos deben referirse uno al otro y al mismo tiempo. El electrón ya no puede ser concebido, como una pequeña partícula eléctrica; debe asociarse a una onda; la longitud de la misma puede ser medida y sus interferencias pueden predecirse.<sup>206</sup>

La mecánica cuántica describe el estado instantáneo de un sistema (estado cuántico) con una función de onda que codifica la distribución de probabilidad de todas las propiedades medibles u observables. Entre estas posibles propiedades observables en un sistema dado podemos mencionar la energía, la posición, el momento y el momento angular. La mecánica cuántica no asigna valores definidos a dichas propiedades, sino que hace predicciones sobre sus distribuciones de probabilidad dentro de un intervalo de valores numéricos. La interferencia de las funciones de onda permite explicar las propiedades ondulatorias de la materia.<sup>207</sup>

El objeto fundamental de la química cuántica es describir, según el formalismo matemático de la mecánica cuántica, la estructura interna de los átomos y las moléculas. Aunque la noción de enlace químico ha sido un concepto fundamental anterior al desarrollo de la mecánica cuántica, actualmente los químicos explican el hecho del enlace adoptando la noción de interacción orbital, que es una aplicación a la química de la mecánica ondulatoria.<sup>208</sup>

---

<sup>205</sup> Cfr. *idem*, 947-948.

<sup>206</sup> Cfr. DE BROGLIE, L., *The Wave Nature of the Electron* en: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1929/broglie-lecture.pdf](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1929/broglie-lecture.pdf) [consultada el 24-IX-2015].

<sup>207</sup> Cfr. ROSEMBERG, J. *et al.*, *op. cit.*, 114.

<sup>208</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 652.

La química cuántica se desarrolló inicialmente con el propósito de explicar la unión homopolar,<sup>209</sup> fenómeno que constituía, como ya se ha señalado, una de las dificultades de la teoría clásica de Lewis. Para esto se utilizó la ecuación cuántica del estado estacionario, conocida como ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$H\Psi = E\Psi$$

en donde  $\Psi$  es la función de onda del sistema,  $E$  designa la energía de la partícula o las partículas del sistema considerado,  $H$  es un operador diferencial llamado Hamiltoniano. La resolución de esta ecuación proporciona una función de onda ( $\Psi$ ) que permite el cálculo de todas las magnitudes físicas características del edificio molecular (magnitudes observables).<sup>210</sup>

Esta función de onda, según los físicos, no tiene sentido físico en ella misma, pero  $|\Psi|^2$ , el cuadrado de su módulo o producto escalar, representa la probabilidad de encontrar la partícula en el instante  $t$  en las coordenadas correspondientes. Es como si la partícula hubiese perdido su ubicación precisa individual para ser reemplazada por una nube continua de densidad  $|\Psi|^2$ . Ni el desarrollo matemático de la ecuación de Schrödinger ni el detalle de la construcción del operador Hamiltoniano son necesarios para este trabajo. El estudio matemático de las soluciones de la ecuación de Schrödinger muestra que la energía no puede tomar valores continuos, lo que se traduce por la existencia de niveles discretos de energía.<sup>211</sup>

La solución a la ecuación de Schrödinger relativa al átomo más simple, el hidrógeno (o los iones hidrogenoides  $\text{He}^{2+}$ ,  $\text{Li}^{3+}$ , etc.), que posee un solo electrón, proporciona soluciones para los estados estacionarios que se agrupan en familias de energía. De una manera general se obtienen  $n^2$  funciones de onda para la familia de energía:  $-Z^2 / (2n^2)$ , siendo  $Z$  la carga nuclear y  $n$  un entero positivo. Estas funciones se denominan orbitales atómicos. El ensamble de los orbitales correspondiente al mismo valor de  $n$  forma una capa. Así, para  $n = 1$ , la función

---

<sup>209</sup> Cfr. *supra*, 93.

<sup>210</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J. C., *op. cit.*, 652.

<sup>211</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 76.

de onda es de simetría esférica y se denomina 1 s. Para  $n = 2$  la función de onda es de simetría esférica 2s y tres funciones 2p, denominadas 2px, 2py y 2pz correspondientes a tres ejes de rotación. Para  $n = 3$  hay una función de simetría esférica (3s) y tres funciones del tipo p: (3p) y cinco funciones de estructura más compleja: 3d. Una magnitud significativa derivada de la función orbitalar es la densidad de probabilidad de presencia del electrón que describe en el espacio que rodea al núcleo.<sup>212</sup>

La ecuación de Schrödinger funciona bien para el átomo de hidrógeno (con un protón y un electrón), pero no puede resolverse con exactitud para el caso de átomos que tengan más de un electrón. Los químicos y los físicos han debido superar esta dificultad con métodos de aproximación, los cuales contienen algoritmos particulares que permiten generar las funciones de onda características tanto de la teoría del enlace de valencia como de la teoría del orbital molecular.<sup>213</sup>

En el caso de la teoría del enlace de valencia, los electrones de los átomos que constituyen las moléculas tienen una ubicación localizada, es decir, se encuentran asociados a un núcleo particular. Esta característica aparece reflejada en la combinación lineal de las funciones de onda de los átomos de las moléculas. En cambio, en la teoría del orbital molecular —que considera a las moléculas como sistemas—, los electrones de los átomos que constituyen las moléculas ya no pueden ser localizados en torno a un único núcleo, sino que se encuentran deslocalizados en la molécula completa. De aquí que las funciones de onda que describen el sistema deberán incluir componentes que asocian los mismos electrones con más de un núcleo.<sup>214</sup>

#### 4.4.1.1 La teoría del enlace de valencia desde la perspectiva de la mecánica cuántica

La primera aplicación de la mecánica cuántica a sistemas químicos, como ya se señaló, fue desarrollada por Heitler y London en 1927 y se ha convertido en la base para trabajos posteriores.<sup>215</sup>

---

<sup>212</sup> Cfr. *idem*, 78.

<sup>213</sup> Cfr. CHANG, R. & GOLDSBY, K. A., *op. cit.*, 297.

<sup>214</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 653.

<sup>215</sup> Cfr. *supra*, 90.

Para construir la función de onda que permita resolver la ecuación de Schrödinger, estos autores toman como punto de partida el clásico caso del enlace covalente que es el de la molécula de hidrógeno, a la cual consideran como un sistema compuesto de dos núcleos y dos electrones completamente separados. La molécula de  $H_2$  se forma por la superposición de las funciones de onda de los electrones de los respectivos átomos de hidrógeno. La superposición produce un aumento en la densidad electrónica en la región entre los dos núcleos formándose un enlace sigma ( $\sigma$ ).<sup>216</sup>

La función de onda  $\Psi$  para la molécula de hidrógeno descrita en términos de funciones de onda  $\Psi_{H1}$  y  $\Psi_{H2}$  puede representarse:

$$\Psi = \Psi_{H1} \Psi_{H2}$$

Si incluimos explícitamente la localización del electrón de valencia para cada función de onda atómica:

$$\Psi = \Psi_{H1}(1s^1_{H1}) \Psi_{H2}(1s^1_{H2})$$

A medida en que los dos átomos de H se aproximan entre sí y se produce el solapamiento de los orbitales, los electrones  $1s^1_{H1}$  y  $1s^1_{H2}$  se convierten en partículas indistinguibles, entonces:

$$\Psi = \Psi_{H1}(1s^1_{H2}) \Psi_{H2}(1s^1_{H1})$$

Dado que las dos descripciones son igualmente admisibles, el verdadero estado del sistema se describe más exactamente como una combinación lineal de ambas:

$$\Psi = N [ \Psi_{H1}(1s^1_{H1})\Psi_{H2}(1s^1_{H2}) \pm \Psi_{H1}(1s^1_{H2})\Psi_{H2}(1s^1_{H1}) ]$$

Para obtener la energía del enlace de hidrógeno molecular, la resolución de la ecuación de Schrödinger ( $H \Psi = E \Psi$ ) con esta función  $\Psi$  mostró que la energía del sistema proviene, en su mayor parte, de la naturaleza mecánico cuántica

---

<sup>216</sup> El enlace sigma ( $\sigma$ ) es el tipo más fuerte de enlace covalente y con mayor estabilidad. Se forma por hibridación de orbitales atómicos.

del mismo y puede ser descrita como la energía de resonancia correspondiente al intercambio de los dos electrones pronosticada para el enlace de valencia.<sup>217</sup>

Aunque la demostración de la naturaleza mecánico-cuántica del enlace químico fue realizada por Heitler y London, sin embargo, fue Pauling quien relacionó este método con las estructuras estáticas propuestas por Lewis, interpretando los estados mecánico-cuánticos de la molécula como las superposiciones de los estados correspondientes a las estructuras clásicas. Por tanto, según Pauling, la concepción del enlace de valencia de la mecánica cuántica no se aparta de la de la química estructural pues cada término de la función de onda se corresponde con una estructura química definida.<sup>218</sup>

El éxito de la versión mecánico-cuántica de la teoría del enlace de valencia se debe a que permite interpretar, predecir y explicar de forma muy simple, propiedades importantes de las moléculas. Para el modelo del enlace de valencia, el apareamiento de los electrones alojados ya sea en orbitales atómicos o híbridos es lo que permite la unión entre dos átomos. Sin embargo, no todos los tipos de enlace ni todas las propiedades de las moléculas se pueden explicar adecuadamente mediante los modelos de enlaces localizados; un ejemplo bien conocido es el del benceno.<sup>219</sup>

#### 4.4.1.2 La teoría del orbital molecular

Al mismo tiempo que se desarrollaba la teoría del enlace de valencia, Friedrich Hund (1896-1997) y Mulliken propusieron la teoría del orbital molecular, que surgió como un enfoque alternativo para diseñar las funciones de onda para resolver la ecuación de Schrödinger para una molécula. En la mecánica cuántica, el término orbital designa la función orbital para la solución de la ecuación de Schrödinger de un electrón, basada en la atracción del núcleo sobre el electrón más el promedio de la repulsión de los demás electrones. La teoría del

---

<sup>217</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 652-654.

<sup>218</sup> Cfr. *idem*, 654 y HENDRY, R. F., “Two Conceptions of the Chemical Bond”, *op. cit.*, 914 y 917.

<sup>219</sup> Cfr. ALCANIZ, E., *Enlace químico y estructura de la materia*, Universidad de Valencia, en: <http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/EQEM.htm> [consultada el 1-octubre-2015].

orbital molecular considera que los orbitales moleculares pertenecen a la molécula como a un todo más que como átomos individuales.

Cuando ocurre un enlace simple entre dos átomos, el par de electrones que forma el enlace ocupa un orbital molecular que es la combinación matemática de las funciones de onda de los orbitales atómicos de los dos átomos involucrados. Para calcular la función de onda de un electrón, es necesario tener en cuenta que, si este se encuentra cerca de un núcleo particular dentro del sistema molecular, actúan sobre él tanto las fuerzas del núcleo como las de los electrones cercanos al mismo, por lo que es necesario asumir la función de onda de los otros electrones. La manera más apropiada para representar lo anterior es mediante una combinación lineal de orbitales atómicos para cada electrón. Esta función de onda se denomina orbital molecular, y a ello debe su nombre esta teoría.<sup>220</sup>

Los orbitales atómicos y los orbitales moleculares coinciden en varias de sus características. Por ejemplo, un orbital molecular puede contener como máximo dos electrones (con espines opuestos) y tiene una energía definida. Al igual que un orbital atómico es una función de onda que describe los electrones de los átomos, un orbital molecular es una función de onda que describe a los electrones de la molécula; sin embargo, a diferencia de los orbitales atómicos, los orbitales moleculares están asociados a la molécula entera y no a un solo átomo.<sup>221</sup>

Para explicar la teoría del orbital molecular utilizaremos de nuevo como ejemplo la molécula de H<sub>2</sub> que es la más sencilla. Cuando dos átomos de hidrógeno simples, cada uno con un orbital atómico, se combinan, se forman dos orbitales moleculares: uno de enlace y otro de antienlace.<sup>222</sup>

El orbital molecular de enlace es el resultado de la suma de los dos orbitales atómicos de modo que sus funciones se refuerzan mutuamente en la región de enlace. Tiene menor energía y mayor estabilidad que los orbitales atómicos que lo forman; sin embargo, la densidad electrónica entre los núcleos es

---

<sup>220</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 655 y MULLIKEN, R. S., "Spectroscopy, Molecular Orbitals, and Chemical Bonding", *Nobel Lecture*, en: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1966/mulliken-lecture.pdf](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/mulliken-lecture.pdf) [consultada el 1-octubre-2015].

<sup>221</sup> Cfr. BROWN, TH. *et al.*, *op. cit.*, 343.

<sup>222</sup> Cfr. *ibidem*.

máxima, lo que da como resultado una función simétrica respecto del plano de los dos núcleos ( $\Psi^s$ ). En el orbital molecular de antienlace, los orbitales se cancelan mutuamente en la región entre los núcleos y la densidad electrónica mayor se desplaza a los lados opuestos a los mismos. Tienen mayor energía y poca densidad electrónica entre los núcleos lo que da como resultado una función asimétrica ( $\Psi^a$ ). Este orbital molecular excluye a los electrones de la región en la que se debe formar un enlace.<sup>223</sup>

La función de onda se puede representar como sigue:

$$\Psi^s = \Psi_{H1} + \Psi_{H2} \quad \text{o} \quad \Psi^a = \Psi_{H1} - \Psi_{H2}$$

Al igual que los orbitales atómicos, cada orbital molecular puede dar cabida a dos electrones con sus espines apareados (principio de exclusión de Pauli).<sup>224</sup>

El mejor modo de representar la ecuación de onda para la molécula de hidrógeno que resulta de la combinación de orbitales moleculares y en la que los dos electrones se encuentran en el orbital molecular de enlace  $\Psi$ :<sup>225</sup>

$$\Psi = \Psi(1)\Psi(2) = [\Psi_{H1}(1) + \Psi_{H2}(1)][\Psi_{H1}(2) + \Psi_{H2}(2)]$$

El hidrógeno tiene dos electrones de enlace y ninguno de antienlace. De acuerdo con la teoría del orbital molecular, el hidrógeno forma moléculas diatómicas.

El que los orbitales moleculares se puedan describir en función de una combinación de orbitales atómicos se fundamenta en la misma base física que explica por qué cuando un electrón está cerca del núcleo de un átomo dado, su función de onda debe de parecerse a un orbital atómico de dicho átomo.<sup>226</sup>

Resulta interesante señalar, desde otra perspectiva, la diferencia entre la teoría del enlace del orbital molecular y la teoría del enlace de valencia. Así como en la teoría del enlace de valencia, los electrones ocupan orbitales atómicos, en la teoría del enlace molecular los electrones ocupan orbitales moleculares. Mientras

---

<sup>223</sup> Cfr. *idem*, 343-344.

<sup>224</sup> Cfr. *idem*, 344.

<sup>225</sup> Cfr. ALCANIZ, E., *op. cit.*

<sup>226</sup> Cfr. *ibidem*.

que en la teoría del enlace de valencia los orbitales atómicos se combinan a través del producto de las funciones de onda que los representan, en la teoría del orbital molecular, son los orbitales moleculares los que se combinan a través del producto de las funciones de onda que los representan. Se trata de dos modos distintos de concebir la molécula que dan lugar a distintos estados desde el punto de vista cuántico, y no de dos teorías que proponen, bajo distintas bases, un mismo estado cuántico molecular. Puede entenderse entonces por qué, en muchos casos, las dos teorías proporcionen diferentes resultados. En definitiva, el enfoque de la teoría del orbital molecular brinda una descripción de un sistema molecular totalmente distinta a la que proporciona la teoría del enlace de valencia. Para la teoría del orbital molecular, las moléculas, en tanto moléculas, son un todo; no pueden identificarse en ella componentes atómicos pues los electrones no están localizados en orbitales atómicos sino en orbitales moleculares deslocalizados alrededor de la molécula entera.<sup>227</sup>

#### 4.4.2 Partículas indiscernibles e interacciones localizadas

Al adoptar la mecánica cuántica para describir más rigurosamente los modelos moleculares, los químicos debieron en cierto modo heredar la problemática epistemológica del dualismo onda-partícula y el de la localización determinada o no de los electrones. Sin embargo, la aplicación de la mecánica cuántica a la química molecular no invalida el hecho del carácter local de las interacciones electrónicas enlazantes. ¿Cómo se produce entonces el paso de lo no localizable cuántico y de lo indiscernible de los electrones, a lo localizable en la química molecular teórica?<sup>228</sup>

Por lo dicho hasta ahora, hemos constatado que los físicos y los químicos teóricos del enlace covalente, lejos de ignorar, explotan el concepto de no localización de las partículas de la mecánica ondulatoria estableciendo, por procedimientos de aproximación, el de localización relativa del enlace covalente representado clásicamente de manera simbólica mediante una tira entre dos átomos.

---

<sup>227</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., *op. cit.*, 655-656 y MULLIKEN, R. S., *op. cit.*

<sup>228</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 87-91.

La probabilidad de la presencia de un electrón comprometido en una combinación atómica o molecular es representada por la formalización matemática de la física cuántica por lo que se llama nube electrónica. Max Born (1882-1970) fue uno de los primeros en señalar que la expresión matemática de esta densidad electrónica a una distancia del núcleo permite definir las zonas de igual densidad que rodean al núcleo. Esta nube o densidad de presencia es una porción del espacio descrita por el carácter formalmente geométrico de la ecuación de onda, porción de espacio al interior de la cual el electrón tiene mayor probabilidad de encontrarse realmente. La nube electrónica tiene una ubicación particular bien definida; se trata de una porción de espacio cargada, y esta porción de espacio está localizada y delimitada. Aceptar la definición de orbital atómico o molecular y el concepto de nube electrónica lleva a reconocer la existencia de una localización real, aunque relativa, del electrón en una porción de espacio descrita geoméricamente y localizable experimentalmente por una reactividad determinada de las entidades moleculares.

## 5. El isomerismo y la estereoquímica

### 5.1 El isomerismo

Una buena parte de la literatura relacionada con la estructura molecular y la geometría trata del tema del enlace, sin embargo, hay también cuestiones importantes sobre la noción misma de estructura molecular. Como ya se ha señalado, la teoría estructural surgió cuando la multiplicidad de los compuestos orgánicos hizo necesaria una racionalización diferente a la propuesta por la teoría electroquímica de Berzelius que explicaba satisfactoriamente los compuestos inorgánicos conocidos.<sup>229</sup>

Los isómeros, sustancias que teniendo los mismos átomos en la misma proporción y con el mismo peso molecular presentan propiedades diferentes, fueron descubiertos por Justus von Liebig (1803-1873) y Friedrich Wöhler (1800-

---

<sup>229</sup> Cfr. BALABAN, A. T., "Visual Chemistry: Three-Dimensional Perception of Chemical Structures", *Journal of Science, Education and Technology*, Vol. 8, No. 4 (1999), 251.

1882). El fenómeno de isomería muestra que los pesos y la composición atómica no son siempre suficientes para caracterizar las especies químicas; es evidente que los átomos pueden enlazarse de modo distinto en una molécula. A menudo es suficiente que esta diferencia comporte un cambio en la disposición de dos átomos para modificar significativamente las propiedades de la molécula. Estas diferencias pueden situarse también simplemente al nivel de la orientación o dirección de un solo enlace entre dos átomos determinada espacialmente. Lo anterior apunta a concluir que las interacciones interatómicas o enlaces en una molécula dada, son causa de sus propiedades y que éstas están relacionadas con las configuraciones. La configuración estructural no es simplemente una representación abstracta convencional, un modelo explicativo de carácter conjetural. El arduo trabajo y la genial intuición de los químicos lograron los milagros de la comprensión de la constitución de la materia y de conseguir descifrar cómo los átomos están conectados en moléculas mucho antes que la difracción de rayos X y la microscopía de efecto túnel permitieran ver que las fórmulas moleculares corresponden exactamente a la realidad.<sup>230</sup>

## 5.2 La estereoquímica

El objeto de la estereoquímica es la molécula en tanto que organizada espacialmente. Esta ciencia establece las posibles correlaciones existentes entre la organización espacial de un sistema molecular y sus propiedades físico-químicas. La estereoquímica tiene una importancia teórica y práctica de primer orden pues constituye una herramienta clave para el estudio de los mecanismos de reacción y para la elaboración de estrategias para síntesis moleculares complejas.<sup>231</sup>

El estereoquímico considera que, bajo determinadas condiciones físicas en las que el compuesto químico es estable, tanto las longitudes de los enlaces como los ángulos de los mismos no varían. No obstante, la organización espacial de la molécula jamás es rígida, sino que posee un carácter dinámico bastante complejo. La molécula es una realidad dinámico-estructural que posee una cierta capacidad

---

<sup>230</sup> Cfr. BALABAN, A. T., *op. cit.*, 251-252 y MANFREDI, A., *op. cit.*, 99.

<sup>231</sup> Cfr. RAMBERG, P., "Arthur Michael's Critique of Stereochemistry, 1887-1899", *Historical Sources in the Physical and Biological Sciences*, Vol. 26, No. 1 (1995), 89.

de deformarse debido a la libre rotación de los enlaces  $\sigma$  (covalentes simples), lo que permite que pueda tomar toda una serie de posibles formas espaciales. Éstas son infinitas para cualquier compuesto orgánico saturado cuya cadena posea al menos dos átomos de carbono. Las diversas disposiciones no idénticas de la molécula obtenidas por la rotación de uno o más enlaces se designan con el nombre de conformación.<sup>232</sup>

La estereoquímica teoriza, por tanto, un aspecto de la molécula: su capacidad de deformarse. Y este hecho no podría ser objeto de estudio si no se considerara que la molécula, en tanto que tal, es un todo espacialmente organizado. Si no fuera así, la posibilidad de deformación del sistema no tendría sentido. De hecho, una parte de un todo se mueve con respecto a otra parte si estas dos partes, junto con muchas otras, se consideran como formando de alguna manera un todo unitario. La noción de deformación remite implícitamente a la idea de una relación concomitante de una parte con un todo y con otras partes. El concepto de conformación reclama el de unidad.<sup>233</sup>

En estereoquímica podemos hablar de partes de un conjunto más amplio, de *partes extra partes*, de situación espacial, de lugar, de posición, de localización de una parte de un todo por relación con otra. Los objetos de la estereoquímica pueden considerarse fácilmente dentro del ámbito de las entidades tangibles percibidas por el sentido común. Implícitamente se confirma la idea de delimitación espacial de la entidad molecular. La molécula ocupa un lugar delimitado por el hecho de poseer una estructura tal que los estereoquímicos deducen de mediciones y cálculos de ángulos y longitudes de enlace entre los compuestos atómicos.<sup>234</sup>

---

<sup>232</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 101.

<sup>233</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>234</sup> Cfr. *idem*, 103.

## 6. La cuestión de la realidad objetiva de los modelos moleculares

La realidad es compleja y, para poder estudiarla científicamente, debemos recurrir a simplificaciones que representen de manera conveniente los aspectos que nos interesan de esa realidad. En todas las ramas de la ciencia se emplean modelos: algunos tienen un carácter muy matemático, y otros, en cambio, son representaciones que nos permiten figurarnos esquemáticamente aspectos centrales del objeto de estudio.<sup>235</sup>

Los modelos son construcciones teóricas que representan sistemas o propiedades. En cuanto representaciones, no son una traducción exacta y completa de la realidad. Evidentemente, existe una gran variedad de modelos, misma que permite distinguir al menos dos niveles de teorización. Un primer nivel en el que los conceptos y enunciados de la teoría se refieren a una modelización que tiene una relación directa con los fenómenos experimentales. Estas modelizaciones llamadas fenomenológicas son elaboradas directamente a partir de datos observables (por ejemplo, presión, temperatura, volumen, etc.). El segundo tipo de modelizaciones, denominadas representacionales, se refieren a datos no observables (por ejemplo, el número de partículas atómicas o moleculares en un volumen de un gas) es decir, remiten indirectamente a la experiencia a través de enunciados que están ligados a magnitudes observables.<sup>236</sup>

---

<sup>235</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia*, 2ª. ed., EUNSA, Pamplona 2009, 200.

<sup>236</sup> Cfr. ARTIGAS, M., “Los límites del lenguaje científico”, en ORTIZ, J.M., (ed.), *Veinte claves para la nueva era*, Rialp, Madrid 1992, 130. En su artículo “Models in Science”, Roman Friggs y Stephan Hartmann consideran que los modelos científicos pueden ser teóricos cuando son una representación o realización de una ley general; o bien, representacionales, que a su vez pueden ser modelos de fenómenos (por ejemplo, el modelo atómico de Bohr) y modelos de datos (por ejemplo, la representación gráfica de la línea que une los puntos del recorrido orbital de un planeta). Para estos autores, sin embargo, a pesar del importante papel que desempeña la modelización en la ciencia, este remite a una serie de cuestionamientos en diversos ámbitos de no fácil solución, por ejemplo, ¿qué son los modelos? (ontología), ¿qué y cuál es el alcance de lo que conocemos a través de los modelos? (epistemología), ¿de qué modo se relacionan los modelos con la teoría?, ¿cuáles son las implicaciones de los modelos en los debates sobre el realismo científico, el reduccionismo, explicaciones y leyes de la naturaleza? (filosofía de la ciencia). Cfr. FRIGGS, R. & HARTMANN, S., “Models in Science”, *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2012 Edition),

La construcción y uso de modelos representacionales es una actividad central en la formación de la teoría química. Estos modelos hacen visible, de algún modo, el mundo invisible del átomo y la molécula. La cuestión ahora es la siguiente: ¿las modelizaciones moleculares de tipo estructural corresponden efectivamente a la realidad objetiva de las especies químicas?, ¿qué tipo de correspondencia existe entre estos modelos y la realidad que intentan explicar?<sup>237</sup> En artículos recientes autores como Peter Ramberg, Eric Francoeur, Giuseppe Del Re, Pawel Zeidler, tratan de esta cuestión.<sup>238</sup> ¿Cuál es el estatus ontológico que se puede atribuir a los modelos moleculares? Las interpretaciones de estos autores sobre el fundamento real de los modelos estructurales apuntan a sostener que el carácter espacial de los modelos tiene una correspondencia directa con la realidad de la especie química concreta.

Antes de entrar en la discusión sobre el carácter realista de las modelizaciones moleculares, parece necesario precisar lo que se entiende por realidad química. ¿Qué es la realidad química? Para responder a esta pregunta y tratar de especificar el tipo de relación que existe entre modelo molecular y realidad química, comenzaremos por lo que comúnmente se denomina realidad.

El problema de la verdad en la ciencia, es decir, el de la correspondencia entre la realidad y la inteligibilidad científica es tan antiguo como la ciencia misma. En el contexto de las metafísicas realistas, el concepto de verdad se atribuye, en primer lugar, a un juicio del intelecto. La existencia de las cosas reales, por otra parte, es independiente del pensamiento humano. No es la objetivación mental la que produce la realidad.<sup>239</sup>

---

Edward N. Zalta (ed.), URL <http://plato.stanford.edu/archives/fall2012/entries/models-science7> [consultada el 16 de noviembre de 2015].

<sup>237</sup> Cfr. RAMBERG, P. J., "Pragmatism, Belief and Reduction. Stereoformulas and Atomic Models in Early Stereochemistry", *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 6 (2000), 35.

<sup>238</sup> Cfr. DEL RE, G., "Ontological Status of Molecular Structure", *HYLE - International Journal for the Philosophy of Chemistry*, Vol. 4 (1998), 81-103, FRANCOEUR, E., "Beyond dematerialization and inscription. Does the materiality of molecular models really matter?", *HYLE - International Journal for the Philosophy of Chemistry*, Vol. 6 (2000), 63-84, RAMBERG, P. J., "Pragmatism, Belief and Reduction. Stereoformulas and Atomic Models in Early Stereochemistry", Vol. 6 (2000), 35-61, ZEIDLER, P., "The Epistemological Status of Theoretical Models of Molecular Structure", *HYLE - International Journal for the Philosophy of Chemistry*, Vol. 6 (2000), 17-34.

<sup>239</sup> Cfr. SANGUINETI, J. J., *Lógica*, 7ª. ed., EUNSA, Pamplona 2007, 187.

Que la realidad química existe, es un hecho. Como mostramos en el capítulo uno, el desarrollo de la química hasta su constitución como ciencia moderna culmina con el aislamiento y la identificación de lo que ahora podemos llamar especies químicas. La experiencia química establece la realidad de una discontinuidad de especies que esta ciencia busca conocer. El reconocimiento de esta discontinuidad es el resultado de todo un esfuerzo de purificación y de aislamiento de entidades inorgánicas diversas durante varios siglos. Esta realidad concreta es la evidencia inicial a partir de la cual, y a propósito de la cual, la inteligibilidad científica puede tener sentido. Es a partir de esta realidad concreta que se intenta precisar la correspondencia entre modelo molecular y entidad química. De lo contrario, la modelización molecular se reduciría a un simple instrumento intelectual que permitiría reagrupar un conjunto de observaciones realizadas en un momento dado bajo condiciones físicas determinadas.<sup>240</sup>

La pregunta sobre la realidad de los átomos y moléculas parece haber recibido, en muchos sentidos, elementos de respuesta concluyentes que podemos encontrar desde los inicios del desarrollo científico de la química. El triunfo del atomismo, por ejemplo, es una de sus más patentes manifestaciones.<sup>241</sup> Actualmente se reconoce que, en numerosos casos, es posible obtener demostraciones rigurosas concernientes a la existencia de entidades corpusculares

---

<sup>240</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 123.

<sup>241</sup> “Sabemos que la descomposición de las especies químicas, cuando se lleva a cabo en la medida de lo posible, ha dado lugar a la definición experimental de un pequeño número de cuerpos simples que siempre pueden recuperarse, sin ningún cambio en su naturaleza, y sin pérdida o ganancia de masa, a partir de las combinaciones a las que se han sometido. Es entonces muy difícil no asumir que, por ejemplo, una y la misma sustancia existe en todas las especies químicas de las que el hidrógeno puede ser recuperado y que pasa oculto, pero indestructible, a través de las diversas reacciones. Dalton suponía, y este es el punto esencial de la hipótesis atómica, que esta sustancia está formada por una variedad determinada de partículas que son todas iguales y que no se pueden dividir en las reacciones que podemos producir, y que por esta razón son llamadas átomos. Hay, por lo tanto, uno o varios átomos de hidrógeno en cada molécula de una especie química hidrogenada”. PERRIN, J., “Discontinuous Structure of Matter”, *Nobel Lecture* (11-XII-192866), Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014, [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1926/perrin-lecture.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1926/perrin-lecture.html) [consultada el 12-XI-2015]. La traducción es mía.

desconocidas anteriormente. Este es precisamente el caso de los elementos químicos y de las moléculas.<sup>242</sup>

A partir del hecho de la discontinuidad real de la materia química, han sido numerosos los científicos que, en sus reflexiones filosóficas sobre la física y la química, no dudan en hablar de individuo, de causa formal, de naturaleza común, de esencias, de sustancias químicas, empleando una terminología claramente filosófica y de una filosofía realista. Cuando el químico describe y caracteriza los cuerpos, lo hace por medio de sus propiedades físicas y químicas: color, dureza, viscosidad, punto de ebullición o solidificación, peso específico, etc. que corresponden a lo que en filosofía clásica llamamos cualidad.<sup>243</sup>

El carácter predecible de las propiedades de una sustancia química todavía por descubrir reclama el hecho del carácter discontinuo de la materia química, su especificidad y también su inteligibilidad en tanto que especie diferenciada, la cual se sigue de una representación teórica realmente fundamentada. Dicho de otro modo, la capacidad predictiva de la modelización molecular (y atómica, iniciada con la clasificación de Mendeleiev) exige un fundamento real.<sup>244</sup>

Existen diferentes tipos de modelos según la diversidad de fenómenos estudiados y las posibilidades de conceptualización y experimentación dadas en un momento determinado, de modo que no hay motivo para utilizar siempre un tipo determinado de modelización. Sin embargo, hay dos características básicas que deben darse en todos los modelos: la referencia y la significación. Los modelos hacen referencia a aspectos concretos de la realidad la cual, a su vez, está condicionada por el modo de especificar las características del modelo: lo que propiamente se estudia en la teoría es el modelo ideal, cuyas propiedades se

---

<sup>242</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>243</sup> Cfr. MANFREDI, A., *op. cit.*, 129.

<sup>244</sup> Cfr. *idem*, 147-148. "Mediante la aplicación del método de la descomposición, Lavoisier y sus sucesores obtuvieron los elementos o cuerpos simples cuyo número (un centenar) es pequeño en comparación con el número inmenso de especies químicas. Se puede hablar, entonces, de leyes de la discontinuidad. La primera anuncia la existencia de sustancias puras. La segunda indica que éstas están formadas por elementos simples en pequeño número. Finalmente puede considerarse también la ley de las proporciones definidas de Proust (las proporciones según las cuales dos cuerpos se combinan no son susceptibles de variación continua) como una ley de la discontinuidad". PERRIN, J., "La chimie physique", *Revue de Métaphysique et de Morale*, Vol. 37, No. 1 (1930), 20. La traducción es mía.

definen por medio de conceptos teóricos. El modelo tiene una significación que se determina teóricamente, y una referencia a la realidad cuyo valor debe juzgarse comparando las conclusiones alcanzadas como consecuencia de la utilización del modelo con los resultados de la experimentación. Es decir, además de formular las definiciones teóricas oportunas, se deben mostrar las prácticas experimentales que proporcionan la base empírica necesaria para la aplicación del modelo; siempre ha de ser posible valorar la correspondencia entre los modelos y los datos experimentales.<sup>245</sup>

## 7. Conclusiones

La química se constituye como ciencia experimental moderna cuando consigue aislar, identificar y caracterizar los elementos. Las prácticas analíticas se perfeccionan y diversifican y, en consecuencia, surge la multiplicación de las sustancias simples, lo que lleva a plantear algunas interrogantes sobre la constitución y transformación de los cuerpos. El enfoque analítico si bien nos dice de qué cosa está hecha una sustancia, no nos dice cómo está hecha, por qué tiene ciertas propiedades y no otras y de dónde le vienen esas propiedades, con frecuencia esenciales.

Dado que la comprensión de los principios últimos de los cuerpos no se encuentra en una descomposición última elemental, la atención de los químicos se orienta al proceso inverso, es decir, a la síntesis: la recombinación y la reestructuración posibilitan una mejor inteligibilidad química.

Esta nueva inteligibilidad se enfoca de manera particular a la teoría de la estructura molecular. A partir de la representación estructural, el químico es capaz de inferir propiedades esenciales como el número, el orden, la unidad, e incluso, como consecuencia de la distribución espacial, la interacción de unas partes respecto a otras. El desarrollo de la química estructural permite, por una parte, evitar reduccionismos de tipo mecanicista en la concepción de las especies químicas y, por otra, poner de manifiesto su dinamismo. La modelización molecular está directamente relacionada, por tanto, con el interés en que estas

---

<sup>245</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia*, *op. cit.*, 202-203.

estructuras sean el elemento clave para dar una explicación formal de las propiedades observables de los compuestos químicos.

El carácter geométrico es ciertamente un aspecto importante, entre otros, de la inteligibilidad de la sustancia química. Puede afirmarse que la representación geométrica de las estructuras químicas es una representación de las leyes que rigen el dinamismo propio de las moléculas. La representación esquemática de un ángulo de enlace es, de hecho, también una representación energética práctica. Los modelos moleculares actuales se confeccionan teniendo en cuenta las longitudes medias de los enlaces, calculados por la química cuántica, y verificados por pruebas termodinámicas.

Admitir la existencia de partículas elementales, conlleva a la necesidad de imaginar una fuerza capaz de unir las para asegurar la cohesión de la materia. El concepto de enlace químico es crucial para entender cómo se comporta la materia. Las propiedades de un agregado molecular dependen de la forma en la que se enlacen los átomos. Los átomos, al formar una molécula, pierden toda individualidad. Las reacciones químicas se entienden en términos de ruptura y formación de enlaces.

El objeto fundamental de la química cuántica es describir, según el formalismo matemático de la mecánica cuántica, la estructura interna de los átomos y las moléculas. Esta teoría concibe el sistema molecular como una nueva entidad en la que los átomos individuales ya no pueden ser identificados y, en consecuencia, los electrones están deslocalizados en la molécula completa. Este nuevo modo de entender el modo de ser de las moléculas apunta a reforzar su carácter sustancial.

La construcción y uso de modelos representacionales es una actividad central en la formación de la teoría química. La variedad de los modelos depende del tipo de fenómenos que se estudian y de las posibilidades conceptuales y experimentales disponibles. En cuanto representaciones, no son una traducción exacta de la realidad, aunque tienen una correspondencia directa con la misma. La realidad concreta es lo que permite precisar la correspondencia entre el modelo y la entidad química.



# **CAPÍTULO III**



**LA TABLA PERIÓDICA DE LOS  
ELEMENTOS**



## 1. Introducción

Entre 1869 y 1871, siendo profesor de la universidad de San Petersburgo, Mendeleiev publicó *Los principios de la Química*, un libro de química general dirigido a sus alumnos. Con el título se pretendía subrayar que la química había dejado de ser una investigación sobre los principios últimos de la materia para convertirse en una ciencia firmemente establecida a partir de algunos principios derivados de la experimentación. Sin embargo, este texto en apariencia ordinario, estaba llamado a producir un gran cambio, un verdadero punto de inflexión en la historia de la química porque fue durante su elaboración cuando Mendeleiev descubrió su famosa ley periódica.<sup>246</sup>

Así como la física, que puede preciarse de la mecánica cuántica o la relatividad, y la biología, que ha producido la teoría de la evolución, en la química hay dos grandes ideas: la periodicidad química y el enlace químico, que, además, están profundamente relacionadas.<sup>247</sup>

La observación de que ciertos elementos prefieren combinarse con “especies específicas” de elementos muy pronto llevó a los químicos a clasificarlos en tablas de afinidad química. Más adelante, estas tablas dieron lugar, de manera indirecta, al descubrimiento del sistema periódico, posiblemente la idea más relevante de toda la química. Más aún, la tabla periódica surge en parte de los intentos de Mendeleiev y muchos otros de conocer el modo en que elementos particulares se enlazan químicamente.<sup>248</sup>

La tabla periódica revela los principios que organizan a la materia, lo que equivale a decir que revela los principios que organizan la química.<sup>249</sup> En un nivel fundamental, toda la química está contenida en la tabla periódica. Esto no quiere decir, por supuesto, que toda la química es obvia desde la tabla periódica, pero la

---

<sup>246</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B., “Mendeleev’s Periodic System of Chemical Elements”, *The British Journal for History of Science*, Vol. 19, No. 1 (1986), 3 y 8, y BROOKS, N. M., “Developing the Periodic Law: Mendeleev’s work during 1869-1871”, *Foundations of Chemistry*, No. 4 (2002), 127.

<sup>247</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, Oxford University Press, Oxford 2007, xiii.

<sup>248</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>249</sup> Cfr. *infra*, 135 y ss.

estructura de la tabla refleja la estructura electrónica de los elementos y, por tanto, sus propiedades químicas y su comportamiento.<sup>250</sup>

Fundamentalmente, el orden inherente en la tabla periódica ha llevado a un conocimiento profundo de la estructura del átomo y de los electrones que rodean el núcleo en capas específicas y orbitales. El arreglo de los electrones sirve para racionalizar la tabla periódica. Estos explican por qué, elementos como el sodio, el potasio y el rubidio, por ejemplo, pertenecen al mismo grupo. Pero más importante, entender la estructura atómica —a la que se llegó tratando de entender la tabla periódica— ha contribuido al desarrollo, primero, de la teoría cuántica y, después, de la mecánica cuántica, es decir, a un cuerpo de conocimiento que continúa siendo la teoría fundamental de la física que permite explicar el comportamiento no solamente de toda la materia, sino también todas las formas de radiación, desde la luz visible, los rayos X, hasta la luz ultra violeta.<sup>251</sup>

A diferencia de muchos de los descubrimientos científicos hechos en el s. XIX la tabla periódica no ha sido refutada por los descubrimientos de los siglos

---

<sup>250</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table: A Very Short Introduction*, Oxford University Press, Oxford 2011, xvii-xix. El notable interés por el sistema periódico tanto desde el punto de vista filosófico como histórico ha dado origen a un gran número de publicaciones. Entre la bibliografía primaria cabe destacar el libro de J. W. van Spronsen, *The Periodic System of Chemical Elements*, (Elsevier, Amsterdam 1969), que contiene una excelente y detallada exposición de la historia del sistema periódico, aunque cabe señalar que no entra en la discusión sobre la forma en que la física moderna pretende haberlo explicado. Otro texto que hace una magnífica exposición sobre el sistema periódico es el de F. P. Venable, *The Development of the Periodic Law* (Chemical Publishing Co. 1869). Este texto, sin embargo, tiene la limitante de no cubrir el periodo en el que la física moderna comienza a ejercer una influencia importante en el modo de entender la tabla periódica. El libro de E. Scerri, *The Periodic Table. Its Story and Its Significance* (Oxford University Press, New York 2007) es el escrito más amplio y ambicioso sobre el sistema periódico desde el de J. W. van Spronsen; aborda muchos de los problemas científicos, filosóficos e históricos relevantes que este ha planteado y sigue planteando. Del mismo autor, *The Periodic Table: A Very Short Introduction* (Oxford University Press, New York 2011) brinda una (no tan) breve introducción a la tabla periódica y aborda la discusión científico-filosófica que ha surgido a raíz de las múltiples formas existentes (más de mil) de la misma. Cfr. GORDIN, M., “Eric R. Scerri: The Periodic Table: Its Story and Its Significance”, *Isis*, Vol. 98, No. 3 (2007), 666-667; LA BARCA, M., “The Periodic Table: A Very Short Introduction”, *Educación Química*, Vol. 23, No. 4 (2012), 482-483.

Para bibliografía secundaria puede verse una amplia relación de artículos sobre el sistema periódico que ponen el acento en la perspectiva filosófica en SCERRI, E. & EDWARDS, J., “Bibliography of Literature on the Periodic System”, *Foundations of Chemistry*, Vol. 3 (2001), 183-196.

<sup>251</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table: A Very Short Introduction*, *op. cit.*, xvii-xix.

XX y XXI. Más aún, los descubrimientos, en particular los de la física moderna, han servido para afinar la tabla periódica y corregir algunas anomalías. Pero su forma general y su validez han permanecido intactas, lo que señala el poder y la profundidad de este sistema de conocimiento.<sup>252</sup>

En los últimos años, la reducción de la química a la física ha sido abordada de diferentes maneras. Muchos estudios se han enfocado en la interrelación teórica entre la química y la física; otros han centrado la discusión poniendo el acento en la posibilidad de si el sistema periódico puede deducirse de la mecánica cuántica; otros, en fin, plantean el problema desde el punto de vista ontológico. Sea cual sea la manera de enfocar el problema, la tabla periódica constituye un excelente campo de prueba para el estudio de este tema.<sup>253</sup>

## 2. Los elementos químicos

### 2.1 Acerca de la caracterización de los elementos: Lavoisier y Mendeleiev

El significado del término elemento ha sufrido cambios importantes a lo largo de la historia de la química. Antes de la revolución química de Lavoisier, el elemento era considerado como principio, como un componente de una sustancia química, pero no en el sentido en el que actualmente damos a la palabra componente. La asociación simple y directa por los filósofos griegos de los elementos como principios con cualidades particulares observables (caliente, frío, húmedo y seco) sugería que los elementos deberían entenderse no como componentes materiales, sino más bien como tendencias o potencialidades de las que se desprendían dichas cualidades.<sup>254</sup> Es decir, los cuatro elementos (fuego, tierra, agua, aire) eran considerados como portadores de propiedades responsables de las características tangibles de las sustancias, aunque en sí mismos fueran

---

<sup>252</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>253</sup> Cfr. SCERRI, E., "Reduction and Emergence in Chemistry-Two Recent Approaches", *Philosophy of Science*, Vol. 74, No. 5 (2007), 920.

<sup>254</sup> Cfr. HENDRY, R. F., "Lavoisier and Mendeleev on the Elements", *Foundations of Chemistry*, No. 7 (2005), 31.

inobservables. Los elementos eran cualidades inmateriales impresas en una materia a su vez indiferenciable y presente en todas las sustancias; es decir, en sí mismos, deberían ser considerados como abstractos, a pesar de dar origen a toda la variedad física observable. Por tanto, las cualidades de los cuatro elementos presentes en una sustancia específica gobernaban sus propiedades.<sup>255</sup>

El triunfo de la ciencia moderna es tenido generalmente como causa de la experimentación directa y de la adopción de una perspectiva empirista que sostiene que solo cuenta lo que puede ser observado. No sorprende, por tanto, que el sentido tal vez más fundamental del concepto de elemento fuera rechazado. Boyle y Lavoisier, por ejemplo, definieron el elemento como una sustancia material que no se ha podido descomponer en otros componentes más fundamentales por medios químicos.<sup>256</sup> En 1789 Lavoisier publicó una lista de 33 sustancias simples o elementos de acuerdo con este criterio empirista. Lejos estaban los antiguos elementos de tierra, agua, aire y fuego, que habían sido considerados como sustancias simples. Muchas de esas sustancias pueden calificarse como elementos según los estándares modernos, mientras que otras como la luz y el calor, ciertamente no pueden considerarse elementos.<sup>257</sup> Los rápidos avances en las técnicas de separación y caracterización de las sustancias químicas a lo largo de los años siguientes ayudaron a los químicos a extender y refinar dicha lista. La importante técnica de espectroscopía, que mide los espectros de emisión y absorción de varios tipos de radiación, eventualmente llevó a medios precisos por los que cada elemento puede ser identificado a través de su huella digital única. En los tiempos modernos conocemos 91 elementos que ocurren

---

<sup>255</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 113.

<sup>256</sup> La definición de elemento dada por Lavoisier cuenta con algunos precedentes. Además de Boyle (cfr. *supra*, 58, en un texto de 1780, Johann Gmelin (1748-1804) define al elemento como sigue: “En química, los cuerpos simples son aquellos que no pueden ser descompuestos en partículas diferentes por medios químicos; estos reciben también el nombre de elementos”. De modo análogo, Jean Le Rond d’Alembert (1717-1783), en la *Enciclopedia*, caracteriza a los elementos químicos como “Simples cuerpos indestructibles presentes en sus compuestos”. Cfr. PANETH, F. A., “The Epistemological Status of the Chemical Concept of Element”, *British Journal for the Philosophy of Science*, Vol. 13 (1962), 164. Las comillas son del texto, la traducción es mía.

<sup>257</sup> La luz es un tipo de radiación electromagnética y el calor de energía térmica.

naturalmente, y ha sido posible extender el número de elementos más allá de este límite.<sup>258</sup>

Se suele afirmar que hubo dos desarrollos decisivos en la química de los siglos XVII y XVIII: una creciente toma de conciencia del papel activo de la atmósfera<sup>259</sup> en el cambio químico, y la creciente demanda de poder identificar los elementos hipotéticos como sustancias concretas que, al menos en principio, pudieran aislarse en el laboratorio. Esto parece sugerir que las contribuciones clave de Lavoisier a la química de los elementos fueron su identificación del papel del oxígeno en la combustión y calcinación, y su famosa definición empírica de elemento, contenida en el prefacio de su *Traité Élémentaire de Chimie* (1789).<sup>260</sup>

En el contexto del siglo XVIII, la definición analítica de elemento fue una etapa importante de la tendencia de separarse de los esquemas *a priori* sobre el elemento para irse acercando a una postura intermedia entre el modo teórico de entenderlo y la vertiente práctica propia del trabajo de laboratorio.<sup>261</sup>

Según aparece en su *Tratado*, la caracterización de elemento propuesta por Lavoisier, puede entenderse como una definición más bien operacional:<sup>262</sup>

“Si aplicamos los términos *elementos*, o *principios de los cuerpos*, para expresar nuestra idea del punto último que el análisis es capaz de alcanzar, debemos admitir, como elementos, a todas las sustancias a las que somos capaces de reducir, por cualquier

---

<sup>258</sup> Cfr. *idem*, 4-5. Actualmente se ha confirmado la existencia de 117 elementos. Cfr. el comunicado de prensa del *Joint Institute for Nuclear Research* en <http://www.jinr.ru/posts/discovery-of-the-new-chemical-elements-with-numbers-113-115-117-and-118-2/> [consultada el 9 de abril de 2016]. Algunos de ellos se encuentran en la naturaleza y otros han sido obtenidos de manera artificial formando parte de sustancias simples o de compuestos químicos. Algunos han sido creados artificialmente en los aceleradores de partículas o en reactores atómicos. Estos últimos suelen ser inestables y solo existen durante milésimas de segundo. En 1999 se anunció el descubrimiento del elemento 118, pero en 2001 el *Lawrence Berkeley National Laboratory* se retractó de dicho anuncio porque no fue posible repetir el experimento que había dado origen a este descubrimiento.

<sup>259</sup> En el sentido de composición química, y no en cuanto unidad física de presión igual a la presión de una columna de mercurio de 760 mm de alto.

<sup>260</sup> Cfr. HENDRY, R.F., “Lavoisier and Mendeleev on the Elements”, *op. cit.*, 35.

<sup>261</sup> Cfr. *idem*, 36.

<sup>262</sup> Lavoisier introduce en la definición de elemento su determinación por medios experimentales. El avance importante en la definición de elemento de Lavoisier consiste en inferir la existencia de una sustancia básica de cada sustancia simple que se encuentra experimentalmente. Cfr. PANETH, F. A., *op. cit.*, 146 y 154. Ver también *supra*, 45.

medio, a los cuerpos por descomposición. No se pretende afirmar que estas sustancias que consideramos simples, no puedan estar compuestas por dos o, más aún, un gran número de principios; pero, como estos principios no pueden ser separados, o más bien, ya que no tenemos hasta ahora los medios para separarlos, para nosotros actúan como sustancias simples, y no debemos suponerlas como compuestas hasta que la observación y la experimentación hayan probado que lo son”.<sup>263</sup>

La revolución química operada por Lavoisier introdujo el término sustancia simple e ingrediente material de las sustancias. Una sustancia simple es aquella que no puede seguir descomponiéndose por los medios conocidos. La inclusión de la palabra conocidos es muy importante dado que, en el esquema propuesto por Lavoisier, las sustancias simples se consideraban como tales solamente de modo provisional, ya que podrían perder su estatus con técnicas analíticas modernas más refinadas. Un cambio importante con respecto al esquema anterior fue que no todas las sustancias contenían una de estas sustancias simples. Ya no se consideró que había una materia primordial indiferenciada, sino en su lugar un número de constituyentes elementales o sustancias simples, ahora en posesión de propiedades observables.<sup>264</sup>

La aplicación de esta definición no podía haber sido simplemente una cuestión empírica en la época de Lavoisier, porque no era claro, en términos exclusivamente empíricos, exactamente qué tipo de cambios químicos constituyen descomposiciones y cuáles no. En el *Tratado*, aparecen algunas inconsistencias en relación con el modo de aplicar esta definición. Por ejemplo, Lavoisier llama cuerpos al azufre, fósforo y carbón, que en realidad son elementos. El agua, en cambio, se considera como un elemento por la falta de evidencia de su naturaleza compuesta. Por el contrario, no aplica esta definición a la sosa y a la potasa, negándose a considerarlos cuerpos simples aun cuando concede que no han sido descompuestos todavía.<sup>265</sup> La química analítica desarrollada a partir de Lavoisier

---

<sup>263</sup> LAVOISIER, A., *Tratado Elemental del Química*, 1789, citado en HENDRY, R.F., “Lavoisier and Mendeleev on the Elements”, *op. cit.*, 37. Las cursivas son del texto, la traducción es mía.

<sup>264</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 113.

<sup>265</sup> Cfr. HENDRY, R.F., “Lavoisier and Mendeleev on the Elements”, *op. cit.*, 37-38 y PANETH, F. A., *op. cit.*, 126.

no había propuesto una distinción clara entre elemento y cuerpo simple, distinción que, como señalaremos en breve, será establecida por Mendeleiev y que implicará una reorganización completa del panorama conceptual de la química.<sup>266</sup>

Para Lavoisier, la química era la ciencia del análisis, y el concepto de sustancia simple, su noción clave.<sup>267</sup> Hay que señalar, sin embargo, que su concepto de sustancia simple se define de modo negativo, como un cuerpo que no puede sufrir descomposición. Lo anterior traerá consecuencias importantes durante el s. XIX pues alentó la especulación hacia la complejidad de los elementos.<sup>268</sup>

Gracias a nuevos instrumentos de análisis, como por ejemplo la pila voltaica, muchas sustancias comenzaron a ser descubiertas en el s. XIX. En 1830, Berzelius enumera 50, número que creció a 70 en la década de 1860 con el inicio del análisis espectroscópico. Los químicos del s. XIX contaban con mejores herramientas para identificar y describir los elementos teniendo en cuenta también que la hipótesis atómica de Dalton proporcionó una característica individual para cada elemento: el peso atómico. Aunque Dalton relacionó las ideas de peso atómico y elemento, esta conexión no generó un nuevo concepto de elemento.<sup>269</sup>

El aspecto abstracto-metafísico de los elementos no había sido completamente descuidado, sino que continuaba sirviendo como una función explicativa en la química del siglo XIX, aunque no necesariamente como una explicación microscópica. Un químico podría ser escéptico a la explicación atomista, como Mendeleiev y muchos otros lo fueron en el siglo XIX, y aceptar sin embargo la explicación metafísica de fenómenos químicos. De hecho, uno de los beneficios de considerar que los elementos tenían un estatus metafísico es que proporcionaban una salida a la aparente paradoja que Mendeleiev estaba

---

<sup>266</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 118-119.

<sup>267</sup> Según Paneth, el concepto de elemento es utilizado por Lavoisier en dos sentidos. Cuando utiliza “sustancia básica” se refiere a la sustancia indestructible presente en los compuestos, y por “sustancia simple” la sustancia aislada sin combinar, tal y como aparece a nuestros sentidos. En definitiva, sustancia básica y sustancia simple vendrían a ser dos aspectos diferentes del concepto químico de elemento. Cfr. PANETH, F. A., *op. cit.*, 150 y 155.

<sup>268</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B., “Mendeleev Periodic System of Chemical Elements”, *op. cit.*, 4.

<sup>269</sup> Cfr. *idem*, 5. Cfr. *supra*, 64-65.

intentando abordar, la relativa a la naturaleza de los elementos cuando se combinaban para formar compuestos. En el cloruro de sodio, por ejemplo, uno se puede preguntar de qué modo coexisten el sodio, un metal gris y venenoso, y el cloro, un gas verde y venenoso, en la sal común. Es evidente que los elementos mismos, en el sentido moderno de la palabra, no parecen sobrevivir en el compuesto; no es posible tener una mezcla de sodio y cloro que muestre las propiedades de ambos elementos. La respuesta de la que se disponía según los esquemas del elemento del siglo XIX era que las sustancias simples no sobrevivían en el compuesto, solo lo hacían los elementos abstractos.<sup>270</sup>

De acuerdo con lo anterior, se creía que los elementos abstractos eran permanentes y por tanto responsables de las propiedades observables de los cuerpos simples y compuestos. Sin embargo, desde la perspectiva de los antiguos filósofos, los elementos abstractos también se consideraban “ingredientes materiales” de los cuerpos simples y compuestos. Este concepto de “ingrediente material” servía, por tanto, para enlazar el mundo de los elementos abstractos y el ámbito observable, reino de las sustancias simples. Por ejemplo, las relaciones estequiométricas observadas en los cambios químicos se explicaban en términos de cantidades de elementos abstractos presentes en las sustancias reaccionantes a través de la acción del ingrediente material.<sup>271</sup>

Por tanto, hay tres tesis importantes con relación a los elementos en el siglo XIX. El elemento abstracto es portador de propiedades y posee la herencia del elemento según el esquema de los antiguos. Además, para poder ser un portador de propiedades, el elemento es un ingrediente materialmente indestructible de las sustancias, que se comporta según la ley de conservación de la materia de Lavoisier. El tercer concepto es que el elemento abstracto es inobservable, mientras que las sustancias simples como sodio, cloro y oxígeno pueden observarse. Debe hacerse notar que en la química contemporánea,

---

<sup>270</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 114.

<sup>271</sup> Cfr. *ibidem*. La estequiometría es la rama de la química que mide las proporciones cuantitativas o relaciones de masa de los elementos químicos que están implicados en una reacción química. Se basa en las leyes de las combinaciones químicas. Las relaciones estequiométricas se pueden establecer entre partículas, moles, masas y volúmenes. Cfr. BROWN, TH. *et al.*, *op. cit.*, 75.

solamente parece mantenerse la última noción, en la que el término elemento debe limitarse a lo que los químicos del s. XIX habrían llamado sustancia simple.<sup>272</sup>

El punto culmen del esquema de los elementos del siglo XIX se alcanzó con el descubrimiento del sistema periódico. Mendeleiev distinguió cuidadosamente entre lo que llamó sustancia simple y elemento. Más que cualquiera de los otros descubridores, el químico ruso se preocupó por el estatus filosófico de los elementos.

Ya en un artículo publicado en *Chemical News* en 1879, Mendeleiev propone una explicación sobre la distinción entre cuerpo simple y elemento:

“A pesar de que, hasta Laurent y Gerhardt, las palabras ‘molécula’, ‘átomo’ y ‘equivalente’ se usaban una u otra indiscriminadamente del mismo modo, los términos ‘cuerpo simple’ y ‘elemento’ a menudo se confunden entre sí. Sin embargo, tienen diferente significado, que es preciso señalar, para evitar la confusión de los términos en la química filosófica. Un cuerpo simple es algo material, metal o metaloide, dotado de propiedades físicas y capaz de reacciones químicas. La idea de ‘molécula’ se corresponde con la expresión cuerpo simple (...). Pero en oposición a esto, el término ‘elemento’ debe reservarse para caracterizar partículas materiales que forman los cuerpos simples y compuestos, y que determinan su comportamiento desde los puntos de vista químico y físico, la palabra ‘elemento’ trae a la mente la idea de un átomo; el carbono es un elemento; el carbón, el diamante y el grafito son cuerpos simples”.<sup>273</sup>

Según este texto, Mendeleiev considera que al cuerpo simple le corresponde la idea de molécula; y el elemento, en cambio, caracteriza a las partículas materiales que forman los cuerpos simples y compuestos y que determinan el modo de comportarse de los mismos desde el punto de vista de la física y de la química. El término elemento parece referirse más bien a la idea de átomo. Mendeleiev ilustra la diferencia entre elemento y cuerpo simple con el caso

---

<sup>272</sup> Cfr. *ibidem*. La concepción de elemento ha cambiado también durante el siglo XX. Actualmente se considera al elemento como una entidad abstracta esencialmente caracterizada por un número entero matemático: su número atómico. Cfr. ROUVRAY, D. H., “Elements in the History of the Periodic Table”, *Endeavour*, Vol. 28, No. 2 (2004), 74.

<sup>273</sup> Cfr. MENDELEEV, D., “The Periodic Law of the Chemical Elements”, *Chemical News*, No. 40, 292. Citado en BENSUADE-VINCENT, B., “Mendeleev’s Periodic System of Chemical Elements”, *The British Journal for the History of Science*, Vol. 19, No. 1 (1986), 11. Las comillas son del texto, la traducción es mía.

del elemento carbono que se presenta en forma de tres cuerpos simples (grafito, diamante y carbón), o del nitrógeno, inactivo en estado libre y muy activo en combinación.<sup>274</sup>

A diferencia de la ley periódica, que parece haber alcanzado su madurez solamente cuando Mendeleiev consiguió terminar el primer volumen de *Los principios de la Química*, la discusión de sustancia simple y elemento abstracto se menciona nuevamente ya desde el inicio del primer volumen y se revisa en varias ocasiones a lo largo del libro.

Es útil en este sentido hacer una distinción clara del concepto de elemento como una sustancia separada homogénea, y como parte material pero invisible de un compuesto. El óxido de mercurio no contiene dos cuerpos simples, un gas y un metal, sino dos elementos, mercurio y oxígeno, que cuando están libres, son un gas y un metal. Ni el mercurio como metal ni el oxígeno como gas están contenidos en el óxido de mercurio; este solo contiene la sustancia de los elementos, así como el vapor solo contiene la sustancia del hielo, pero no el hielo en sí mismo, o como el maíz contiene la sustancia de la semilla pero no la semilla misma.<sup>275</sup>

Para Mendeleiev, el elemento es una entidad, la cual es esencialmente inobservable pero formada en la esencia interior de los cuerpos simples. Mientras que un elemento particular ha de ser visto como inmutable, el aspecto de su cuerpo simple correspondiente puede tomar varias formas como sucede, por ejemplo, en el caso del carbono. En ese sentido, puede considerarse que Mendeleiev suscribía la antigua tradición filosófica sobre la naturaleza de los elementos como portadores de propiedades. La genialidad de Mendeleiev estuvo en reconocer que, así como el elemento era lo que permanecía intacto a lo largo de la formación de un compuesto, el peso atómico era la única cantidad que sobrevivía en términos de atributos mensurables. Así que dio el paso de asociar

---

<sup>274</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 118-119. Ver también HENDRY, R. F., "Elements, Compounds, and Other Chemical Kinds", *Philosophy of Science*, No. 73 (2006), 866-867 y HENDRY, R. F., "Lavoisier and Mendeleev on the Elements", *op. cit.*, 42.

<sup>275</sup> MENDELEEV, D. I., *The Principles of Chemistry*, 5<sup>th</sup>. Russian ed., vol. 1 (1889). (1<sup>a</sup> traducción en inglés por KEMENSKY, G., Collier, New York (1891), 23, citado en SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 115.

estas dos características. Un elemento (sustancia básica) ha de caracterizarse por su peso atómico.<sup>276</sup> En un sentido, un elemento abstracto tenía un atributo singular mensurable que permanecía invariable en todas las combinaciones químicas. Esta es una justificación profunda de por qué usar el peso atómico como la base de la clasificación de los elementos, a diferencia de sus precursores en el sistema periódico. ¿Por qué se adjudica Mendeleiev este hecho cuando otros lo habían efectuado así antes que él? Porque él dio una explicación detallada de por qué este era el mejor modo de hacerlo.<sup>277</sup>

Mendeleiev dotaría a la química de un nuevo programa: profundizar, por una parte, en las relaciones entre los cuerpos simples y los compuestos, y de otra, en los elementos contenidos en ellos. El concepto de cuerpo simple, fundamental en una química moldeada sobre el análisis, pasa a ser secundario en una química moldeada sobre la sustitución. El cuerpo simple deja de ser el principio explicativo; solo el elemento puede explicar las propiedades de los cuerpos simples y compuestos.<sup>278</sup>

Mientras que Lavoisier define un elemento como una sustancia química que no puede descomponerse por medio de los métodos analíticos comunes, Mendeleiev considera un elemento como una sustancia compuesta de átomos con el mismo peso atómico. Sin embargo, aunque las concepciones explícitas tanto Lavoisier como Mendeleiev difieren entre sí, ambos suscriben —y emplean— la noción de elemento como el componente de sustancias compuestas que puede a) sobrevivir al cambio químico y b) explicar el comportamiento químico de sus compuestos.<sup>279</sup>

---

<sup>276</sup> La masa atómica de un átomo individual es simplemente su masa total expresada en unidades de masa atómica (uma). Un átomo de carbono con seis neutrones (carbono-12) tiene una masa de 12 uma (6 protones + 6 neutrones). El carbono-14 (6 protones + 8 neutrones) tiene una masa de 14 uma. El peso atómico (o masa atómica relativa) es el promedio de las masas atómicas de los diferentes isótopos en una muestra. El peso atómico del carbono es 12.01. Existen diversos isótopos del carbono, pero casi 99% del carbono que existe en la naturaleza consiste en carbono-12. Cfr. BROWN, TH. *et al.*, *op. cit.*, 43.

<sup>277</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 115.

<sup>278</sup> Cfr. BENSUADE-VINCENT, B. & STENGERS, I., *op. cit.*, 119.

<sup>279</sup> Cfr. HENDRY, R. F., “Lavoisier and Mendeleev on the Elements”, *op. cit.*, 31.

## 2.2 El descubrimiento de los elementos

El descubrimiento de nuevos elementos ha sido un proceso continuo desde tiempos antiguos. Ciertos elementos, como el oro, el hierro, el cobre y la plata se conocen desde los albores de la civilización. Esto muestra que estos elementos se encuentran sin combinar o son fáciles de separar de los minerales con los que se encuentran mezclados.<sup>280</sup>

Historiadores y arqueólogos se refieren a ciertas épocas de la historia de la humanidad como la Edad de Hierro o la Edad de Bronce. Los alquimistas añadieron algunos elementos a la lista incluyendo el azufre, el fósforo y el mercurio. En tiempos más recientes, el descubrimiento de la electricidad permitió a los químicos aislar elementos más reactivos que, a diferencia del cobre o el hierro, no podían obtenerse a partir del calentamiento de sus menas con carbón. Ha habido algunos episodios importantes en la historia de la química en los que varios elementos han sido descubiertos en un lapso de pocos años. El químico inglés Humphry Davy, por ejemplo, consiguió aislar por medio de la electrólisis diez elementos incluyendo el calcio, el bario, el magnesio, el sodio y el cloro.<sup>281</sup>

En contraste, algunos elementos son radioactivos e intrínsecamente inestables. Gracias al descubrimiento de la radioactividad y de la fisión nuclear y del desarrollo de la química radioactiva, fue posible rellenar algunos de los huecos de la tabla periódica. El último hueco pendiente por rellenar era el que corresponde al elemento número 43; los investigadores decidieron nombrar al nuevo elemento usando la palabra griega *technetos*, que significa "artificial", por ser el primer elemento producido de forma artificial. Este elemento se obtuvo durante el desarrollo de algunas reacciones radioactivas y no hubiera sido posible hacerlo antes del advenimiento de la física nuclear.<sup>282</sup>

---

<sup>280</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 5.

<sup>281</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>282</sup> Desde su descubrimiento se buscaron fuentes naturales de tecnecio en materiales terrestres. En 1962, fue aislado e identificado <sup>99</sup>Tc en una muestra de pechblenda, en muy bajas concentraciones. Su presencia era debida a la fisión espontánea del <sup>238</sup>U. Este descubrimiento fue hecho por B. T. Kenna y P. K. Kuroda. Cfr. HOLDEN, N. E., "History of the Origin of the Chemical Elements and Their Discoverers", *National Nuclear Data Center*, USA (2004), en <http://www.nndc.bnl.gov/content/elements.html> [consultada el 29 de marzo de 2016].

Los últimos descubrimientos con relación a los elementos químicos están basados en desarrollos tecnológicos incluyendo la producción de haces de rayos de átomos y partículas elementales como los neutrones. Estas partículas pueden hacerse colisionar entre sí para conseguir reacciones de fusión nuclear y en consecuencia producir nuevos elementos con números atómicos muy elevados. Quien inició con este tipo de procedimientos fue el químico estadounidense Glenn T. Seaborg (1912-1999) el cuál sintetizó el plutonio en 1943 y participó, además, en los equipos que consiguieron la síntesis de muchos de los elementos transuránicos.<sup>283</sup>

### 2.3 La tabla periódica moderna

La forma en que los elementos están acomodados en filas y columnas en la moderna tabla periódica revela varias relaciones entre ellos. Algunas de estas relaciones son muy conocidas, mientras que otras esperan todavía ser descubiertas.<sup>284</sup> La tabla periódica convencional consiste en filas y columnas. Pueden observarse tendencias entre los elementos tanto a lo largo como a lo ancho de la tabla. Cada fila horizontal representa un periodo de la tabla. Recorriendo un periodo, uno pasa desde los metales como el potasio o el calcio, situados a la izquierda, a los metales de transición como fierro, cobalto y níquel, siguiendo con algunos elementos semimetálicos como el germanio hasta los no metales como el arsénico, selenio y bromo a la derecha de la tabla. En general, hay una leve gradación en las propiedades químicas y físicas en la medida en que se recorre un periodo, aunque abundan excepciones a esta regla general, lo que hace que el estudio de la química sea un campo fascinante e impredeciblemente complejo.<sup>285</sup>

Los metales pueden variar de sólidos opacos como el sodio o el potasio, a sustancias muy brillantes como el cromo, el platino y el oro. Los no metales, de otra parte, tienden a ser sólidos o gases como el carbono y el oxígeno respectivamente. Por su apariencia, muchas veces es difícil distinguir entre metales sólidos y no metales sólidos. Para la gente común, un metal duro y brillante podría

---

<sup>283</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 6.

<sup>284</sup> Cfr. CHU, P., "Yttrium", *Chemical & Engineering News*, No. 8 (2003), 102.

<sup>285</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 11.

parecer más metálico que un metal blando como el sodio. Pero en sentido químico, los elementos que tienen mayor habilidad para perder electrones (bajas energías de ionización) se consideran como los más metálicos. El sodio es considerado como más metálico por los químicos que el fierro y el cobre. La tendencia periódica de metales a no metales se repite en cada periodo, de modo que cuando las filas se agrupan forman columnas o grupos de elementos similares. Los elementos en un mismo grupo tienden a compartir muchas propiedades físicas y químicas aun cuando también hay muchas excepciones.<sup>286</sup>

La forma en la que los grupos se designan en la tabla periódica moderna es complicada y ha causado controversia. Los grupos o columnas de grupos de elementos importantes, que también se conocen como elementos representativos, están colocados en los extremos izquierdo y derecho de la tabla periódica moderna. En los Estados Unidos, estos grupos generalmente están marcados con números romanos del I al VIII, y con la letra A que se añade en ocasiones para diferenciarlos de los metales de transición o grupos IB a VIIIB, que están colocados el centro de la tabla. Sin embargo, en Europa la convención es diferente ya que todos los grupos están marcados de izquierda del IA al VIIIA hasta que se llega al grupo encabezado por el cobre, en donde se pasa de IB hasta llegar a los gases nobles con VIIIB. Ambos sistemas utilizan el mismo número romano para cada columna, que en el caso de los grupos de elementos principales, denota también el número de electrones de la última capa.<sup>287</sup>

En el extremo izquierdo de la tabla, el grupo I contiene metales como el sodio, el potasio y el rubidio. Se trata de sustancias blancas y muy reactivas, en nada parecidas a lo que ordinariamente se designa como metales, como el fierro, el cromo, el oro y la plata. Los metales del grupo I son tan reactivos que solamente con colocar una pequeña cantidad en agua pura dan lugar a vigorosas reacciones, producen gas hidrógeno y una solución alcalina incolora. Los elementos del grupo

---

<sup>286</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>287</sup> Dadas las confusiones que estas convenciones han causado, la *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC) ha recomendado que los grupos se numeren secuencialmente con números arábigos del 1 al 18, omitiendo el uso de las letras A y B. Pero el resultado poco afortunado de esta propuesta ha sido que se pierda la correlación entre los electrones de la última capa y los elementos de los grupos.

II incluyen magnesio, calcio y bario y tienden a ser menos reactivos que los del grupo I.<sup>288</sup>

Moviéndonos hacia la derecha, encontramos un bloque rectangular central de elementos conocidos como metales de transición, que incluyen el fierro, el cobre y el zinc. En las primeras tablas periódicas, estos elementos se localizaban en lo que ahora llamamos grupos principales. Muchas características de la química de estos elementos se han perdido en la tabla periódica moderna por la manera en la que han sido separados del cuerpo principal de la misma, aunque las ventajas de esta separación superan las pérdidas. A la derecha de los metales de transición se encuentra otro grupo de elementos representativos comenzando con el grupo III y terminando con el grupo VIII, los gases nobles, que se encuentran en el extremo derecho de la tabla.

En algunas ocasiones las propiedades que comparte un grupo no son obvias de manera inmediata. Es el caso del grupo IV que está formado por carbono, silicio, germanio, estaño y plomo. A medida en que se recorre el grupo se observa una gran diversidad. El carbono, cabeza del grupo, es un no metal sólido que se da en tres formas estructurales completamente distintas (diamante, grafito y fulereno) y forma la base de todos los sistemas vivientes. El siguiente elemento hacia abajo, el silicio, es un semimetal que forma la base de la vida artificial, o al menos, de la inteligencia artificial, ya que es el corazón de todas las computadoras. El siguiente elemento, el germanio, es el semimetal descubierto más recientemente, cuyas propiedades fueron predichas por Mendeleiev. Moviéndonos hacia abajo hacia el estaño y el plomo, llegamos a dos metales conocidos desde la antigüedad. A pesar de las amplias variaciones entre ellos, en términos de comportamiento metal-no metal. Los elementos del grupo IV tienen similitudes importantes en sentido químico poseyendo la máxima capacidad de combinación o valencia de 4.

La aparente diversidad de los elementos del grupo VII es aún mayor. El flúor y el cloro, que encabezan este grupo, son ambos gases venenosos. El siguiente elemento, el bromo, es uno de los dos elementos conocidos que existe en forma líquida a temperatura ambiente, el otro es el metal mercurio.

---

<sup>288</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 14-16.

Moviéndonos hacia abajo en el grupo encontramos al yodo, un sólido negro-violeta. Si a algún químico poco experimentado se le pidiera ordenar estos elementos según su apariencia, sería inconcebible que clasificara dentro del mismo grupo al flúor, cloro, bromo y al yodo. Es aquí en donde la sutil distinción entre los sentidos abstracto y observable de elemento sería de utilidad. La similitud entre estos se apoya primeramente en el primer sentido y no en el sentido del elemento como sustancia que puede ser aislada y observada.

En el extremo derecho de la tabla se encuentra un grupo importante de elementos: los gases nobles, todos los cuales fueron descubiertos y aislados en el siglo XX. Su propiedad principal, paradójicamente, al menos cuando fueron aislados por primera vez, fue su falta de propiedades químicas. Estos elementos helio, neón, argón y criptón no se habían incluido en las primeras tablas periódicas porque eran desconocidos y además imprevisibles. Cuando fueron descubiertos, su existencia supuso un gran reto para el sistema periódico, pero fueron exitosamente colocados al final de la tabla como un nuevo grupo que se denominó grupo VIII (o grupo 18 en el sistema de IUPAC).

Otro bloque de elementos, que se encuentran al pie de la moderna tabla periódica, son las tierras raras que ordinariamente aparecen como desconectadas del resto. Podrían colocarse entre el resto de los elementos; de hecho, existen versiones de la tabla periódica que lo hacen, sin embargo, esto dificulta el manejo de la tabla. Al final, lo que importa no es la forma de representación sino la ley periódica.

### **3. Relaciones cuantitativas entre los elementos y los orígenes de la tabla periódica**

Al aumentar el número de los elementos conocidos, los científicos comenzaron a pensar en la posibilidad de clasificarlos. A través de su historia, el desarrollo de la tabla periódica ha supuesto una delicada interacción entre dos aproximaciones importantes: el discernimiento de datos físicos de una parte, y de otra, la observación de similitudes cualitativas entre los elementos. Ambas

aproximaciones son esenciales, y el balance que debe darse entre ellas ha sido de una importancia crucial a lo largo de su desarrollo.<sup>289</sup>

Los elementos que forman parte de un grupo vertical de la tabla periódica comparten algunas similitudes químicas, pero el sistema periódico no surge solamente de características descriptivas. Si las similitudes químicas hubieran sido la única base para su clasificación, habría muchos casos en los que el orden y localización de los elementos serían ambiguos. El desarrollo del sistema periódico moderno comenzó cuando se reconoció que hay relaciones numéricas precisas entre los elementos. Algunas de las últimas contribuciones a la tabla periódica se han basado en teorías físicas fundamentales; en cambio, otras, han buscado patrones entre las propiedades numéricas, como son los pesos equivalentes o los pesos atómicos, asociados con cada elemento.<sup>290</sup>

Mucho de lo que se conoce sobre los elementos se ha aprendido de la forma como reaccionan con otros elementos y por las propiedades de su manera de enlazarse. Los metales situados a la izquierda de la tabla periódica convencional son complementariamente opuestos a los no metales que tienden a agruparse del lado derecho de la tabla. Esto es así porque, en términos modernos, los metales forman iones positivos por la pérdida de electrones mientras que los no metales forman iones negativos al ganar electrones. Estos iones con cargas opuestas se combinan para formar sales neutras. Los óxidos o hidróxidos metálicos se disuelven en agua formando bases, mientras que los óxidos o hidróxidos de los no metales forman ácidos. Ácidos y bases reaccionan entre sí en reacciones de neutralización cuyo producto son sal y agua. Las bases y los ácidos, al igual que los metales y los no metales a partir de los que se forman, son también opuestos pero complementarios.<sup>291</sup>

### 3.1 Pesos equivalentes y pesos atómicos

Uno de los mayores desarrollos, siguiendo la línea cuantitativa, se debió a Jeremias Benjamin Richter (1762-1807) quien, entre 1792 y 1794 publicó una serie

---

<sup>289</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 29.

<sup>290</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>291</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 20.

de datos cuantitativos que posteriormente serían conocidos como pesos equivalentes. Richter midió las cantidades de ácidos que se combinaban con ciertas cantidades de bases. Luego, extendió este procedimiento a reacciones entre metales y ácidos; obtuvo así una medición indirecta de las cantidades relativas en las que los elementos se combinan entre sí. El término peso equivalente se generalizó posteriormente para indicar la cantidad de un elemento que reacciona con una cantidad estándar de oxígeno. Los químicos comenzaron a realizar comparaciones cuantitativas entre las cantidades de ácidos y bases que reaccionaban entre sí. Posiblemente se trató de la primera vez en la que las propiedades de los elementos se compararon entre sí por medio de una escala numérica. Esta urgencia por encontrar patrones numéricos en la naturaleza mostraría ser un elemento muy importante para el desarrollo de la tabla periódica.<sup>292</sup>

Aunque Dalton comenzó a considerar la forma de determinar los pesos atómicos alrededor de 1803, no fue sino hasta 1810 cuando publicó, en la segunda parte de su *New System of Chemical Philosophy*, una exposición detallada de su teoría atómica. En este texto Dalton defendía una teoría atómica global que podría contener dos conjuntos independientes de ideas. El atomismo químico podía ser descrito como una teoría de la composición química que asigna un peso característico relativo a cada uno de los elementos, en la que se busca representar todas las sustancias como compuestas de múltiplos enteros de esos pesos, y en la que ninguna concepción explícita sobre la estructura de la materia tenía que ser expresada. Pero Dalton también tenía mucho que decir sobre los tamaños, formas y configuraciones, lo que se refiere más bien a una concepción física del atomismo.<sup>293</sup>

Dalton infirió directamente los pesos atómicos a partir de mediciones de las masas de los elementos que se combinan entre sí. Sin embargo, algunas complicaciones en este aparentemente simple método forzaron a Dalton a hacer algunas suposiciones sobre las fórmulas químicas de los compuestos en cuestión.

---

<sup>292</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 31 y PARTINGTON, J. R., "The Concept of Substance and Chemical Element", *Chymia*, Vol. 1 (1948), 115.

<sup>293</sup> Cfr. ROCKE, A. J., "The Reception of Chemical Atomism in Germany", *Isis*, Vol. 70, No. 4 (1979), 519.

La clave para resolver dichas complicaciones fue la valencia, o capacidad de combinación de un elemento.<sup>294</sup>

Ya se señaló en otra parte de este trabajo cómo, a raíz del estudio de las propiedades físicas de los gases, Dalton había llegado a la conclusión de que los átomos de un gas se diferencian no solo por su tamaño o forma, sino también por su peso, lo que le llevaría a fijar el peso atómico relativo como una propiedad determinante de los átomos.<sup>295</sup> Inicialmente el concepto de peso atómico no mejoró las perspectivas de la clasificación de los elementos por las dificultades para calcularlo. Mientras que los pesos equivalentes introducidos por Richter parecían tener una base experimental clara, los pesos atómicos de Dalton y de algunos de sus contemporáneos parecían ser más teóricos.<sup>296</sup>

### 3.2 La hipótesis de Prout

Otra alternativa para hacer frente al problema de la clasificación de los elementos fue el intento de reducir las numerosas sustancias simples a un solo elemento, la supuesta materia prima. En 1810 William Prout (1785-1850), basándose en las tablas de los pesos atómicos de los elementos conocidos en su época, estableció que el peso atómico de todo elemento —salvo algunas pocas excepciones— es un número entero múltiplo del peso del hidrógeno, lo que lo condujo a identificar a este elemento como la materia prima; los átomos de los demás elementos químicos estarían formados por agrupaciones de varios átomos de hidrógeno. En definitiva, esto significaría que en realidad solo habría un tipo de materia que se daría en diferentes estados de combinación.<sup>297</sup>

La hipótesis de Prout dio origen a una serie de experimentos que proporcionaron un conjunto cada vez más preciso de pesos atómicos, mismos que serían utilizados como una base para intentar ordenar los elementos en el sistema periódico. Muchos de los pioneros del sistema periódico como Wolfgang Döbereiner (1780-1849), Leopold Gmelin (1788-1853), Max Pettenkofer 1818-

---

<sup>294</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, op. cit., 21.

<sup>295</sup> Cfr. *supra*, 63-64.

<sup>296</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>297</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, op. cit., 39.

1901), Jean Baptiste André Dumas (1800-1884) y Alexander De Chancourtois (1820-1886) manifestaron gran interés en la hipótesis de Prout que influyó de manera importante en sus ideas sobre la clasificación de los elementos.<sup>298</sup>

La creciente precisión en el cálculo de los pesos atómicos durante las dos décadas siguientes al anuncio de la hipótesis de Prout, mostró que ésta era incorrecta ya que, para muchos elementos, los pesos no resultaron ser múltiplos enteros del peso del hidrógeno. La explicación de lo anterior tuvo que esperar al descubrimiento de los isótopos.<sup>299</sup> Con el tiempo se entendería que los elementos cuyos valores en una escala de hidrógeno están cerca de ser números enteros son aquellos que solo existen en una forma, o cuyas otras formas o isótopos, solo se producen en cantidades muy pequeñas. Por contraste, muchos de los elementos cuyos pesos atómicos difieren notoriamente de ser múltiplos de números enteros, como el cloro (35.46), el cobre (63.57), el zinc (65.38) y el mercurio (200.6) se dan como mezclas de varios isótopos en proporciones significativas. En cierto sentido, se puede decir que la idea de Prout ha sido reivindicada por la física moderna. En términos de número de protones, los núcleos de todos los elementos son, de hecho, compuestos del núcleo del átomo de hidrógeno, que contiene un único protón.<sup>300</sup>

### 3.3 Las triadas de Döbereiner

El químico alemán Wolfgang Döbereiner descubrió otro principio general que también contribuyó a la necesidad de medir con mayor exactitud los pesos atómicos. Él fue el primero que se dio cuenta de que varios grupos de tres elementos, que posteriormente llamó triadas, mostraban similitudes químicas y presentaban importantes relaciones numéricas, como por ejemplo que el peso

---

<sup>298</sup> Cfr. *idem*, 40.

<sup>299</sup> Los isótopos son átomos de un mismo elemento que difieren en el número de neutrones, y, por tanto, en su masa. Los isótopos de un elemento tienen las mismas propiedades químicas porque el número de electrones (igual al número Z de protones del núcleo) es el mismo. El carbono, por ejemplo, tiene dos isótopos principales:  $^{12}\text{C}$  y  $^{14}\text{C}$ . Cfr. BROWN, TH. *et al.*, *op. cit.*, 43.

<sup>300</sup> Cfr. *idem*, 41-43.

equivalente o peso atómico del elemento central de la triada era la media del peso de los dos elementos a sus lados.<sup>301</sup>

En 1817, Döbereiner encontró que, si ciertos elementos se combinaban con oxígeno en compuestos binarios, se podía establecer una relación numérica entre los pesos equivalentes de estos compuestos. Así, para los óxidos de calcio, estroncio y bario, el peso equivalente del óxido de estroncio era aproximadamente la media de los óxidos de calcio y de bario. Estos tres elementos: calcio, estroncio y bario forman una triada.

$$\text{SrO} = (\text{CaO} + \text{BaO}) / 2 = 107 \\ (59 + 155) / 2$$

Dado que estaba trabajando con los valores de los pesos atómicos que habían sido deducidos con los métodos experimentales de su tiempo, sus valores se aproximan bastante a los valores de la triada:

$$104.75 = (56 + 153.5) / 2$$

En un principio, las observaciones del químico alemán no tuvieron mayor relevancia para el mundo químico, pero posteriormente se volvieron importantes. Döbereiner todavía es recordado como uno de los primeros pioneros del desarrollo del sistema periódico. Lo que no suele mencionarse es que Döbereiner consideraba la posibilidad que el elemento central de la triada podía ser la mezcla de los otros dos elementos y que estas observaciones podían ser un soporte para la noción de transmutación entre los tres elementos.<sup>302</sup>

Döbereiner sostuvo que, en orden a ser significativas, sus triadas deberían revelar las relaciones químicas entre los elementos, así como sus relaciones numéricas. Por otra parte, se negó a agrupar el flúor, un halógeno, junto con el cloro, bromo y yodo, porque no pudo encontrar una relación de triada entre los pesos atómicos del flúor y los de los otros halógenos. También se rehusó proponer triadas entre elementos no similares, como el nitrógeno, el carbón y el oxígeno, aunque mostraran la relación numérica propia de la triada.<sup>303</sup>

---

<sup>301</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, op. cit., 36.

<sup>302</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, op. cit., 43.

<sup>303</sup> Cfr. *ibidem*.

Basta decir que la investigación de Döbereiner estableció la noción de triadas como un concepto poderoso que muchos otros investigadores usaron con mucho provecho. Las triadas de Döbereiner, que aparecerían en la tabla periódica agrupadas en columnas verticales, representan el primer paso en colocar los elementos en un sistema que diera cuenta de sus propiedades químicas y que revelara sus relaciones físicas. En cierto sentido, las propiedades químicas pueden considerarse más importantes ya que en definitiva el propósito de este modo de relacionar los elementos está orientado a su clasificación química. Los datos numéricos formalizan el sistema y en ocasiones resuelven casos de localización de los elementos que pueden ser difíciles de resolver únicamente con base en las propiedades químicas. De cualquier modo, el descubrimiento de Döbereiner fue importante pues proporcionó el primer indicio de una regularidad numérica que constituirá el núcleo de la relación entre la naturaleza y propiedades de los elementos.<sup>304</sup>

Antes de descubrir la relación correcta entre peso atómico y peso equivalente, era frecuente que algunos químicos se refirieran a pesos atómicos como pesos equivalentes y viceversa. Para complicar más las cosas, aun cuando la misma terminología era utilizada por químicos distintos, había desacuerdo en los valores actuales ya que habían sido usados diversos estándares por distintos trabajadores. Además, los métodos para obtener pesos atómicos solo eran aplicables a los gases. Inicialmente no era posible calcular los pesos atómicos de líquidos y sólidos, y esto hacía difícil reconocer relaciones periódicas, dado que a lo largo de un periodo se pasa de sólidos a gases.<sup>305</sup>

No sorprende, por tanto, que grupos de elementos similares en la tabla periódica hubieran sido descubiertos mucho antes que los periodos que mostraban elementos no semejantes; en otras palabras, las relaciones verticales de la tabla fueron descubiertas antes que las horizontales. Por supuesto, existe una razón que explica por qué los grupos se descubrieron mucho antes que los periodos: los elementos en cada grupo comparten propiedades químicas, lo que llevó a su agrupación de manera obvia intuitivamente. Aunque esto es cierto, lo

---

<sup>304</sup> Cfr. ROCKE, A. J., "The Reception of Chemical Atomism in Germany", *op. cit.*, 528.

<sup>305</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 44.

que se quiere subrayar es el reconocimiento de relaciones numéricas entre los elementos en los grupos. La existencia de la tabla periódica no depende solamente de las propiedades químicas sino también, y en gran medida, de aspectos numéricos y principios físicos, aunque esto último suscite preguntas relativas a la reducción de la química a la física.

Actualmente se sabe que el número atómico, y no el peso atómico, es el factor clave para colocar cada elemento en la tabla periódica, pues éste no depende de ningún modo de la combinación de los pesos. El número atómico está dado por el número de protones o unidades de carga positiva en el núcleo de cualquiera de los átomos. Así, cada elemento de la tabla periódica tiene un protón más que el elemento precedente. Como el número de neutrones en el núcleo también tiende a aumentar en la medida en que nos desplazamos en la tabla periódica, el número atómico y el peso atómico se corresponden aproximadamente, pero es el número atómico el que identifica cada elemento. Es decir, los átomos de un elemento particular tienen siempre el mismo número de protones, aunque pueden diferir en el número de electrones que contienen.<sup>306</sup>

#### 4. Los descubridores del sistema periódico

El sistema periódico no fue descubierto solamente por Mendeleiev, como comúnmente se piensa, o por Mendeleiev y Julius Lothar Meyer (1830-1895). Fue descubierto por cinco o seis individuos más o menos al mismo tiempo, en la década de los años 1860, siguiendo la racionalización de los pesos atómicos de la conferencia de Karlsruhe.<sup>307</sup>

A mediados del siglo XIX era claro que se necesitaba hacer algo para resolver la difundida confusión sobre los pesos equivalentes y los pesos atómicos. Avogadro había propuesto una solución a la ley de Gay-Lussac que preservaba las partículas elementales indivisibles de Dalton. Gay-Lussac había observado que la relación entre los volúmenes de los gases que entraban en combinación química y sus productos gaseosos era de enteros pequeños. Dalton rehusó aceptar esto

---

<sup>306</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, op. cit., 22.

<sup>307</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, op. cit., 63.

porque implicaba que los átomos parecían dividirse en algunos casos, como en el de la combinación de hidrógeno y oxígeno para producir vapor. Avogadro había sugerido que tales “átomos” debían ser diatómicos; es decir, que en su forma más elemental deberían ser dobles. Por tanto, el átomo de oxígeno no se dividía; más bien, se trataba de una molécula de oxígeno, que consistía de dos átomos de oxígeno.<sup>308</sup>

Como ya se señaló, fue en este contexto en el que se llevó a cabo la conferencia de Karlsruhe.<sup>309</sup> Su objetivo era clarificar las nociones de átomo y molécula y los temas relacionados de peso equivalente y peso atómico. Cannizzaro retomó el trabajo realizado por Avogadro cincuenta años antes haciéndolo más razonable para los químicos que asistían a la conferencia. Una vez habiendo aceptado la noción de que los gases elementales están formados por moléculas diatómicas, toda la subestructura de la química fue corregida. Cannizzaro estableció claramente la distinción entre pesos atómicos y pesos moleculares lo que hizo posible que los pesos de los elementos conocidos pudieran ser comparados de una manera más fiable. Al fin, los químicos interesados en clasificar los elementos tenían una base firme sobre la cuál construir confiadamente.<sup>310</sup>

Mientras más se examina el desarrollo del sistema periódico, se ve mejor la continuidad de su surgimiento. Mirando los eventos que llevan a la aparición del sistema periódico de Mendeleiev en 1869, el concepto de periodicidad puede verse como un desarrollo en distintas etapas de los sistemas de varios químicos. El final de este desarrollo fue Mendeleiev quien trabajó más que nadie para establecer la validez de un sistema completamente maduro. Existen buenas razones para singularizar a Mendeleiev (y a Lothar Meyer) en esta historia, más aún, para considerar a Mendeleiev el principal descubridor del sistema periódico.

---

<sup>308</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>309</sup> Cfr. *supra*, 80 y nota 144.

<sup>310</sup> Cfr. HARTLEY, H., “Stanislao Cannizzaro, F. R. S. (1862-1910) and the First International Chemical Conference at Karlsruhe in 1860”, *Notes and Records of the Royal Society of London*, Vol. 21, No. 1 (1966), 57.

Pero como ya se ha señalado, la *idea* de una periodicidad, que es central para el sistema periódico, no se originó con Mendeleiev.<sup>311</sup>

Para poder tener una mejor comprensión sobre las aportaciones de los descubridores del sistema periódico, parece oportuno dar algunos criterios que en su conjunto pueden considerarse como una definición de un sistema periódico. Un sistema periódico puede considerarse como una tabla con las siguientes características:

1. Debe contener una secuencia creciente continua de los pesos atómicos de los elementos conocidos hasta el momento.
2. La secuencia anterior ha de servir para definir un valor de posición (número ordinal) en la tabla.
3. La secuencia de pesos atómicos recién señalada debe dividirse en secciones dejando espacios para los elementos aún por descubrir, de modo que cuando este espacio sea llenado, el nuevo elemento se corresponda con grupos análogos de elementos tanto horizontal como verticalmente.
4. Se han de mostrar las relaciones conocidas entre periodicidad y valencia.
5. Se debe proporcionar una división en grupos y subgrupos.<sup>312</sup>

El sistema periódico moderno consigue ordenar los elementos según su número atómico de tal modo que éstos se ubican en grupos naturales. Este ordenamiento puede representarse de muchos modos diversos, dependiendo también del uso que quiera dársele; por ejemplo, un ingeniero eléctrico se enfocará en las similitudes y patrones en conductividades eléctricas, mientras que un químico posiblemente dará mayor importancia a la reactividad de los elementos.<sup>313</sup>

Desde la época de las primeras tablas periódicas como las de Newlands, Lothar Meyer y Mendeleiev, ha habido numerosos intentos para obtener una versión última. Desde la famosa tabla de Mendeleiev de 1869 se han publicado más de 700 versiones que incluyen todo tipo de alternativas, desde tablas tridimensionales, hélices, círculos concéntricos, espirales, escalonadas, zig-zag, etc.

---

<sup>311</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 67.

<sup>312</sup> Cfr. CASSEBAUM, H. & KAUFFMAN, G. B., "The Periodic System of the Chemical Elements: The Search for Its Discoverer", *Isis*, Vol. 62, No. 3 (1971), 314-315.

<sup>313</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 23.

Lo que es fundamental en todos estos intentos, es la ley periódica que solamente existe en una única forma. Ninguna de estas representaciones cambia este aspecto.

#### **4.1 Alexandre Emile Béguyer De Chancourtois y su sistema helicoidal**

El primero que, de hecho, descubrió la periodicidad química fue De Chancourtois en 1862 pues fue el primero en reconocer (siete años antes de que Medeleiev llegara a la misma conclusión) que las propiedades de los elementos son una función periódica de sus pesos atómicos.<sup>314</sup>

Para su representación tridimensional De Chancourtois utilizó los pesos equivalentes de los elementos, aunque dividió entre dos varios de ellos, obteniendo como resultado que muchos de sus valores coincidían de manera bastante aproximada con los nuevos pesos atómicos de Cannizzaro. También redondeó las cifras de los pesos atómicos para conseguir números enteros. De Chancourtois dibujó un cilindro y dividió su base en dieciséis partes iguales. Trazó después una hélice con ángulo de 45° con respecto al eje vertical. Cada vuelta de la hélice la dividió también en dieciséis puntos, de manera que el punto diecisiete quedaba exactamente sobre el punto uno, el dieciocho sobre el dos y así sucesivamente. Después acomodó los elementos en orden creciente de pesos atómicos sobre cada uno de los puntos. Como resultado de esta representación, los elementos cuyo peso atómico difería en dieciséis unidades, se alinearon verticalmente en columnas. El sodio, por ejemplo, con un peso atómico de 23, apareció colocado exactamente arriba del litio, cuyo peso atómico se calculó en 7. La siguiente columna contenía los elementos magnesio, calcio, fierro, estroncio, uranio y bario. Se puede ver claramente el surgimiento del moderno grupo de los elementos alcalinotérreos, con la única diferencia que algunos elementos de transición aparecen también en las alineaciones verticales. Este hecho no debe sorprender ya que la tabla de De Chancourtois es una tabla breve que no separa los grupos principales de elementos de los metales de transición. Pueden observarse relaciones periódicas o grupos químicos en este sistema, aunque de

---

<sup>314</sup> Cfr. *idem*, 43.

manera aproximada, cuando se recorre la superficie del cilindro moviéndose verticalmente de arriba hacia abajo.<sup>315</sup>

La propuesta de De Chancourtois, sin embargo, no causó una fuerte impresión en la comunidad química por distintas razones; entre otras, porque el estilo de representación elegido no permitía visualizar la convergencia de similitudes de manera convincente. Mientras que las agrupaciones químicas de algunos elementos como los metales alcalinos, las tierras alcalinas y los halógenos aparecían claramente en las columnas verticales, muchos otros elementos no lo hacían. Además, la inclusión de radicales como  $\text{NH}_4^+$  y  $\text{CH}_3$ , así como de otros compuestos como algunos óxidos, ácidos e incluso algunas aleaciones supuso una desventaja para el sistema. De cualquier modo, resultó que al hacer del eventual descubrimiento de los pesos atómicos la base de su sistema, De Chancourtois procedió de una mejor manera de lo que había imaginado, ya que las propiedades de los elementos son ciertamente una función periódica de sus números atómicos. Fue también inadvertidamente profético al usar números enteros para los pesos atómicos creando así series ordinales de los elementos, aunque no tenía una secuencia completa de todos los números en su sistema.<sup>316</sup>

## 4.2 Las octavas de Newlands

John Alexander Reina Newlands (1837-1898) era un químico que residía en Londres, aunque su madre había nacido en Italia. Este hecho parece haberlo animado a pelear como voluntario en la campaña revolucionaria de Garibaldi por la unificación de Italia. En todo caso, parece que el joven Newlands no sufrió ningún daño pues pronto volvió a su trabajo en Londres. En 1863 publicó su primera clasificación de los elementos sin hacer uso de los valores de los pesos atómicos establecidos a partir de la conferencia de Karlsruhe de 1860 porque no los conocía. En cambio, sí utilizó los pesos atómicos de Gerhardt quien había comenzado a revisarlos antes de la conferencia de Karlsruhe. Newlands pudo

---

<sup>315</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 69.

<sup>316</sup> Cfr. *ibidem*.

producir una tabla que consistía de once grupos de elementos con propiedades análogas cuyos pesos diferían por un factor de 8 o múltiplos de 8.<sup>317</sup>

Esta primera agrupación de los elementos es sorprendentemente sugestiva, especialmente teniendo en cuenta que utiliza los pesos atómicos anteriores a Karlsruhe. Desde Prout, los investigadores se habían encontrado con el hecho de que los intervalos aritméticos de los pesos atómicos entre los elementos no eran tan exactos o tan regulares como parecía que deberían ser. El hecho de que los pesos atómicos dependían de las caprichosas mezclas de isótopos para un elemento concreto no se sospechaba en ese entonces. Además del asunto de los isótopos, los pesos atómicos de los elementos no habían sido determinados correctamente. Para fortuna de Newlands y los otros pioneros del sistema periódico, la ordenación de los elementos de acuerdo con el peso atómico, a pesar de sus intervalos irregulares, corresponde casi exactamente a la basada en el número atómico. Más aún, se piensa que gracias a las mezclas naturales de isótopos fue posible anunciar el orden que posteriormente se descubrió con base en los números atómicos.<sup>318</sup>

En 1864, Newlands publicó una nueva clasificación de los elementos, esta vez haciendo uso de los pesos atómicos establecidos en Karlsruhe. Newlands encontró una diferencia de 16 (o muy cercana a este valor) en lugar de 8, entre los pesos de seis juegos del primer y segundo miembros de grupos de elementos similares. De nuevo, estos descubrimientos resultaron ser inesperadamente exactos teniendo en cuenta que estaba trabajando con pesos atómicos y no con números atómicos.<sup>319</sup>

Menos de un mes después, Newlands publicó un tercer sistema (también en 1864), pero en esta tabla incluyó menos elementos (24, más un espacio para un nuevo elemento) y no hizo mención de los pesos atómicos. Esta propuesta es especialmente meritoria pues Newlands asigna un número ordinal a cada uno de los elementos anticipándose así, en cierto sentido, a la noción moderna de número

---

<sup>317</sup> Cfr. VAN SPRONSEN, J. W., "One Hundred years of the "Law of Octaves": When the Italian Cannizzaro Was Fighting for Atomic Weights in Karlsruhe, Newlands Fought for the Liberation of Italy", *Chymia*, Vol. 11 (1966), 126.

<sup>318</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 73-74.

<sup>319</sup> Cfr. *idem*, 74.

atómico. Abandonando la progresión aritmética de los pesos atómicos, Newlands simplemente coloca los elementos en orden creciente de pesos atómicos sin preocuparse por los valores de dichos pesos. Lo más importante de esta publicación sobre la clasificación de los elementos fue presentar un sistema periódico; esto es, revelar un patrón de repetición en las propiedades de los elementos después de ciertos intervalos regulares. Esto, por supuesto, es la esencia de la ley periódica, y Newlands merece el crédito de haber descubierto este factor tan pronto, junto con De Chancourtois.<sup>320</sup>

En 1865 Newlands desarrolló otro sistema más que contenía considerables avances con respecto al anterior; incluía 65 elementos colocados en orden creciente de pesos atómicos utilizando de nuevo número ordinales en lugar de los valores conocidos de los pesos atómicos. Este sistema fue construido sobre su famosa ley de las octavas por lo que los elementos mostraban una repetición de sus propiedades químicas en intervalos de cada 8 elementos. Con esta propuesta Newlands da un paso importante en la evolución del sistema periódico ya que representa el primer anuncio claro de una nueva ley de la naturaleza relacionada con la repetición de las propiedades de los elementos después de ciertos intervalos en su secuencia. La ley periódica, aunque en nuestros días no se utiliza este término, es posiblemente el aspecto más importante de la tabla periódica. La tabla periódica en todas sus formas, después de todo, no es sino un intento de representar esta ley gráficamente.<sup>321</sup>

---

<sup>320</sup> Cfr. *idem*, 74-76.

<sup>321</sup> Cfr. *idem*, 76-77. En un artículo publicado en 1999, C. J. Giunta sostiene que la clasificación de Newlands no constituye un sistema periódico. Entre los motivos que sustentan esta afirmación señala que la propuesta de Newlands contiene varias inconsistencias. Sostiene, por ejemplo, que su formulación de la ley de las octavas no deja espacio para la predicción de nuevos elementos, o que sus predicciones anteriores a la ley de las octavas están basadas en relaciones entre pesos atómicos y no en los números que muestran el orden de los elementos. Cfr. GIUNTA, C. J., "J. A. R. Newlands Classification of the Elements: Periodicity, but no System (1)", *Bulletin for de History of Chemistry*, Vol. 24 (1999), 24-31. Esta postura es fuertemente criticada por E. Scerri, quién apunta que hay una serie de conceptos erróneos en la apreciación de Giunta que se deben, en parte, a que intenta examinar el trabajo de Newlands desde una perspectiva contemporánea sin considerar el contexto de sus descubrimientos. Según Scerri, Newlands fue el primero en hacer hincapié en la importancia de la ley periódica por medio de la ley de las octavas. Por lo que se refiere a las predicciones, Scerri anota que este aspecto del desarrollo científico es discutible, como lo muestran los debates actuales sobre el tema. Cfr. SCERRI, E., "A Philosophical Commentary on Giunta's

Aunque esta última propuesta puede considerarse un sistema periódico genuino comparado con sus anteriores listas de elementos, Newlands no vio la necesidad de separar los elementos en subgrupos como lo hizo Mendeleiev posteriormente. Es decir, no vio la necesidad de poner aparte los metales de transición, tal y como se encuentran ahora en la tabla periódica. La ley de las octavas se aplica perfectamente a los elementos de los dos primeros periodos, pero en los sucesivos elementos las periodicidades de Newlands se tornan difíciles pues los metales de transición hacen que los periodos consten de más de ocho elementos. Como el mismo Newlands pudo señalar más adelante, un periodo no necesariamente debía contener ocho elementos, sino que podía tener siete o nueve. Estas ideas se verificaron con el descubrimiento de los gases nobles, lo que supuso añadir una columna más al sistema periódico.<sup>322</sup>

### 4.3 William Odling

A diferencia de los otros descubridores del sistema periódico que fueron figuras marginales en la historia de la química, William Odling (1829-1921) fue un químico y científico distinguido que tuvo importantes puestos a lo largo de su carrera. El más notable fue suceder a Michael Faraday como director de la *Royal Institution* de Londres. Odling tuvo también la ventaja de haber asistido a la conferencia de Karlsruhe en la que se vio la necesidad de adoptar un sistema unificado de pesos atómicos. A diferencia de Newlands quien intentó elaborar un sistema periódico sin utilizar los valores de pesos atómicos recomendados por Cannizzaro, Odling pudo hacer uso de estos valores al elaborar su tabla de los elementos. De hecho, después de Karlsruhe, Odling se convirtió rápidamente en el defensor de las propuestas de Cannizzaro y Avogadro en Inglaterra, reconociendo la importancia significativa de los nuevos valores de los pesos atómicos.<sup>323</sup>

---

Critique of Newlands Classification of the Elements”, *Bulletin for History of Chemistry*, Vol. 25, No. 2 (2001), 124-128.

<sup>322</sup> Cfr. VAN SPRONSEN, J. W., “One Hundred years of the “Law of Octaves”, *op. cit.*, 131-133.

<sup>323</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 49.

El artículo principal de Odling sobre el sistema periódico apareció en 1864. Mientras que el sistema de Newlands de ese año solamente incluía 24 de los 60 elementos conocidos, el de Odling incluía 57 elementos. Más aún, el artículo de Odling precedió al anuncio de Newlands sobre la periodicidad a la *London Chemical Society* en 1865. Sin embargo, todo parece indicar que ambos químicos trabajaron de manera independiente.<sup>324</sup>

Odling comienza su artículo señalando que al ordenar los más o menos 60 elementos conocidos por pesos atómicos o números proporcionales, se observa una marcada continuidad en las series aritméticas resultantes, y aunque hay algunas excepciones a esta regularidad, la periodicidad en las propiedades químicas es claramente observable en los grupos horizontales de su tabla. Además, nota que hay un número considerable de pares de elementos químicamente análogos, aproximadamente la mitad de los elementos conocidos, cuyas diferencias de peso atómico oscilan entre los valores de 84.5 y 97. La mitad de estos casos incluyen al primer y tercer números de lo que se conocía como triadas por lo que Odling sugiere que puede encontrarse un elemento intermedio. Se trata de un claro ejemplo de una predicción hecha con base a un sistema, aunque no da ejemplos específicos. En 1865 Odling enfatizó las relaciones entre valencia y periodicidad, y demostró la existencia de subgrupos afines a los grupos principales; las diferencias de ésta propuesta de Odling con respecto a la tabla de Mendeleiev de 1869 son prácticamente insignificantes.<sup>325</sup>

#### 4.4 Gustavus Detfel Hinrichs

El caso de Gustavus Detfel Hinrichs (1836-1923) es inusual entre los descubridores del sistema periódico. Nació en Holstein entonces parte de Dinamarca que posteriormente pasó a ser una provincia alemana. Fue un autor prolífico: publicó alrededor de 3000 artículos en danés, francés, alemán e inglés además de alrededor de 25 libros en inglés y alemán. Estos libros incluyen el

---

<sup>324</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 82.

<sup>325</sup> Cfr. *idem*, 83 y CASSEBAUM, H. & KAUFFMAN, G. B., *op. cit.*, 319-320.

excéntrico *Atomechanick* de 1867, en alemán, en el que Hinrichs propone su versión definitiva de la clasificación de los elementos.<sup>326</sup>

Pocos años antes, en 1859, los alemanes Gustav Robert Kirchhoff (1824-1887) y Robert Bunsen (1811-1899) habían descubierto que se podía conseguir que cada elemento emita luz que puede dispersarse mediante un prisma de cristal y analizarse cuantitativamente. También descubrieron que cada elemento daba un único espectro que consiste en un conjunto de líneas espectrales específicas, mismas que incluyeron en tablas complejas. Algunos autores, entre ellos Hinrichs, sugirieron que estas líneas espectrales podían proveer información sobre los elementos que las producían, pero esta opinión no fue aceptada por Bunsen, quien se opuso a la idea de utilizar los espectros en orden a estudiar los elementos y clasificarlos de alguna manera.<sup>327</sup>

Hinrichs, sin embargo, no dudó en conectar los espectros con los átomos de los elementos. Se interesó principalmente en el hecho de que, en cada elemento particular, las frecuencias de sus líneas espectrales parecían ser siempre múltiplos enteros (de la menor diferencia). Por ejemplo, en el caso del calcio, observó una relación de 1:2:4 entre sus frecuencias espectrales. Hinrichs interpretó este hecho señalando que, si las diferencias entre las líneas espectrales producen relaciones de números enteros, la causa puede deberse a las relaciones del tamaño de las dimensiones atómicas de varios elementos. Esta interpretación resultó exitosa; además de ser esencialmente correcta desde la perspectiva moderna, proporcionó un nuevo modo de clasificar los elementos en un sistema periódico.<sup>328</sup>

En un artículo publicado en 1864, Hinrichs anota:

En cuanto tuve noticia del gran descubrimiento de Kirchhoff y Bunsen, estuve seguro que las líneas oscuras en [los espectros] de los elementos probarían estar distribuidas de acuerdo con leyes simples y que estas leyes nos podrían conducir a un conocimiento de las *dimensiones relativas de los átomos*.<sup>329</sup>

---

<sup>326</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 86.

<sup>327</sup> Cfr. ZAPFEE, C. A., "Gustavus Hinrichs, Precursor of Mendeleev", *Isis*, Vol. 60, No. 4 (1969), 469.

<sup>328</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 88.

<sup>329</sup> Citado en ZAPFEE, C. A., *op. cit.*, 469. Las cursivas son del texto, la traducción es mía.

Aunque el sistema de Hinrichs contiene varias imprecisiones, consigue agrupar de manera acertada muchos elementos importantes. Una de sus principales ventajas es que sus agrupaciones se presentan de modo más claro que en los sistemas de Newlands de 1864 y 1865. Si bien no se presenta como una tabla, la clasificación de Hinrichs parece mostrar muchas de las relaciones de periodicidad que se observan en la tabla moderna. Hinrichs poseía un conocimiento profundo tanto de química como de mineralogía. Así, su aproximación a la clasificación de los elementos fue parcialmente química.<sup>330</sup>

Hinrichs fue posiblemente el más interdisciplinar de todos los descubridores del sistema periódico. Más aún, Hinrichs llegó al sistema periódico por un camino diferente, como lo hizo también Lothar Meyer, quien se basó en estudios de periodicidad física. Un factor que es importante señalar es que Hinrichs parece haberse adelantado a su tiempo al dar gran importancia al análisis de los espectros de los elementos y tratar de relacionarlos con la clasificación periódica.<sup>331</sup>

#### 4.5 Julius Lothar Meyer

El primer sistema periódico que tuvo mayor impacto en el mundo científico fue el del químico alemán Julius Lothar Meyer. Al igual que Mendeleiev, Lothar Meyer asistió a la conferencia de Karlsruhe en 1860 y conoció de primera mano el trabajo de Cannizzaro sobre los pesos atómicos de los elementos, mismo que le causó una gran impresión. En 1862, es decir, dos años después de Karlsruhe, elaboró dos tablas periódicas parciales: una con 28 elementos acomodados en orden creciente de pesos atómicos y agrupados en columnas verticales de acuerdo a sus valencias químicas, y otra con 22 elementos que no estaban ordenados según pesos atómicos.<sup>332</sup>

En 1864 Lothar Meyer publicó la primera edición de un libro de química, *Die Modern Theorie der Chemie*, que estaba profundamente influenciado por el trabajo de Cannizzaro. El libro, del que se hicieron cinco ediciones, fue traducido al inglés,

---

<sup>330</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, op. cit., 53.

<sup>331</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, op. cit., 92.

<sup>332</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, op. cit., 55.

francés y ruso y eventualmente se convirtió en uno de los tratados más autorizados sobre los principios teóricos de la química antes de la llegada de la físico-química a finales de 1800. Este texto incluye la publicación de las tablas mencionadas.<sup>333</sup>

En la primera tabla, Lothar Meyer muestra claramente, y por primera vez, una variación regular en la valencia de los elementos de 4 a 1 al desplazarse de izquierda a derecha a lo largo de la tabla, seguida de la repetición de valencia 1 y un posterior incremento a los elementos con valencia 2. Esto sugiere que Lothar Meyer intentó ordenar los elementos no solo en términos de pesos atómicos sino también en función de sus propiedades químicas. Más aún, parece que decidió que el criterio que pesara más al ordenar algunos de los elementos fue el de las propiedades químicas sobre los pesos atómicos. Así lo hizo, por ejemplo, al agrupar al telurio con elementos como el oxígeno y el azufre, o al yodo con los halógenos. Lothar Meyer también separó los elementos en dos tablas de manera análoga a la separación de la tabla periódica moderna en la que aparecen de una parte el grupo de los elementos principales y de otra los elementos de transición.<sup>334</sup>

Otra característica digna de mención de esta tabla de Lothar Meyer es la presencia de varios huecos o espacios vacíos que denotan el lugar previsto para elementos no conocidos. Una vez más, parece que la presencia de estos espacios no se originó con Mendeleiev, quién espero cinco años desde Karlsruhe para aventurarse a publicar un sistema periódico y a hacer las predicciones detalladas sobre los elementos hasta entonces desconocidos. La tabla de Lothar Meyer contiene interpolaciones entre elementos vecinos. Por ejemplo, en el espacio debajo del elemento silicón, indica que debería colocarse un elemento cuyo peso atómico fuera mayor que el silicón por 44.55. Esto implica un peso de 73.1 para este elemento desconocido, el cual, cuando fue descubierto, se encontró que tenía un peso de 72.3. Esta predicción del germanio que fue aislado en 1886, se atribuye generalmente a Mendeleiev aunque fue claramente anticipada por Lothar Meyer en 1864.<sup>335</sup>

---

<sup>333</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>334</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 95-96.

<sup>335</sup> Cfr. *idem*, 96.

Por lo que se refiere a la tabla de 22 elementos, aunque Lothar Meyer no elige el concepto de peso atómico creciente para ordenarlos, éste también aumenta progresivamente a lo largo de la tabla y solamente aparecen seis inconsistencias. Dado que Lothar Meyer consiguió clasificar 50 elementos (28 en una tabla y 22 en otra) y que en esta clasificación solamente aparecen seis errores, mismos que ocurren en los problemáticos metales de transición (usando el término moderno), hay que decir que éstas no pueden considerarse una falla significativa. Dentro de estos seis elementos, solamente dos se refieren a una ubicación desacertada en términos de incremento de pesos atómicos: molibdeno y vanadio. El resto se encuentran dentro del límite de error en el cálculo de los pesos atómicos.<sup>336</sup>

Sin embargo, la mayor fuerza de Lothar Meyer está en su conocimiento adicional de propiedades físicas y su utilización en la construcción de representaciones del sistema periódico. Lothar Meyer puso particular atención en los volúmenes atómicos, densidades y puntos de fusión de los elementos. Publicó un diagrama que mostraba la periodicidad entre los volúmenes atómicos de los elementos (peso atómico / gravedad específica); la periodicidad entre los elementos puede observarse a simple vista. Con esto contribuyó considerablemente a la aceptación favorable del sistema periódico. Mendeleiev también se hizo cargo de la importancia del volumen atómico; incluso hizo predicciones sobre volúmenes atómicos en su primer artículo de 1869 pero no enfatizó la periodicidad en esta propiedad física de los átomos ni elaboró diagramas sobre esta tendencia.<sup>337</sup>

## 5. Dimitri Ivanovich Mendeleiev

Mendeleiev es, sin duda, el científico ruso más famoso de la era moderna. Aunque no fue el primero en desarrollar el sistema periódico, su versión es la que ha creado el mayor impacto en la comunidad científica desde su introducción. Su nombre se encuentra conectado indudablemente con el sistema periódico,

---

<sup>336</sup> Cfr. *idem*, 98.

<sup>337</sup> Cfr. *ibidem* y BROOKS, N. M., *op. cit.*, 133.

posiblemente del mismo modo con el que el nombre de Darwin está relacionado con la teoría de la evolución y el de Einstein con la teoría de la relatividad.<sup>338</sup>

Aunque es posible discutir sobre algunos aspectos prioritarios de sus contribuciones, no se puede negar que Mendeleiev es también el más importante difusor del sistema periódico: no solo defendió su validez, sino que, además, dedicó mucho tiempo a su elaboración. Como ya se señaló, hubo otros que produjeron trabajos significativos, pero muchos de ellos como De Chancourtois, Odling y Hinrichs después de publicar sus ideas iniciales, dirigieron su atención a otros campos y nunca retomaron de manera seria el estudio del sistema periódico para examinar todas sus consecuencias en el grado en el que lo hizo Mendeleiev.<sup>339</sup>

Lo anterior no sugiere que Mendeleiev trabajara solamente en el sistema periódico. Es también conocido por otras aportaciones científicas, así como por trabajar en varios campos de química aplicada, como la industria del petróleo rusa y la dirección del instituto ruso de pesos y medidas. Pero el sistema periódico fue para Mendeleiev su mayor interés.

## 5.1 Primeros años de vida y trabajo científico

Mendeleiev nació en Tobolsk, Siberia, en 1834. Fue el último hijo de una familia numerosa. Su padre murió cuando era muy joven, y su madre falleció cuando Dimitri tenía 15 años. Deseosa de impulsar sus estudios científicos, hizo todo lo posible para inscribir a su hijo en el principal instituto pedagógico de San Petersburgo. Ahí Mendeleiev recibió clases de química, biología y física, además de pedagogía. Esta última tuvo una profunda influencia en su trabajo científico, ya que fue durante la redacción de un libro de texto para enseñar química inorgánica que Mendeleiev comenzó a desarrollar su sistema periódico.<sup>340</sup>

Los primeros trabajos científicos de Mendeleiev consistieron en un examen detallado de las propiedades químicas, así como los volúmenes específicos de numerosas sustancias. En 1856 pasó un tiempo trabajando en el laboratorio de

---

<sup>338</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 58.

<sup>339</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 101.

<sup>340</sup> La breve reseña de datos biográficos está tomada básicamente de *idem*, 101 y ss. y LEICESTER, H. M., "Factors Which Led Mendeleev to The Periodic Law", Vol. 1 (1948), 67 y ss.

Robert Bunsen (1811-1899) en Heidelberg, donde estudió el comportamiento de los gases. Fue durante esta estancia en Alemania cuando Mendeleiev asistió al congreso de Karlsruhe en el que Cannizzaro finalmente presentó una distinción clara entre átomos y moléculas<sup>341</sup>. El mismo Mendeleiev se referirá en una carta fechada el 7 de septiembre de 1860 a la admiración que la causó la claridad con la que se formuló esta distinción:

Se decidió adoptar una comprensión diferente de las moléculas y los átomos de una molécula, considerando como molécula la cantidad de una sustancia que interviene en una reacción y determinando las propiedades físicas, y considerando como un átomo a la menor cantidad de una sustancia incluida en una molécula. Además se llegó a un entendimiento acerca de los equivalentes, considerados como empíricos, no en función de la comprensión de los átomos y las moléculas.<sup>342</sup>

Y posteriormente:

Recuerdo vívidamente la impresión producida por sus discursos, que no admitían compromisos y parecían defender la verdad misma, basados en las ideas de Avogadro, Gerhardt y Regnault que en ese tiempo estaban lejos de ser reconocidas. Y aunque no se pudo llegar a ninguna conclusión, aun así, los objetivos de la reunión se consiguieron, porque las ideas de Cannizzaro probaron, después de algunos años, ser las únicas en resistir las críticas y representar al átomo como “la porción más pequeña de un elemento que forma parte de una molécula o sus compuestos”. Solamente tales pesos atómicos reales —no convencionales— pueden servir de base para la generalización.<sup>343</sup>

Fue después de Karlsruhe cuando Mendeleiev llegó a una clara comprensión de la naturaleza de los átomos y de los pesos atómicos. Ninguna formulación de la ley periódica habría sido posible con el sistema de pesos equivalentes utilizado hasta entonces, ya que éste oscurecía la relación ordenada entre propiedades y pesos atómicos que fue la base de este gran descubrimiento.<sup>344</sup>

---

<sup>341</sup> Cfr. DE MILT, C., *op. cit.*, 155 y *supra*, 79.

<sup>342</sup> Cfr. NIAZ, M. & RODRÍGUEZ, M. A. & BRITO, A., “An appraisal of Mendeleev’s Contribution to the Development of the Periodic Table”, *Studies in History and Philosophy of Science*, No. 35 (2004), 272. La traducción es mía.

<sup>343</sup> MENDELEEV, D. I., “The Periodic Law of the Chemical Elements”, *Journal of the Chemical Society*, No. 55 (1889), 634-656, citado en LEICESTER, H. M., *op. cit.*, 70. Las comillas son del texto, la traducción es mía.

<sup>344</sup> Cfr. LEICESTER, H. M., *op. cit.*, 70.

En 1865 Mendeleiev defendió su tesis doctoral, que se basó en su estudio sobre la interacción entre el alcohol y el agua. Por esta época fue cuando empezó a considerar la posibilidad de escribir un libro enfocado a sistematizar la química inorgánica, esfuerzo que —como ya hemos mencionado— le llevaría al descubrimiento del sistema periódico. A finales de 1868 Mendeleiev terminó el primer volumen de *Los principios de la Química* en el que realizó un examen sistemático de los diferentes tipos de elementos y compuestos y en el que trataba sobre los elementos más comunes como hidrógeno, oxígeno y nitrógeno. Inicialmente agrupó estos elementos de acuerdo con las valencias que mostraban cuando se combinaban con hidrógeno. Esto ofrecía, al menos, algunos modos de organización, pero a este punto no había ningún signo de principio organizador o sistema de clasificación. Este primer volumen concluyó con un estudio sobre los halógenos. Mendeleiev comenzó el segundo volumen con el estudio de los metales alcalinos y se topó entonces con la pregunta sobre qué elementos tratar a continuación.<sup>345</sup>

La cuestión de un principio organizador debía afrontarse y, a diferencia de los precursores del sistema periódico con el que estaba familiarizado, Mendeleiev no aceptaba ni el concepto de tríadas ni la existencia de una sustancia primaria. Mendeleiev conocía el trabajo del químico belga Jean-Servais Stas (1813-1891), por ejemplo, quien comenzó defendiendo la hipótesis de William Prout, pero que posteriormente se convirtió en su mayor crítico después de una serie de determinaciones precisas de pesos atómicos que él mismo había realizado. Mendeleiev se refiere específicamente a Stas en el primer volumen de su libro y expresa también su desacuerdo con la hipótesis de Prout. Se distancia también de la noción de triadas de elementos al proponer, por ejemplo, que el flúor debe agruparse junto con el cloro, el bromo y el yodo, o cuando insiste que el rubidio, el cesio y el talio pertenecen a los metales alcalinos junto con el litio, el sodio y el potasio, es decir, se añaden a la triada original que constituía ese grupo.<sup>346</sup>

No obstante, aunque Mendeleiev había comprendido la importancia del peso atómico, inicialmente no acogió este modo de caracterizar los elementos.

---

<sup>345</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 103.

<sup>346</sup> Cfr. *idem*, 103-104.

Hubo de pasar algún tiempo antes de que estuviera firmemente convencido de utilizar los pesos atómicos de Cannizzaro. Entre 1864 y 1865 enlistó 53 elementos, pero continuó usando los valores de los pesos equivalentes para algunos de ellos. Sin embargo, al redactar el segundo volumen de su libro en 1868, enlistó 22 elementos, todos ellos de acuerdo con los pesos atómicos de Cannizzaro. Esto implica que, para este momento, había comenzado a trabajar concienzudamente en la clasificación de los elementos y había asimilado completamente el uso de los pesos atómicos modernos, una decisión que probó ser esencial para su descubrimiento.<sup>347</sup>

## 5.2 Mendeleiev y la ley periódica

En 1869, Mendeleiev publica un artículo titulado *Las relaciones entre las propiedades y los pesos atómicos de los elementos* en el que enuncia por primera vez el principio de periodicidad, entendiendo por éste que las propiedades físicas y químicas de las sustancias simples y los compuestos constituyen funciones periódicas basadas en el peso atómico de un elemento. El factor determinante es el peso atómico del elemento. En el borrador anota:

Cuando se ordenan los elementos de acuerdo con el tamaño de sus pesos atómicos, presentan una función periódica tal que, si uno expresa las propiedades químicas de cada elemento por medio de un número y si los átomos están colocados a lo largo del eje de la abscisa, y las propiedades están colocadas a lo largo de la ordenada, uno obtiene una curva, cuyos bordes representan la similitud de los contornos de diferentes partes de la curva.

Sin embargo, en la versión publicada, simplemente menciona que “Los elementos ordenados de acuerdo con el tamaño de sus pesos atómicos muestran *claras* propiedades periódicas”.<sup>348</sup>

Además de la idea de que los elementos si se ordenan según sus pesos atómicos, exhiben una evidente *periodicidad* en sus propiedades, enumera otros aspectos que se derivan de ésta, por ejemplo:

---

<sup>347</sup> Cfr. *idem*, 104.

<sup>348</sup> Cfr. BROOKS, N. M., *op. cit.*, 128-129.

- Los elementos cuyas funciones químicas son similares, o tienen pesos atómicos muy cercanos (como el osmio, el iridio, y el platino), o muestran un incremento uniforme en sus pesos atómicos (como el potasio, el rubidio y el cesio). (Esto manifiesta la importancia que da a las propiedades de los elementos según su orden tanto vertical como horizontal (según la tabla periódica moderna)).
- El orden de los elementos, o de grupos de elementos, en función de sus pesos atómicos corresponde a sus así llamadas *valencias*, así como, en cierta medida, a sus propiedades químicas distintivas como se desprende, entre otras series, de la del litio, berilio, boro, carbón, nitrógeno, oxígeno y flúor.
- Los elementos más abundantes tienen pesos atómicos *pequeños*.
- La *magnitud* de los pesos atómicos determina las propiedades del elemento del mismo modo que el tamaño de la molécula determina las propiedades del cuerpo complejo. (Con esto enfatiza que los diferentes elementos tienen diferentes propiedades y que los compuestos de esos elementos deberían reflejar esas diferencias).
- Debemos esperar la posible existencia de elementos todavía no descubiertos, por ejemplo, elementos análogos al aluminio o al silicio, cuyos pesos atómicos estén entre 65 y 71.
- El peso atómico dado de un elemento en ocasiones puede ser modificado por el conocimiento de los pesos de elementos contiguos. Así, el peso atómico del telurio debe estar entre 123 y 126, y no puede ser 128.
- Algunas propiedades características de los elementos pueden predecirse a partir de sus pesos atómicos.<sup>349</sup>

Aunque en este texto se muestran claramente muchas de los aspectos esenciales del nuevo sistema, también pone de manifiesto serios problemas: Mendeleiev no menciona, por ejemplo, exactamente qué tipo de propiedades físicas y químicas de los elementos mensurables numéricamente son las que se utilizan para mostrar el principio de periodicidad.<sup>350</sup> Además, los pesos atómicos

<sup>349</sup> Cfr. *idem*, 129 y SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 109-110.

<sup>350</sup> Más adelante mencionará, por ejemplo, los volúmenes atómicos (propiedad física) y la composición de óxidos salinos (propiedad química). Cfr. BROOKS, N. M., *op. cit.*, 132.

de algunos elementos, por ejemplo, el uranio, eran poco precisos, así como también algunas de las valencias características de otros elementos, como el plomo y el talio, lo que tendrá como consecuencia que más adelante Mendeleiev tenga que modificar la posición de estos elementos en la tabla. Finalmente, la forma de la tabla que presenta en este artículo aunque expresa algunas de las relaciones básicas entre los elementos, no muestran otras relaciones fundamentales.<sup>351</sup>

No obstante, la concepción de Mendeleiev de la relación entre peso atómico y propiedades físicas y químicas de un elemento y sus compuestos fue más allá que la de ninguno de sus precursores. Döbereiner, De Chancourtois y Newlands habían establecido relaciones formales entre grupos limitados de elementos. Lothar Meyer había relacionado ciertas propiedades físicas, principalmente volúmenes atómicos, con pesos atómicos y había reconocido la periodicidad de estas propiedades. Mendeleiev consideró este campo como un todo. Las propiedades químicas, las propiedades físicas y las reacciones de los elementos encontraron su lugar propio.<sup>352</sup>

Desde el anuncio del descubrimiento de la ley periódica de los elementos, se ha escrito mucho sobre el trabajo de Mendeleiev en la clasificación química como una contribución fundamental en el conjunto del conocimiento científico. Sin embargo, cuando se ha intentado explicar el método de su descubrimiento, se percibe que se ha hecho de manera incompleta y sin relacionarlo adecuadamente con el trabajo de otros químicos que lo precedieron y sin señalar de manera precisa los pasos por los cuales Mendeleiev llegó a sus conclusiones.<sup>353</sup>

Un método general del descubrimiento científico no puede ser fácilmente definido. En ocasiones, una intuición repentina puede posibilitar el discernimiento sobre relaciones entre datos en los que previamente se había trabajado con intensidad. Sin embargo, el descubrimiento de algo tan fundamental como una ley natural generalmente es el resultado de un proceso acumulativo. En el caso de Mendeleiev, la evidencia indica que el descubrimiento de la ley periódica ha seguido un proceso que el mismo Mendeleiev ha descrito como el procedimiento

---

<sup>351</sup> Cfr. *idem*, 129-130.

<sup>352</sup> Cfr. LEICESTER, H. M., *op. cit.*, 72.

<sup>353</sup> Cfr. RAWSON, D. C., "The Process of Discovery: Mendeleev and the Periodic Law", *Annals of Science*, Vol. 31, No. 3 (1974), 181.

habitual en el descubrimiento de cualquier ley natural: 1) el presentimiento de que esa ley existe; 2) el reconocimiento de la importancia de dicha ley; y 3) la confirmación de la ley por medio de la experimentación. Si se acepta la validez de esta secuencia, debe aceptarse también que aunque los tres pasos son esenciales, el segundo —el reconocimiento de la importancia de la ley— es probablemente el más importante, ya que supone el paso de la simple acumulación y ordenación de datos particulares a importantes generalizaciones.<sup>354</sup>

En el medio siglo anterior a Mendeleiev, varios químicos supusieron que los elementos estaban relacionados matemáticamente, probablemente de acuerdo con sus propiedades y pesos atómicos. Mendeleiev reconoce que en la época en la que comenzó a trabajar en su sistema de los elementos estaba al tanto de los trabajos de algunos de ellos, por ejemplo, John Gladstone (1827-1902), Peter Kremers (1827-?), Ernst Lenssen (1837-?), Dumas y Pettenkofer, y apunta que sus investigaciones lo animaron a buscar una ley que gobernara las relaciones entre los elementos. ¿Por qué, entonces, fue Mendeleiev y no ellos quién reconoció y explicó la ley que subyace a estas relaciones?<sup>355</sup>

Por una parte, puede decirse que los precursores de Mendeleiev parecen haberse interesado demasiado en la aparente pero engañosa relación numérica, lo que les impidió la búsqueda de un principio unificador real. En algunos casos se sintieron también atraídos por la idea de que los pesos atómicos de elementos análogos aumentan en intervalos regulares, formando a menudo triadas de elementos. Otros sostuvieron que las relaciones numéricas proporcionaron evidencia para sostener que una materia prima servía como una unidad estructural básica de elementos cada vez más complejos. Aunque Mendeleiev supo sacar provecho del presentimiento de que los elementos se relacionaban de acuerdo con sus pesos atómicos, no se dejó llevar por suposiciones erróneas que implicaban relaciones numéricas ingeniosas.<sup>356</sup>

Por otra parte, Mendeleiev tuvo a su disposición (a finales de los años 1860) una relación de valores más precisos de pesos atómicos, y lo que es más

---

<sup>354</sup> Cfr. *idem*, 181-182.

<sup>355</sup> Cfr. *idem*, 182.

<sup>356</sup> Cfr. *ibidem*.

importante, una distinción clara entre éstos y los pesos equivalentes. De aquí que no solo procediera a comparar elementos análogos dentro de los grupos (como por ejemplo los metales alcalinos), tal y como lo habían hecho sus precursores, sino que comparó también elementos desemejantes. A través de este procedimiento, Mendeleiev consiguió relacionar todos los elementos en un sistema en el que sus propiedades están en función de sus pesos atómicos, y en consecuencia reconocer el principio de periodicidad como una ley de la naturaleza. La confirmación de esta ley sería llevada a cabo experimentalmente más adelante por otros químicos.<sup>357</sup>

### 5.3 Predicciones y la tabla periódica

Uno de los mayores logros de Mendeleiev, además de corregir los pesos atómicos de algunos elementos y modificar la ubicación de otros dentro del sistema periódico –como fue, por ejemplo, el caso del intercambio de posición entre el telurio y el yodo–, fue el haber predicho correctamente la existencia de nuevos elementos. Ya desde su primera publicación en 1869, al acomodar los elementos en la tabla periódica, dejó libres tres espacios, señalando que deberían ser ocupados por elementos todavía no descubiertos los cuales tendrían propiedades análogas a las de los elementos vecinos. Mendeleiev se aventuró a predecir las propiedades físicas y químicas de estos tres elementos que más tarde se llamarían galio, escandio y germanio y cuyo descubrimiento convenció a muchos químicos de la validez de su ley periódica.<sup>358</sup>

¿Por qué fue Mendeleiev quien realizó estas predicciones y no Lothar Meyer ni ninguno de sus predecesores? Posiblemente porque, gracias a su aproximación filosófica a la química, Mendeleiev pudo darse cuenta de que los elementos abstractos deberían ser considerados como más fundamentales que las sustancias simples. La explicación de por qué los elementos persisten en sus compuestos debía encontrarse en los elementos abstractos y no en las sustancias

---

<sup>357</sup> Cfr. *idem*, 182-183.

<sup>358</sup> Cfr. LEICESTER, H. M., *op. cit.*, 73.

simples, y en consecuencia, si el sistema periódico debería ser de importancia fundamental, primero habría que clasificar a los elementos abstractos.<sup>359</sup>

Precisamente porque intentaba clasificar elementos abstractos y no sustancias simples, Mendeleiev no se dejó confundir por propiedades químicas no esenciales. Por ejemplo, los elementos en el grupo de los halógenos (flúor, cloro, bromo, iodo) aparecían bastante diferentes unos de otros cuando el enfoque se ponía en ellos como sustancias simples aisladas, ya que se trata de dos gases, un líquido y un sólido respectivamente. Las similitudes entre los miembros de este grupo se aprecian mejor cuando se consideran los compuestos que cada uno de ellos forman con el sodio, por ejemplo, que muestran ser polvos blancos cristalinos. El punto es que en estos compuestos, el flúor, el cloro, el bromo y el iodo, están presentes no como sustancias simples sino en una forma latente o esencial, como sustancias básicas.<sup>360</sup>

Es importante comprender el modo de proceder de Mendeleiev en relación con la ubicación de los elementos en su sistema periódico si queremos entender muchas de sus correcciones de pesos atómicos y predicción de elementos desconocidos. Mendeleiev consideró otros criterios además del peso atómico para ordenar los elementos tales como la similitud entre los elementos y el concepto de que solo un elemento podía ocupar un determinado lugar en la tabla periódica. Sin embargo, todos estos criterios podían ser ignorados, y de hecho lo fueron, según se presentaban los casos particulares.<sup>361</sup>

Mendeleiev consideraba que las semejanzas entre los elementos de una misma familia eran muy importantes, por lo que buscó las similitudes químicas que se revelaban a partir, por ejemplo, de reacciones de unos elementos con otros, en la naturaleza de sus sales, en las reacciones de precipitación, en la química ácido-base de los elementos. En contraste a la aproximación de Lothar Meyer,

---

<sup>359</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 117.

<sup>360</sup> Cfr. *idem*, 118.

<sup>361</sup> Cfr. *idem*, 125. Hubo casos en los que consideró suficiente mover un determinado elemento para reflejar más adecuadamente ciertas semejanzas en las familias de elementos, sin cambiar el peso atómico en cuestión. Esto es lo que hizo por ejemplo con el mercurio que parecía más semejante al zinc y al cadmio, que al cobre y a la plata, con los que había sido colocado en tablas anteriores.

Mendeleiev creía que las propiedades químicas debían tener precedencia sobre las propiedades físicas, con la importante excepción del peso atómico, por supuesto. Lothar Meyer estableció su propio sistema periódico concentrándose de manera predominante en las semejanzas entre las propiedades físicas tales como volúmenes atómicos, densidades y grados de fusión.<sup>362</sup>

Tanto la predicción de nuevos elementos, como la corrección de pesos atómicos de los elementos existentes, permitió la correcta ubicación de los elementos en la tabla de Mendeleiev. Estas pueden considerarse como dos formas de predicción y fueron esenciales para el perfeccionamiento del sistema periódico. Sin embargo, hay que señalar también que no todas las predicciones realizadas por Mendeleiev fueron exitosas. Por tanto, podríamos preguntarnos por qué al parecer las predicciones exitosas de Mendeleiev sirvieron para reforzar la validez de su sistema mientras que sus fallos no lograron debilitarla. Si se admite que fueron las predicciones las que tuvieron mayor peso en la aceptación del sistema periódico, entonces estamos en desventaja para poder dar respuesta a esta cuestión. Pero no está del todo establecido que la predicción sea el factor más importante para demostrar el valor de una nueva idea científica. De hecho, más que probar el valor de la predicción, el desarrollo y la aceptación de la tabla periódica debe proporcionarnos un poderoso ejemplo de la importancia de la ordenación de los elementos, es decir, de la capacidad de una nueva teoría científica para explicar los hechos ya conocidos.<sup>363</sup>

La noción de que las teorías científicas son aceptadas primariamente si hacen predicciones exitosas parece estar bien radicada en la cultura científica, y la historia de la tabla periódica ha sido uno de los episodios a través de los cuales esta noción se ha propagado. Sin embargo, filósofos, y algunos científicos, han debatido ampliamente hasta qué punto las predicciones influyen en la aceptación de una teoría científica, y si no es de alguna manera una conclusión inevitable que las predicciones exitosas son más reveladoras que otros factores.<sup>364</sup>

---

<sup>362</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>363</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>364</sup> Aunque la cuestión sigue abierta, lo cierto es que, por lo que se refiere a la ley periódica, ambas posturas aportan un sustento epistemológico significativo. El artículo más paradigmático sobre el tema es SCERRRI, E. & WORRALL, J., "Prediction and the Periodic Table", *Studies in History and*

## 6. La física y la tabla periódica

Aunque las teorías sobre el átomo fueron reintroducidas en la ciencia por Dalton, fueron debatidas por algunos químicos del siglo XIX pues varios de ellos se negaban a aceptar que estos existieran en realidad. Sin embargo, gracias al trabajo de algunos físicos, la realidad del átomo fue cada vez más firmemente establecida. El artículo de Albert Einstein (1879-1955) sobre el movimiento browniano (1905), usando métodos estadísticos, proporcionó la justificación teórica conclusiva para la existencia de los átomos, aunque le faltaba el soporte experimental. Este fue proporcionado poco después por el físico experimental francés Perrin. A principios del siglo XX, los físicos no solamente adoptaron al átomo, sino que transformaron su ciencia realizando numerosos experimentos dirigidos a descubrir su estructura. Su trabajo tuvo una profunda influencia en química y específicamente en el caso de la tabla periódica.<sup>365</sup>

El descubrimiento del electrón, la primera partícula subatómica y el primer indicio de que el átomo posee una subestructura, vino en 1897 por medio de J.J. Thomson en el laboratorio Cavendish en Cambridge. Poco antes, en 1895, Wilhelm Konrad Röntgen (1845-1923) había descubierto los rayos-X en Würzburg, Alemania, los cuales se convirtieron en una poderosa herramienta para el estudio de la estructura interna de la materia. Sometiendo muestras de los diferentes elementos a un bombardeo con rayos X, Henry Moseley (1887-1915) descubrió que un mejor principio para ordenar los elementos en el sistema periódico es el número atómico en lugar del peso atómico.<sup>366</sup>

Un año después de que Röntgen descubriera los rayos-X, Henri Becquerel (1852-1908) descubrió el importante fenómeno de la radioactividad por el que ciertos átomos se desintegran espontáneamente emitiendo un número de distinto

---

*Philosophy of Science*, Vol. 32, No. 3 (2001), 407-452. Ver también: BROOKS, N. M. "Developing the Periodic Law: Mendeleev's work during 1869-1871", *Foundations of Chemistry*, No. 4 (2002), 127-147; BRUSH, S. G., "Predictivism and the Periodic Table", *Studies in History and Philosophy of Science*, Vol. 38 (2007), 256-259; SCHINDLER, S., "Use-novel Predictions and Mendeleev's Periodic Table: response to Scerri and Worrall (2001)", *Studies in History and Philosophy of Science*, Vol. 39 (2008), 265-269.

<sup>365</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 72.

<sup>366</sup> Cfr. *idem*, 73.

nuevos tipos de rayos. Este fenómeno condujo a la comprensión de que el átomo puede subdividirse en otras partículas más básicas (protón, neutrón y electrón) destruyendo el antiguo concepto de la inmutabilidad y demostrando que un elemento puede transformarse en otro, consiguiéndose así, en cierto sentido, la meta que los alquimistas habían perseguido en vano.<sup>367</sup>

El doble descubrimiento de la radioactividad y de los rayos-X hizo posible el posterior descubrimiento e identificación de varios elementos nuevos, como el radio y el polonio, que debían ser ubicados, y esto proporcionó nuevas pruebas de la firmeza del sistema periódico y también de su habilidad para adaptarse a los cambios. Así como el electrón es el principal responsable de las propiedades químicas de los elementos, los descubrimientos conectados con el núcleo del átomo tuvieron una profunda influencia en la evolución del sistema periódico. La exploración del núcleo junto con el posterior trabajo sobre la naturaleza de los rayos-X y la radioactividad, llevaron al descubrimiento del número atómico y de los isótopos, dos desarrollos que en conjunto permitieron resolver muchas de las incertidumbres del sistema periódico de Mendeleiev.<sup>368</sup>

Por otra parte, el descubrimiento de los isótopos presentó inicialmente cierto peligro para el sistema periódico. El gran número de nuevos isótopos descubiertos sugería que había muchos más átomos, en el sentido de la menor partícula posible, de cualquier elemento particular de lo que se había reconocido. Muchos químicos incluso sugirieron que debería abandonarse la tabla periódica en favor de un nuevo sistema de clasificación que incluyera un lugar propio para cada isótopo. Afortunadamente esta idea fue rechazada cuando se cayó en cuenta de que los isótopos de un mismo elemento, en la mayoría de los casos, mostraban propiedades químicas prácticamente idénticas.<sup>369</sup>

El descubrimiento del número atómico supuso una de las mejores aportaciones que ha sufrido el sistema periódico desde su inicio. Cuando el concepto de número atómico se combinó con la comprensión de los isótopos, fue posible apreciar por qué la hipótesis de Prout (todos los elementos son

---

<sup>367</sup> Cfr. *idem*, 74.

<sup>368</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 159-160.

<sup>369</sup> Cfr. *idem*, 160.

compuestos del hidrógeno) había preocupado tanto a los pioneros del sistema periódico. Ahora se podría afirmar que la hipótesis de Prout sería válida en una forma modificada según la cual todos los átomos de la tabla periódica pueden considerarse múltiplos de una unidad de número atómico o protón. También fue posible explicar por qué las triadas habían sido tan sugerentes en la evolución inicial del sistema periódico.<sup>370</sup>

### 6.1 El descubrimiento del núcleo

Ernest Rutherford (1871-1937) llegó a Cambridge procedente de Nueva Zelanda, y posteriormente pasó unos periodos de tiempo tanto en la Universidad McGill en Montreal y en la Universidad de Manchester. Regresó a Cambridge para asumir la dirección del laboratorio Cavendish como sucesor de J. J. Thomson. Las contribuciones de Rutherford a la física atómica fueron muchas y diversas, incluyendo las leyes que rigen la desintegración radioactiva, el descubrimiento de los rayos  $\alpha$  y  $\beta$ , así como ser el primero en lograr la división del átomo. Fue también el primero en conseguir la transmutación de los elementos en otros elementos nuevos; propuso, además, un nuevo modelo del átomo según el cual éste consiste en un núcleo central rodeado de electrones cargados negativamente que orbitan alrededor del mismo.<sup>371</sup>

En 1911, trabajando con Hans Geiger (1882-1945) y Ernst Marsden (1889-1970), hizo pasar una corriente de partículas alfa positivamente cargadas a través de una delgada lámina de oro y observó que algunas de las partículas se dispersaban en ángulos muy grandes mientras que otras parecían rebotar en dirección contraria de la que provenían. Estos experimentos eran contrarios al modelo atómico de Thomson en el que la carga positiva del átomo se difundía a través de todo el átomo. Este efecto fue revisado usando como blanco numerosos elementos desde el aluminio hasta el plomo, lo que les llevó a la conclusión de que la deflexión era proporcional al cuadrado de la carga nuclear, dado que la carga nuclear, más que el peso, era la que causaba la desviación de las partículas alfa

---

<sup>370</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>371</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 74-75.

eléctricamente cargadas. Analizando los análisis de los datos de deflexión, llegaron a la siguiente relación aproximada entre la carga ( $Z$ ) y el peso atómico ( $A$ ):

$$Z \approx A/2$$

Otro físico inglés, Charles Barkla (1877-1944), había llegado a la misma conclusión también en 1911, analizando la deflexión de rayos-X en varias sustancias. Barkla encontró que los elementos más pesados producen una mayor desviación en cantidades proporcionales a sus pesos atómicos y concluyó que el número de la dispersión de los electrones por átomo es alrededor de la mitad de su peso atómico en el caso de los átomos ligeros. Dado que en el caso de átomos neutros el número de cargas positivas es igual al número de electrones, las conclusiones de Barkla y Rutherford son idénticas.<sup>372</sup>

## 6.2 El número atómico

Los trabajos de Barkla y Rutherford en la carga atómica contribuyeron al descubrimiento del número atómico, pero no hay evidencia de que lo hubieran puesto en primer plano. En realidad, el descubridor del número atómico fue un físico amateur Anton van den Broek (1870-1926), cuyas contribuciones ordinariamente han sido minusvaloradas. Frecuentemente se ha dicho que van den Broek solamente resumió el trabajo de Rutherford y Barkla, pero en realidad, su atento estudio sobre la tabla periódica de Mendeleiev y sus prolongados esfuerzos por mejorarla, fue lo que le llevó al descubrimiento de un número ordinal asociado a cada elemento, a identificar este número con la carga nuclear, así como el número de electrones en cualquier átomo.<sup>373</sup>

Van den Broek, entrenado en la econometría, publicó algunos artículos de gran influencia en las revistas importantes de su época. Su primer artículo apareció en 1907 bajo el título “La partícula  $\alpha$  y el sistema periódico de los elementos”,<sup>374</sup> y tuvo como punto de partida un artículo de un año anterior en el que Rutherford había sugerido algunas explicaciones sobre la naturaleza de la partícula  $\alpha$ . Una de

---

<sup>372</sup> Cfr. COLE, A., “Evidence for the Existence of the Nucleus Atom”, *Science, New Series*, Vol. 41, No. 1046 (1915), 75.

<sup>373</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 165.

<sup>374</sup> Cfr. *ibidem*.

estas sugerencias, en la que puso especial interés van den Broek, era que esta partícula consistía en la mitad de un átomo de helio con una carga +1.<sup>375</sup> Van den Broek la llamó *alphon* y propuso que podría tomar el lugar del átomo de hidrógeno en la teoría de Prout en la que todos los elementos están compuestos por una partícula básica. De acuerdo con el esquema de van den Broek, cada número particular de *alphon* añadidos debe corresponder a un elemento químico particular. Dado que el peso del átomo de helio era conocido ser de cuatro unidades, el *alphon* debería tener un peso de 2, y todos los números pares de compuestos *alphon* deberían corresponder a los pesos de todos los elementos conocidos.<sup>376</sup>

En 1911 van den Broek publicó una carta breve en la revista *Nature* que representa la primera anticipación del concepto de número atómico, dado que la sugerencia de Newlands de dar a cada elemento un número ordinal, hecha mucho tiempo antes, había sido mucho más sutil. Van den Broek se basó en las líneas de investigación de Rutherford y Barkla en las que se sostenía que la carga de un átomo es aproximadamente la mitad de su peso atómico:  $Z \approx A/2$ . En esta evidencia fundamentó su especulación de 1907 según la cual el peso atómico aumenta aproximadamente en dos unidades entre dos elementos consecutivos. En otras palabras, van den Broek estaba sugiriendo que, dado que la carga nuclear de un átomo era la mitad de su peso atómico, y que los pesos atómicos de los elementos sucesivos incrementaban en forma escalonada en dos unidades, entonces la carga nuclear define la posición de un elemento en la tabla periódica. Es decir, cada elemento sucesivo en la tabla periódica tiene una carga nuclear de una unidad más que el elemento previo anterior. Así, mientras que Rutherford y Barkla llegaron a la conclusión de que  $Z \approx A/2$ , van den Broek se dio cuenta, además, que  $Z \approx A/2 =$  número atómico. La primacía del número atómico ( $Z$ ) como el elemento ordenador de los elementos, introdujo la física en la tabla periódica por primera vez.<sup>377</sup>

---

<sup>375</sup> De hecho, la partícula  $\alpha$  es un átomo de helio que ha sido despojado de sus dos electrones orbitales. Tiene una masa de 4 y una carga de +2.

<sup>376</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 165-166.

<sup>377</sup> Cfr. *idem*, 167-168 y HEILBORN, J. L., "The Work of H. G. J. Moseley", *Isis*, Vol. 57, No. 3 (1966), 345.

Los logros de van den Broek no se basan solamente en esta premonición del número atómico. En 1913 estableció claramente la ley de que el número de serie de cada elemento, en la secuencia ordenada por el aumento del peso atómico, equivale a la mitad del peso atómico y, por lo tanto, a la carga intra-atómica. Aunque supone un avance importante la mención de los números de serie de cada uno de los elementos, sigue siendo un tanto incorrecto al estar ligada firmemente al peso atómico, no obstante el peso atómico se divide por la mitad.<sup>378</sup> A pesar de esto, el artículo de van den Broek fue citado, ni más ni menos, por Niels Bohr (1885-1962) en su trilogía de artículos también de 1913, en donde introduce la aplicación de la teoría cuántica al átomo.<sup>379</sup>

La aportación más significativa de van den Broek aparece en otra comunicación breve a la revista *Nature*, publicada en 1913, en la que explícitamente conecta el número de serie con la carga de cada átomo y la desliga del peso atómico: “La hipótesis [sobre el número de serie de los elementos igual a  $Z$ ] es válida para la tabla de Mendeleiev aunque la carga nuclear no es igual a la mitad del peso atómico”.<sup>380</sup> Van den Broek fue capaz de dar este importante paso basándose en más experimentos de dispersión de Geiger y Marsden, los que analiza y discute en esta nota. Su contribución fue elogiada por Frederick Soddy (1877-1956) en el siguiente número de *Nature* y una semana después también por Rutherford. Fue en esta ocasión en la que Rutherford acuñó la expresión número atómico: “La original sugerencia hecha por van den Broek de que la carga en el núcleo es igual al número atómico [es decir, al número de serie en la tabla periódica] y no a la mitad del peso atómico me parece ser muy prometedora”.<sup>381</sup>

---

<sup>378</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, op. cit., 166.

<sup>379</sup> BOHR, N., “On the Constitution of Atoms and Molecules”, *Philosophical Magazine*, No. 26 (1913), 1-25, 476-502, 857-875. Van den Broek aparece citado en la página 14.

<sup>380</sup> Cfr. VAN DEN BROEK, A. J., “Intra-atomic Charge”, *Nature*, No. 92 (1913), 372-373.

<sup>381</sup> RUTHERFORD, E., “The Structure of the Atom”, *Philosophical Magazine*, Series 6, vol. 27 (1914), 496.

### 6.3 Henry Moseley

Aunque fue van den Broek quien llegó al concepto de número atómico, le correspondió a Moseley completar la tarea de su justificación cuantitativa y establecer así claramente que el número atómico y no el peso atómico es el mejor principio ordenador de los elementos. Moseley también fue capaz de sentar las bases sobre las que otros pudieron afirmar de manera concluyente que existían 92 elementos naturales y especificar de modo preciso en dónde se encontraban los espacios de los elementos faltantes en la tabla periódica.<sup>382</sup>

Moseley entró a trabajar con Rutherford, que en ese momento se encontraba en Manchester, como un investigador estudiante. Se le asignó un proyecto que consistía en llevar a cabo una serie de experimentos en los que debía hacer chocar haces de luz sobre la superficie de muestras de varios elementos. Moseley diseñó un ingenioso aparato con placas de diversos metales que podían rotar de modo que cada una se convirtiera en blanco de un haz de electrones, y después midió los rayos-X  $K_{\alpha}$  emitidos. Primero experimentó con catorce elementos; nueve de los cuales, del titanio al zinc, formaron una serie continua en la tabla periódica. Moseley descubrió que una zona de las líneas de la serie K de las líneas del espectro de cada elemento era directamente proporcional al cuadrado del entero que representa la posición de cada elemento sucesivo de la tabla periódica. Encontró que la frecuencia  $n$  de los rayos-X  $K_{\alpha}$  obtenidos de cada muestra del blanco variaba según la siguiente relación:

$$N \propto Q^2$$

en donde  $Q$  es un número que aumenta en una cantidad constante al moverse a través de los elementos. Moseley había descubierto una cantidad fundamental que aumentaba en intervalos regulares a medida que se movía a través de la secuencia de los elementos según aparecen ordenados en la tabla periódica. Rápidamente reconoció esta cantidad como la carga positiva del núcleo, o el número atómico de van den Broek. Moseley reconoció el trabajo previo de Barkla, van den Broek y Bohr, quienes se habían anticipado a sus propios

---

<sup>382</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, op. cit., 79.

descubrimientos. Mostró también que  $Q = N - 1$ , en donde  $N$  representa el número de unidades de carga en el núcleo y por tanto el número atómico.<sup>383</sup>

Tan pronto como Moseley estableció experimentalmente la importancia del número atómico, comenzó a resolver varias de las cuestiones, propuestas por otros químicos, relacionadas con nuevos elementos. Por ejemplo, al preguntarse cómo identificar qué elementos deberían llenar los huecos de la tabla periódica, encontró que siete de ellos no habían sido descubiertos todavía. Su trabajo también permitió resolver la cuestión de la ubicación de los elementos que constituyen las llamadas tierras raras, una tarea que no afrontaron ni Mendeleiev, ni los otros pioneros de la tabla periódica. Mendeleiev había señalado que la ubicación de las tierras raras era uno de los problemas más difíciles a los que se enfrentaba la ley periódica ya que las tierras raras son muy difíciles de separar químicamente. Como parecen diferir ligeramente en sus pesos atómicos y propiedades, nadie había sido capaz de encontrar una forma satisfactoria de ubicarlas en la tabla periódica.<sup>384</sup>

Las mejoras que Moseley proporcionó a la tabla periódica representan uno de los mejores ejemplos del poder reductivo de la física en el campo de la química. Otros problemas, como el de los pares invertidos, como era el caso del telurio y yodo, que habían agobiado a Mendeleiev a lo largo de su carrera, habían sido resueltos. Más aún, el trabajo de Moseley hizo más fácil de poder tratar con el problema de los aparentemente nuevos elementos que surgieron como resultado de las investigaciones de fenómenos radioactivos. Dos sustancias podían considerarse el mismo elemento, si y solo si, mostraban el mismo valor para el número atómico, que podría medirse de modo preciso con el método de Moseley.<sup>385</sup>

La sugerencia de van den Broek y el trabajo experimental de Moseley sobre el número atómico tuvieron como uno de sus efectos la rehabilitación de la hipótesis de Prout, quien había propuesto que todos los elementos eran compuestos del hidrógeno. Los números atómicos de todos los elementos eran

---

<sup>383</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 171.

<sup>384</sup> Cfr. *ibidem*, 172. No fue sino hasta 1945 cuando el último hueco faltante fue llenado al sintetizarse el prometeo cuyo número atómico es 61.

<sup>385</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 173.

ciertamente múltiplos exactos del número atómico del hidrógeno, que es 1. De manera más general, el trabajo de van den Broek y Moseley revitalizó algunas nociones sobre la unidad de la materia que habían sido duramente criticadas por Mendeleiev entre otros. Hasta ahora, Thomson había mostrado que el electrón era común a todos los elementos y Rutherford había establecido que las partículas eléctricas se encontraban presentes en los núcleos de todos los elementos. Moseley había añadido el hecho de que todos los núcleos parecían consistir de números enteros de cargas positivas. Claramente parecía existir una forma de subrayar la unidad detrás de la aparente diversidad de los elementos. Esta postura cobró fuerza cuando Rutherford descubrió que los elementos podían transmutarse unos en otros por medio del uso de técnicas radioactivas, recordando una vez más la antigua noción de los alquimistas sobre la unidad fundamental de toda la materia.<sup>386</sup>

#### 6.4 El electrón y la periodicidad química

El descubrimiento del electrón por Thomson ha sido uno de los eventos más celebrados en la historia de la física. Lo que no es muy conocido es que Thomson tenía profundo interés por la química lo que, entre otras cosas, lo motivó a proponer la primera explicación de la tabla periódica en términos de electrones.<sup>387</sup>

En 1895 Röntgen descubrió los rayos-X experimentando con rayos catódicos. La definición de la naturaleza de los rayos catódicos constituyó un problema central para la física de las dos últimas décadas del siglo XIX. Fue en este contexto en el que Thomson condujo su propia investigación que le llevó al descubrimiento del electrón y a darse cuenta de que ciertamente se trataba de un constituyente de toda la materia.<sup>388</sup> Hasta el momento, se sabía que los rayos

---

<sup>386</sup> Cfr. *idem*, 175-176.

<sup>387</sup> Cfr. *idem*, 183.

<sup>388</sup> Según Isobel Falconer, los experimentos de Thomson sobre los rayos catódicos no fueron el origen de su hipótesis sobre el corpúsculo (posteriormente electrón), sino que estaban motivados por la búsqueda de la unidad en la ciencia y fueron el medio para sintetizar las ideas de sus trabajos previos. Para esta autora, aún en 1897 el principal interés de Thomson no era la naturaleza de los rayos catódicos sino los mecanismos de conducción de los gases. Falconer sostiene que, para

catódicos estaban cargados negativamente, y que parecían ser partículas. Confirmar su naturaleza podría hacerse si se conseguía mostrar que podían ser desviados por un campo eléctrico. Los experimentos que se estaban llevando a cabo incluían el paso de una descarga eléctrica de alrededor de 1000 V a través de un gas contenido en un tubo de vidrio de 300 cm de largo y 3 cm de ancho a una presión de 0.01 mm de mercurio. Thomson usó una carga eléctrica extremadamente elevada y se aseguró que el tubo de cristal estuviera al vacío. Bajo estas condiciones, los rayos catódicos finalmente mostraron la desviación producida por un campo eléctrico. Era el año 1897.<sup>389</sup>

El descubrimiento del electrón llevó a que se postularan diversos modelos del átomo. Perrin en Francia, al igual que Thomson en Inglaterra, había realizado experimentos con los rayos catódicos. Perrin, de hecho, fue el primero en obtener la prueba directa de que el electrón estaba negativamente cargado. Este descubrimiento, unido a la evidencia experimental obtenida por Thomson, le llevó a formular la primera concepción planetaria del átomo en 1901. Propuso que cada átomo consistía de uno o más cuerpos altamente cargados positivamente, una especie de sol positivo alrededor del cual, pequeños planetas negativos, o electrones, estaban en órbita.<sup>390</sup> Perrin también creía que la carga total negativa en el átomo debería ser exactamente igual a la carga total positiva, previendo las conjeturas actuales sobre la estructura del átomo. En 1903 el japonés Hantaro Nagaoka (1865-1950) propuso, de modo independiente, un modelo saturnino de

---

Thomson, la creencia en la unidad última del conocimiento iba de la mano con la filosofía mecanicista y su énfasis en la materia y el movimiento lo que implicaba que, en última instancia, todos los fenómenos físicos, incluyendo los átomos mismos, podrían explicarse como sistemas dinámicos en un éter material. Para Falconer, la búsqueda de la unidad tiene en Thomson dos intereses paralelos: por una parte, su intento de un modelo de interacción entre el campo electromagnético y la materia en escala atómica; y por otra, su deseo de conducir la química dentro del ámbito de la física. Cfr. FALCONER, I., "Corpuscles, Electrons and Cathode Rays: J. J. Thomson and the 'Discovery of the Electron'", *The British Journal for the History of Science*, Vol 20, No. 3 (1987), 241-276.

<sup>389</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 184.

<sup>390</sup> El concepto de orbitales electrónicos aparece con la teoría atómica de Bohr y se ha convertido posiblemente en el concepto más importante en la explicación moderna del sistema periódico. Cfr. SCERRI, E., "The Recently Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues", *Philosophy of Science*, Vol. 68, No. 3 (2001), Suplemento, S78.

átomo en el que los electrones se movían alrededor de uno o más anillos alrededor de un cuerpo central.<sup>391</sup>

Thomson comenzó a pensar específicamente cómo se disponen los electrones en el átomo y concluyó que el modelo de sistema solar propuesto por Perrin y Nagaoka sería inestable porque los electrones orbitales irradiarían energía constantemente, y eventualmente caerían al centro del átomo. Sugirió un modelo alternativo en el que los electrones se encontraban incrustados en el núcleo circulando dentro con su carga positiva. En un artículo de 1904, Thomson publicó también el primer conjunto de arreglos electrónicos, o lo que hoy en día se llama configuraciones electrónicas. Con este paso se adelantó a Perrin y Nagaoka al concebir a los electrones no solo moviéndose alrededor del átomo sino haciéndolo además de modo estructurado.<sup>392</sup>

Aunque el modelo atómico de Thomson pronto sería desplazado por el modelo nuclear de Rutherford, tuvo éxito al establecer dos conceptos importantes: señalar que el electrón es la clave para la periodicidad química y enunciar la noción de que los átomos de sucesivos elementos en la tabla periódica difieren por la adición de un electrón. Ambas ideas se convirtieron en aspectos importantes para la teoría atómica de la periodicidad de Bohr.<sup>393</sup>

## 6.5 La teoría cuántica del átomo

Bohr obtuvo su doctorado en física teórica del estudio de los metales antes de realizar una estancia posdoctoral con Rutherford en Manchester. Aunque otros físicos habían comenzado a establecer la teoría cuántica en la física, Bohr fue el primero en aplicar estas ideas en el contexto de la física atómica. En 1913 publicó su teoría cuántica del átomo de hidrógeno. La noción de *quanta*, o paquetes de energía, había sido propuesta en 1900 por Max Planck (1858-1947) para explicar las observaciones hechas sobre la radiación del cuerpo negro. Bohr adoptó la noción de *quanta* de Planck y la aplicó a la física de los átomos. Sus cálculos lo llevaron a concluir que, en el modelo planetario de átomo, se forman anillos

---

<sup>391</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 185.

<sup>392</sup> Cfr. *idem*, 186.

<sup>393</sup> Cfr. *idem*, 187.

adicionales de electrones, fuera de los anillos ya completos, corrigiendo así el modelo de Thomson en el que los electrones se añaden a los anillos interiores. Pero más importante aún fue que Bohr propusiera que los electrones serían estables si permanecían en ciertas órbitas cuantificadas, y que perderían energía solamente cuando sufrieran la transición de una órbita a otra órbita más estable. Es decir, los electrones en un conjunto discreto de órbitas estables alrededor del núcleo de un átomo estarían en estado estacionario y, por tanto, no irradiarían energía.<sup>394</sup>

Aunque Bohr aplicó su teoría cuántica del átomo al espectro del átomo del hidrógeno, también intentó entender con mayor profundidad la tabla periódica a través de las configuraciones electrónicas examinando la estabilidad de los anillos de electrones con los que Thomson había intentado explicar la tabla periódica. Bohr asignó configuraciones electrónicas a átomos de varios elementos en términos del número cuántico principal de cada electrón, el cuál podría ser usado para caracterizar su estado estacionario.<sup>395</sup>

El método de Bohr, llamado *aufbauprinzip* (principio de construcción), consistió en construir átomos de los elementos sucesivos en la tabla periódica añadiendo un electrón al átomo previo. Al moverse de un elemento al siguiente en la tabla periódica, Bohr supuso que un electrón se añadía a la capa más externa, aunque encontró algunas excepciones a esta regla. En determinado paso del proceso, la capa exterior colmaría su capacidad, de modo que habría que introducir una nueva capa. Sin embargo, como con este método no fue capaz de deducir la capacidad máxima de electrones en cada capa, Bohr decidió utilizar datos químicos y espectroscópicos más que cálculos teóricos.<sup>396</sup>

El hecho de que Bohr utilizara esencialmente consideraciones químicas al elaborar sus configuraciones puede verse claramente en el modo en cómo realiza las configuraciones de ciertos elementos. La cantidad de electrones en la capa más

---

<sup>394</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 85-86.

<sup>395</sup> Cfr. BOHR, N., "On the Constitution of Atoms and Molecules", *op. cit.*, 497 y HEILBORN, J. L. & KUHN, T., "The Genesis of the Bohr Atom", *Historical Studies in the Physical Sciences*, 1 (1969), 211-290, en donde estos autores, historiadores de la física, intentan mostrar, de manera concluyente, que la motivación inicial de la teoría de Bohr era mucho más amplia.

<sup>396</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, *op. cit.*, 190.

externa está determinada por la valencia química. Estos electrones son los más débilmente unidos al núcleo y por lo tanto los que de manera más probable forman los enlaces con otro átomo. En el caso del nitrógeno, por ejemplo, Bohr se vio forzado a reacomodar los electrones de las capas interiores para conseguir una configuración que correspondiera a un elemento trivalente. Al alterar las configuraciones para hacerlas coincidir con la evidencia experimental, Bohr no proporcionó ningún argumento teórico para explicar por qué dichos arreglos han de realizarse de este modo. Sin embargo, Bohr consiguió dos cosas con su teoría. La primera fue introducir la importante idea de que el electrón diferenciador debería ocupar, en la mayoría de los casos, la capa más externa y no la más interna como había propuesto Thomson. La segunda es que, a pesar de algunos aspectos arbitrarios, el esquema de Bohr proporcionó al menos una correlación entre la configuración electrónica y la periodicidad química. Por ejemplo, la configuración del litio es  $2 - 1$ , mientras que la del sodio que pertenece al mismo grupo es  $8 - 2 - 1$ , similar a la del berilio y magnesio que también pertenecen al grupo II de la tabla periódica y que comparten la propiedad de tener dos electrones en la última capa. Este es el origen de la noción moderna de que los átomos del mismo grupo de la tabla periódica poseen el mismo número de electrones en la última capa, algo que ya había insinuado Thomson.<sup>397</sup>

Bohr abandonó el problema de la estructura atómica y la tabla periódica por una década. Sin embargo, en 1922 y 1923 anunció una nueva versión mejorada de la tabla periódica electrónica. De nuevo usó su *aufbauprinzip* para construir las configuraciones de los átomos de los elementos sucesivos de la tabla periódica pero esta vez utilizó los dos números cuánticos conocidos hasta el momento:  $n$  el número cuántico principal y  $k$ , o número cuántico azimutal o angular, que posteriormente pasó a ser designado como  $l$ , descubierto por Arnold Sommerfeld

---

<sup>397</sup> Cfr. *idem*, 190-192. Esta afirmación es una simplificación y solo es correcta para los grupos principales, o los grupos de elementos representativos en la tabla periódica. En el caso de los elementos de transición, los elementos de un mismo grupo tienen el mismo número de electrones en la penúltima capa. Las tierras raras, en cambio, tienen el mismo número de electrones en la capa localizada dos capas antes de la última capa. Además, hay algunas configuraciones anómalas de alrededor de 20 elementos.

(1868-1951).<sup>398</sup> Con estos dos números cuánticos Bohr fue capaz de compilar un conjunto más detallado de las configuraciones electrónicas. Pocos años más tarde, Edmund Stoner (1899-1968) propuso la necesidad de un tercer número cuántico para especificar algunos detalles la distribución de los electrones en los niveles atómicos. Finalmente, Wolfgang Ernst Pauli (1900-1958) sugirió la necesidad de incluir el cuarto número atómico, spin, que se refiere al concepto según el cual un electrón adopta uno de los dos valores de un tipo especial de momento angular. Provisto de los cuatro números atómicos, Pauli descubrió que podía explicar la estructura atómica y la organización de la tabla periódica si imponía una restricción sobre la distribución de los electrones en los diferentes estados cuánticos, restricción que sería conocida como su famoso principio de exclusión. Sin embargo, la solución propuesta por Pauli, aunque consigue delimitar el número de electrones que pueden contener las capas u órbitas sucesivas, no explica en qué lugares particulares de la tabla periódica ocurre la periodicidad; es decir, no explica la longitud de los periodos, que es la propiedad realmente crucial de la tabla periódica.<sup>399</sup>

Aunque la aplicación de la teoría cuántica al sistema periódico proporcionó un nuevo modo de expresar la tabla periódica en términos del número de electrones de la capa externa, no aportó esencialmente nada nuevo a la comprensión de la química. Más aún, en muchos casos, químicos como Irving

---

<sup>398</sup> “Actualmente, el modelo atómico que se admite es el propuesto por la mecánica cuántica (modelo de Schrödinger). El modelo de Bohr es un modelo unidimensional que utiliza un número cuántico ( $n$ ) para describir la distribución de electrones en el átomo. El modelo de Schrödinger permite que el electrón ocupe un espacio tridimensional. Por lo tanto, requiere tres números cuánticos para describir los orbitales en los que se puede encontrar al electrón. La descripción del átomo mediante la mecánica ondulatoria está basada en el cálculo de las soluciones de la ecuación de Schrödinger; que es una ecuación diferencial que permite obtener los números cuánticos de los electrones. Las soluciones, o funciones de onda ( $\Psi$ ) son funciones matemáticas que dependen de unas variables que solo pueden tomar valores enteros. Estas variables de las funciones de onda se denominan números cuánticos: número cuántico principal, ( $n$ ), angular ( $l$ ) y número cuántico magnético ( $m$ ). Estos números describen el tamaño, la forma y la orientación en el espacio de los orbitales en un átomo”. El cuarto número cuántico spin ( $s$ ), que postula que los electrones giran sobre un eje, fue introducido por George Eugène Uhlenberk (1900-1988) y Samuel Abraham Goudsmit (1902-1978) en 1925. Cfr. <http://www.eis.uva.es/~qgintro/atom/tutorial-11.html> [consultada el 2 de junio de 2016] y *supra*, 107-109.

<sup>399</sup> Cfr. SCERRI, E., *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, *op. cit.*, 87-88.

Langmuir, John David Main Smith y Charles Bury fueron capaces de aventajar a la física en la asignación de configuraciones electrónicas porque estaban más familiarizados con las propiedades químicas individuales de los elementos.

Los físicos proporcionaron un gran impulso a los intentos de entender las bases subyacentes de la tabla periódica, sin embargo, fueron los químicos los que, en muchos casos, consiguieron aplicar de mejor modo, las nuevas ideas de la física, tales como las configuraciones electrónicas.<sup>400</sup>

## 7. Conclusiones

El examen de la evolución del concepto de elemento es importante para entender tanto el desarrollo del sistema periódico como la clasificación de los elementos. La concepción metafísica de los antiguos, en la que el elemento se entendía como principio de potencialidades, fue reemplazada, con el surgimiento de la química moderna, por una visión de tipo empírico que lo entiende como una sustancia material irreductible a otros componentes más fundamentales, compaginando un modo teórico de entenderlo y un aspecto práctico más acorde con el trabajo de laboratorio. No obstante, la consideración filosófica sobre la naturaleza de los elementos subyace en el desarrollo y explicación de algunas cuestiones, como, por ejemplo, el descubrimiento de la ley periódica o el tema de la combinación química. El estudio tanto de la naturaleza de elementos como de su ordenación periódica también sugiere algunos cuestionamientos de tipo filosófico como son el tema de la unicidad de la materia o el de la reducción de la química a la física.

Las semejanzas entre las propiedades químicas de algunos elementos llevaron a explorar relaciones numéricas con el fin de poder ordenarlos en un sistema que no solo diera cuenta de dichas propiedades, sino que también revelara sus relaciones físicas. Dar con un principio ordenador cuantificable no fue sencillo. La genialidad de Mendeleiev estuvo en reconocer al peso atómico como

---

<sup>400</sup> Cfr. *idem*, 97. Bury, por ejemplo, sugirió que los grupos de 8 electrones interiores y aparentemente estables, podían cambiar a grupos de 18 electrones, y estos, a su vez a grupos de 32. Estas caracterizaciones representan un signo de la emergencia de las formas media-larga y larga de la tabla periódica.

el atributo del elemento que permanecía invariable en la combinación química y, por tanto, como un principio ordenador que permitía clasificar a los elementos, ya que proporcionaba una caracterización propia de los mismos. El posterior desarrollo de la ciencia permitió sustituir el peso atómico por el número atómico como principio ordenador. El número atómico está dado por el número de protones o unidades de carga positiva en el núcleo de cualquiera de los átomos. Cada elemento de la tabla periódica tiene un protón más que el elemento precedente.

La tabla periódica es notable por su simplicidad. No solo organiza los componentes fundamentales de la materia, sino que su estructura es un reflejo de la estructura de los elementos y, por tanto, de sus propiedades químicas y comportamiento.

El sistema periódico se desarrolló a través de un proceso de evolución gradual. Su descubrimiento fue hecho, de manera independiente, por científicos distintos quienes diferían en sus áreas de investigación. Algunos sistemas periódicos pusieron mayor énfasis en las propiedades físicas de los átomos; otros, en cambio, se interesaron más por el comportamiento químico de los elementos y por realzar predicciones audaces relativas a elementos aún no descubiertos.

La capacidad de predicción de las teorías científicas, si bien puede ser considerada como una prueba de su validez, ha generado amplios debates en la comunidad científica. En el caso del sistema periódico se cuestiona si la predicción de nuevos elementos fue un factor decisivo para la aceptación de la tabla periódica, y si estas predicciones tienen significativamente mayor impacto que la ordenación exitosa de los elementos dentro del sistema periódico.

El intento por explicar mejor el sistema periódico ha conducido a grandes avances en otras áreas de la ciencia diferentes a la química, especialmente en la física teórica. Por ejemplo, la noción de que el átomo consiste en un núcleo con electrones en órbitas alrededor del mismo, propuesta por J. J. Thomson fue el resultado de intentar explicar el orden en el que los elementos se despliegan en la tabla periódica. De manera análoga, cuando Bohr, uno de los fundadores de la mecánica cuántica, aplicó las ideas sobre el *quantum* de energía al átomo, estaba intentando específicamente conseguir una mejor comprensión del sistema periódico de los elementos. Las investigaciones que dieron origen al *principio de*

*exclusión* de Pauli fueron inicialmente motivadas por un intento de explicar el sistema periódico y el motivo por el que las diferentes capas de electrones de los átomos contenían un número específico de los mismos.

# **CAPÍTULO IV**



**LA REDUCCIÓN DE LA  
QUÍMICA A LA FÍSICA**



## 1. Introducción

Un problema tradicional en la filosofía de la ciencia es el de las relaciones que mantienen entre sí las diversas teorías científicas. El interés filosófico por el caso concreto de la reducción en el ámbito de las ciencias particulares ha sido motivado, en buena medida, por la esperanza de que su mejor comprensión aporte nuevas perspectivas de solución sobre algunos temas.<sup>401</sup>

Habitualmente la relación entre química y física se había considerado como un caso típico de reducción. Muchos filósofos de la ciencia parecían haber aceptado que la reducción de la química a la física era un hecho que no exigía mayor comentario, o al menos, requería menos atención que los problemas relativos a la reducción potencial de la biología o la posible reducción de actividades mentales a hechos físicos. Fuera de los límites de la filosofía de la química, la reducción de la química a la física se solía considerar como un ejemplo paradigmático pero, en última instancia, poco interesante, de reducción científica.<sup>402</sup>

Recientemente, sin embargo, la naturaleza originaria de esta relación se ha vuelto un tema controvertido en filosofía de la química, dado que ha ido cobrando fuerza la idea de que la aplicación de principios reduccionistas a la química es problemático, cuando no, imposible. Uno de los mayores logros de la filosofía de la química es el haber señalado que la reducción de la química a la física no es tan simple como a primera vista podría parecer.<sup>403</sup>

Hasta hace poco una postura bastante extendida para mantener la opción no reduccionista sostenía que el problema de la reducción debería centrarse en el aspecto epistemológico; la reducción ontológica no entraba en la discusión pues se daba por sentada. Actualmente el problema de la autonomía de la química se

---

<sup>401</sup> Cfr. CÓRDOBA, M., “Neo-Reduccionismo Interteórico y sus Implicaciones Ontológicas”, *Revista Portuguesa de Filosofia*, T. 68, Fasc. 3 (2012), 547-548.

<sup>402</sup> Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics*, *op. cit.*, xvii.

<sup>403</sup> Cfr. *ibidem*.

empieza a considerar también como un problema de tipo ontológico y metafísico.<sup>404</sup>

El progreso científico puede dividirse, en términos generales, en dos tipos: (1) un aumento del conocimiento de los hechos, mediante su incorporación a la cantidad total de las observaciones científicas; y (2) una mejora en el cuerpo de las teorías que lleva a proporcionar una mejor explicación de los hechos conocidos y a predecir el resultado de observaciones futuras. Un caso especialmente importante del segundo tipo es la sustitución de una teoría aceptada (o conjunto de teorías) por una nueva teoría (o conjunto de teorías) que, en cierto sentido es superior a esta. La reducción podría considerarse como una mejora en este sentido.<sup>405</sup>

¿Cuáles son las características esenciales de la reducción? Dado que debe haber progreso en la ciencia, se requiere que la nueva teoría pueda sustituir a la anterior, es decir, que pueda explicar o predecir todos aquellos hechos que la teoría anterior solía manejar. No puede reconocerse el remplazo de una teoría por otra como progreso a menos que la nueva teoría, en términos generales, pueda decirse que posee mayor grado de simplicidad. Para los defensores del reduccionismo clásico,<sup>406</sup> lo que particularmente ha de caracterizar la reducción, además de cumplir con lo anterior, es que nos permita realizar una economía en el vocabulario teórico de la ciencia.<sup>407</sup>

---

<sup>404</sup> Cfr. VIHALEM, R., "The Autonomy of Chemistry: Old and New Problems", *Foundations of Chemistry*, Vol. 13, No. 2 (2010), 98. Vihalemm se refiere explícitamente a un artículo publicado por Lombardi y Labarca que se ha convertido en punto de referencia al replantear la importancia del aspecto ontológico en la discusión sobre la autonomía de la química: LOMBARDI, O. & LABARCA, M., "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *Foundations of Chemistry*, No. 7 (2005), 125-148.

<sup>405</sup> Cfr. KEMENY, J. G. & OPPENHEIM, P., "On Reduction", *An International Journal for Philosophy in the Analytic Tradition*, Vol. 7, No. 1 (1956), 6-7.

<sup>406</sup> Nos referimos a aquellos autores que, siguiendo a Nagel, sostienen que las cuestiones ontológicas aparentemente involucradas en la reducción deberían ser sustituidas por el análisis de las conexiones sintácticas y semánticas que intervienen en la explicación de una teoría sobre la base de otra. Cfr. GLYMOUR, C., "On Some Patterns of Reduction", *Philosophy of Science*, Vol. 37, No. 3 (1970), 340.

<sup>407</sup> Cfr. KEMENY, J. G. & OPPENHEIM, P., *op. cit.*, 7.

Los autores que sostienen posturas no reduccionistas consideran que es posible decir que las tesis reduccionistas se aplican a la química con alguna dificultad y que, para ilustrarlo, basta mencionar algunos de los problemas que se plantean. ¿La química, realmente, puede ser objeto de reducción? ¿Los conceptos químicos como el de valencia, por ejemplo, están lo suficientemente bien formulados como para que se aplique la noción de reducción? ¿Existen las leyes químicas? Para que una ley química pueda reducirse a alguna teoría física, tiene que existir esa ley, debe estar bien formulada y tal vez incluso axiomatizada. Si esto no es así, entonces existen buenas razones para pensar que, para muchas partes de la química, el tema de la reducción es debatible.<sup>408</sup>

La reducción entre química y física se ha considerado como el modelo de lo que debería ser una reducción exitosa. Son pocos los filósofos de la química, y menos aún los químicos, que dudan que teorías de la física como son la mecánica cuántica, la mecánica estadística y la termodinámica, desempeñen un papel importante en la formulación de las teorías químicas de la materia. El problema parece ser que no proceden de forma consistente; la química está formada por un mosaico de teorías que no parecen alinearse muy bien con los sólidos fundamentos de las teorías de la física.<sup>409</sup>

Por lo tanto, la tendencia en la filosofía de la química contemporánea es considerar que la química no puede de hecho ser reducida a la física. Esta tendencia contrasta con el optimismo de Paul Dirac (1902-1987) quien, en un famoso texto, sostiene que la mecánica cuántica ha alterado las explicaciones mecanicistas de la química y expresa la esperanza de que, en un futuro, podrá conseguirse su completa reducción a la física:<sup>410</sup> “Las leyes fundamentales necesarias para el tratamiento matemático de gran parte de la física y de toda la química son ampliamente conocidas, y la dificultad se encuentra solamente en el hecho de que la aplicación concreta de estas leyes lleva a ecuaciones que son suficientemente complejas para ser resueltas”.<sup>411</sup>

---

<sup>408</sup> Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics*, *op. cit.*, 7.

<sup>409</sup> Cfr. *idem*, 8.

<sup>410</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>411</sup> “The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of large parts of physics and the whole of chemistry are those fully unknown, and the difficulty lies only in the fact that

¿Qué hay de físico en la química? Según el punto de vista de los fisicalistas —que conceden que la química solo goza de autonomía a nivel experimental—, las teorías de la física se asumen como una explicación completa y satisfactoria de los hechos químicos. El único papel teórico de la química se orienta a la superación de las dificultades de cálculo que se plantean en la aplicación de esas teorías a predicciones específicas. Eyring, Walter y Kimbal, por ejemplo, afirman que, hasta donde la mecánica cuántica es correcta, los cuestionamientos químicos son problemas de matemáticas aplicadas. Sin embargo, a pesar de ello, consideran que por su complejidad, la química no deja de ser, en gran parte, una ciencia experimental.<sup>412</sup>

Una actitud crítica moderada parece estar tomando forma. Mario Bunge (1919), bien conocido por su trabajo en los fundamentos de la física, se opone a la postura que considera que la química teórica no es sino un capítulo de la física. Para Bunge lo que es físico en los sistemas químicos son sus componentes más que los sistemas mismos, los cuales poseen propiedades emergentes además de propiedades físicas.<sup>413</sup> Por su parte, Hans Primas (1928-2014) enfatiza que muchos de los conceptos teóricos de la química no han sido todavía reducidos exitosamente a la mecánica cuántica y considera que es una cuestión abierta si esta reducción se conseguirá algún día.<sup>414</sup> Y Giuseppe Del Re (1932-2009) señala que las explicaciones proporcionadas por la química son esencialmente diferentes a las de la física y aunque ésta pueda incluir muchos conceptos, esto no es suficiente para reducir la química a la física.<sup>415</sup>

A nivel lógico, muchos puntos permanecen sin resolver. Los tres más importantes son: la definición de las dos ciencias en cuestión; la distinción entre

---

application of these laws leads to equations that are too complex to be solved". DIRAC, P., "The Quantum Mechanics of Many-Electron Systems", *Proceedings of the Royal Society of London*, A 123 (1929), 714. La traducción es mía.

<sup>412</sup> Cfr. EYRING, H. & WALTER, J. & KIMBAL, W., *Quantum Chemistry*, *op. cit.*, iii.

<sup>413</sup> Cfr. BUNGE, M., "Is Chemistry a Branch of Physics?", *Journal for General Philosophy of Science*, Vol. 13, No. 2 (1982), 209.

<sup>414</sup> Cfr. PRIMAS, H., *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*, Springer, Berlin 1981, 250-252.

<sup>415</sup> Cfr. DEL RE, G. *et al.*, "On the Specificity of Chemical Explanation", en *Atti del Congresso Logica e Filosofia della Scienza*, Bologna (1986), 263-266.

explicación y predicción; el auténtico significado del término reducción en conexión con la relación química-física.<sup>416</sup>

## 2. ¿Qué tipo de ciencia es la química?

Ante la pregunta a los químicos de si su ciencia es una rama de la física, se pueden encontrar dos respuestas. Los químicos teóricos clásicos responderán negativamente. Para defender la autonomía de la química dirán que ésta posee sus propios conceptos, tales como el de enlace químico y las reacciones químicas; sus propios enunciados de leyes, tales como las ecuaciones de reacción; y sus técnicas experimentales específicas, como la cromatografía.<sup>417</sup>

Los químicos teóricos cuánticos, en cambio, darán una respuesta afirmativa. Para defender la reducción de la química a la física, ya sea actual o posible, señalarán que la teoría de moléculas es una aplicación de la mecánica cuántica a sistemas compuestos de núcleos y electrones (o átomos si se consideran desde otra perspectiva), y que la teoría de las reacciones químicas es una aplicación de la mecánica cuántica a la dispersión de las colisiones de los átomos o moléculas.<sup>418</sup>

¿Quién está en lo correcto? Podemos decir que hay algo de verdad en cada una de estas respuestas. Los químicos tratan con sistemas químicos, en los que los físicos no están normalmente interesados, y aunque lo hacen con la ayuda de la física, esto no quiere decir que la química dependa totalmente de ésta. La física no es suficiente en la elaboración de la química porque debe ser enriquecida con conceptos e hipótesis químicos en orden a resolver los problemas propios de la química.<sup>419</sup>

A primera vista podría parecer que la química está incluida en la física porque los sistemas químicos parecen constituir un tipo especial de sistemas físicos. Sin embargo, esta impresión no es acertada porque lo que es físico en los

---

<sup>416</sup> Cfr. LIEGENER, C. & DEL RE, G., "Chemistry vs. Physics, the Reduction Myth and the Unity of Science", *Journal for General Philosophy of Science*, Vol. 18, No. 1 (1987), 166.

<sup>417</sup> Cfr. BUNGE, M., *op. cit.*, 209.

<sup>418</sup> Cfr. *idem*, 209-210.

<sup>419</sup> Cfr. *idem*, 210.

sistemas químicos son sus componentes más que el sistema en sí mismo, pues éste posee ciertas propiedades emergentes además de las propiedades físicas. Un sistema químico puede definirse como un sistema en donde ocurren las reacciones químicas; por ejemplo, sistemas cuya composición atómica y molecular son variables. La composición de un sistema químico es entonces un conjunto de átomos o moléculas, cada uno de los cuales puede considerarse como un sistema físico. Dado que el sistema y sus componentes no comparten todas sus propiedades, no pertenecen al mismo tipo de ciencia. Así, aunque la comparación entre química y física incluye una comparación entre sus teorías, también incluye otros elementos igualmente importantes. Por ejemplo, aun cuando fuera posible definir cada concepto químico en términos de conceptos físicos y deducir cada enunciado de ley química de un conjunto de premisas físicas, la química continuaría teniendo sus propios referentes particulares (como los sistemas químicos), métodos (como la neutralización o la medición de la acidez), y metas (como entender y controlar las síntesis químicas).<sup>420</sup>

En el ámbito de la química existe, además, cierta tensión entre el desarrollo de un núcleo matemático consistente, por una parte, y la transformación de la materia por otra. Esta tensión también es importante al considerar el tema de la reducción. La reducción es la relación entre teorías por lo que se da por sentado que las teorías pueden establecerse con suficiente precisión. Por tanto, la reducción de la química presupone la existencia de un núcleo teórico, el cual, para algunos filósofos, no parece ser muy claro.<sup>421</sup>

El núcleo teórico de la química ha sido negado, por ejemplo, por la filosofía kantiana, que considera que la química adolece de un marco matemático y mecánico que pueda proporcionar una base coherente para conectar sus observaciones experimentales con los *a priori* filosóficos.<sup>422</sup> En particular, Kant

---

<sup>420</sup> Cfr. *idem*, 210-211.

<sup>421</sup> Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics*, *op. cit.*, 11-12.

<sup>422</sup> En sus *Fundamentos Metafísicos*, Kant anota: “(...) la química no puede ser más que un arte sistemático o una doctrina experimental, pero nunca una ciencia en sentido estricto. Sus principios son meramente empíricos y no permiten ninguna presentación *a priori* en la intuición. Por tanto, no permiten concebir los principios de las apariencias químicas según su posibilidad, ya que no son susceptibles a la aplicación de las matemáticas”. Citado en *ibidem*, 12. La traducción es mía.

niega explícitamente que la química se haya constituido en ciencia. Según Kant, el problema principal es que los fenómenos químicos no han estado (y posiblemente nunca estén) fundamentados en las fuerzas fundamentales de la materia del mismo modo que, por ejemplo, los fenómenos gravitacionales han sido fundamentados exitosamente por la mecánica newtoniana. La postura de Kant acerca de la naturaleza de la química (exceptuando su clasificación de la química como no científica) podría ser asumida por varios filósofos de la química y químicos en nuestros días.<sup>423</sup>

Con el desarrollo originario de la teoría cuántica del átomo y del enlace químico, parecería que finalmente la química moderna ha logrado superar la visión kantiana de la química. En cierto sentido, la química cuántica parecería encerrar la promesa de que la química puede reducirse a la física y que sus conceptos pueden ser explicados por ésta. Sin embargo, los problemas relativos a la naturaleza de la química y a la reducción de ésta a la física, no han sido resueltos satisfactoriamente todavía.<sup>424</sup>

### 3. Reduccionismo y no reduccionismo en la filosofía de la química

#### 3.1 El modelo de reducción de Nagel

Una de las descripciones clásicas más completas sobre la teoría de la reducción es la propuesta por Ernest Nagel (1901-1985) en su libro *La estructura de la ciencia*. Según Nagel, la reducción es una relación lógica entre teorías: la teoría reducida se deduce a partir de la teoría reductora con ciertas condiciones auxiliares y otros enunciados necesarios para la deducción.

---

<sup>423</sup> Cfr. *idem*, 13. La influencia del pensamiento de Kant sobre la ontología química es discutida en detalle por Ruthenberg. Ver RUTHEMBERG, K., "Paneth, Kant and the Philosophy of Chemistry", *Foundations of Chemistry*, No. 11 (2009), 79-91.

<sup>424</sup> Cfr. *ibidem*.

Para Nagel existen dos tipos de reducción: la reducción homogénea y la reducción heterogénea. La reducción homogénea es aquella en la que se emplean los mismos conceptos para la formulación de las leyes tanto de la teoría reducida como de la teoría reductora. Este sería el caso, por ejemplo, de la incorporación de la ley de la caída de Galileo y las leyes de Kepler a la teoría mecánica y de gravitación de Newton: aunque los dos tipos de movimiento son claramente distintos, no se requieren conceptos diferentes para describirlos ya sea en una u otra teoría.<sup>425</sup> En la reducción homogénea puede hablarse de un sentido diacrónico pues la teoría reducida precede en el tiempo a la teoría reductora. Esta forma de reducción supone también un avance en el conocimiento, ya que las teorías reductoras no solo proporcionan más información (dan cuenta de lo que la teoría reducida explicaba y además de nuevos fenómenos), sino que son más precisas y correctas.<sup>426</sup>

La reducción heterogénea, en cambio, es aquella en la que no todos los términos de la teoría reducida aparecen en la teoría reductora. En este tipo de reducción no hay posibilidad de deducir los términos entre las teorías sin una reinterpretación que establezca una conexión entre el aparato conceptual de las dos teorías, en la forma de las llamadas “leyes puente”. Para ilustrar la reducción heterogénea, Nagel pone como ejemplo la reducción de la ley de los gases de Charles-Boyle a la teoría cinética de los gases, en la que los conceptos de temperatura y presión, que no figuran entre los conceptos mecánicos de la teoría cinética, se conectan con las características promedio del movimiento de las moléculas constitutivas.<sup>427</sup> De acuerdo con Nagel, el término temperatura de la termodinámica puede reducirse a términos de la mecánica estadística, en la que la temperatura de un gas se identifica con el valor medio de la energía cinética por molécula, en el sistema de moléculas que lo componen.<sup>428</sup>

---

<sup>425</sup> NAGEL, E., *The Structure of Science. Problems in the Logic of Scientific Explanation*, Routledge and Kegan Paul, Ltd., London 1961, 339.

<sup>426</sup> Cfr. CÓRDOBA, M., *op. cit.*, 549.

<sup>427</sup> Cfr. NEEDHAM, P., “Nagel’s Analysis of Reduction: Comments in Defense as well as Critique”, *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, No. 41 (2010), 164.

<sup>428</sup> Cfr. CÓRDOBA, M., *op. cit.*, 550.

La teoría mecánica estadística brinda a los conceptos gas y temperatura el mismo referente ontológico al considerar que un gas no es más que un conjunto de partículas en interacción y su temperatura no es sino el valor medio de la energía cinética de dichas partículas. Este modo de concebir las relaciones interteóricas postula, por tanto, la existencia de una única ontología, ya que las únicas entidades, propiedades y relaciones realmente existentes son las que pertenecen a la ontología de la teoría reductora.<sup>429</sup>

El alcance de la reducción heterogénea depende de cómo se consideren las leyes puente que conectan a las teorías reducida y reductora entre sí. Generalmente se asume que, más que leyes, se trata de definiciones que vinculan los términos de ambas teorías; por consiguiente, la teoría reductora no aportaría ningún contenido nuevo pues la teoría reducida no sería sino una simplificación de aquella.<sup>430</sup>

La idea nageliana de reducción heterogénea se enmarca en el denominado programa reduccionista, de acuerdo con el cual las teorías científicas se organizan jerárquicamente y la ciencia en su conjunto progresa hacia su unidad que se alcanzaría reduciendo todas las disciplinas científicas a una sola.<sup>431</sup>

Las relaciones interteóricas en términos de reducción conducen, pues, a asumir que debería existir una única teoría capaz de ofrecer una descripción objetiva de toda la realidad, y ésta descripción es, por supuesto, la que proporciona la teoría reductora, dado que la teoría reducida es simplemente una simplificación. Esta postura reduccionista va más allá del ámbito epistemológico ya que en ella no solo se relacionan lógicamente conceptos y enunciados, sino que, en última instancia, se identifican entidades y propiedades, por lo que cabría afirmar que las teorías reductora y reducida describen una única ontología.<sup>432</sup>

---

<sup>429</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & PÉREZ RANSANZ, A. R., “Lenguaje, ontología y relaciones interteóricas: en favor de un genuino pluralismo ontológico”, *Revista ARNOR Ciencia, Pensamiento y Cultura*, Vol. 187-747 (2011), 44.

<sup>430</sup> Cfr. SKLAR, L., “Types of Inter-Theoretic Reduction”, *The British Journal for the Philosophy of Science*, Vol. 18, No. 2 (1967), 120.

<sup>431</sup> Cfr. CÓRDOBA, M., *op. cit.*, 551.

<sup>432</sup> Cfr. *idem*, 551-552.

La propuesta de Nagel ha sido objeto de algunas críticas, entre ellas las de aquellos que sustentan una visión científica unificada sin apelar a la reducción. Algunos autores, por ejemplo, Duhem, sostienen que, en las relaciones interteóricas, más que reducción lo que hay es una integración en la que los principios de una teoría se complementan con los de la otra, sin que se presuponga una supremacía por parte de alguna de las teorías. Retomando el ejemplo de la mecánica y la termodinámica: la mecánica se enriquece con la adición de los conceptos de la termodinámica y ambas, mecánica y termodinámica, forman parte de una ciencia más amplia en la que ni el aspecto mecánico ni el termodinámico de la naturaleza son fundamentales.<sup>433</sup>

Otra crítica se dirige a la idea de reducción como deducción en el caso de las teorías diacrónicas. Para Paul Feyerabend (1924-1994) el avance de la ciencia no se realiza porque unas teorías sean asumidas por otras. Según la idea de inconmensurabilidad entre teorías que propone este autor, la reducción no es posible ni desde el punto de vista semántico, ni desde un punto de vista ontológico. Desde una perspectiva semántica, la idea de la variación del significado de una teoría comporta un cambio ontológico: la ontología de teorías sucesivas cambia al variar el significado de los términos involucrados en ellas. Por tanto, sería imposible vincular teorías y establecer una relación reductiva cuando el significado de los términos implicados está dado por contextos teóricos distintos. Desde una perspectiva ontológica, la inconmensurabilidad entre las ontologías de teorías sucesivas produce una ruptura entre éstas, lo que impide la consideración de cualquier tipo de reducción.<sup>434</sup>

Por último, cabe señalar que las críticas en torno a la noción sincrónica de reducción han surgido, en su mayor parte, del ámbito de las ciencias particulares, y argumentan que la reducción fracasa cuando se aplica a la práctica científica real.<sup>435</sup>

---

<sup>433</sup> Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics*, *op. cit.*, 45.

<sup>434</sup> Cfr. CÓRDOBA, M., *op. cit.*, 554.

<sup>435</sup> Cfr. *idem*, 555.

### 3.2 La propuesta de Needham

En el contexto de la filosofía de la química, Needham analiza el modelo de reducción propuesto por Nagel, pero no para sumarse a las críticas, sino para rescatarlo de ellas. Según Needham la noción clásica de reducción cumple con un objetivo fundamental: identificar correctamente la teoría reductora. Muchas de las críticas a la reducción apelaban al hecho de que para que la reducción pudiera llevarse a cabo, eran necesarios ciertos supuestos sustanciales adicionales para establecer las relaciones entre las teorías. Needham considera que cuando tiene lugar la reducción heterogénea, la teoría reducida no se retrotrae a la teoría reductora, sino a la teoría reductora incluyendo a las leyes puente; es decir a enunciados que tienen conceptos tanto de la teoría reductora como de la reducida. La verdadera teoría reductora sería entonces la teoría reductora combinada con las leyes puente, pues solo así se cumple el requerimiento deductivo suficiente para la reducción. Por tanto, no habría términos nuevos que aparezcan en la teoría reducida que no estén en la teoría reductora, de aquí que no haya distinción entre los tipos de reducción: solo hay un tipo de reducción, la reducción homogénea a una teoría reductora completamente especificada.<sup>436</sup>

Needham incorpora a la propuesta de Nagel la noción de razonamiento aproximativo en orden a debilitar la condición de deducción como requerimiento suficiente para la reducción. Según Needham, los principios de conexión que permiten la reducción deben debilitarse pues el ideal deductivo nageliano para la efectiva conexión entre teorías es demasiado exigente. En este marco, destaca dos aspectos de la aproximación. De una parte, sostiene que una hipótesis particular no puede ser considerada de forma independiente de los factores que delimitan el grado de aproximación con el cual es mantenida en un momento concreto de la historia y, por otra, señala que la conexión entre teorías debe incluir argumentos aproximativos e incluso métodos netamente numéricos cuando la resolución analítica de las ecuaciones no es posible.<sup>437</sup>

---

<sup>436</sup> Cfr. NEEDHAM, P., "Nagel's Analysis of Reduction: Comments in Defense as well as Critique", *op. cit.*, 166 y CÓRDOBA, M., *op. cit.*, 557-558.

<sup>437</sup> Cfr. CÓRDOBA, M., *op. cit.*, 558.

Al referirse exclusivamente a las teorías involucradas en la reducción y a los nexos entre ellas, la propuesta de Needham se limita al ámbito epistemológico. Para Needham, solo sería posible plantear un reduccionismo ontológico si pudiera formularse una noción aceptable de dependencia ontológica que diera cuenta de cómo la ontología de la teoría reducida depende de la teoría reductora. Pero como esta noción de dependencia ontológica no se ha podido esbozar con claridad, toda discusión acerca de la dimensión ontológica de la reducción carece de sentido.<sup>438</sup>

### 3.3 El no reduccionismo ontológico y la autonomía de la química

La defensa de la autonomía ontológica del mundo químico bajo las bases de una visión ontológica pluralista apareció por primera vez en un artículo de Lombardi y Labarca.<sup>439</sup> Para estos autores, la ciencia tiene acceso a la realidad solo a través de sus teorías y, en consecuencia, el objeto del conocimiento científico sería siempre el resultado de la síntesis entre los esquemas conceptuales propios de las teorías científicas y la realidad noumenal independiente. Por una parte, esta perspectiva —inspirada en Kant— rechaza la posición metafísica realista según la cual el conocimiento científico se aproxima indefinidamente a la descripción de la realidad tal como es en sí misma; y, por otra, admite la existencia de diferentes esquemas conceptuales, ambos diacrónicos y sincrónicos, que llevan a un pluralismo ontológico que permite la existencia de ontologías diferentes e incluso incompatibles.<sup>440</sup>

A pesar del hecho de que históricamente la química se ha desarrollado de manera independiente a la física, desde el impresionante éxito de la mecánica cuántica, en algunos sectores ha sido ampliamente aceptado que la química se puede reducir por completo a la física. Desde este punto de vista, la química se

---

<sup>438</sup> Cfr. *idem*, 562.

<sup>439</sup> LOMBARDI, O. & LABARCA, M., “The ontological autonomy of the Chemical World”, *Foundations of Chemistry*, Vol. 7 (2005), 125-148.

<sup>440</sup> Cfr. LOMBARDI, O., “The Ontological Autonomy of the Chemical World: Facing the Criticisms”, en SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (eds.), *Philosophy of Chemistry. Growth of a New Discipline*, *op. cit.*, 23.

concibe como una rama de la física en la medida en que trata de sistemas complejos o procesos particulares que, en principio, pueden ser descritos y explicados por medio de la teoría cuántica.<sup>441</sup> Este supuesto afectaría a la autonomía de la química como disciplina científica ya que la física vendría a considerarse como una ciencia fundamental capaz de describir los aspectos más profundos de la realidad, y la química sería una ciencia meramente fenomenológica que se limitaría a describir los fenómenos tal y como se nos presentan. En otras palabras, el reino de lo físico tendría prioridad ontológica; las descripciones químicas solamente se referirían a apariencias o, a lo mucho, a entidades secundarias que poseerían una existencia derivada. No obstante, la posición subordinada de la química no afectaría a la actividad diaria de los químicos pues la autonomía metodológica de su trabajo estaría garantizada.<sup>442</sup>

En general, los argumentos para defender la autonomía de la química se han basado en el fracaso de la reducción epistemológica, puesto que no todos los conceptos y leyes químicas pueden derivarse de los conceptos y leyes de la física. En particular, nociones químicas relevantes como enlace químico, estructura molecular y orbital, entre otros, no son susceptibles a ser explicados de manera rigurosa por la mecánica cuántica. Es decir, la mecánica cuántica no puede operar como teoría reductora pues involucra conceptos incompatibles con la química molecular. Desde esta perspectiva se garantiza también la autonomía metodológica de la química con respecto a la física, pues se dota a la química de un ámbito de conceptos específicos que no tienen lugar en la física fundamental.<sup>443</sup>

---

<sup>441</sup> A este respecto, ya hemos mencionado, por ejemplo, el famoso texto de Dirac, cfr. *supra*, 191.

<sup>442</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *op. cit.*, 126-127.

<sup>443</sup> Cfr. *idem*, 127. Recientemente el Premio Nobel de química Roald Hoffmann (1937) afirma que la mayor parte de los conceptos en química que se han mostrado productivos en el diseño de nuevos experimentos no son reducibles a la física. Es decir, estos conceptos químicos no pueden ser redefinidos adecuadamente utilizando solo el lenguaje de la física. Cfr. HOFFMANN, R., "What might Philosophy of Science look like if Chemists Built it", *Synthese*, No. 155 (2007), 329.

### 3.3.1 El estatuto ontológico del mundo químico

Aunque existe un amplio acuerdo entre los filósofos de la química sobre el fracaso de la reducción epistemológica de la química a la física, casi nadie pone en duda la reducción ontológica: las entidades químicas, cuando se analizan en profundidad, no son más que entidades físicas. Por ejemplo, Vemulapalli y Byerly<sup>444</sup> adoptan una postura fiscalista de acuerdo a la cual la química depende ontológicamente de la física fundamental a pesar del hecho de que las propiedades de un sistema químico no puedan derivarse de las propiedades físicas. Una postura semejante es la de Scerri y McIntyre,<sup>445</sup> quienes sostienen que la dependencia ontológica de la química con respecto a la física parece ser inevitable; de aquí que el problema de la reducción —que debe ser resuelto en orden a preservar la autonomía de la química— sea una cuestión epistemológica y no ontológica. En definitiva, al considerar las relaciones entre química y física, la reducción epistemológica debe ser rechazada, pero la reducción ontológica no puede ser negada.<sup>446</sup>

Lo anterior plantea la necesidad de analizar los problemas ontológicos. Es decir, más que preguntarse por la reducción epistemológica de conceptos y leyes, hay que analizar la dependencia ontológica de las entidades y regularidades químicas de las entidades y regularidades del mundo físico. Ahora bien, si el fracaso de la reducción epistemológica es suficiente para garantizar la autonomía de la química, ¿por qué son relevantes las cuestiones ontológicas? Porque si se

---

<sup>444</sup> Cfr. VEMULAPALLI, G. K. & BYERLY, H., “Remnants of Reductionism”, *Foundations of Chemistry*, No. 1 (1999), 18.

<sup>445</sup> Cfr. SCERRI, E. & MCINTYRE, L., “The Case for the Philosophy of Chemistry”, *op. cit.*, 215.

<sup>446</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., “The Ontological Autonomy of the Chemical World”, *op. cit.*, 132-133 y LOMBARDI, O., “¿Acerca de qué nos habla la química? Nuevos argumentos en favor de la autonomía ontológica del mundo químico”, *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, Vol. 13, No. 26 (2013), 112. Lombardi comenta que algunos autores comienzan a abrirse a la discusión ontológica, entre ellos Scerri quien, si bien en la década de 1990 asumía una postura ontológicamente reduccionista acrítica, en la década siguiente ha revisado su posición presentando una postura intermedia entre realismo y reduccionismo ontológico abogando por una imagen de niveles de realidad autónomos aunque interrelacionados. Cfr. SCERRI, E., “The Failure of Reduction and How to Resist Disunity of the Sciences in the Context of Chemical Education”, *Science & Education*, No. 9 (2000), 412.

ignoran, se deja de plantear un tema importante: ¿es la química una ciencia secundaria? La respuesta a esta pregunta depende de la consideración de la reducción ontológica: si la realidad física tiene prioridad ontológica sobre el mundo químico, los conceptos químicos que no son reducibles a la mecánica cuántica se referirán a entidades aparentes o secundarias dotadas de un estatus ontológico derivado. Bajo este supuesto, mientras que la física describiría la estructura más profunda y fundamental de la realidad, la química sería una ciencia secundaria que estudia entidades figuradas que no existen realmente.<sup>447</sup>

Si aceptamos la distinción entre sujeto y objetos en la relación epistémica, los elementos lingüísticos y/o conceptuales (lenguaje, teorías, descripciones, conceptos, nombres, predicados, etc.) corresponden a la parte del sujeto, y los elementos ontológicos (ontología, regularidades, entidades individuales, propiedades, relaciones, eventos, etc.) corresponden a la parte del objeto. Bajo las bases de esta distinción, la reducción epistemológica se entiende como una relación entre elementos lingüísticos o conceptuales, particularmente teorías, y la reducción ontológica como una relación entre elementos ontológicos, generalmente propiedades, pero también entidades individuales, eventos y relaciones nomológicas. Esto significa, por tanto, que la reducción epistemológica y la reducción ontológica son conceptos distintos en la medida en que se aplican a elementos de naturaleza diferente.<sup>448</sup>

La reducción ontológica se refiere, pues, a la dependencia ontológica de entidades, propiedades y regularidades de un estrato de la realidad, con respecto a las entidades, propiedades y regularidades de otro estrato considerado como ontológicamente fundamental. Por tanto, el reduccionismo ontológico es una tesis metafísica que postula la prioridad ontológica de cierto nivel de la realidad al que los otros niveles se reducen directa o indirectamente. La reducción epistemológica, en cambio, se refiere a la relación entre teorías científicas: una teoría puede reducirse a otra cuando puede deducirse de ésta última. Así, el reduccionismo epistemológico es la tesis epistemológica según la cual la ciencia debe, o al menos

---

<sup>447</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *op. cit.*, 133-134.

<sup>448</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., "The Ontological Autonomy of the Chemical World: a Response to Needham", *Foundations of Chemistry*, No. 8 (2006), 82.

puede, ser unificada al deducir todas las teorías científicas a partir de una teoría privilegiada.<sup>449</sup>

Lombardi y Labarca se proponen abordar la cuestión ontológica dentro de un marco que permita la coexistencia de ontologías diferentes pero igualmente objetivas inspirado en el realismo internalista de Hilary Putnam (1926-2016), según el cual la ontología solamente surge como una síntesis entre la realidad noumenal y el esquema conceptual.<sup>450</sup> Bajo este supuesto, sostienen que es posible postular un pluralismo ontológico el cual, en su opinión, proporciona los fundamentos necesarios para sostener la autonomía ontológica del mundo químico: una vez que se acepta que los conceptos y leyes químicas se refieren a entidades y regularidades de una ontología no derivada, no secundaria, puede abandonarse la idea tradicional de superioridad de la física con respecto a la química.<sup>451</sup>

### 3.3.2 El pluralismo ontológico

Como acabamos de señalar, en el realismo internalista de Putnam, Lombardi y Labarca encuentran un marco filosófico fructífero para tratar el problema de la relación entre los mundos físico y químico, por lo que destacaremos algunos aspectos de esta postura que consideramos importantes para nuestro estudio.

En su libro *Razón, Verdad e Historia*, Putnam señala que, en la caracterización de la verdad, la dicotomía objetivo–subjetivo conduce ineludiblemente a la elección entre dos alternativas excluyentes: o bien, asumir la teoría de la verdad–copia, que presupone la existencia de un mundo objetivo, independiente de la mente humana, con el cual se corresponde un enunciado que se dice verdadero; o bien, rechazar la objetividad de la verdad y optar por la

---

<sup>449</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., “The Ontological Autonomy of the Chemical World”, *op. cit.*, 128.

<sup>450</sup> Cfr. NEEDHAM, P., “Ontological Reduction: a Comment on Lombardi and Labarca”, *Foundations of Chemistry*, No. 8 (2006), 73.

<sup>451</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., “The Ontological Autonomy of the Chemical World”, *op. cit.*, 128.

perspectiva relativista según la cual sistemas de pensamiento, ideologías y aún teorías científicas son consideradas inevitablemente subjetivas<sup>452</sup>. Putnam rechaza esta dicotomía que considera tradicional y se propone encontrar un término medio entre el realismo metafísico y el relativismo radical.<sup>453</sup>

Según Putnam, para el realismo metafísico o externalismo el mundo se compone de una totalidad fija de objetos independientes de nuestro conocimiento y admite que solo existe una única descripción verdadera y completa del mundo; la verdad implica algún tipo de relación de correspondencia entre palabras y objetos, entre proposiciones y hechos. En contraposición, el internalismo o realismo internalista, que es la postura que adscribe Putnam, sostiene que los objetos no existen de manera independiente a los esquemas conceptuales. Para Putnam formular la pregunta ¿de qué tipo de objetos consiste el mundo? solo tiene sentido dentro de una teoría de la descripción.<sup>454</sup>

Como señala Pérez Ransaz, la clave para entender las desavenencias entre externalistas e internalistas se encuentra en la noción de objeto. Para el internalismo, los objetos dependen de esquemas conceptuales en sentido fuerte, el cual incluye la existencia. Es decir, los objetos no existen independientemente de los esquemas conceptuales. Esto significa que los esquemas conceptuales no son meros elementos intermediarios entre sujetos y objetos, sino que juegan un papel esencial en la constitución de los objetos. Por tanto, incluso si hay una realidad independiente del sujeto, la ontología solamente surge de un esquema conceptual. Los objetos que resultan de la síntesis entre cada esquema conceptual y la realidad independiente son los únicos objetos. Objetividad no significa, entonces, independencia del sujeto, sino el resultado de nuestros esquemas conceptuales aplicados a la realidad. Y esta es la única objetividad posible cuando

---

<sup>452</sup> Cfr. PUTNAM, H., *Reason, Truth and History*, Cambridge University Press, Cambridge 1981, ix. La teoría de la verdad copia es una idea central en la filosofía positivista: ante la realidad totalmente hecha y acabada, nuestro aparato cognoscitivo es como una cámara fotográfica que copia imágenes de la realidad exterior. De esta forma, la objetividad consiste en copiar bien esa verdad, sin deformarla, y la verdad consistirá en la fidelidad de nuestra imagen interior a la realidad que representa. (Cfr. MARTÍNEZ, M., *La nueva ciencia. Su desafío, lógica y método*, Trillas, México 1999, 34-35).

<sup>453</sup> Cfr. LOMBARDI, O., “¿Acerca de qué nos habla la química?”, *op. cit.*, 115.

<sup>454</sup> Cfr. PUTNAM, H., *op. cit.*, 49.

se prescinde del punto del externalismo o, como también lo denomina Putnam, la vista del Ojo de Dios.<sup>455</sup>

En otras palabras, la realidad independiente del sujeto constituye un ámbito que no es el objeto de nuestro conocimiento. No tiene sentido pensar en una ontología independiente pues nos enfrentamos al mundo y lo categorizamos siempre a través de un esquema conceptual: de tal síntesis surgen los objetos. Por tanto, si la ontología solamente surge como resultado de la síntesis entre esquema conceptual y realidad independiente, debe admitirse que diferentes esquemas conceptuales definen ontologías distintas lo que lleva a la tesis del pluralismo ontológico, un aspecto central del internalismo de Putnam.<sup>456</sup>

Lombardi destaca la raigambre kantiana del pluralismo ontológico al enfatizar que la ontología constituida como síntesis no es una postura epistemológica fruto de nuestros limitados medios de acceso a la realidad, sino el único dominio donde las entidades existen como tales, así como el sistema kantiano tampoco es una postura epistemológica sino un amplio marco filosófico en el que se establecen las condiciones necesarias para el conocimiento y, en consecuencia, para todo discurso científico significativo.<sup>457</sup>

Otro aspecto interesante señalado por Lombardi es la aplicación sincrónica del enfoque pluralista. ¿Pueden coexistir diferentes ontologías con sus propias entidades básicas en una misma época y bajo un mismo paradigma? ¿Una determinada ontología podría tener prioridad metafísica sobre las restantes? Si las distintas teorías aceptadas no pueden vincularse mediante reducción epistemológica, no hay dificultad en sostener la coexistencia de diferentes ontologías, como tampoco hay motivo para sostener que una ontología tiene prioridad metafísica sobre las demás. Como no existe el punto de vista del Ojo de Dios, no hay argumento que pueda respaldar la idea de una única ontología verdadera: todas las ontologías tienen el mismo estatuto metafísico, puesto que

---

<sup>455</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., “The Ontological Autonomy of the Chemical World”, *op. cit.*, 137.

<sup>456</sup> Cfr. LOMBARDI, O., “¿Acerca de qué nos habla la química?”, *op. cit.*, 116.

<sup>457</sup> Cfr. *idem*, 117.

todas están constituidas por descripciones científicas igualmente legítimas en tanto pragmáticamente exitosas.<sup>458</sup>

No es posible, por tanto, concebir la descripción de la realidad en sí misma: incluso la teoría cuántica incluye un esquema conceptual particular que constituye la ontología cuántica. Si los conceptos químicos pudieran reducirse a conceptos cuánticos, se podría afirmar la reducción ontológica del mundo químico a la ontología de la mecánica cuántica. Pero si se acepta la irreductibilidad epistemológica de la química, el único argumento para sostener una reducción ontológica es el prejuicio del realismo metafísico. Desde el punto de vista pluralista conceptos químicos como composición, enlace químico, forma molecular y orbital, por ejemplo, se refieren a entidades que pertenecen a la ontología química, que solamente depende de la teoría que la constituye y no se deriva de un nivel ontológico más fundamental de la realidad. Las propiedades químicas no necesitan referirse a propiedades físicas para adquirir su legitimidad ontológica: son propiedades que pertenecen al mundo químico, y su objetividad no depende de la posibilidad de ser reducidas ontológicamente a las propiedades supuestamente más básicas de la física. El hecho de que el mundo químico no se reduzca ontológicamente al mundo de la física no significa que ambas ontologías están completamente aisladas; al contrario, están interconectadas por enlaces nomológicos no reductivos lo que permite la existencia de relaciones objetivas entre ambos mundos pero preserva la autonomía ontológica de cada uno de ellos.<sup>459</sup>

Desde el punto de vista del pluralismo, las relaciones entre teorías simultáneamente aceptadas, más que conducir a una jerarquización de niveles, conforman una red en la que una misma teoría puede conectarse con dos o más teorías, relacionándose con cada una de ellas y formando una estructura reticular basada en los puentes conceptuales que las conectan. En este entramado, las fronteras disciplinares pierden su importancia. Este es precisamente el caso de la relación entre química y física; la química establece vínculos con teorías

---

<sup>458</sup> Cfr. LOMBARDI, O., “¿Acerca de qué nos habla la química?”, *op. cit.*, 117.

<sup>459</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., “The Ontological Autonomy of the Chemical World”, *op. cit.*, 140, 146-147.

propiamente físicas, como la mecánica cuántica, sin que por ello las teorías químicas involucradas, ni las correspondientes ontologías, pierdan su autonomía.<sup>460</sup>

Una última cuestión que cabría plantearse acerca del pluralismo ontológico es si dado que el esquema conceptual juega un papel preponderante en la constitución de la ontología, ¿cómo no caer en un relativismo radical? Lombardi explica que la práctica científica cumple un papel central en la imposición de un esquema conceptual. Cuando en la actividad experimental cuestionamos a la realidad independiente del sujeto, la respuesta debe darse en el mismo lenguaje en que la pregunta fue formulada; sin embargo, la realidad siempre conserva la capacidad de responder negativamente. Es precisamente este hecho lo que permite al pluralismo ontológico no caer en un relativismo radical: una ontología constituida por un esquema conceptual puede invalidar empíricamente una teoría formulada en tal esquema.<sup>461</sup>

### 3.3.3 Orbitales y ontología en la filosofía de la química

En el presente apartado centraremos la atención en un caso ampliamente discutido en la actualidad: la supuesta observación de los orbitales atómicos. Tratamos este tema porque para Lombardi y Labarca, el análisis de este caso permite argumentar en favor del pluralismo ontológico y mostrar que puede admitirse la coexistencia de diferentes ontologías sin prioridades ni privilegios metafísicos.<sup>462</sup>

En 1913 Bohr utilizó la noción de los quanta de Max Planck (1858-1947) y la aplicó a la física de los átomos. Su modelo planetario del átomo consiste de un núcleo cargado positivamente, rodeado de electrones negativos dispuestos en órbitas concéntricas (cada una caracterizada por un número cuántico distinto) y

---

<sup>460</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *op. cit.*, 126-127.

<sup>461</sup> Cfr. LOMBARDI, O., "¿Acerca de qué nos habla la química?", *op. cit.*, 118.

<sup>462</sup> Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., "Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos", *Principia*, Vol. 14, No. 3 (2010), 310.

capaces de saltar entre las distintas órbitas por emisión o absorción de energía luminosa.<sup>463</sup>

Aunque el modelo de Bohr fue un eslabón importante para el desarrollo de la mecánica cuántica, presentó dificultades cuando se aplicó a átomos multielectrónicos y a moléculas. Con la formulación definitiva de la mecánica cuántica, se modificó sustancialmente la concepción de los electrones en el átomo ya que dejaron de concebirse girando alrededor del núcleo en trayectorias definidas: se comienza a utilizar el término orbital en lugar de órbita.<sup>464</sup>

La cuestión de la existencia actual de orbitales ha sido un tema de debate recurrente en la filosofía de la química desde la publicación, en septiembre de 1999, de un artículo (incluyendo una fotografía en la portada) en la revista *Nature* que, bajo el título *Orbitals observed*, anunciaba la visualización de orbitales moleculares.<sup>465</sup> A pesar del impacto, la acogida y la expectativa generados, algunos autores expresaron serias reservas con respecto a la interpretación de los experimentos mostrados. En particular, en el ámbito filosófico, se presentaron diferentes argumentos que señalaban un error conceptual en la interpretación de las visualizaciones.<sup>466</sup> Scerri, por ejemplo, insistió en que los orbitales no pueden ser visualizados porque son constructos matemáticos y no entidades de las que se pueda decir que existen físicamente. Y este hecho no se debe a limitaciones empíricas sino a que el término orbital carece de referencia: estrictamente los orbitales no existen. Según este autor, el error conceptual consiste en confundir el concepto de orbital con el de densidad de carga (o densidad electrónica) el cual sí es observable experimentalmente.<sup>467</sup>

---

<sup>463</sup> Cfr. *idem*, 188.

<sup>464</sup> Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del status ontológico de las entidades químicas”, *op. cit.*, 314.

<sup>465</sup> ZUO, J. M. & KIM, M. & O’KEEFE, M. & SPENCE, J.C.H., “Direct observation of *d*-orbitals holes and Cu-Cu bonding in Cu<sub>2</sub>O”, *Nature*, No. 401 (1999), 49-52.

<sup>466</sup> Cfr. por ejemplo: SCERRI, E., “Have Orbitals Really Been Observed?”, *op. cit.*, 1492-1494; SCERRI, E., “The Recently Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues”, *op. cit.*, S76-S88.

<sup>467</sup> Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del status ontológico de las entidades químicas”, *op. cit.*, 318-319.

Scerri considera que el modelo orbital sigue siendo muy útil como una primera aproximación y se encuentra en la base de mucha de la química computacional. Sin embargo, no se puede perder de vista que se trata solamente de un modelo. De acuerdo con la teoría ampliamente aceptada, los orbitales atómicos sirven como una especie de sistema de coordenadas que puede ser utilizado para extender matemáticamente la función de onda de cualquier sistema físico particular. Así como el sistema de coordenadas  $x, y$  y  $z$  que se utiliza para describir cualquier experimento particular en la física clásica, es inobservable, del mismo modo los orbitales atómicos son completamente inobservables.<sup>468</sup>

El primer argumento utilizado por Scerri para negar la existencia de los orbitales se basa en una limitación matemática. De hecho, solamente el átomo considerado como un todo posee un estado cuántico bien definido, representado por su función de onda total; dicho estado resulta de las interacciones entre el núcleo y cada electrón, y de los electrones entre sí. Una consecuencia de las interacciones entre los electrones es que no es posible factorizar la función de onda del átomo como producto de las funciones de onda de los electrones componentes: toda descomposición de este tipo es una mera aproximación. En otras palabras, como la ecuación de Schrödinger no puede ser resuelta analíticamente para átomos multielectrónicos, no es posible asignar una función de onda individual a cada electrón. Bajo este supuesto, el autor considera que los orbitales son no referenciales en cuanto que no se corresponde con cualquier entidad que se puede decir que existe físicamente. La utilidad de los orbitales se limita, entonces, a proporcionar una base en la cual la función de onda pueda expresarse matemáticamente; la precisión dependerá de las posibilidades de cálculo disponibles.<sup>469</sup>

El segundo argumento se basa en el hecho de que, según la mecánica cuántica, los electrones carecen de una trayectoria definida. Su función de onda no describe su trayectoria, sino que, más bien, permite calcular una distribución

---

<sup>468</sup> Cfr. SCERRI, E., "Have Orbitals Really Been Observed?", *op. cit.*, 523 y HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics*, *op. cit.*, 353.

<sup>469</sup> Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., "Acerca del status ontológico de las entidades químicas", *op. cit.*, 319-321 y LABARCA, M. & LOMBARDI, O., "Why Orbitals Do Not Exist?", *Foundations of Chemistry*, No. 12 (2010), 150-151.

de probabilidad. Por tanto, si se admite que un orbital es una función de onda, y dado que la función de onda es una magnitud imaginaria (incluye el número imaginario  $i = \sqrt{-1}$ ), entonces los orbitales no son observables.<sup>470</sup>

Con el anuncio de la observación de orbitales, la discusión pasa del terreno epistemológico al ontológico: ya no se trata de establecer el papel explicativo del concepto de orbital, o la posibilidad de su descripción en términos de la mecánica cuántica, sino de saber si los orbitales existen o no.<sup>471</sup>

Lombardi y Labarca critican la postura de Scerri argumentando que del carácter no referente de los orbitales no puede concluirse que no existan. Más aún, según estos autores, la no referencialidad del término orbital depende de un profundo rompimiento conceptual entre la noción de orbital, tal y como se entiende en la mecánica cuántica, y la noción de orbital como es usada en la química molecular.<sup>472</sup> Mientras que en la mecánica cuántica el orbital es un término no referente (el orbital atómico es una función de onda y, por tanto, un ítem matemático que no posee un referente ontológico), en la química molecular los orbitales existen como regiones espaciales que permiten dar cuenta, por ejemplo, de los enlaces entre los átomos y la estructura de las moléculas.<sup>473</sup> En otras palabras, los orbitales no existen en el mundo descrito por la mecánica cuántica pero sí existen en el mundo descrito por la química molecular.<sup>474</sup>

Labarca y Lombardi concluyen que sostener la idea de que los orbitales no existen se basa en un reduccionismo metafísico que da primacía a la mecánica cuántica y que no tiene en cuenta la legitimidad de la química como ciencia *a priori*. Esta conclusión va de acuerdo con el pluralismo ontológico sostenido por estos autores, que admite la existencia igualmente real de diferentes ontologías sin relaciones de prioridad o independencia entre ellas. Dado que toda ontología surge de la síntesis entre la realidad nouménica y el esquema conceptual, podemos

---

<sup>470</sup> Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del status ontológico de las entidades químicas”, *op. cit.*, 319.

<sup>471</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>472</sup> Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics*, *op. cit.*, 355.

<sup>473</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>474</sup> Cfr. LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del status ontológico de las entidades químicas”, *op. cit.*, 325.

afirmar tanto una ontología propia de la mecánica cuántica como una ontología propia de la química molecular. De aquí que no hay inconveniente en afirmar que la forma molecular y los enlaces químicos existen en la ontología de la química molecular, aunque no existan en la ontología cuántica. Las entidades químicas no necesitan de las entidades cuánticas para legitimar su existencia. Por tanto, a la pregunta ¿los orbitales pueden ser observados?, Labarca y Lombardi responden afirmativamente. Los orbitales pueden ser observados como pueden serlo otras entidades no pertenecientes a la ontología cuántica<sup>475</sup>.

La química molecular no solamente se ha desarrollado de manera independiente de la mecánica cuántica, sino que, además, es irreductible a ésta. Conceptos como orbital atómico, enlace químico y estructura molecular, han sido empíricamente exitosos en la práctica de la química y han resultado de gran utilidad en la manipulación y obtención de diferentes sustancias químicas. El valor científico de la química molecular se funda en el éxito de sus numerosas aplicaciones tecnológicas y esto de manera independiente al desarrollo de la mecánica cuántica. “Cuando nos libramos del supuesto metafísico de una realidad única descrita por la “Teoría Verdadera”, podemos aceptar la coexistencia de múltiples ontologías autónomas, cuyo carácter “real” se funda en el éxito de nuestra interacción con las entidades que la conforman. Los orbitales atómicos son un ejemplo de estas entidades”<sup>476</sup>.

Hettema critica las conclusiones pluralistas de Labarca y Lombardi. Para este autor, el problema está en que parece haber una discontinuidad ontológica entre el uso del término orbital en la química molecular y en la mecánica cuántica. Según Hettema no podemos describir a los orbitales como las regiones espaciales de los átomos en las que la localización de los electrones es más probable; este papel le correspondería a la densidad electrónica. De aquí que lo que podríamos observar no son los orbitales sino la densidad electrónica u otro efecto del orbital. Para Hettema, hay una noción dual del concepto de orbital: una noción de orbital que depende del marco ontológico de las diversas teorías, y una noción de orbital

---

<sup>475</sup> Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics*, *op. cit.*, 355 y LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del status ontológico de las entidades químicas”, *op. cit.*, 326.

<sup>476</sup> LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del status ontológico de las entidades químicas”, *op. cit.*, 329.

según su función en una explicación química. Es decir, mientras que para algunos los orbitales son funciones matemáticas, para otros tienen que ver más con su función explicativa. De aquí que, para Hettema, la pregunta no es si los orbitales existen, sino cómo o como qué existen. Es decir, el debate sobre la existencia de los orbitales nos remite a una cuestión esencial en la filosofía de la ciencia: cómo debemos concebir el objeto científico.<sup>477</sup>

#### 4. Valoración crítica del pluralismo ontológico

Junto con el impacto que causó la propuesta del pluralismo ontológico, vinieron también las primeras críticas. Considerar estas críticas, así como las aclaraciones que sobre las mismas realizan los autores, nos dará pie para añadir algunos comentarios y nos proporcionará elementos que resultarán útiles para determinar el estatuto ontológico de la química.

La primera observación crítica fue realizada por Paul Needham quien rechaza la misma noción de reducción ontológica que subyace a las posturas contra las que explícitamente se confronta el pluralismo ontológico: el realismo metafísico, por una parte, y por otra, el relativismo. Needham se pregunta si es coherente la idea de la existencia de entidades de segunda clase que los autores describen como un nivel ontológico inferior de la realidad.<sup>478</sup>

¿Qué debemos entender por entidades de segunda clase? O, dicho de otro modo, ¿qué es lo que permite suponer que las entidades químicas tengan una ontología secundaria o derivada? Según Lombardi y Labarca, con el éxito de la mecánica cuántica, se ha otorgado a la física un estatus de ciencia fundamental que le posibilita describir la realidad en sus aspectos más profundos. Por consiguiente, la química vendría a ser una ciencia meramente fenoménica, pues se limita a describir los fenómenos tal y como se nos aparecen.<sup>479</sup> Esto sucede cuando se da

---

<sup>477</sup> Cfr. HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics*, *op. cit.*, 362-363 y *supra*, 199-200.

<sup>478</sup> Cfr. NEEDHAM, P., "Ontological Reduction: a Comment on Lombardi-Labarca", *Foundations of Chemistry*, No. 8 (2006), 75.

<sup>479</sup> Cfr. *supra*, 211. Esta supuesta diferencia entre ambas disciplinas coincide también con la jerarquía de las ciencias que tiene sus raíces en el pensamiento positivista de finales del siglo XIX. Debido a su carácter fundamental, la física se encuentra en lo más alto de la jerarquía, mientras

por sentada la dependencia ontológica del mundo químico con respecto al mundo físico.<sup>480</sup>

Needham está de acuerdo en que la reducción ontológica no debe ser simplemente asumida sin más, pero considera que debe darse una explicación clara sobre lo que hay que entender por dependencia ontológica, explicando los términos bajo los cuales la ontología de la teoría reducida pueda decirse ser dependiente de la teoría reductora, pero no viceversa. Mientras esto no se haga, en sí misma, la noción de reducción ontológica es una noción oscura, carente de sentido, por lo que debería prescindirse de la misma.<sup>481</sup>

Para refutar esta caracterización de la noción de reducción ontológica como carente de sentido, Lombardi y Labarca refieren varios casos en los que, en su opinión, se ve claramente que tanto la reducción como la dependencia ontológica han sido temas recurrentes en la historia de la filosofía.<sup>482</sup> Por su parte,

---

que la química se relega a una posición inferior, al punto de que puede ser derivada de las leyes físicas fundamentales.

<sup>480</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & LABARCA, M., “The Ontological Autonomy of the Chemical World”, *op. cit.*, 126. Para ilustrar (la conformidad) con la reducción ontológica, Lombardi y Labarca señalan, por ejemplo, el fisicalismo de Vemulapalli y Byerly quienes sostienen que, la emergencia de entidades y propiedades químicas, debería ser interpretada solamente en un sentido epistemológico. (Cfr. VEMULAPALLI, G. K. & BYERLY, H., “Remnants of Reductionism”, *Foundations of Chemistry*, 1 (1999), 18), y Scerri y McIntyre, para quienes el problema a resolver en la defensa de la autonomía de la química es la cuestión epistemológica y no la ontológica. Cfr. SCERRI, E. & MCINTYRE, L., “The Case for the Philosophy of Chemistry”, *op. cit.*, 215.

<sup>481</sup> Cfr. NEEDHAM, P., “Ontological Reduction: a Comment on Lombardi-Labarca”, *op. cit.*, 74 y Lombardi, O., “The Ontological Autonomy of the Chemical World: Facing the Criticism”, *op. cit.*, 24.

<sup>482</sup> Por ejemplo, la idea de un sustrato fundamental en la filosofía presocrática (escuela de Mileto), misma que sobrevive en Empédocles y en el atomismo de Leucipo y Demócrito. En la filosofía de Platón, las Ideas mantienen una prioridad ontológica sobre las cosas sensibles que se consideran meras copias de las Ideas en tanto que requieren de éstas para existir, tienen una existencia secundaria. La distinción aristotélica entre sustancia primera y atributos en donde la sustancia tiene prioridad ontológica en el sentido de que no necesita de otra cosa para existir, mientras que los atributos tienen una existencia secundaria, posibilitada por la existencia de la sustancia. La relación entre cualidades primarias (dotadas con prioridad ontológica), y cualidades secundarias (meramente subjetivas), permeadas por la filosofía de Locke y la física de Galileo. El atomismo de Gassendi, el corpuscularismo de Boyle y, posteriormente, la teoría atómica moderna de Dalton. Más recientemente, el intento de Boltzmann por explicar los fenómenos térmicos de los gases en términos de la mecánica clásica, o la física de partículas representada por el Modelo Estándar. (Cfr.

Lombardi añade que la cuestión estriba no tanto en dotar de sentido la relación de dependencia ontológica como en preguntarse qué razones existen para admitirla.<sup>483</sup>

De manera esquemática se puede decir que:

1. Aceptar el reduccionismo ontológico supone aceptar que las entidades químicas son entidades de segunda clase pues tienen una existencia secundaria o derivada.
2. No existe una única ontología a la cual se refiere todo el conocimiento científico.
3. Cada disciplina científica tiene su propio dominio ontológico en el que las entidades y regularidades descritas teóricamente pueden ser consideradas reales.<sup>484</sup>

Sostener el pluralismo ontológico, por tanto, permite concebir una realidad fenoménica estratificada que se organiza en múltiples niveles ontológicos interconectados entre sí por relaciones objetivas, pero no reductivas. De este modo, cada teoría opera sobre su propio nivel ontológico con entidades y regularidades propias y reales.<sup>485</sup>

Por lo que se refiere al internalismo putniano, en el que como ya señalamos, Lombardi y Labarca encuentran el marco filosófico en el que fundamentar su propuesta, un aspecto al que considero importante hacer referencia es a su rechazo del realismo metafísico. Ya hemos mencionado que Putnam identifica el realismo metafísico con la tesis según la cual los objetos del mundo existen independientemente de nuestro conocimiento y constituyen una totalidad fija, por tanto, sola hay una única descripción verdadera y completa de cómo es el mundo. Además de que este modo de concebir la metafísica es el propio del científicismo, se pueden presentar las siguientes objeciones: primero, que de que existan objetos en el mundo independientemente de nuestro conocimiento, no se puede inferir, como hace Putnam que haya una sola

---

LOMBARDI, O., "The Ontological Autonomy of the Chemical World: Facing the Criticism", *op. cit.*, 24-25.

<sup>483</sup> Cfr. LOMBARDI, O., "¿Acerca de qué nos habla la química?", *op. cit.*, 121.

<sup>484</sup> Cfr. LABARCA, M., *op. cit.*, 163.

<sup>485</sup> Cfr. *ibidem*.

descripción verdadera y completa de cómo es el mundo. Y segundo, que del hecho de que yo vea la realidad desde un cierto punto de vista y según cierto aspecto, no se sigue que no tenga una percepción directa de la realidad y, en consecuencia, que el hecho que yo describo no tenga una existencia independiente.<sup>486</sup>

Dicho de otro modo, lo que afirma la metafísica realista es que hay un mundo objetivo que existe independientemente del conocimiento y del lenguaje humano, y que cuando se afirma que es posible conocer la realidad objetiva, no se quiere decir que se pretenda poder definir toda la realidad, más aún, ni siquiera poder definir completamente un objeto determinado.

En definitiva, Putnam rechaza el realismo metafísico porque, de acuerdo con su planteamiento, no tiene sentido aceptar que existe una única ontología independiente. Estamos de acuerdo con Putnam en que nuestro conocimiento de la realidad está mediado por nuestros esquemas conceptuales, pero esto no significa que lo que conozcamos no sea el mundo, ni que entendamos la realidad de modo unívoco. Por el contrario, Putnam afirma que fuera de los esquemas conceptuales no existen objetos, puesto que el mundo se compone de objetos cuando es introducido en esquemas de descripciones<sup>487</sup>.

Sobre la influencia de la filosofía kantiana queremos señalar que, siguiendo a nuestros autores, para Kant la cuestión que formula el realismo sobre si hay objetos físicos o materiales o si solo existe lo mental no es una pregunta procedente. Es decir, no se trata de establecer qué es lo que realmente existe, sino en aceptar que todo objeto de conocimiento se constituye en el marco de nuestro esquema categorial y, en consecuencia, es objeto para nosotros. Más aún, Kant no pone en duda la existencia de una realidad independiente del sujeto, porque para él es un postulado de la razón. Lo que le interesa destacar es que la realidad

---

<sup>486</sup> Cfr. VILLALBA, M., “Las relaciones entre verdad y racionalidad, según Hilary Putnam”, *Revista Observaciones Filosóficas*, No. 7 (2008) en <http://www.observacionesfilosoficas.net/lasrelaciones.htm> [consultada el 25 de noviembre de 2016].

<sup>487</sup> Cfr. *ibidem*. En esta afirmación se ve claramente la influencia de la filosofía kantiana y se entenderá mejor a la luz de lo que explicaremos en los siguientes epígrafes.

independiente es un dominio nouménico que no es objeto de nuestro conocimiento. No podemos formar ninguna idea o concepto de la cosa-en-sí.<sup>488</sup>

Dado que los objetos no existen independientemente de los esquemas conceptuales, descomponemos el mundo en objetos cuando introducimos uno u otro esquema descriptivo. Interactuamos con el mundo y lo caracterizamos a través de un determinado sistema de conceptos, y de tal síntesis, surgen los objetos en cuanto tales, con una identidad. No solo no hay una correspondencia entre cosas-en-sí y objetos de la experiencia, sino que tampoco puede asumirse que las determinaciones de los objetos empíricos tienen su razón de ser en la cosa-en-sí. Al rechazar el realismo metafísico (por las mismas razones por las que Kant rechazara en su momento el realismo trascendental), lo que Putnam está refutando es la noción de objeto como algo que tiene una identidad propia pero que a la vez existe con total independencia de nuestro conocimiento.<sup>489</sup> Nos parece vislumbrar que, en el trasfondo de este planteamiento, aparece el problema de la objetividad que es una cuestión crucial de la filosofía kantiana. La reducción de la cosa a objeto confirma, bajo este supuesto, la fundamentación de la realidad en la actividad cognoscitiva, la dependencia del ser respecto al conocimiento, debido a la dimensión necesariamente relacional del objeto —siempre referido a un sujeto que conoce—, que contrasta con el carácter en cierto modo absoluto de las nociones de ente o cosa. Se trata, por tanto, de un método reflexivo, que no apunta directamente a las cosas, sino a la mediación que las hace posibles como objeto de conocimiento, es decir, al sujeto.<sup>490</sup>

Siguiendo la lógica de este discurso, surge entonces la pregunta de si la ontología constituida como síntesis no podría interpretarse como una epistemología dado que el acceso a la realidad está mediado por nuestros limitados esquemas conceptuales. A esta inquietud los autores responden que no es así, del mismo modo que el sistema kantiano no es una posición epistemológica sino un

---

<sup>488</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & PÉREZ RANSANZ, A. R., *op. cit.*, 49.

<sup>489</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>490</sup> Cfr. SANZ, V., *De Descartes a Kant. Historia de la filosofía moderna*, EUNSA, Pamplona (2005), 388-389.

amplio marco filosófico que establece las condiciones necesarias para el conocimiento y, por tanto, para todo discurso científico significativo.<sup>491</sup>

Para nuestros autores, si no hay motivos para afirmar que diferentes teorías científicas puedan vincularse mediante reducción epistemológica, tampoco hay motivos para sostener que una determinada ontología tiene prioridad metafísica sobre el resto. La idea de que la realidad nos impone una correspondencia única entre nuestros conceptos y las cosas es una mera ilusión. Por tanto, si no hay un concepto privilegiado de objeto, ni de existencia que sea metafísicamente correcto, no hay nada que impida aceptar que puedan coexistir ontologías no solo distintas, sino incluso incompatibles.<sup>492</sup>

¿Cómo salir entonces al paso de la posible acusación de relativismo? Si, como se ha explicado, cada esquema conceptual contribuye a la constitución de su propia ontología, no hay contradicción al adjudicar propiedades incompatibles a ontologías diferentes, ya que dichas propiedades son reales y objetivas dentro de sus propias ontologías.<sup>493</sup>

De acuerdo con Lombardi y Labarca, el realismo internalista lleva a postular el pluralismo ontológico, y el pluralismo ontológico, a su vez, permite justificar la autonomía ontológica de la química.

Según Manafu, la inferencia desde el realismo internalista al pluralismo ontológico, puede representarse sistemáticamente como sigue:

1. Una ontología siempre es relativa a un esquema conceptual.
2. Existe una pluralidad de esquemas conceptuales que pueden aplicarse simultáneamente a la misma porción de la realidad.
3. Por tanto, existe una pluralidad de ontologías.

Sin embargo, para este autor, contrariamente a lo que sugiere el pluralismo ontológico, diferentes esquemas conceptuales no siempre (o no necesariamente) definen diferentes ontologías. Si dos esquemas conceptuales están relacionados de

---

<sup>491</sup> Cfr. LOMBARDI, O. & PÉREZ RANSANZ, A. R., *op. cit.*, 49.

<sup>492</sup> Cfr. *idem*, 52.

<sup>493</sup> Cfr. *ibidem*.

alguna manera (de modo que uno se reduce de otro), ¿es necesario postular dos ontologías diferentes, cada una correspondiente a un esquema conceptual?<sup>494</sup>

¿Cómo impacta esto a la cuestión de la autonomía ontológica de la química? Según Manafu, de acuerdo a lo que se ha argumentado, la noción de autonomía ontológica de la química sostiene la idea de que la química tiene su propia ontología, misma que es distinta de la ontología de la física. Esto significa que la química se ocupa de sus propias entidades, propiedades y regularidades, las cuales no son reducibles a las entidades, propiedades y regularidades propias de la física. Con esta puntualización, lo que se pretende señalar es que la cuestión de la autonomía ontológica se encuentra inseparablemente unida a la cuestión del reduccionismo, de modo que no se puede resolver la primera sin haber resuelto la segunda. En otras palabras, según este autor, el internalismo realista no basta para resolver la cuestión de la autonomía ontológica de la química.<sup>495</sup>

En un artículo reciente, Lombardi señala que gran parte del desarrollo de la filosofía de la ciencia en el siglo XX ha ignorado el tema ontológico. Según la autora, a pesar de las múltiples críticas de las que ha sido objeto, el pluralismo ontológico de raigambre kantiana, con su intento de repensar los límites entre las teorías científicas a la luz del problema del realismo, al menos ha contribuido a reinstalar la discusión ontológica en el contexto de la filosofía de la química.<sup>496</sup>

Con lo dicho hasta aquí, se ha afrontado el problema de la autonomía de la química en el contexto del tema del reduccionismo, sosteniendo que, en general, existen suficientes argumentos para defender la no reducción epistemológica de la química a la física. Lo que llamó nuestra atención fue la novedad que parecía aportar el estudio de la cuestión desde el punto de vista ontológico y metafísico, por ello dedicamos suficiente espacio al estudio del pluralismo ontológico propuesto por Lombardi y Labarca. En nuestra opinión, el tema de la relación química-física, más que ser una cuestión ontológica y metafísica, ha de abordarse desde otro ámbito, que es el de la filosofía de la ciencia.

---

<sup>494</sup> Cfr. MANAFU, A., "Internal Realism and the Problem of Ontological Autonomy: a Critical Note on Lombardi and Labarca", *Foundations of Chemistry*, No. 15 (2013), 226.

<sup>495</sup> Cfr. *idem*, 228.

<sup>496</sup> Cfr. LOMBARDI, O., "The Ontological Autonomy of the Chemical World: Facing the Criticism", *op. cit.*, 36.

En el fondo, la cuestión sería plantearnos si realmente se puede hablar de una ontología de la química. En mi opinión, existe una única ontología a la que se refiere todo el conocimiento científico. Las ciencias se aproximan al conocimiento de la realidad desde diferentes ámbitos y la profundización en la misma depende de sus objetos propios.

Por lo que se refiere a las ciencias experimentales, lo propio de su método son las construcciones teóricas que proporcionan marcos conceptuales para la descripción de fenómenos observables. El conocimiento obtenido, en cuanto que pretende una aproximación verdadera a la realidad, está siempre referido a un contexto concreto el cuál, además, depende de los conocimientos y medios instrumentales del momento, por lo que su validez es compatible con las sucesivas reinterpretaciones de los conceptos y de los datos experimentales.<sup>497</sup> Es decir, más que discutir sobre la existencia de entidades teóricas, refiriéndose con esto a la cuestión del estatus ontológico de las mismas, lo que hay que establecer es en qué medida dichas entidades corresponden a determinados aspectos de la realidad. En otras palabras, la ciencia experimental como tal no implica una perspectiva ontológica propia.

Lo que acabamos de señalar contrasta con la propuesta del pluralismo ontológico que, en nuestra opinión, vendría a ser un razonamiento metafísico especulativo, en el que la ontología de las entidades químicas (por ejemplo, orbitales, enlaces, estructuras) está determinada por los esquemas conceptuales que la originan. Y aunque Lombardi y Labarca insisten en la dimensión realista de su postura, su planteamiento no puede hacer referencia directa a las cosas en sí, pues como ya anotamos anteriormente, debido a su raigambre kantiana, lo que las hace posibles es que existen en cuanto objetos de conocimiento.

---

<sup>497</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia experimental*, 3ª. ed., EUNSA, Pamplona 1999, 49.

## 5. Filosofía de la ciencia y ontología

Quizá un modo sugerente de empezar este epígrafe sea preguntarnos si es correcto presuponer que la ciencia persigue el conocimiento sobre el mundo (o la naturaleza) tal cual es y, por consiguiente, la filosofía de la ciencia también debería analizar cuestiones ontológicas como aquellas sobre la naturaleza del ser o la consideración sobre qué tipos de entidades existen realmente. Este cuestionamiento resulta pertinente para el pluralismo ontológico que hemos analizado, el cual se presenta como un intento de introducir un cierto tipo de ontología metafísica en la filosofía de la química.

Como ya se señaló, Lombardi y Labarca sostienen que el reduccionismo ontológico es una tesis metafísica según la cual, las descripciones físicas se refieren a una ontología verdadera y definitiva mientras que la química solamente describe fenómenos aparentes, estudia entidades que no existen realmente o, en el mejor de los casos, una realidad de menor nivel ontológico. Por mi parte, coincido con Vihalemm en afirmar que la filosofía de la ciencia no necesita de ningún tipo de planteamiento metafísico-ontológico para convencernos de que no hay motivo para creer que las teorías físicas fundamentales son las únicas que pueden decirnos algo acerca del mundo real y, por tanto, tienen prioridad ontológica sobre las otras teorías científicas, como, por ejemplo, sobre la química.<sup>498</sup>

La perspectiva reduccionista tuvo un papel importante dentro del marco del positivismo y del materialismo, ya que se consideraba que las entidades y teorías de niveles superiores no serían sino la suma de entidades y teorías de niveles inferiores por lo que, en último término, todo podría reducirse a sus componentes materiales. Actualmente se piensa que, por lo general, es muy difícil sostener que unas ciencias se reducen a otras debido al carácter específico de los diferentes niveles de la realidad y de las diversas perspectivas utilizadas para estudiarlos.<sup>499</sup>

---

<sup>498</sup> Cfr. VIHALEMM, R., "The autonomy of chemistry; old and new problems", *Foundations of Chemistry*, No. 13 (2011), 97 y VIHALEMM, R., "A. Whitehead's Metaphysical Ontology and I, Prigogine's Scientific Ontology: From a Point of View of a Theoretical Conception of Science", *Problemas*, No. 71 (2007), 82.

<sup>499</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia*, *op. cit.*, 139-140.

Así como la ciencia en general, no puede ser identificada con la física, tampoco las leyes y teorías químicas pueden identificarse con las de la física. Sin embargo, ¿por qué se ha propuesto a la física como el modelo paradigmático de ciencia? Porque se considera como una investigación teórico-experimental que construye su objeto de investigación estudiando la naturaleza solamente a través de situaciones idealizadas y matemáticamente predecibles. Por tanto, con base en la física, puede construirse un modelo teórico que representa a la ciencia en general en su forma más pura; es decir, como una idealización que hace posible teóricamente el estudio de la estructura metodológica propia de las ciencias exactas.<sup>500</sup>

En toda actividad científica hay que distinguir dos procesos: la construcción de entidades teóricas (conceptos, leyes y teorías) y la comprobación experimental. En la elaboración de cualquier teoría científica, el primer paso lógico es, por tanto, la construcción del objeto científico. El objeto que estudia una ciencia no es simplemente el objeto tal y como se presenta a nuestra experiencia inmediata, sino un objeto que la ciencia misma debe formular y delimitar. Si se considerasen los objetos reales con sus propiedades observables no sería posible obtener formulaciones matemáticas como las utilizadas, por ejemplo, en la física clásica. De aquí que resulte imprescindible construir un objeto ideal, y que sustituye a los objetos reales.<sup>501</sup>

En los *Principios matemáticos de la filosofía natural*, por ejemplo, Newton buscaba un conocimiento de la naturaleza por medio de conceptos matemáticos, por lo que definió un sistema ideal de puntos dotados de masa y sometidos a fuerzas. Se trata de una idealización. Sin embargo, si se considerasen los objetos reales con sus propiedades observables no sería posible obtener formulaciones matemáticas como las de la mecánica. Esto significa que el objeto que estudia la ciencia no es simplemente el objeto tal y como se presenta a nuestra experiencia inmediata, sino un objeto que la ciencia misma debe formular y delimitar.<sup>502</sup>

---

<sup>500</sup> Cfr. VIHALEMM, R., "A. Whitehead's Metaphysical Ontology and I, Prigogine's Scientific Ontology", *op. cit.*, 85.

<sup>501</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia experimental*, *op. cit.*, 112.

<sup>502</sup> Cfr. *ibidem*.

Todo conocimiento implica una abstracción: se deben tomar en consideración algunos aspectos, dejando otros de lado y, en este sentido, se puede decir que el concepto abstracto obtenido no es la misma realidad de la cosa. Pero cuando afirmamos que el objeto de la ciencia debe ser construido, queremos decir algo más. En el conocimiento ordinario, y en cierto sentido también en la reflexión filosófica, el objeto es ciertamente limitado, pero la atención no se centra en la particular forma según la cual lo hemos conocido, sino en el ser mismo de la cosa.<sup>503</sup>

En cambio, en el conocimiento científico, no se trata de descubrir algo que estaba ahí, sino que hay que construir conceptos que permitan describir unos aspectos de la realidad estudiada dejando otros fuera de consideración, de tal modo que los aspectos considerados puedan ser estudiados en relación con experimentos controlados. Y es precisamente esta actitud analítica lo que permite a la ciencia examinar y describir sistemáticamente las características o el dinamismo de estos aspectos de la realidad. Por consiguiente, el concepto abstracto propio de la ciencia tendrá que ser considerado por la teoría científica no como un aspecto parcial a través del cual se busca hacer referencia a un ser físico concreto, sino como la realidad —teórica— del objeto de estudio. Así, el objeto científico viene a ser una entidad que no solo se abstrae de la realidad, sino que se construye a través de la elaboración positiva de un nuevo concepto al que se llega a través de la delimitación de algunas características de la realidad, la eliminación y la atribución de otras. De este modo, el objeto científico no solo es abstracto sino, en cierto modo, ideal. El desarrollo de una teoría particular solamente es posible después de que el objeto científico ha sido construido de modo adecuado.<sup>504</sup>

Las teorías científicas son una particular representación o conceptualización de la realidad. Esto no significa que las teorías no tengan un contenido real. Todo objeto científico o modelo teórico denota una cierta realidad física, pues la teoría pretende comprender y explicar la realidad. Pero esta realidad

---

<sup>503</sup> Cfr. MARTÍNEZ, R., *Breve introduzione alla Filosofia della scienza*, Pontificia Università della Santa Croce, Roma (2011), 108.

<sup>504</sup> Cfr. *idem*, 108-109.

viene entendida de un modo particular, según ciertos aspectos y no necesariamente en su totalidad.<sup>505</sup>

El modo como se construyen los objetos en física permite también describir los procedimientos de otras ciencias experimentales. En el caso de la química, por ejemplo, se estudian entidades observables tales como los compuestos químicos (minerales, por ejemplo), utilizando inicialmente métodos empíricos que permiten clasificar tales entidades y determinar algunas de sus estructuras y propiedades, pero solo se constituye como ciencia madura cuando formula hipótesis acerca de aspectos más profundos, que no son accesibles a la observación directa. Para realizar esta tarea, ha de recurrir a la construcción de objetos ideales. La química utiliza los conceptos de la física para determinar las características de las sustancias y de los procesos químicos, y construye propiedades tales como calores específicos, constantes de ionización, energías de enlace, etc.; este tipo de conceptos, junto con los procedimientos experimentales adecuados, permiten obtener relaciones cuantitativas que se refieren a los conceptos construidos. En otras palabras, cada teoría se apoya en un conjunto de propiedades que se definen en relación con procedimientos experimentales y que son la base para definir otras propiedades derivadas.<sup>506</sup>

A lo largo de este trabajo se ha intentado mostrar que la química configura su objeto en relación con un conjunto de teorías basadas en conceptos, operaciones y técnicas. La química se ocupa de la composición y propiedades de la materia, y de sus transformaciones. La noción química de sustancia pura se basa en una concepción ideal de las propiedades químicas y físicas de la materia y del cambio. Del atomismo a la química molecular, los científicos reconocieron la existencia de diversos niveles de complejidad y organización de la materia. Elementos, principios y átomos fueron conceptos que aparecieron a lo largo de la historia de la química, pero no se referían a un mismo objeto; no hubo una continuidad conceptual.<sup>507</sup>

---

<sup>505</sup> Cfr. *idem*, 111.

<sup>506</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia experimental*, *op. cit.*, 115-117.

<sup>507</sup> Las ideas de este y los siguientes párrafos están tomadas de los capítulos I a III de este trabajo. Se hace referencia también a las ideas contenidas en WOOLLEY, R.G., "Is there a Quantum Definition of a Molecule?", *Journal of Mathematical Chemistry*, No. 23 (1998), 3-12.

Con Lavoisier el concepto de elemento adquirió un carácter definitivamente empírico, a diferencia de las doctrinas que se desarrollaron a principios del siglo XVII, las cuales se encontraban todavía vinculadas a principios y elementos relacionados con la categoría de la cualidad, aunque ya se observaba el esfuerzo por liberarla de su carácter metafísico. Después de Lavoisier, los elementos se caracterizaron por sus propiedades gravimétricas y los compuestos, que se forman por la combinación química de los elementos, muestran propiedades diferentes a las propiedades de sus elementos constitutivos.<sup>508</sup>

El surgimiento de la química atómica y la teoría cinética de los gases marcó un punto de inflexión importante en el desarrollo de la química moderna. En el siglo XIX la teoría atómica de Dalton hizo posible que se diera a los elementos una interpretación microscópica; el átomo se concibió como el bloque último de la materia. Los compuestos pasaron a ser combinaciones definidas de átomos; se constituyó la noción de molécula. También se desarrolló un método mediante el cual se podía determinar de manera fiable los pesos relativos de los diferentes tipos de átomos y en consecuencia definir la composición atómica de las moléculas. Este fue un logro teórico significativo en la química clásica basado en la concepción atómica molecular de la materia.<sup>509</sup>

Una vez establecida la caracterización de elementos y compuestos en términos de átomos y moléculas, la atención se centró en la síntesis. La recombinación y la reestructuración pasaron a ser los aspectos que dieron cuenta de la inteligibilidad de la realidad química. Se introdujo en la química el concepto de estructura molecular. La fórmula estructural de una molécula resumía o representaba la organización espacial de los átomos y las conexiones entre los mismos. Surgió también el concepto de valencia como la capacidad de un átomo de combinarse con otros átomos, y se consideró como una propiedad constitutiva del átomo, y el de enlace químico. El enlace pasó a ser un elemento crucial para entender cómo se comportaba la materia; sin embargo, aunque jugó y sigue

---

<sup>508</sup> Cfr. *supra*, 45-46.

<sup>509</sup> Cfr. *supra*, 64-67.

jugando un papel importante en las predicciones y explicaciones químicas, es un concepto que todavía es difícil de definir con precisión.<sup>510</sup>

La irrupción de la teoría cuántica en la química tuvo como objeto describir la estructura de los átomos y moléculas según un particular formalismo matemático. Bajo esta perspectiva, se cuestionó la noción de estructura molecular, es decir, la idea fundamental de que las moléculas estén constituidas por átomos que se unen entre sí con una disposición determinada mediante enlaces con longitudes y ángulos bien definidos.<sup>511</sup>

Por lo que se refiere a las leyes químicas, se planteó un interesante debate epistemológico: ¿Posee la química leyes naturales? ¿Tienen estas leyes alguna peculiaridad que las distinga de las leyes físicas? ¿La ley periódica de los elementos constituye una ley científica en el mismo sentido que las leyes de la dinámica en la física clásica? Aunque la ley periódica no tiene la misma estructura que las leyes físicas, se trata de una legítima ley natural y es fundamental para la ciencia química. Si la química no pudiera formular sus propias leyes, su autonomía como disciplina científica se vería profundamente cuestionada.<sup>512</sup>

Con lo que explicamos anteriormente acerca de la construcción del objeto científico, podemos decir que los orbitales son entidades hipotéticas que surgen dentro del marco de una teoría que intenta explicar cómo se enlazan los átomos entre sí y, por tanto, no equivalen a la simple traducción de un hecho de experiencia.<sup>513</sup> Así, para la química molecular, los orbitales son regiones espaciales

---

<sup>510</sup> Cfr. *supra*, 84-87 y 91-97. Las diferencias entre la concepción clásica del enlace químico y la concepción cuántica, puso de manifiesto la ambivalencia sobre su estatus. Algunos químicos asumieron una postura pragmática y se conformaron con las teorías que resultaron útiles para hacer predicciones y contribuir a la síntesis de las moléculas, evitando los cuestionamientos relativos a su naturaleza. Otros asumieron una postura escéptica, entre ellos, los fundadores de la química cuántica, para los que la noción de enlace parecía ser deficiente. Según lo anterior, parecería que el enlace cumple una función oscura que permitiría generar modelos funcionales, pero cuya matriz ontológica es dudosa o al menos incognoscible.

<sup>511</sup> Cfr. *supra*, 105-109.

<sup>512</sup> Cfr. *supra*, 123-125.

<sup>513</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia experimental, op. cit.*, 174-175. No es posible observar hoy en día el electrón ni ninguna de las partículas subatómicas. Sin embargo, su existencia se da por cierta, y está en la base de un gran número de teorías y de aplicaciones prácticas. Desde el punto de vista lógico, las pruebas de la realidad del electrón se apoyan en inferencias que utilizan todo un conjunto de teorías y técnicas instrumentales, pero se trata de un conocimiento bien establecido.

del átomo donde la ubicación de los electrones es más probable, mientras que, para la química cuántica, el término “orbital” equivale a “función de onda monoeléctronica”. Como puede verse, la noción de orbital en ambos casos es una consecuencia del contexto teórico que les da origen, pero ambos pretenden explicar un hecho real: la localización de los electrones.<sup>514</sup>

A partir de lo dicho hasta aquí, podemos concluir que:

- las explicaciones y modelos químicos son específicos del nivel químico considerado y, por tanto, son propios de la química como ciencia, lo que no se contrapone a que algunas regularidades químicas estén relacionadas con procesos físicos fundamentales. Es en este sentido en el que podemos decir que la química posee un estatuto epistemológico propio;
- si bien las teorías químicas proporcionan los marcos conceptuales bajo los que se definen y constituyen las entidades químicas, la respuesta a la pregunta sobre su realidad objetiva sigue siendo un problema de capital importancia. Abordaremos de manera particular este tema en el siguiente apartado;
- las leyes de la química no tienen la misma estructura y precisión que las leyes físicas, por lo que no deben juzgarse desde los estándares de la física.

El objeto científico o modelo teórico denota una realidad física a la que hace referencia, pero abarca solo algunos aspectos, de aquí que no pueda ser considerado como una copia exacta de la misma. En mi opinión, el error del pluralismo ontológico está en ver el objeto científico como aquello que la ciencia conoce verdaderamente, a causa de la separación kantiana entre el fenómeno, aquello que aparece, y el noumeno, la cosa en sí, estando el objeto del conocimiento en la parte del fenómeno.<sup>515</sup> Así, mientras que para Lombardi y Labarca, hay diversas ontologías fruto de diversos esquemas conceptuales, en lo personal considero que hay una única ontología a cuyo conocimiento nos aproximamos desde diversas perspectivas.

## 6. El realismo científico

---

<sup>514</sup> Cfr. LOMBARDI, O., “¿Acerca de qué nos habla la química?”, *op. cit.*, 129-130.

<sup>515</sup> Cfr. MARTÍNEZ, R., *op. cit.*, 107.

Aunque ya hemos tratado del realismo al abordar la cuestión de la realidad objetiva de los modelos moleculares,<sup>516</sup> para completar nuestro estudio nos parece oportuno hacer de nuevo una breve referencia este tema con relación a las entidades químicas. Cuando el químico habla de elementos, átomos, electrones, etc., pretende referirse a aspectos reales de la naturaleza y, como se acaba de señalar, las construcciones teóricas son el instrumento mediante el cual se busca conocer la realidad aunque no son meras traducciones de la misma.<sup>517</sup>

Cualquiera que sea la interpretación de los métodos científicos, es innegable que la ciencia nos proporciona un amplio conocimiento sobre la composición de la materia, y esto apunta a la existencia de la verdad científica. No es difícil sostener que el método de la ciencia presupone un realismo gnoseológico y que este realismo es perfeccionado y ampliado por el progreso de la ciencia.<sup>518</sup>

Sin embargo, en la epistemología contemporánea hay una fuerte tendencia a visiones relativistas e instrumentalistas, lo que ha planteado algunas dificultades en contra del realismo que, según Artigas, pueden resumirse como sigue:

- las entidades científicas se construyen en el proceso de teorización, de modo que no tienen un estatus ontológico independiente de la mente;
- este proceso de construcción determinaría la carga teórica de cualquier hecho científico, por lo que nunca podríamos probar el carácter realista de nuestras teorías;
- los aspectos lógicos del método científico implicarían la indeterminación de las teorías y, en consecuencia, la imposibilidad de evaluar la verdad de cualquier logro científico concreto;
- estas características del método científico conducirían a una visión falibilista que, además, sería coherente con el carácter provisional de cualquier construcción científica y excluiría cualquier afirmación absoluta y definitiva acerca de la verdad;

---

<sup>516</sup> Cfr. *supra*, 112-116.

<sup>517</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia*, *op. cit.*, 236.

<sup>518</sup> Cfr. ARTIGAS, M., "Reliability and Falibilism", en <http://www.unav.edu/web/ciencia-razon-y-fe/reliability-and-falibilism> [consultada el 13 de diciembre de 2016].

- la adecuación empírica puede ser vista como un requisito suficiente para explicar cómo funciona la ciencia; por tanto aun cuando se considere que el positivismo es incapaz de proporcionar una explicación adecuada de la ciencia, no sería necesario adoptar una visión realista para hacer justicia a la práctica científica real.<sup>519</sup>

El camino para explicar la verdad científica no es sencillo. Además de reconocer las limitaciones de nuestro conocimiento, deben tenerse en cuenta los aspectos convencionales que intervienen en la construcción del objeto científico y en las demostraciones, de modo que sea posible delimitar en qué sentido se refieren a la realidad las construcciones teóricas.<sup>520</sup>

¿Cuál es, pues, el estatuto ontológico de las entidades químicas? ¿Son entidades reales? Como apuntamos más arriba, las ciencias particulares y, en nuestro caso, la química, presuponen una realidad ontológica, pero al estudiarla adoptan perspectivas particulares que se concretan en entidades y propiedades definibles dentro de los marcos conceptuales de sus leyes y teorías propias. Los procedimientos experimentales son los que aportan la base empírica necesaria para poder valorar la correspondencia entre los modelos teóricos y la realidad. En la discusión acerca del estatus epistemológico y ontológico de la noción de estructura molecular, por ejemplo, a la noción clásica que la considera como una propiedad intrínseca de los sistemas químicos, se opone el punto de vista cuántico en el que esta carece por completo de significado debido a la indeterminación de la posición y la trayectoria de los componentes moleculares. Sin embargo, la espectroscopía y otras técnicas modernas de microscopía aportan una evidencia clara a favor de su existencia real a nivel químico.<sup>521</sup>

Con lo anterior, lo que quiero decir es que, por lo que se refiere a las entidades químicas, en muchos casos ha sido posible obtener demostraciones rigurosas de su existencia, como es, por ejemplo, el caso de los elementos y de las moléculas, aunque esto no equivalga a considerarlas como algo perfectamente

---

<sup>519</sup> Cfr. *ibidem*.

<sup>520</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia*, *op. cit.*, 244.

<sup>521</sup> Cfr. LABARCA, M., “La Filosofía de la Química en la Filosofía de la ciencia contemporánea”, *op. cit.*, 157-158.

comprendido y definitivamente establecido en todos sus detalles. A pesar de que se consiga establecer la realidad de ciertas entidades químicas, siempre hay que tener en cuenta su marco contextual y que, por tanto, se trata de una realidad que es conocida parcialmente, bajo determinados aspectos, y que permanece abierta a determinaciones más precisas.<sup>522</sup>

## 7. Conclusiones

El estudio del tema de la reducción concierne a la filosofía de la ciencia en cuanto se considera como uno de los aspectos más relevantes de las relaciones interteóricas. En el caso específico que nos ocupa, el tema tiene, además, una repercusión directa en la definición del estatus ontológico de la química y su consolidación como una disciplina científica distinta de la física.

Las teorías de la física desempeñan un papel importante en la formulación de las teorías químicas, sin embargo, esto no es suficiente para afirmar una reducción de tipo epistemológico, pues las explicaciones proporcionadas por la química son esencialmente diferentes a las de la física. Lo físico en los sistemas químicos son sus componentes, más que los sistemas mismos.

Los químicos tratan con sistemas químicos y, aunque lo hacen con la ayuda de la física, esto no quiere decir que la química se reduzca totalmente a esta. La física no es suficiente en la elaboración de la química porque debe ser enriquecida con conceptos e hipótesis químicas para conseguir resolver los problemas propios de esta.

En cuanto a la defensa de la autonomía de la química desde el ámbito ontológico, podría hablarse de una ontología propia de la química, distinta de la de la ontología física —y que la primera no está subordinada a la segunda—, si se considera que la realidad admite diferentes grados de complejidad y el conocimiento de la misma se puede realizar a diversos niveles. Las entidades químicas tienen un grado de sustancialidad y unas afecciones accidentales que les son propias y que son distintas de las de las entidades físicas.

---

<sup>522</sup> Cfr. ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia*, *op. cit.*, 242.

Las propiedades químicas no necesitan referirse a propiedades físicas para adquirir su legitimidad ontológica: son propiedades que pertenecen al mundo químico, y su objetividad no depende de la posibilidad de ser reducidas ontológicamente a las propiedades supuestamente más básicas de la física. El hecho de que el mundo químico no se reduzca ontológicamente al mundo de la física no significa que ambas ontologías estén completamente aisladas; al contrario, están interconectadas por enlaces nomológicos no reductivos, lo que permite la existencia de relaciones objetivas entre ambos mundos, pero preserva la autonomía ontológica de cada uno de ellos.

Aunque la química cuántica se ha revelado como una herramienta útil para la explicación de ciertos fenómenos químicos; sin embargo, su aplicación en muchos casos resulta problemática pues no permite explicar las teorías químicas de forma directa y requiere de múltiples aproximaciones. La correspondiente postura filosófica que pretendiera sostener que las teorías químicas pueden reducirse a la mecánica cuántica es improcedente.

La filosofía de la ciencia se presenta como una perspectiva útil para delimitar la distinción entre la física y la química en cuanto que permite caracterizar el objeto propio de cada una de estas ciencias.



# **CONCLUSIONES**



El estudio de la materia, de sus constituyentes últimos y de sus transformaciones, ha fascinado siempre a filósofos y científicos. Resulta particularmente ilustrativo, por ejemplo, que algunas de las brillantes propuestas de los antiguos griegos, como es el caso de la doctrina del atomismo, resurjan en la ciencia moderna bajo la óptica del método matemático experimental.

Las diversas perspectivas de aproximación a la realidad material apuntan a una necesaria distinción conceptual según se aborde el tema desde la filosofía o de la ciencia. Términos como sustancia, elemento, principios y átomos están presentes cuando se intenta dar respuesta a la pregunta sobre la naturaleza de las entidades corpóreas; sin embargo, no hay una continuidad en su significación. A lo largo del primer capítulo de este trabajo se intentó mostrar esta discontinuidad poniendo de manifiesto algunos aspectos de la evolución respecto al modo de entender estos términos; evolución que muestra, por decirlo de alguna manera, la tensión que existe entre las diversas explicaciones sobre la realidad material.

En este estudio no se aborda, de intento, la formulación racional de las teorías sobre la constitución de la materia propuestas por los griegos, ni tampoco las teorías sobre la manipulación de la materia de los alquimistas, pues las conexiones formales de éstas con la química moderna resultan complejas. Este aspecto, así como el papel innegable que juega la rica tradición alquímica en la génesis de la química moderna, pueden ser objeto de otras investigaciones.

El conjunto rico y complejo de las doctrinas prelavoyserianas que todavía aparecen vinculadas, en buena medida, a principios y elementos relacionados con la categoría de cualidad, muestran el esfuerzo de los científicos por liberarse progresivamente del carácter metafísico en la consideración y explicación de la realidad química. En los siglos anteriores al surgimiento de la química moderna, la noción de elemento, por ejemplo, se encuentra ligada a la noción de principio como sinónimo de actividad. En otras palabras, esta noción aparece fundada sobre la categoría de la cualidad, que es una categoría filosófica. A medida que nos vamos acercando al siglo XVIII, algunas propuestas tratan ya de dar una explicación por una causa material de orden físico a las observaciones de orden cualitativo. El interés por centrar el estudio de las cualidades inherentes a los cuerpos naturales, tiene por objeto mostrar que la química no puede ser reducida

a sus aspectos mecanicistas y, por consiguiente, debe seguir sus propios métodos de investigación que son distintos a aquellos adoptados por la física.

En definitiva, el desarrollo de la química hasta antes de Lavoisier puede considerarse como un esfuerzo por desprenderse de una comprensión puramente filosófica de la naturaleza. Este desarrollo pasa a través de un intento de “corporalizar” los fenómenos de naturaleza cuantitativa y de “fiscalizar” los principios o elementos de una teorización fundada esencialmente sobre la categoría metafísica de la cualidad.

El punto de inflexión en la concepción de la noción de elemento se da claramente con Lavoisier, para quien dicha noción se asocia a la idea del último término al que se llega con el análisis. La novedad aportada por el químico francés consiste, por una parte, en la dimensión estrictamente operativa con la que en adelante se caracterizará al elemento y por otra, que además es consecuencia de la anterior, en que, al centrar las causas últimas de la inteligibilidad en la descomposición, esta inteligibilidad será, en adelante, de tipo analítico. Se comienza a perfilar, de manera clara, la diferencia conceptual entre el elemento de la química (lo simple como opuesto a lo compuesto), el átomo de la física clásica (lo simple como opuesto a lo divisible) y la sustancia metafísica (lo simple como unidad radical).

Un hito que determina de manera importante el desarrollo de la química a partir de Lavoisier, es la introducción de la balanza, que pasa de ser un instrumento de precisión a constituirse en un medio clave para descifrar la naturaleza. El peso (la masa) por su carácter estable y permanente se convierte en el nuevo principio resolutivo de los experimentos químicos. Lavoisier generaliza el carácter inmutable de la materia por el peso, reformulando así la química al aplicarle una de las categorías fundamentales de la física newtoniana. Así como en la física experimental, en adelante también para la química, la clave metodológica para adquirir el conocimiento confiable de las relaciones causales será la experimentación.

El cambio metodológico que produce la revolución lavoisieriana puede calificarse de paradigmático, pues conlleva una profunda mutación de los principios de inteligibilidad del ser, en tanto que tal, de las sustancias químicas.

La aparición del atomismo, como teoría que permite explicar la transformación de las sustancias es, sin duda, una de las grandes aportaciones en el intento de profundizar en el estudio de la materia. No es de extrañar, por tanto, que hayan surgido diferentes versiones del mismo a lo largo de la historia. Desde su nacimiento en la antigua Grecia, hasta las versiones de los filósofos mecanicistas en el siglo XVII, esta doctrina se presenta como una tesis metafísica que pretende dar una explicación acerca de la naturaleza última de la realidad material. Por contraste, en la ciencia moderna, en la que la existencia del átomo se da por probada experimentalmente, la relevancia del atomismo deja de ser filosófica: la consideración metafísica cede el paso a la epistemológica.

Como en otros ámbitos, también en las diversas formulaciones atomistas, el dilema acerca de la constitución de la materia se encuentra entre una especificación cuantitativa y una cualitativa. La química corpuscular, que en ocasiones se caracteriza como una especie de atomismo cualitativo, sostiene que las cualidades de la materia no pueden explicarse si se las reduce exclusivamente a aspectos cuantitativos; así como la explicación de los fenómenos tampoco puede reducirse exclusivamente a las propiedades mecánicas (tamaño, forma y movimiento) de los átomos: para los defensores de esta doctrina, los corpúsculos son los portadores de las propiedades químicas específicas.

El resurgimiento del atomismo clásico en el siglo XVII suele estar ligado al desarrollo de la filosofía mecanicista. Al considerar que la materia es inerte y que todas las interacciones se producen por el impacto de partículas, todas las cualidades (incluyendo las cualidades y reacciones químicas) serán, entonces, ontológica y epistémicamente reducibles a propiedades mecánicas y cuantitativas de la materia.

El atomismo sufre una transformación importante cuando Dalton formula su versión del atomismo químico a principios del siglo XIX. Además de que se ajusta a los más recientes conocimientos químicos de su época, proporciona un modelo interpretativo capaz de evolucionar en función de los avances experimentales posteriores. Con sus leyes de combinación de las sustancias químicas abre el camino que lleva a la medición experimental del peso relativo de los átomos el cual viene a ser considerado como una propiedad que permite distinguirlos entre sí.

Al introducir el concepto de átomo y darle una fundamentación empírica, el atomismo daltoniano proporciona una determinación teórica al objeto fundamental de la química. De esta fundamentación se derivan algunos de los conceptos más importantes de esta ciencia como son el de molécula, valencia, la relación periódica de los elementos, las nociones de estructura y partículas elementales, etc.

El atomismo está directamente relacionado con la vertiente analítica de la química pues es mediante el análisis como se llega a explicar la complejidad de la materia desde su nivel más simple o elemental. Para el enfoque analítico, la química, por decirlo de algún modo, toca el fondo de la divisibilidad elemental que le es propia y la define y limita; su objeto es aislar, identificar y caracterizar los elementos de su dominio de estudio.

El enfoque analítico, si bien nos dice de qué está hecha una sustancia química, no nos dice cómo está hecha ni por qué tiene ciertas propiedades y no otras. El análisis químico se limita, por tanto, a identificar los diferentes elementos y a determinar sus proporciones relativas, lo que no es suficiente para dar cuenta de todas las propiedades de la sustancia. Dicho de otro modo, la inteligibilidad de los cuerpos no se encuentra únicamente en la búsqueda e identificación de los elementos, sino también en su recombinación. Una atomización a ultranza no desemboca en un contenido noético capaz de llevar a comprender la unidad de las sustancias y de sus propiedades. En la consideración de la química también como ciencia de la síntesis, la recombinación y la reestructuración entran a formar parte de la inteligibilidad de la realidad química.

Esta nueva inteligibilidad se enfoca de manera particular a la teoría de la estructura molecular. A partir de la representación estructural, el químico es capaz de inferir propiedades esenciales como el número, el orden, la unidad, e incluso, como consecuencia de la distribución espacial, la interacción de unas partes respecto a otras. El desarrollo de la química estructural permite, de una parte, evitar reduccionismos de tipo mecanicista en la concepción de las especies químicas y, de otra, poner de manifiesto su dinamismo. La modelización molecular está directamente relacionada, por tanto, con el interés en que estas estructuras sean el elemento clave para dar una explicación formal de las propiedades observables de los compuestos químicos.

La construcción y uso de modelos representacionales es una actividad central en la formación de la teoría química. Estos modelos hacen visible, de algún modo, el mundo invisible del átomo y la molécula. ¿En qué medida las modelizaciones moleculares de tipo estructural corresponden efectivamente, en tanto que tales, a la realidad objetiva de las especies químicas? ¿Qué tipo de correspondencia existe entre estos modelos y la realidad que intentan explicar? ¿Cuál es el estatus ontológico que se puede atribuir a los modelos moleculares? La consideración sobre el fundamento real de los modelos estructurales apunta a sostener que el carácter espacial de los modelos tiene una correspondencia directa con la realidad de la especie química concreta.

Si hubiera que elegir un único concepto básico sobre el que se construye la Química, este sería, sin duda, el de enlace químico. Desde el momento en el que se admite la existencia de partículas elementales, es necesario también imaginar una fuerza capaz de unirlos para asegurar la cohesión de la materia. Desde el atomismo griego hasta las teorías de afinidad de la Edad Media, el conocimiento de estas fuerzas de enlace fue más bien de carácter empírico. Hubo que esperar hasta el siglo XIX para que aparecieran las primeras teorías físicas sobre el enlace. Sin embargo, no fue sino hasta el siglo XX, con el descubrimiento del electrón, cuando fue posible comprender que el enlace no dependía de los átomos sino de los electrones.

Junto con la noción de valencia surgen diversos modelos de enlace que pretenden explicar los fenómenos de atracción observados según la naturaleza orgánica o inorgánica de los compuestos estudiados. De ser entendido inicialmente como un fenómeno esencialmente electrostático, el enlace químico pasa a inscribirse dentro del marco más amplio de las interacciones electromagnéticas. Los numerosos intentos por desarrollar una teoría electrónica del enlace químico culminan con el trabajo de Lewis que constituye la base de la teoría electrónica moderna. El desarrollo posterior de las ideas de Lewis muestra que muchos hechos químicos pueden aclararse y explicarse con la aplicación de su teoría del enlace químico.

La química cuántica ha permitido realizar una valiosa penetración intelectual en la explicación sobre la formación de enlaces químicos. Su objeto fundamental es describir, según el formalismo matemático de la mecánica

cuántica, la estructura interna de los átomos y las moléculas. Esta teoría concibe el sistema molecular como una nueva entidad en la que los átomos individuales ya no pueden ser identificados y, en consecuencia, los electrones están deslocalizados en la molécula completa. Ha proporcionado también una base para la interpretación de las propiedades moleculares.

El enlace es un elemento crucial para entender cómo se comporta la materia. Las reacciones químicas se entienden en función de ruptura y formación de enlaces. A pesar del importante papel que juega el enlace en las predicciones, intervenciones y explicaciones químicas, es un concepto difícil de definir con precisión. En la medida en que se profundiza en los distintos tratados sobre el tema, se van encontrando muchas aproximaciones teóricas, pero pocas caracterizaciones directas sobre el enlace y casi ninguna definición del mismo. Esta situación parece poner de manifiesto la incertidumbre acerca del estatus ontológico que subyace al enlace químico.

Los cuestionamientos relativos a la realidad de los enlaces químicos, a su entidad, a la caracterización del fenómeno del enlace o a la relación entre estructura molecular y enlace, deben intentar responderse teniendo en cuenta tanto la argumentación filosófica como un cuidadoso examen de la teoría química misma.

Más allá de una comprensión más profunda, de una reflexión más amplia por parte de los químicos, la noción de enlace remite a algunas consideraciones importantes de orden filosófico: una organización interna en las entidades químicas que es consecuencia de un orden relacional; una heterogeneidad intrínseca a la molécula en la que existen partes diferentes de otras partes cuya contigüidad está asegurada, por decirlo de algún modo, mediante el enlace y la realidad de la unidad molecular enteramente ligada a la naturaleza del enlace. El fundamento categorial de razonamiento inductivo que subyace en la propuesta de la idea de enlace parece ser la existencia de la noción de orden estable, de arreglo ordenado y permanente en la naturaleza que conlleva a la idea de relación entre las partes.

La construcción y uso de modelos representacionales es una actividad central en la formación de la teoría química. Aunque los modelos estructurales pretenden de algún modo hacer visible el mundo invisible del átomo y la molécula,

es importante determinar si corresponden efectivamente a la realidad objetiva de las especies químicas.

Que la realidad química existe es un hecho, y es precisamente esta realidad concreta la evidencia inicial a partir de la cual y a propósito de la cual la inteligibilidad científica puede tener sentido; y es también a partir de esta realidad concreta que se precisa la correspondencia entre el modelo molecular y la entidad química. La modelización molecular no se reduce a un simple instrumento intelectual que permite reagrupar, por decirlo de algún modo, un conjunto de observaciones físicas.

Además de que la pregunta sobre la realidad de los átomos y las moléculas ha recibido, en muchos sentidos, elementos de respuesta concluyentes, cuando el químico describe y caracteriza las entidades corpóreas, lo hace por medio de sus propiedades, que corresponden a lo que en filosofía clásica llamamos cualidad.

La existencia de propiedades específicas de una sustancia química, reclama el hecho del carácter discontinuo de la materia química, su especificidad y su inteligibilidad en tanto que especie diferenciada, de la cual se sigue una representación teórica realmente fundamentada. En otras palabras, la modelización molecular y también su capacidad predictiva, exigen un fundamento real.

El uso de la palabra ley en la literatura científica suele identificarse con la estructura formal propia de las leyes físicas. Sin embargo, si se considera que las leyes comprenden enunciados de regularidades observadas experimentalmente en una clase de sistemas, principios teóricos que rigen tales regularidades y modelos idealizados que las explican, se puede calificar a la ley periódica como una verdadera ley científica.

El descubrimiento del sistema periódico es posiblemente el hecho más relevante de toda la química. La tabla periódica revela los principios que organizan a la materia, es decir, los principios que organizan la química. En un nivel fundamental, toda la química está contenida en la tabla periódica. Esto no quiere decir, por supuesto, que toda la química es obvia desde la tabla periódica, pero la estructura de la tabla refleja la estructura electrónica de los elementos y, por tanto, sus propiedades químicas y su comportamiento.

Las semejanzas entre las propiedades químicas de algunos elementos llevaron a explorar relaciones numéricas con el fin de poder ordenarlos en un sistema que no solo diera cuenta de dichas propiedades, sino que también revelara sus relaciones físicas. La genialidad de Mendeleiev estuvo en reconocer el peso atómico como el atributo del elemento que permanecía invariable en la combinación química y, por tanto, como un principio ordenador que permitía clasificar a los elementos ya que proporcionaba una caracterización propia de los mismos. El posterior desarrollo de la ciencia permitió sustituir el peso atómico por el número atómico como principio ordenador. El número atómico está dado por el número de protones o unidades de carga positiva en el núcleo de cualquiera de los átomos. De aquí que cada elemento de la tabla periódica tenga un protón más que el elemento precedente.

El sistema periódico se desarrolló a través de un proceso de evolución gradual. Algunos sistemas periódicos pusieron mayor énfasis en las propiedades físicas de los átomos; otros, en cambio, se interesaron más por el comportamiento químico de los elementos y por realizar predicciones audaces relativas a elementos aún no descubiertos.

El intento por explicar mejor el sistema periódico condujo a avances importantes en la física teórica como, por ejemplo, la propuesta de la constitución del átomo de J. J. Thomson como un núcleo con electrones girando en órbitas alrededor del mismo que surgió al pretender explicar el orden en el que los elementos se despliegan en la tabla periódica; o la aplicación de las ideas sobre el *quantum* de energía al átomo de Bohr al buscar una mejor comprensión del sistema periódico de los elementos.

Los conceptos bien establecidos en un área de la ciencia a menudo encuentran aplicaciones naturales en otras áreas de la ciencia. Las investigaciones en física se centran mayormente en sistemas con un pequeño número de variables reales o reducidas y dan lugar a conceptos y leyes fundamentales firmemente establecidos. Es, pues, natural que la química acuda a la física en busca de guía para explorar territorios desconocidos. Podría decirse que las leyes físicas de alguna manera ayudan a fijar las fronteras en las cuales deben confinarse los mecanismos químicos, aunque no pretendan ni puedan dictar dichos mecanismos.

La relación entre física y química ha sido un tema de interés constante; sin embargo, con motivo del proyecto neopositivista de unificación de la ciencia, han surgido algunos planteamientos que llevan a postular las relaciones entre física y química bajo un esquema reduccionista. En la defensa de la autonomía de la química hay quienes han dado por supuesta la reducción ontológica, y han centrado la argumentación en mostrar el fallo de la reducción epistemológica bajo el supuesto de que las leyes de la física no pueden explicar la totalidad de los hechos químicos. No obstante, actualmente el problema de la reducción de la química se empieza a considerar también como un problema de tipo ontológico y metafísico.

La propuesta de Lombardi y Labarca que se analiza en el último capítulo de este trabajo, es un ejemplo de este planteamiento. Esta teoría sostiene un pluralismo ontológico no solamente de la química con respecto a la física, sino dentro de la diversidad de teorías químicas. Como ya se señaló en su momento, la falta de realismo en su fundamentación conduce a lo que podríamos calificar como un “ontologismo conceptualista”: las entidades químicas son tales en cuanto que solo surgen de esquemas conceptuales particulares. Así, una es la ontología del enlace de la química clásica y otra la del enlace de la química cuántica.

Desde el ámbito de la filosofía de la naturaleza, hay una única ontología de la realidad material. Por lo que se refiere al ámbito de la ciencia, la idea de que las partículas elementales figuran como constituyentes últimos de la materia y que son las mismas tanto para la química como para la física, y que los estados de los sistemas químicos están determinados por el comportamiento de estas partículas es generalmente aceptada. Por tanto, la química no necesita ni debe introducir entidades materiales que no estén compuestas de entidades postuladas por los físicos.

La discusión sobre la viabilidad de la reducción interteórica pertenece al ámbito de la filosofía de la ciencia: es la correcta definición del objeto científico propio lo que permite distinguir la química de la física siendo que ambas operan con un sustrato material común.

Dado el fuerte vínculo ontológico entre la química y la física y sus débiles lazos epistemológicos, quizá lo oportuno no sea buscar un modelo que postule la reducción de la primera a la segunda, sino más bien se debería intentar determinar

los motivos por los que leyes y teorías de la química, así como los conceptos y modelos de los sistemas químicos, no pueden ser subsumidos por las leyes y teorías de la física.

## **BIBLIOGRAFÍA**



- ABBAGNANO, N., *Dizionario di filosofia*, 4ª. reimpresión, FCE, México 2012 (Actualizado y aumentado por Giovanni Fornero).
- ABBRI, F., “Alchemy and Chemistry: Chemical Discourses in the Seventeenth Century”, *Early Science and Medicine*, Vol. 5, No. 2 (2000), 2124-226.
- AGAZZI, E., “Theory and the Problem of Reductionism”, *Erkenntnis*, Vol. 12, No. 3 (1978), 339-358.
- ALCAÑIZ, E., *Enlace químico y estructura de la materia*, Universidad de Valencia, en: <http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/EQEM.htm> [consultada el 1-octubre-2015].
- ALONSO, C. J., *Historia básica de la ciencia*, EUNSA, Pamplona 2001.
- ANDLER, D. & FAGOT-LARGEAUT, A. & SAINT, B., *Filosofía de las ciencias*, FCE, México 2011.
- ANDRÉS, J. & ANGLÉS, M. A. & LLOPIS, R. & NIEVES, M. & REMIRO, F., *Introducción a los modelos de enlace químico*, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 1993.
- ARTIGAS, M., *Filosofía de la ciencia experimental*, 3ª. ed., EUNSA, Pamplona 1999.
- \_\_\_\_\_, *Filosofía de la ciencia*, 2ª. ed., EUNSA, Pamplona 2009.
- \_\_\_\_\_, *Filosofía de la naturaleza*, 4ª. ed. renovada, EUNSA, Pamplona 1998.
- \_\_\_\_\_, “Los límites del lenguaje científico”, en ORTÍZ, J.M., (ed.), *Veinte claves para la nueva era*, Rialp, Madrid (1992), 113-131.
- \_\_\_\_\_, “Reliability and Falibilism”, en: <http://www.unav.edu/web/ciencia-razon-y-fe/reliability-and-falibilism> [consultada el 13 de diciembre de 2016].
- ASIMOV, I., *Breve historia de la química*, Alianza, Madrid 2003.

AMERICAN ASSOCIATION FOR THE ADVANCEMENT OF SCIENCE, "The Hypothesis of Avogadro", *The Scientific Monthly*, Vol. 2, No. 6 (1916), 617-619.

BALABAN, A. T., "Visual Chemistry: Three-Dimensional Perception of Chemical Structures", *Journal of Science, Education and Technology*, Vol. 8, No. 4 (1999), 251-255.

BENSAUDE-VINCENT, B., "Mendeleev's Periodic System of Chemical Elements", *The British Journal for History of Science*, Vol. 19, No. 1 (1986), 3-17.

BANCHETTI-ROBINO, M.P., "From Corpuscles to Elements: Chemical Ontologies from Van Helmont to Lavoisier" en SCERRI, E.R. & MCINTYRE, L. (eds.), *Philosophy of Chemistry. Growth of a New Discipline*, Springer, Dordrecht/Heilderberg/New York, London 2015, 141-154.

BERSON, J. A., "Molecules with Very Weak Bonds: The Edge of Covalency", *Philosophy of Science*, Vol. 75, No. 5 (2006), 947-957.

BISHOP, R. C., "Patching Physics and Chemistry Together", *Philosophy of Science*, Vol. 72, No. 5 (2005), 710-722.

BOAS, M., "The Establishment of the Mechanical Philosophy", *Osiris*, Vol. 10 (1952), 412-541.

BROOKE, J. H., "Laurent, Gerhardt, and the Philosophy of Chemistry", *Historical Studies in Physical Sciences*, Vol. 6 (1975), 405-429.

BROOKS, N. M., "Developing the Periodic Law: Mendeleev's work during 1869-1871", *Foundations of Chemistry*, No. 4 (2002), 127-147.

BROWN, Th. L. & LEMAY, Jr., H. E. & BURSTEN, B. & BURDGE, J., *Química. La ciencia central*, 9a. ed., Pearson, México 2004.

BRUSH, S. G., "Mach and Atomism", *Synthese*, Vol. 18, No. 2 (1968), 192-215.

\_\_\_\_\_, "Predictivism and the Periodic Table", *Studies in History and Philosophy of Science*, Vol. 38 (2007), 256-259.

- BUNGE, M., "Is Chemistry a Branch of Physics?", *Journal for General Philosophy of Science*, Vol. 13, No. 2 (1982), 209-223.
- CAHAN, D. (ed.), *From Natural Philosophy to the Sciences. Writing the History of Nineteenth-Century Science*, The University of Chicago Press, Chicago 2003.
- CHANG, R. & GOLDBY, K. A., *Química*, 11ª. ed., McGraw-Hill, México 2013.
- CASABÓ I GISPERT, J., *Estructura atómica y enlace químico*, Reverté, Barcelona 1999.
- CASSEBAUM, H. & KAUFFMAN, G. B., "The Periodic System of the Chemical Elements: The Search for Its Discoverer", *Isis*, Vol. 62, No. 3 (1971), 314-327.
- CAWS, P., "The Functions of Definition in Science", *Philosophy of Science*, Vol. 26, No. 3 (1959), 201-228.
- CHALMERS, A., "Atomism from the 17th to the 20th Century", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Winter 2014 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL = <http://plato.stanford.edu/archives/win2014/entries/atomism-modern/> [consultada el 2 de marzo de 2015].
- COLE, A., "Evidence for the Existence of the Nucleus Atom", *Science, New Series*, Vol. 41, No. 1046 (1915), 73-81.
- CONTRERAS GARCÍA, J. & OTERO-DE-LA-ROSA, A. & RECIO, J. M., "El enlace químico y su supervivencia en la química cuántica", *Anales de Química*, Vol.110, No.2 (2014), 113-120.
- CÓRDOBA, M., "Neo-reduccionismo interteórico y sus implicaciones ontológicas", *Revista Portuguesa de Filosofia*, T. 68, Fasc. 3 (2012), 547-568.
- COULSON, Ch. A., *Early Ideas in the History of Quantum Chemistry* en: <http://www.quantum-chemistry-history.com/Coulson1.htm> [consultada el 17-IX-2015].
- CROWLEY, T., "Aristotle's 'So Called-Elements'", *Phronesis*, Vol. 53, No. 3 (2008), 223-242.

- CRUZ, D. & CHAMIZO, J.A. & GARRITZ, A., *Estructura atómica. Un enfoque químico*, Addison-Wesley Iberoamericana, U.S.A. 1991.
- DE BROGLIE, L., *The Wave Nature of the Electron* en: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1929/broglie-lecture.pdf](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1929/broglie-lecture.pdf) [consultada el 24-IX-2015].
- DEL RE, G., "Ontological Status of Molecular Structure", *HYLE - International Journal for the Philosophy of Chemistry*, Vol. 4 (1998), 81-103.
- \_\_\_\_\_, "Models and analogies in science", *HYLE - International Journal for the Philosophy of Chemistry*, Vol. 6 (2000), 5-15.
- DI SANTO, L., "Hilary Putnam: la transformación de la filosofía", *Revista de Estudios Epistemológicos*, No. XIII (2016), 33-47.
- DONOVAN, A., "Lavoisier and the Origins of Modern Chemistry", *Osiris*, Vol. 4 (1988), 214-231.
- DUCHEYNE, S., "Algunas Notas Metodológicas sobre los Experimentos de Van Helmont", *Revista Azogue*, No. 5 (2007), 100-107.
- EYRING, H. & WALTER, J. & KIMBAL, G.E., *Quantum Chemistry*, Wiley, New York 1944.
- FALCONER, I., "Corpuscles, Electrons and Cathode Rays: J. J., Thomson and the 'Discovery of the Electron'", *The British Journal for the History of Science*, Vol 20, No. 3 (1987), 241-276.
- FALK, G., "Some Further Considerations in the Development of the Electron Conception of Valence", *Proceedings of the American Philosophical Society*, Vol. 53, No. 213 (1914), 25-30.
- FISHER-HJALMARS, I., *Presentation Speech to R. Mulliken Nobel Prize in Chemistry (1966)*, "Nobelprize.org". Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014. [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html) [consultada el 22-IX-2015].

FRANCOEUR, E., "Beyond dematerialization and inscription. Does the materiality of molecular models really matter?", *HYLE - International Journal for the Philosophy of Chemistry*, Vol. 6 (2000), 63-84.

\_\_\_\_\_, "The Design and Use of Molecular Models", *Social Studies of Science*, Vol. 27, No. 1 (1997), 7-40.

FRIGGS, R. & HARTMANN, S., "Models in Science", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2012 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL <http://plato.stanford.edu/archives/fall2012/entries/models-science7> [consultada el 16 de noviembre de 2015].

GARCÍA LÓPEZ, J., *Metafísica tomista. Ontología, Gnoseología y Teología natural*, EUNSA, Pamplona 2001.

GELL-MANN, M., *The Quark and the Jaguar. Adventures in the Simple and the Complex*, W. H. Freeman and Company, New York 2002.

GIUNTA, C. J., "J. A. R. Newlands Classification of the Elements: Periodicity, but no System (1)", *Bulletin for de History of Chemistry*, Vol. 24 (1999), 24-31.

GLYMOUR, C., "On Some Patterns of Reduction", *Philosophy of Science*, Vol. 37, No. 3 (1970), 340-353.

GOODSTEIN, J., "Atoms, Molecules and Linus Pauling", *Social Research*, Vol. 51, No. 3 (1984), 691-708.

HARTLEY, H., "Stanislao Cannizzaro, F. R. S. (1862-1910) and the First International Chemical Conference at Karlsruhe in 1860", *Notes and Records of the Royal Society of London*, Vol. 21, No. 1 (1966), 56-63.

HEILBORN, J. L., "The Work of H. G. J. Moseley", *Isis*, Vol. 57, No. 3 (1966), 336-364.

HEILBORN, J. L. & KUHN, T., "The Genesis of the Bohr Atom", *Historical Studies in the Physical Sciences*, 1 (1969), 211-290.

HENDRY, R. F., "Elements, Compounds, and Other Chemical Kinds", *Philosophy of Science*, No. 73 (2006), 864-875.

\_\_\_\_\_, "Lavoisier and Mendeleev on the Elements", *Foundations of Chemistry*, No. 7 (2005), 31-48.

\_\_\_\_\_, "Two Conceptions of the Chemical Bond", *Philosophy of Science*, Vol. 75, No. 5 (2008), 909-920.

HETTEMA, H., *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consequences*, Rijksuniversiteit Groningen, Groningen 2012.

\_\_\_\_\_, "Linking Chemistry with Physics: A replay to Lombardi", *Foundations of Chemistry*, No. 16 (2014), 193-200.

\_\_\_\_\_, "Reduction for a Dappled World: Connecting Chemical and Physical Theories", en SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (eds.), *Philosophy of Chemistry. Growth of a New Discipline*, Springer, Dordrecht/Heilderberg/New York, London 2015, 5-22.

HIGUERAS, M., "El atomismo molecular de Gassendi y la concepción corpuscular de la materia en el joven Leibniz", *Cultura. Revista de História e Teoria das Ideias*, Vol. 32 (2013), 255-270.

HOLDEN, N. E., "History of the Origin of the Chemical Elements and Their Discoverers", *National Nuclear Data Center*, USA (2004), en: <http://www.nndc.bnl.gov/content/elements.html> [consultada el 29 de marzo de 2016].

HOLMES, F. L., "Lavoisier's Conceptual Passage", *Osiris*, Vol. 4 (1988), 82-92.

\_\_\_\_\_, "The Boundaries of Lavoisier's Chemical Revolution", *Revue d'histoire de sciences*, Vol. 48 (1995), 9-48.

HOLT, N., "A Note on Wilhelm Ostwald's Energism", *Isis*, Vol. 61, No. 3 (1970), 386-389.

- HORNE, R.A., "Aristotelian Chemistry", *Chymia*, Vol. 11 (1966), 21-27.
- JENSEN, W. B., "The Trait  of the Third Chemical Revolution. Tribute to 'Valence and the Structure of Atoms and Molecules'", en: <http://www.che.uc.edu/jensen/W.%20B.%20Jensen/Unpublished%20Lectures/Chemistry/05.%20G.%20N.%20Lewis%201'.pdf> [consultada el 17-IX-2015].
- JOHNSON, M.R., "Was Gassendi an Epicurean?", *History of Philosophy Quarterly*, Vol. 20, No. 4 (2003), 339-360.
- JONES, H. C., "Jacobus Henricus van't Hoff", *Proceedings of the American Philosophical Society*, Vol. 5 No. 20 (1911), iii-xii.
- KEDROV, B. M., "Dalton's Atomic Theory and Its Philosophical Significance", *Philosophy and Phenomenological Research*, Vol. 9, No. 4 (1949), 644-662.
- KEMENY, J. G. & OPPENHEIM, P., "On Reduction", *An International Journal for Philosophy in the Analytic Tradition*, Vol. 7, No. 1 (1956), 6-19.
- KOHLER JR., R., "The Origin of G. N. Lewis's Theory of the Shared Pair Bond", *Historical Studies in the Physical Sciences*, Vol. 3 (1971), 343-376.
- KRAGH, H., "Conceptual Changes in Chemistry: The Notion of a Chemical Element, ca. 1900-1925", *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, No. 31, Vol. 4 (2000), 435-450.
- \_\_\_\_\_, "The First Subatomic Explanations of the Periodic System", *Foundations of Chemistry*, No. 3 (2001), 129-143.
- KULTGEN, J. H., "Philosophical Conceptions in Mendeleev's Principles of Chemistry", *Philosophy of Science*, No. 25 (1958), 177-183.
- LABARCA, M., "La Filosof a de la Qu mica en la Filosof a de la ciencia contempor nea", *Redes*, Vol. 11, No. 1 (2005), 155-171.

LABARCA, M. & LOMBARDI, O., “Acerca del estatus ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos”, *Principia*, Vol. 14, No. 3 (2010), 309-333.

\_\_\_\_\_, “Why Orbitals do not Exist?”, *Foundations of Chemistry*, No. 12 (2010), 149-157.

LANGMUIR, I., “The Structure of Atoms and the Octet Theory of Valence”, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 5, No. 7 (1919), 252-259.

\_\_\_\_\_, “Types of Valence”, *Science, New Series*, Vol. 54, No. 1386 (1921), 59-67.

LEICESTER, H. M., “Factors Which Led Mendeleev to The Periodic Law”, *Chymia*, Vol. 1 (1948), 67-74.

LIEGENER, C. & DEL RE, G., “Chemistry vs. Physics, the Reduction Myth and the Unity of Science”, *Journal for General Philosophy of Science*, Vol. 18, No. 1 (1987), 165-174.

LOMBARDI, O., “¿Acerca de qué nos habla la química? Nuevos argumentos en favor de la autonomía ontológica del mundo químico”, *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, Vol. 13, No. 26 (2013), 105-144.

\_\_\_\_\_, “Linking Chemistry with Physics: Arguments and Counterarguments”, *Foundations of Chemistry*, Vol. 16, No. 3, (2014), 181-192.

\_\_\_\_\_, “The Ontological Autonomy of the Chemical World: Facing the Criticism”, en SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (eds.), *Philosophy of Chemistry. Growth of a New Discipline*, Springer, Dordrecht/Heilderberg/New York, London 2015, 23-38.

LOMBARDI, O. & MARTÍNEZ, J.C., “Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué se refiere la química cuántica?”, *Scientiae Studia*, Vol. 10, No. 4 (2012), 649-670.

LOMBARDI, O. & LABARCA, M., "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *Foundations of Chemistry*, No. 7 (2005), 125-148.

\_\_\_\_\_, "The Ontological Autonomy of the Chemical World: a Response to Needham", *Foundations of Chemistry*, No. 8 (2006), 81-92.

\_\_\_\_\_, "On the Autonomus Existence of Chemical Entities", *Current Physical Chemistry*, Vol. 1, No. 1 (2011), 69-75.

LOMBARDI, O. & PÉREZ RANSANZ, A. R., "Lenguaje, ontología y relaciones interteóricas: en favor de un genuino pluralismo ontológico", *Revista ARNOR Ciencia, Pensamiento y Cultura*, Vol. 187-747 (2011), 43-52.

MAIOCCHI, R., "Pierre Duhem: 'The Aim and Structure of Physical Theory': A Book Against Conventionalism", *Synthese*, Vol. 83, No. 3 (1990), 385-400.

MANAFU, A., "Internal Realism and the Problem of Ontological Autonomy: a Critical Note on Lombardi and Labarca", *Foundations of Chemistry*, No. 15 (2013), 225-228.

\_\_\_\_\_, "A Novel Approach to Emergence in Chemistry", en SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (eds.), *Philosophy of Chemistry. Growth of a New Discipline*, Springer, Dordecht/Heilderberg/New York, London 2015, 39-55.

MANFREDI, A., *Le caractère holistique des systèmes matérielles en chimie moléculaire*, Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita, Pontificia Università della Santa Croce, Romae 2003.

MELHADO, E. M., "Chemistry, Physics, and Chemical Revolution", *Isis*, Vol. 76, No. 2 (1985), 195-211.

MACINTOSH, J. J. & ANSTEY, P., "Robert Boyle", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2014 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL = <http://plato.stanford.edu/archives/fall2014/entries/boyle/> [consultada el 26-febrero-2015].

- MCINTYRE, L., "Emergence and Reduction in Chemistry: Ontological or Epistemological Concepts", *Synthese*, Vol. 155, No. 3 (2007), 337-343.
- MULDER, P., "On the alleged non-existence of orbitals", *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, No. 41 (2010), 178-182.
- MULLIKEN, R. S., "Spectroscopy, Molecular Orbitals, and Chemical Bonding", *Nobel Lecture*, en:  
[http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1966/mulliken-lecture.pdf](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/mulliken-lecture.pdf) [consultada el 1-octubre-2015].
- NAGEL, E., *The Structure of Science. Problems in the Logic of Scientific Explanation*, Routledge and Kegan Paul, Ltd., London 1961.
- NEEDHAM, P., "Ontological Reduction: a Comment on Lombardi and Labarca", *Foundations of Chemistry*, No. 8 (2006), 73-80.
- \_\_\_\_\_, "The Source of Chemical Bonding", *Studies in History and Philosophy of Science*, No. 45 (2014), 1-13.
- \_\_\_\_\_, "Nagel's Analysis of Reduction: Comments in Defense as well as Critique", *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, No. 41 (2010), 163-170.
- NIAZ, M. & RODRÍGUEZ, M. A. & BRITO, A., "An appraisal of Mendeleev's Contribution to the Development of the Periodic Table", *Studies in History and Philosophy of Science*, No. 35 (2004), 271-282.
- NYE M. J., *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry. Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines 1800-1950*, University of California Press, California 1993.
- PANETH, F. A., "The Epistemological Status of the Chemical Concept of Element", *British Journal for the Philosophy of Science*, Vol. 13 (1962), 1-14 (Part I) y 144-160 (Part II).
- PARTINGTON, J. R., "The Concept of Substance and Chemical Element", *Chymia*, Vol. 1 (1948), 109-121.

PAULING, L., *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, 3a. ed., Cornell University Press, New York 1960.

PERRIN, J., “La chimie physique”, *Revue de Métaphysique et de Morale*” Vol. 37, No. 1 (1930), 17-26.

\_\_\_\_\_, “Discontinuous Structure of Matter”, *Nobel Lecture (11-XII-1926)*. Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014, [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1926/perrin-lecture.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1926/perrin-lecture.html) [consultada el 12-XI-2015].

POLANCO, M. A., *Realismo y pragmatismo. Biografía intelectual de Hilary Putnam*, Tesis de doctorado, Facultad de Filosofía y Letras, Sección de Filosofía, Universidad de Navarra, Pamplona 1997.

PUTNAM, H., *Reason, Truth and History*, Cambridge University Press, Cambridge 1981.

RAMBERG, P. J., “Arthur Michael’s Critique of Stereochemistry, 1887-1899”, *Historical Sources in the Physical and Biological Sciences*, Vol. 26, No. 1 (1995), 89-138.

\_\_\_\_\_, “Pragmatism, Belief and Reduction. Stereoformulas and Atomic Models in Early Stereochemistry”, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 6 (2000), 35-61.

RAPPAPORT, R., “G. F. Rouelle: An Eighteenth-Century Chemist and Teacher”, *Chymia*, Vol. 6 (1960), 68-101.

\_\_\_\_\_, “Rouelle and Stahl: The Phlogistic Revolution in France”, *Chymia*, Vol. 7 (1961), 73-102.

RAWSON, D. C., “The Process of Discovery: Mendeleev and the Periodic Law”, *Annals of Science*, Vol. 31, No. 3 (1974), 181-204.

ROCKE, A. J., "Atoms and Equivalents: The Early Development of Chemical Atomic Theory", *Historical Studies in the Physical Sciences*, Vol. 9 (1978), 225-263.

\_\_\_\_\_, "In Search of El Dorado: John Dalton and the Origins of the Atomic Theory", *Social Research*, Vol. 72, No. 1 (2005), 125-158.

\_\_\_\_\_, "Kekulé, Butlerov, and the Historiography of the Theory of Chemical Structure", *The British Journal for the History of Science*, Vol. 14, No. 1 (1981), 27-57.

\_\_\_\_\_, "The Reception of Chemical Atomism in Germany", *Isis*, Vol. 70, No. 4 (1979), 519-536.

ROSEMBERG, J. & EPSTEIN, L. M. & KRIEGER, P. K., *Química*, 10ª. ed., Mac Graw Hill, México 2013.

ROUVRAY, D. H., "Elements in the History of the Periodic Table", *Endeavour*, Vol. 28, No. 2 (2004), 69-74.

RUTHERFORD, E., "The Structure of the Atom", *Philosophical Magazine*, Series 6, vol. 27 (1914), 488-498.

SAMBURSKY, S., "The Equivalence of Mass and Energy. An Anticipation by Mendeleev", *Isis*, Vol. 60, No. 1 (1969), 104-106.

SANGUINETI, J. J., *Lógica*, 7ª. ed., EUNSA, Pamplona 2007.

SANZ, V., *De Descartes a Kant. Historia de la filosofía moderna*, EUNSA, Pamplona (2005).

SCERRI, E., "Has Chemistry Been at Least Approximately Reduced to Quantum Mechanics?", *Proceedings of the Biennial Meeting of the Philosophy of Science Association*, Vol. 1 (1994), 160-170.

\_\_\_\_\_, "Have Orbitals Really Been Observed?", *Journal of Chemical Education*, Vol. 77, No. XX (2000), 522-525.

- \_\_\_\_\_, “A Philosophical Commentary on Giunta’s Critique of Newlands Classification of the Elements”, *Bulletin for History of Chemistry*, Vol. 25, No. 2 (2001), 124-128.
- \_\_\_\_\_, “The Recently Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues”, *Philosophy of Science*, Vol. 68, No. 3 (2001), Suplemento, S76-S88.
- \_\_\_\_\_, “Some Aspects of the Metaphysics of Chemistry and the Nature of the Elements”, *HYLE - International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 11 (2005), No. 2, 127-145.
- \_\_\_\_\_, “Reduction and Emergence in Chemistry-Two Recent Approaches”, *Philosophy of Science*, Vol 74, No. 5 (2007), 920-931.
- \_\_\_\_\_, “The Ambiguity of Reduction”, *HYLE - International Journal for Philosophy of Chemistry*, Vol. 13, No. 2 (2007), 67-81.
- \_\_\_\_\_, *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*, Oxford University Press, New York 2007.
- \_\_\_\_\_, *The Periodic Table. A Very Short Introduction*, Oxford University Press, New York 2011.
- SCERRI, E. & EDWARDS, J., “Bibliography of Literature on the Periodic System”, *Foundations of Chemistry*, Vol. 3 (2001), 183-196.
- SCERRI, E. & MCINTYRE, L., “The Case for the Philosophy of Chemistry”, *Synthese*, No. 111 (1997), 213-232.
- SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (eds.), *Philosophy of Chemistry. Growth of a New Discipline*, Springer, Dordrecht/Heilderberg/New York, London 2015.
- SCERRI, E. & WORRALL, J., “Prediction and the Periodic Table”, *Studies in History and Philosophy of Science*, Vol. 32, No. 3 (2001), 407-452.

SCHEIDECKER-CHEVALLIER, M., "L'hypothèse d'Avogadro (1811) et d'Ampère (1814): la distinction atome/molécule et la théorie de la combinaison chimique", *Revue d'histoire des sciences*, Vol. 50, No. 1 (1997), 159-194.

SCHINDLER, S., "Use-novel Predictions and Mendeleev's Periodic Table: response to Scerri and Worrall (2001)", *Studies in History and Philosophy of Science*, Vol. 39 (2008), 265-269.

SCHUMMER, J., "Towards a Philosophy of Chemistry", *Journal for General Philosophy of Science*, Vol. 28, No. 2 (1997), 307-336.

\_\_\_\_\_, "The Philosophy of Chemistry", en Allhoff, F. (ed), *Philosophies of the Sciences*, Blackwell-Wiley, New Jersey (2010), 163-183.

\_\_\_\_\_, "La Filosofía de la Química. De la infancia hacia la madurez", en BAIRD, D. & SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (coords.), *Filosofía de la química. Síntesis de una nueva disciplina*, FCE, México 2011, 36-67.

SIEGRFRIED, R., "The Chemical Revolution in the History of Chemistry", *Osiris*, Vol. 4, *The Chemical Revolution: Essays in Reinterpretation* (1988), 34-50.

\_\_\_\_\_, *From Elements to Atoms: a History of Chemical Composition*, American Philosophical Society, Philadelphia 2002.

SKLAR, L., "Types of Inter-Theoretic Reduction", *The British Journal for the Philosophy of Science*, Vol. 18, No. 2 (1967), 109-124.

TANZELLA-NITTI E A. & STRUMIA, G., *Dizionario Interdisciplinare di Scienza e Fede. Cultura scientifica, filosofia e teología*, Urbaniana University Press, Città Nuova Editrice, Roma 2002.

VAN BRAKEL, J., "Chemistry as the Science of the Transformation of Substances", *Synthese*, No. 111(1997), 253-282.

\_\_\_\_\_, "El legado de Kant a la filosofía de la química", EN BAIRD, D. & SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (coords.), *Filosofía de la química. Síntesis de una nueva disciplina*, FCE, México 2011, 108-139.

- VAN'T HOFF, J. H., "The Relation of Physical Chemistry to Physics and Chemistry", *Science*, New Series, Vol. 22, No. 569 (1905), 649-654.
- VAN RIEL, R. & VAN GULICK, R., "Scientific Reduction", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2016 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL = <http://plato.stanford.edu/archives/spr2016/entries/scientific-reduction/>, [consultada el 6 de noviembre de 2016].
- VAN SPRONSEN, J. W., "One Hundred years of the "Law of Octaves": When the Italian Cannizzaro Was Fighting for Atomic Weights in Karlsruhe, Newlands Fought for the Liberation of Italy", *Chymia*, Vol. 11 (1966), 125-137.
- VEMULAPALLI, G. K., "La física en el crisol de la química. Fronteras ontológicas y modelos epistemológicos", en BAIRD, D. & SCERRI, E. & MCINTYRE, L. (coords.), *Filosofía de la química. Síntesis de una nueva disciplina*, FCE, México 2011, 281-300.
- VEMULAPALLI, G. K. & BYERLY, H., "Remnants of Reductionism", *Foundations of Chemistry*, 1 (1999), 17-41.
- VIHALEMM, R., "A. Whitehead's Metaphysical Ontology and I. Prigogine's Scientific Ontology: From a Point of View of a Theoretical Conception of Science", *Problemas*. No. 71 (2007), 78-90.
- \_\_\_\_\_, "The Autonomy of Chemistry: Old and New Problems", *Foundations of Chemistry*, Vol. 13, No. 2 (2010), 97-107.
- VILLAVECES, J.L., "Química y Epistemología, una relación esquivada", *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, Vol. 1, No. 2-3 (2000), 9-26.
- WEISBERG, M., "Challenges to the Structural Conception of Chemical Bonding", *Philosophy of Science*, No. 75 (2008), 932-946.
- WEISBERG, M. & NEEDHAM, P. & HENDRY, R. F., "Philosophy of Chemistry", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Winter 2011 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL =

<http://plato.stanford.edu/archives/win2011/entires/chemistry/>, [consultada el 2 de marzo de 2015].

WOOLLEY, R.G., "Is there a Quantum Definiton of a Molecule?", *Journal of Mathematical Chemistry*, No. 23 (1998), 3-12.

WOODS, G. T., "Chemically, the Same or Different?", *The Mathematical Gazette*, Vol. 60, No. 414 (1976), 247-256.

ZAPFEE, C. A., "Gustavus Hinrichs, Precursor of Mendeleev", *Isis*, Vol. 60, No. 4 (1969), 461-476.

ZEIDLER, P., "The Epistemological Status of Theoretical Models of Molecular Structure", *HYLE - International Journal for the Philosophy of Chemistry*, Vol. 6 (2000), 17-34.