

# En defensa de una epistemología y ontología química

## In Defense of a Chemical Epistemology and Ontologys

José Reynaldo Tejada Valencia

Universidad Nacional Mayor de San Marcos,

Lima, Perú

<https://orcid.org/0000-0003-0475-3272>

Fecha de recepción: 30/04/2024

Fecha de aceptación: 14/08/2024

Fecha de publicación: 07/11/2024

### Resumen

En este artículo, se presenta cómo en la filosofía de la ciencia se ha tomado como modelo de ciencia a la física lo que ha ocasionado que, dentro de la filosofía de la ciencia, todas las demás ciencias pretendan ser reducidas epistemológica y ontológicamente a la física. Una de ellas, que a raíz del desarrollo de la mecánica cuántica se pretende reducir a la física, es la química sobre todo luego que Paul Dirac afirmara que la química es un tipo de física con ecuaciones matemáticas altamente complejas. Para los químicos entender la estructura de un compuesto o molécula química es fundamental. La estructura molecular es la representación espacial de los elementos químicos que forman dicha molécula. Sin embargo, la mecánica cuántica no puede dar cuenta de su estructura, pues en el ámbito cuántico el concepto de estructura molecular no sería más que una “*poterosa e iluminadora metáfora*” sin referente real. En este artículo, se desarrolla dos tesis, la primera, que las estructuras químicas son plausibles, y la segunda que existe un nivel de realidad química que la microfísica o mecánica cuántica no tiene posibilidad ni de predecir ni explicar.

**Palabras clave:** Epistemología, ontología, mereología, filosofía de la química, estructura molecular, emergentismo.

### Abstract

This article presents how the philosophy of science has taken physics as the model of science, which has caused that, within the philosophy of science, all other sciences try to be reduced epistemologically and ontologically to physics. One of them, which following the development of quantum mechanics is intended to be reduced to physics, is chemistry, especially after Paul Dirac stated that chemistry is a type of physics with highly complex mathematical equations. For chemists, understanding the structure of a chemical compound or molecule is fundamental. The molecular structure is the spatial representation of the chemical elements that make up that molecule. However, quantum mechanics cannot account for its structure, because in the quantum realm the concept of molecular structure would be nothing more than a “*powerful and illuminating metaphor*” with no real referent. In this article, two theses are developed, the first, that chemical structures are plausible, and the second that there is a level of chemical reality that microphysics or quantum mechanics has no possibility of either predicting or explaining.

**Keywords:** Epistemology, ontology, mereology, philosophy of chemistry, molecular structure, emergentism.



Este es un artículo Open Access publicado bajo la licencia Creative Commons Atribución 4.0 International. (CC-BY 4.0)

[jose.tejada3@unmsm.edu.pe](mailto:jose.tejada3@unmsm.edu.pe)

## Introducción

Cuando se habla de filosofía de la ciencia, por lo general se viene a la mente la ecuación ciencia = física, situación que ha caracterizado la principal corriente de la filosofía de la ciencia en el siglo XX. La hegemonía que ha presentado la física dentro de la filosofía de la ciencia ha ocasionado que existan profundas repercusiones al punto de que todo lo que se conoce como ciencia se puede reducir a la física. La idea es como sigue: la psicología puede reducirse a la biología, la biología a la química y la química a la física. Dentro de esta cadena de reduccionismo, tanto la psicología como la biología han sabido ganarse un lugar dentro de la filosofía de la ciencia al punto que hoy ya no es apropiado hablar de filosofía de la ciencia, sino de filosofía de las ciencias. Sin embargo, los químicos no tenían ningún interés en temas filosóficos, al menos no conscientemente como veremos más adelante, pues la química tenía tanto su propio lenguaje como forma de explicar el mundo, esto fue así, hasta que se desarrolló la mecánica cuántica, la cual conllevó a la idea de que la química puede ser reducida tanto epistemológica como ontológicamente a la física.

En este artículo, defenderemos la tesis de que la pretendida reducción epistemológica y ontológica tiene un límite en lo que la física puede explicar de los fenómenos químicos; por lo que existe un nivel de realidad que no puede ser explicado si la química fuera reducida totalmente a la física, por lo tanto, es plausible que un mismo evento puede tener una descripción tanto física como química; y para ello utilizaremos a la mereología como base filosófica y lógica para defender esta tesis.

### 1. Reduccionismo epistémico de la química a la física

Como indicamos en la introducción, cuando se habla de filosofía de la ciencia, por antonomasia

se suele entender principalmente ciencia = física. Esto puede hacerse palpable al ver que la gran mayoría de los trabajos en filosofía de la ciencia son acerca de filosofía de la física y en una menor proporción sobre filosofía de la biología. Sin embargo, en el mundo académico y científico, los papers sobre temas de química son más abundantes que todas las demás ciencias juntas, incluidas las sociales (Tague, 1981, como se citó en Chamizo, 2009). Entonces, surge el interrogante como se pregunta Villaveces (2000, p.9) “¿Por qué los filósofos de la ciencia se interesan tan poco por la química?”.

Quizás esto se deba a que la química siguió un desarrollo independiente de la física, al menos hasta que se desarrolló la mecánica cuántica, pues Bohr (1913) propone la periodicidad de los elementos químicos mediante la estructura electrónica del átomo y desarrolla una Tabla Periódica Electrónica. Esto a través de propiedades físicas se podía elaborar el mayor icono de la química. Además de ello, Dirac (1929, p. 714) afirma que “la química es un tipo de física con ecuaciones matemáticas altamente complejas”.

Es así, que la física es concebida como una ciencia *fundamental* la cual describe la realidad en sus aspectos más reales, mientras que la química sería solo una ciencia meramente fenomenológica, que solo describe fenómenos tal como se le presentan (Lombardi & Labarca, 2004, p. 51).

En el año 1997, se funda la *Sociedad Internacional de Filosofía de la Química* y existen dos revistas *Hyle* desde 1995 y *Foundations of Chemistry* desde 1999. De esta manera, los químicos y los profesores de química han sido los principales impulsores de la Filosofía de la Química y su principal lucha ha sido desvirtuar el reduccionismo de la química a la física.

La hegemonía de la filosofía de la física durante tanto tiempo ha tenido profundas

consecuencias epistémicas como por ejemplo la brecha cada vez mayor entre la reflexión filosófica y la ciencia en acción; debido a que la química es una ciencia de acción, es una ciencia de laboratorio. Como indica Jochim Schumacher (2006, citado en Bensaude-Vincent, 2009), químico y filósofo, “si esos filósofos sin perjuicios hubieran ido a los laboratorios, habrían tropezado con la química en casi todas partes”.

La química no solo es una ciencia natural, sino una fuente de tecnologías de materiales, pues trata de producir, probar, medir, crear y mejorar los rendimientos. Entonces, tratar de adaptar a la química dentro de la noción filosófica, que ha predominado en el contexto de una tradición de la filosofía de la ciencia moldeada por categorías en torno a la física teórica, es una tarea inútil. En química se conoce *haciendo*, pues cualquier examen filosófico de la química debe tener en cuenta el hecho que la química ha sido, es y siempre será una ciencia de laboratorio.

La práctica de la química es tanto una actividad física como un ejercicio mental. Los químicos conocen de forma indirecta a la naturaleza, utilizan al laboratorio como un medio para acceder a ella. Como dijo el premio nobel de Química Roald Hoffmann en 1981:

El conocimiento confiable del mundo molecular provino del trabajo caliente y frío de nuestras manos y mente combinadas. Datos sensoriales, sí, pero, no lo hicimos para que los microscopios de túnel de barrido nos muestren moléculas; recopilamos su presencia, su estequiometría, la conectividad de los átomos en ellos y eventualmente su métrica, formas y dinámica a través de experimentos indirectos. (Bensaude-Vincent, 2009, p.168)

Los químicos para conocer la naturaleza y las propiedades de las sustancias utilizan sus dos

más poderosas armas: el análisis y la síntesis. De las dos la más poderosa es la síntesis, pues el análisis carece de poder demostrativo definitivo. En la síntesis, el químico modela lo que sucederá con los reactivos para obtener el producto. No hay forma de plantear dudas u objeciones cuando se recompone un compuesto original a partir de supuestos componentes. En ese sentido, la síntesis tiene el poder de confirmar.

Como vemos, “las teorías químicas no tienen como objetivo explicar los fenómenos como sí lo hacen las teorías físicas. Las teorías químicas intentan dar sentido a los datos fenomenológicos utilizando historias sobre diminutos átomos o moléculas invisibles”. (Bensaude-Vincent, 2009, p.168).

Los químicos *inventamos historias* para dar sentido a lo que está ocurriendo en un matraz. En el siglo XVII, el químico francés Nicolas Lemery utilizando la idea que los átomos tenían ganchos y espinas explicaba el comportamiento de ácidos y álcalis, ahora los químicos modernos utilizan modelos moleculares para explicar los mecanismos de reacción de nuevas moléculas.

De esta manera, los químicos desarrollan representaciones analógicas de estructuras que les son útiles para interpretar las reacciones químicas y predecir nuevos compuestos. Los químicos hacen uso extensivo de imágenes visuales, pero no pretenden que ellas sean una representación de la realidad, sino que son modelos que nos ayudan a saber y entender, al menos en parte, lo que es una entidad química que llamamos estructura molecular. No es cierto que  $H_2O$  es *agua*, esto solo establece un simbolismo para una estructura ideal, que no es igual al agua real del grifo o de un río o lago. Entonces ¿esta narrativa de *ficciones* significa necesariamente que las teorías químicas no tienen ningún valor epistémico?

Pensamos que no. La química, en nuestra opinión, no se esfuerza por llegar a las raíces ni

por develar los últimos bloques de construcción de la materia. Inventa narrativas plausibles para explicar las propiedades observadas en las sustancias individuales que utilizan, o para predecir y fabricar nuevas sustancias con las propiedades deseadas. Al hacerlo, están cambiando constantemente del nivel macro al micro. Es así como nunca se establecen en una escala para su reflexión, ya que el cambio entre niveles determina su estilo expositivo característico (Bensaude-Vincent, 2009)

Esto último conlleva tanto a filósofos como a físicos a cometer errores tanto epistémicos como ontológicos, pues les es difícil entender cómo los químicos operan cómodamente entre estos dos niveles. Uno es el nivel macroscópico, el cual podemos ver, sentir y tocar. Es el mundo que los no científicos llaman *mundo real*. Y el otro, donde los químicos trabajan también cómodamente, es el nivel microscópico, el cual no podemos ver, sentir o tocar. En este nivel, los químicos trabajan con teorías y modelos y están acostumbrados a ir y venir entre estos niveles que lo hacen sin darse cuenta.

Para los físicos, el único nivel de realidad sería aquel que es explicado por la microfísica o mecánica cuántica, pero nos planteamos la siguiente pregunta: ¿Si posteriormente se descubriera que la mecánica cuántica es incorrecta, esto tendría algún efecto sobre el conocimiento químico? La respuesta es NO, pues los conceptos que la química tiene sobre la estructura molecular, la aromaticidad o la quiralidad seguirán en pie. Entonces, ¿es realmente posible hablar de un reduccionismo epistémico de la química a la física? Nuevamente la respuesta es NO, pues la química concede un gran valor epistémico a la estructura que la distingue de la microfísica o mecánica cuántica, por lo que tampoco podemos afirmar que la química puede ser reducida ontológicamente a la física, como explicaremos a continuación.

## 2. Reduccionismo ontológico de la química a la física

Para los químicos entender la estructura de un compuesto o molécula química es fundamental, pues es la manera de comprender su comportamiento ya que es casi imposible explicar o predecir el comportamiento de una reacción química sin tener un conocimiento de la estructura espacial (estereoquímica) de las moléculas: “uno no entiende el comportamiento de una molécula hasta que se conoce su estructura” (Coulson, 1972, citado en Cerro y Merino, 2009, p. 187).

La estructura molecular o fórmula estructural de una molécula es la representación espacial de los elementos químicos que forman una molécula y el modo cómo se relacionan a través de lo que los químicos llamamos *enlaces químicos*. Para Primas (1994, citado en Lombardi, 2013), el alfa y el omega de la química molecular es la doctrina según la cual las moléculas existen como objetos individuales y que cada molécula posee una forma, caracterizada por su estructura nuclear. Sin embargo, al introducir la mecánica cuántica a la química, la noción de estructura carece por completo de significado dada la indeterminación de la posición y la trayectoria de los componentes moleculares.

Guy Woolley (1978, citado en Lombardi, 2013) recuerda que el concepto de forma o estructura molecular es el dogma central de la ciencia molecular. Además, afirma que, dado que la mecánica cuántica no puede dar cuenta de la estructura molecular en el ámbito cuántico, el concepto de estructura molecular no sería más que una “poderosa e iluminadora metáfora” sin referente real. Debemos indicar que la existencia de las moléculas no es la que se pone en duda; lo que ponen en duda los físicos y algunos filósofos de la ciencia es la estructura molecular, la cual, como dijimos anteriormente es el dogma central de la química y es la base para hablar de una ontología química.

En este punto, pensamos que es importante definir cuál es nuestra posición ontológica y metafísica del mundo. Sostenemos que existe un mundo externo y que puede ser conocido y que dentro de él existe una realidad a nivel químico, el cual tiene puntos de intersección con la realidad física, pero que también tiene su propia ontología que no puede ser explicada a través de las teorías puramente físicas, como es el caso de las estructuras moleculares. Entonces ¿qué tipo de entidades reales existen?

Según Del Re (1998), existe una doble clasificación de las entidades reales, las cuales son esenciales para entender la realidad. La primera clasificación se divide en entidades de dos clases. *Entidades de primera clase* (FC, por sus siglas en inglés), es decir, objetos que existen per se por ejemplo: un gato o una molécula; y *entidades de segunda clase* (SC por sus siglas en inglés), como, por ejemplo: la psique de un gato o de un humano; estas entidades presuponen *un portador*. Por otro lado, la segunda clasificación, está relacionada con entidades accesibles a nuestra experiencia sensitiva. Desde la perspectiva Del Re, tanto Schummer como Harré las llaman R1 y R2.

R1: Este concepto es usado para entidades que pueden ser percibidas como tales.

R2: Son entidades que se creen que existen debido a pruebas analógicas y lógicas de naturaleza similar a aquellas por las cuales un juez puede condenar a una persona como autor de un delito.

Si bien las entidades químicas (las moléculas) prima facie, pueden ser consideradas como entidades de primera clase, aspecto propio de cualquier entidad física; esta categoría no nos es útil para demostrar la existencia de las estructuras moleculares, y así demostrar que existe una ontología propia de la química. En cambio, las entidades de Segunda Clase y las entidades del tipo R2 si ayudan a nuestra tesis.

Las entidades de Segunda Clase (SC) son entidades que surgen o mejor emergen, como resultado de la disposición o interconexión de ciertas partes de un Todo. Estas entidades son el nexo entre la mereología, los sistemas complejos (de ambos hablaremos más adelante) y el discurso químico. Las entidades SC están asociadas a todos, cuyos comportamientos son el resultado de relaciones especiales entre muchas partes que interactúan, que van desde una estrecha cooperación dinámica de las partes hasta un ordenamiento persistente debido a interacciones débiles entre pares. Un ejemplo que podemos tomar es el caso del agua. La molécula de agua,  $H_2O$ , es una entidad de primera clase, en adelante FC; sin embargo, las propiedades fisicoquímicas del agua emergen de las redes que forman sus moléculas a través de lo que se conoce como *los puentes de hidrógenos*. Entonces el agua, prima facie, es una entidad FC, sin embargo, para entender sus propiedades fisicoquímicas, las cuales emergen de su estructura molecular, debe de considerarse una entidad SC.

En otras palabras, una sola molécula de agua, de forma aislada, no puede explicar el comportamiento que tiene el agua a nivel macroscópico ni tampoco puede explicar sus propiedades fisicoquímicas, como, por ejemplo, su densidad menor en estado sólido (hielo) que, en su estado líquido, razón por la cual el hielo flota en el agua. Esta propiedad solo puede entenderse dentro del contexto de que las moléculas de agua forman estructuras supra moleculares, las cuales emergen de la estructura que tiene la molécula de agua y su asociación entre ellas.

De lo anterior, es plausible afirmar que las estructuras moleculares son tan reales como lo son las partículas subatómicas en la física; ahora bien, los físicos consideran que los modelos moleculares de palito y bola o resorte y bola están en franca controversia con la mecánica cuántica, porque las partículas no

son completamente localizables, esto debido al dualismo onda partícula; por lo que la naturaleza fáctica de la configuración geométrica de las moléculas estaría en conflicto con ella. Sin embargo, pareciera que los físicos olvidan tanto el teorema como el corolario que plantearon Born y Oppenheimer (1927, citado en Del Re, 1998)) en su método de aproximación que lleva su nombre y que lo desarrollaron en el periodo inicial de la mecánica cuántica, y que se utiliza para el cálculo de las funciones de onda y otras propiedades de las moléculas grandes.

Este teorema y corolario son los siguientes:

**Teorema:** en el marco de la mecánica cuántica, los núcleos de una molécula pueden ser tratados como partículas clásicas prácticamente en reposo en lo que respecta a los movimientos electrónicos.

**Corolario:** La mecánica cuántica no está en conflicto con el modelo químico de una molécula como un marco rígido de núcleos unidos por electrones compartidos.

Este teorema y corolario establece que no existe un conflicto entre la mecánica cuántica y las estructuras moleculares, pues las estructuras moleculares son modelos de una representación analógica de la realidad en el mundo de las moléculas. Por tanto, dentro del marco del realismo, se debería aceptar como conclusión que lo que llamamos estructura de una molécula es un principio; es decir, una entidad SC y R2, inherente a la realidad molecular y por lo tanto real. En otras palabras, la topología descrita por una fórmula o por el grafo correspondiente no es una representación de la realidad, sino una representación analógica que nos ayuda a saber y entender, al menos en parte, lo que realmente es una entidad química que llamamos estructura molecular.

Aquí queremos resaltar un dato interesante, el cual ya indicamos anteriormente, pero ahora lo

queremos cuantificar; según Schummer (2014, p. 58), la cantidad de papers que se publican solo en química anualmente supera el millón de artículos y en todos ellos se parte de la idea de que los compuestos químicos tienen estructuras moleculares ya sea tanto de los reactivos como de los productos a sintetizar. Entonces, ¿por qué todos los experimentos químicos de síntesis de moléculas dan resultados concordantes con la afirmación de que las moléculas tienen una estructura correspondiente, en el sentido analógico anteriormente planteado?, siendo las estructuras moleculares de los productos resultantes, confirmadas por diferentes técnicas instrumentales.

Entonces podemos decir que las propiedades químicas de una sustancia dependen no solo de la naturaleza de sus elementos químicos, sino también de la forma de cómo sus elementos químicos están conectados; es decir, de la estructura molecular de un compuesto. Por lo tanto, como indica Del Re (1998, p.95), de lo que se debería hablar es de las propiedades de la estructura molecular, o mejor aún de propiedades dependientes de la estructura molecular, pero ¿sobre la base de qué podemos afirmar que existe una estructura molecular?, ya que, como ya mencionamos, según la mecánica cuántica y el principio de incertidumbre, las partículas no son completamente localizables y algunos físicos, como Woolley, piensan que las estructuras químicas son solo metáforas.

La respuesta es que, en base a la aceptación de la existencia de las estructuras moleculares, podemos predecir si una reacción química se dará o no. Según Feynman et al. (2022, p.2-9) “el fundamento de una ciencia es su capacidad de predecir. Predecir significa decir qué ocurrirá en un experimento que nunca se ha realizado”. La ciencia química puede predecir perfectamente, en base a las estructuras moleculares, las posibles reacciones y productos que se pueden obtener en una reacción química.

Puesto que la mecánica cuántica, no puede dar cuenta de la estructura molecular al punto de considerarla una *poderosa metáfora*, es decir, para la mecánica cuántica no tienen un sentido real. Sin embargo, como ya hemos mencionado anteriormente, los químicos en base a las estructuras moleculares pueden *diseñar* moléculas y *predecir* el comportamiento de dicha molécula, entonces, ¿se puede negar que la ontología química es real?, o mejor aún nos planteamos la siguiente pregunta: ¿es realmente posible reducir ontológicamente la química a la física?. Nuestra respuesta es nuevamente: NO.

### 3. Mereología de los sistemas complejos

La mereología es una rama de la filosofía que estudia las relaciones entre los Todos y las partes. Se ocupa del análisis y clasificación de los objetos complejos en términos de sus partes constituyentes y de las relaciones entre ellas. Para Simons (2020), el filósofo y lógico polaco Stanislaw Leśniewski no dio una exacta definición de mereología, por lo que, podríamos decir que la concibe como aquella que se ocupa de las relaciones de inclusión y exclusión entre objetos y sus partes, y estudia cómo se pueden definir las partes de un Todo de manera precisa y rigurosa. Inwagen en su obra *Material Beings* (1990) define la mereología como el estudio de la relación entre los objetos y sus partes constitutivas, y cómo esas partes se relacionan entre sí para formar un Todo. La mereología ha tenido una influencia importante en la filosofía contemporánea, especialmente en la ontología y la teoría de la computación.

Para Harré (2014), Robert Boyle (1661) en su obra *El Químico Escéptico* marca a la química con principios mereológicos que se encapsularon en su filosofía corpuscular. Considera que las cosas materiales están compuestas de partes diminutas; por lo que, en su metafísica, consideraba a las sustancias materiales como un aglomerado de

partes y esto es el mínimo indispensable para una mereología de la química.

En cambio, para Varzi (2019), la mereología es simplemente un intento de establecer los principios generales que subyacen a las relaciones entre una entidad y sus partes constituyentes, cualquiera que sea la naturaleza de la entidad. Es decir, la mereología trata sobre entes concretos.

Utilizando la siguiente ley de la lógica formal: Si  $p$  implica  $q$  y  $q$  implica  $r$ , entonces  $p$  implica  $r$ , siendo  $p$ ,  $q$  y  $r$  proposiciones acerca de afirmaciones del mundo, no importando lo que digan; en el mismo sentido podemos afirmar que: Si  $x$  es idéntico a  $y$  e  $y$  es idéntico a  $z$ , entonces  $x$  es idéntico a  $z$ ; con la diferencia que esta afirmación, pertenecería a la ontología formal en la medida en que sus variables se extienden sobre *cosas* en el mundo, no interesando lo que sean. Es por ello por lo que utilizamos a la mereología como herramienta ontológica.

En química conceptos como átomos, moléculas, elementos y sustancias son fundamentales en el discurso químico. Tomemos el caso de las moléculas para entender la problemática mereológica que tiene la química, que muchos químicos no somos conscientes que caemos en una paradoja.

Como indica De Oliveira (1995, p. 9), si buscamos en los libros de química la definición de molécula, encontraremos generalmente como definición del concepto: “la parte más pequeña de la sustancia capaz de mantener sus propiedades”. A partir de una definición de este tipo, la idea que se transmite es que el constituyente aislado (la molécula) contiene en sí mismo los atributos del Todo. Sin embargo, esto no es así, tomemos nuevamente el ejemplo de la molécula del compuesto más común que todos conocemos: el agua.

El agua es una molécula formada por el enlace covalente que se origina entre dos átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno; sin embargo, para comprender las propiedades de densidad, tensión superficial, punto de fusión y punto de ebullición se debe entender al agua como el conjunto de relaciones que cada molécula individual del agua tiene entre sí.

En este ejemplo, podemos observar la paradoja que mencionamos anteriormente, pues una molécula de agua no guardaría individualmente las propiedades de la sustancia que denominamos agua. Por lo tanto, creemos que se puede ver en este ejemplo, la importancia que tiene la mereología tanto para la química como para la filosofía de la química. Pero como lo dijimos anteriormente, hay un tema que hace de la mereología más importante para la filosofía de la química y este es validar la existencia de una ontología de las estructuras, al menos a nivel químico.

Como comentamos al comienzo de este artículo, los químicos no son conscientes que se topan constantemente con temas filosóficos, pues la mereología es un tema central, pero a la vez marginal en la química. Según Harré y Llored (2011), la química no es otra cosa que la ciencia de la transformación de las sustancias a través de la manipulación de sus constituyentes que son también trozos o pedazos discretos de sustancia a los cuales llamamos elementos. Esta definición de química se enmarca perfectamente en los conceptos de la mereología.

### 3.1. ¿Qué es una estructura?

En una primera aproximación, Harte (1994, citado en Koslicki, 2010) dice que una estructura sería como una clase de entidad que tiene espacios que pueden ser llenados con otros objetos, siempre y cuando estos objetos satisfagan cierto tipo de restricciones. Los objetos en cuestión como resultado de ocupar los espacios disponibles en la estructura exhibirán

una particular clase de arreglo o configuración. Koslicki (2010) manifiesta que lo indicado por Harte es correcto en su opinión, pero cree que se puede ir un poco más allá; pues en determinados ámbitos como la matemática, la lingüística, la música y la química, la noción de estructura es importante porque lo que se tiende a formular. En todos estos casos, son leyes cuyo objetivo es caracterizar el comportamiento específico de los rasgos del ámbito que se mantienen invariantes bajo transformaciones que preservan la estructura. Aunque esta invariancia bajo transformación de la estructura en la química no siempre sucede, ya que el fenómeno de la isomería molecular hace que las moléculas con una misma fórmula química, en determinada circunstancia, la transformación espacial le brinde ciertas diferencias debido a este nuevo arreglo espacial.

En general, podemos decir entonces que las entidades están estructuradas o que tienen estructura, o también podríamos hablar de la estructura de una colección de entidades, dependiendo de si algo califica como estructura, esto según las restricciones operativas que tenga dicha estructura en particular.

Para Rescher y Oppenheim (1995, como se citó en Koslicki, 2010), un Todo estructurado involucra tres cosas; primero sus partes; segundo, un dominio de posición que estas partes ocupan; y tercero, una asignación que especifica qué parte ocupa cada una de las posiciones del dominio. En el discurso químico, la forma de una molécula es la clave para su comportamiento. No se puede entender el fenómeno de la isomería sin aplicar el concepto de estructura molecular, pero ¿qué es una molécula?

### 3.2. ¿Qué es una molécula?

Una molécula, de primera aproximación, es una colección de electrones y núcleos y puede describirse como tal. Sin embargo, para que se forme una molécula determinada, los átomos

que forman dicha molécula no pueden tener cualquier configuración, sino que las *conexiones* o, mejor dicho, los enlaces químicos que se forman entre ellos determinan las propiedades del Todo. Pero las moléculas poseen un grado definido de complejidad estructural, pues la sola descripción de núcleos y electrones que posee una molécula no es una descripción completa de ella, pues como dijimos anteriormente, para el caso del agua, la molécula sola de H<sub>2</sub>O no explica sus propiedades, sino que se tiene que tomar en cuenta las propiedades emergentes debido a la existencia de formas químicas supramoleculares muy complejas (Vančik, 2003; Del Re, 1998).

Entonces podemos decir que las propiedades químicas de una sustancia dependen no solo de la naturaleza de sus elementos químicos sino también de la forma de cómo sus elementos químicos están conectados, es decir de la estructura molecular de un compuesto; por lo tanto, como indica Del Re (1998) lo que se debería hablar es de propiedades de la estructura molecular, o mejor aún de propiedades dependientes de la estructura molecular.

Como hemos mencionado anteriormente, la química es una ciencia mereológica y además de ello, se ha indicado que las propiedades químicas de una sustancia dependen no solo de la naturaleza de sus elementos químicos, sino también de la forma de cómo sus elementos químicos están conectados. Por ello, es apropiado hablar de propiedades dependientes de la estructura molecular. Una molécula está compuesta, en general, por componentes formales y materiales, siendo la función principal de los componentes formales de una molécula especificar una serie de requisitos de selección de la pluralidad de moléculas que tendrían la posibilidad de formarse para componer una molécula (Todo) determinada. Por otro lado, los componentes materiales o materia de una molécula son las partes que ocupan una posición determinada dentro de esa molécula (Todo). Entonces, en el discurso químico, una molécula

no es otra cosa que un Todo mereológicamente estructurado, pero que en muchos casos desarrollan un auto ensamblaje molecular para adquirir una mejor estabilidad y distribución espacial que da como resultado una unidad más funcional y estable.

### **3.3. Emergentismo y superveniencia química**

Como dijimos en el apartado anterior ¿Qué es una molécula? Una molécula, en una aproximación, se puede considerar como una colección de electrones y núcleos y pueden describirse como tal. Tanto la manera en que los electrones y el núcleo se juntan como los enlaces químicos que forman determinan las propiedades químicas del Todo (molécula). Sin embargo, los elementos químicos que forman una molécula permiten nuevas propiedades que no puede predecirse a partir del estudio de los elementos individuales que la conforman como en el caso del Cloruro de Sodio el cual está formado por dos elementos químicos que son venenosos en forma individual para el ser humano. El cloro es un gas verde altamente corrosivo y el sodio, un metal alcalino de color plateado muy reactivo, arde con llama amarilla, se oxida en presencia de oxígeno y reacciona violentamente con el agua. En cambio, la sal común, es decir, el cloruro de sodio es un sólido blanco-cristalino que se disuelve fácilmente en agua y es inocuo para el ser humano, pues sirve para dar sabor a alimentos.

De lo descrito anteriormente, podríamos decir que habría un primer nivel mereológico relativo a los componentes que forman la molécula, pero también un segundo nivel mereológico y este es con respecto a la estructura de la molécula en el espacio. Por otro lado, es apropiado destacar las propiedades dependientes de la estructura molecular, como en el caso de las moléculas del agua, en las que la explicación de sus propiedades físico-químicas no se pueden explicar estudiando una sola molécula de agua, sino por el contrario, las propiedades del agua emergen de

la bifurcación y autoorganización de las mismas moléculas de agua para formar agrupaciones moleculares o estructuras supra moleculares que presentan nuevas propiedades de complejidad estructural. Este salto de propiedad molecular a propiedades supra moleculares se debe entender como un movimiento hacia una mayor complejidad del sistema (Vančik, 2003).

*Emergencia* es un término filosófico muy atractivo para los científicos con inclinaciones filosóficas, incluidos los químicos. Sin embargo, su significado suele ser impreciso y poco explícito. Para los emergentistas hay entidades, propiedades y leyes químicas que dependen de entidades, propiedades y leyes físicas, pero que no se reducen a ellas. Pero ¿qué entendemos cómo emergencia? Según Popper (1977 citado en Eronen, 2004, p.22) emergencia significa:

El hecho de que en el curso de la evolución ocurren cosas y eventos nuevos, con propiedades inesperadas e incluso impredecibles; cosas y eventos que son nuevos, más o menos en el sentido en que una gran obra de arte puede describirse como nueva.

En general podemos decir que un conjunto de propiedades *P* emerge de las propiedades de otro conjunto de entidades *Q* justo cuando las entidades *Q* están configuradas de tal manera que se comportan colectivamente como en el caso de la molécula del agua, en donde el Todo es mayor que la suma mereológica de sus partes. En esos casos es cuando aparecen propiedades emergentes. Por lo que un criterio claro y amplio sería identificar la emergencia con la bifurcación en general, y otro claramente más restringido sería identificarlo simplemente con la autoorganización.

Como indica Newman (2013), el enfoque conceptual que se debe tener de emergencia es que siempre que exista una relación de emergencia entre *x* e *y* en las ciencias en general,

y en la química en particular, también tendremos ipso facto un par explanans- explicandum *x* e *y* lo que quiere decir que no puede haber una explicación sin ambos términos.

En el discurso químico, la emergencia y la superveniencia están conectadas, más exactamente pensamos que pueden complementarse, de modo que puede ser razonable afirmar que las características de nivel superior sobrevienen a las propiedades de nivel inferior y emergen de ellas. En este orden, podemos decir que *P* emerge de *Q* y superviene sobre *Q*.

La superveniencia es una relación de dependencia entre un conjunto de propiedades y otras, de modo que, si un conjunto de propiedades *P* superviene a un conjunto de propiedades *Q*, no puede haber ningún cambio en las propiedades *P* sin un cambio en las propiedades *Q*. Para la mayoría de los filósofos, la superveniencia significa fundamentalmente covarianza entre un conjunto de propiedades y otro. Entonces, si *P* superviene a *Q*, y vemos que *P* experimenta un cambio, sabemos que *Q* también debe hacerlo. Esto equivale a la covarianza de un conjunto de propiedades con el otro. La covarianza se explica, pues, por la determinación de *P* por *Q*.

Newman (2013, pp.1664-1665) explica la superveniencia química a través de lo que llama el cambio químico. Indica que cuando se producen cambios en las propiedades de un compuesto siempre se debe a cambios en su composición. Entonces, la superveniencia se puede utilizar para caracterizar este cambio químico, pues lo que distingue al cambio químico es que se debe a cambios reales en los componentes de las sustancias que reaccionan. Es por ello, continua Newman, la noción de cambio químico se puede explicar en términos de superveniencia, ya que un conjunto de propiedades *P* dependen de otro conjunto de propiedades *Q*. Cuando se produce un cambio en *P* debe producirse un cambio en *Q*. Esto se relaciona con la capacidad explicativa de la teoría química, ya que el carácter del

cambio en las propiedades subyacentes, es decir los elementos químicos, explica el cambio en las propiedades supervenientes de la sustancia es decir los compuestos.

#### 4. Conclusiones

La química es una ciencia de laboratorio, pues a través de él, los químicos conocen indirectamente la naturaleza *haciendo* o como dijo uno de los pioneros de la síntesis orgánica Marcellin Berthelot (1827-1907) citado en Chamizo (2021, p. 65): “la química crea su objeto” (de estudio). Esta idea recoge a la perfección el espíritu creativo de la síntesis química y resultado de las reacciones químicas.

La química es una ciencia peculiar, pues a diferencia de la física que se basa fundamentalmente en leyes y teorías, que en química las hay, pero el conocimiento que adquieren los químicos acerca de las moléculas que crean, está basado fundamentalmente en modelos.

El conocimiento químico es el esfuerzo por representar científicamente o por *traducir* a un lenguaje teórico la organización y las acciones de la materia a nivel molecular; no es simplemente una lista de protocolos para transformaciones químicas reproducibles. Es evidente que las representaciones químicas de las moléculas siempre tendrán una falta semántica, debido en gran medida a la simplificación y abstracción. Para Schummer (1998a, citado en Tontini, 2004), la principal importancia de las fórmulas estructurales es la de representar sustancias en ciertas relaciones entre sí, es decir, sustancias dentro de la red química.

Las moléculas no son directamente accesibles a nuestros sentidos, sino solo podemos interpretar la reactividad y los datos espectroscópicos para reconstruir características muy básicas de la *geometría* de tales partículas

microscópicas en la analogía de las relaciones espaciales que establecemos entre objetos macroscópicos. Las estructuras moleculares son una realidad profundamente compleja, de la que sólo podemos captar la superficie a través de la experimentación química.

Como dice Bunge (2012, p. 77): “el mundo es material, pero no es solamente un montón de entidades físicas: se compone de sistemas de una variedad de clase cualitativamente diferentes”. En ese sentido, podemos decir que las estructuras moleculares son tan reales como lo son las partículas subatómicas en la física. Entonces, podemos concluir que un mismo evento puede tener una descripción química y otra física, pero no existe una descripción privilegiada.

#### Referencias

- Bensaude-Vincent, B. (2009). Philosophy of Chemistry. En A. G. Brenner, French Studies In The Philosophy Of Science. *Boston Studies in the Philosophy of Science*, 276 (pp. 165-188). Springer, Dordrecht.
- Bohr, N. (1913). On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine Series*, 26(151), pp.1-25.
- Bunge, M. (2012). *Ontología, Vol. II*. Gedise.
- Cerro y Merino (2009). ¿Moléculas sin esqueleto?: La oportunidad perfecta para revisar el concepto de estructura molecular. *Educación Química*, 187-191.
- Chamizo, J. (2021). El límite material de la sustancia química. *Diánoia*, 51-78.
- Chamizo, J. A. (2009). Filosofía de la química: I. Sobre el método y los modelos. *Educación Química*, 6-11.
- De Oliveira, R. (1995). O mito da substância. *Química Nova na Escola*, (1), 8-11.
- Del Re, G. (1998). Ontological Status of Molecular Structure. *HYLE- An International Journal for the Philosophy of Chemistry*, 81-103.

- Dirac, P. A. (1929). Quantum Mechanics of Many-Electron Systems. *Proceedings of Royal Society*, 714-733.
- Eronen, M. (2004). *Emergence in the Philosophy of Mind*. [Tesis de Maestría]. En Department of Philosophy University of Helsinki, 1-183.
- Feynman, R.P., Leighton, R.B., y Sands, M. (2022). *Lecciones de Física de Feynman: III. Mecánica Cuántica*. Fondo de Cultura Económica USA.
- Harré, R. (2014). Mereological Principle and Chemical Affordances. En E. S. (Eds), *Philosophy of Chemistry: Growth of a New Discipline* (pp. 107-119). Springer Netherlands.
- Harré R. y Llored, J.P. (2011). Mereologies as the grammars of chemical discourse. *Foundations of Chemistry*, 864-875.
- Inwagen, P. (1990). *Material Beings*. Cornell University Press.
- Koslicki, K. (2010). *The Structure of Objects*. Oxford University Press.
- Lombardi, O. (2013). ¿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*, 105-144.
- Lombardi, O., y Labarca, M. (2004). En defensa de la autonomía ontológica del mundo químico. *Diálogos*, 51-70.
- Newman, M. (2013). Emergence, Supervenience, and Introductory Chemical Education. *Science & Education*, 22(7), 1655-1667.
- Schummer, J. (2014). The Methodological Pluralism of Chemistry and Its Philosophical Implications. En I. E. (Eds), *Philosophy of Chemistry: Growth of a New Discipline* (pp. 57-72). Springer Netherlands.
- Simons, P. (2020). *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*. <https://plato.stanford.edu/archives/fall2020/entries/lesniewski/>
- Tontini, A. (2004). On the Limits of Chemical Knowledge. *Hyle an International Journal for the Philosophy of Chemistry*, 23-46.
- Van ik, H. (2003). Philosophy of Chemistry and limits of complexity. *Foundations of Chemistry*, 5, 237-247.
- Varzi, A. (2019). The Stanford Encyclopedia of Philosophy. <https://plato.stanford.edu/archives/spr2019/entries/mereology/>
- Villaveces Cardoso, J. L. (2000). Química y Epistemología, una relación esquivada. *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia*, 9-26.

---

#### Contribución del autor

El autor ha participado en la elaboración, el diseño de la investigación, la redacción del artículo y aprueba la versión que se publica en la revista.

#### Agradecimientos

Sin agradecimientos.

#### Financiamiento

Sin financiamiento.

#### Conflicto de intereses

El autor no presenta conflicto de interés.

#### Correspondencia

jose.tejada3@unmsm.edu.pe