

## FILOSOFÍA Y ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA SIN REDUCCIONISMOS

*Juan Bautista Bengoetxea<sup>1</sup>*

### RESUMEN

Ha sido un tópico en la filosofía de la ciencia defender que la reducción de la química a la física es un hecho. Sin embargo, la reciente filosofía de la química pone en cuestión semejante afirmación. Aquí recogemos este tipo de crítica al reduccionismo y la enfocamos al caso de la enseñanza de la química para mostrar lo siguiente: (i) que la tesis reduccionista no es correcta; (ii) que la química proporciona buenas teorías y modelos que representan adecuadamente los fenómenos químicos; y (iii) que la enseñanza de la química requiere representaciones propiamente químicas, no necesariamente reductibles a la física.

**Palabras clave:** reduccionismo, química, enseñanza

### ABSTRACT

It has been a common idea in philosophy of science to sustain the point that chemistry can be reduced to physics. However, it has been put at issue by the new philosophy of chemistry. The paper gathers this kind of criticism on reductionism and focuses it on the case of the education of chemistry to consequently demonstrating the following three points: (i) that reductionism is not correct, (ii) that chemistry offers good theories and models to represent the chemical phenomena, and (iii) that the education of chemistry needs

---

<sup>1</sup> Investigador Posdoctoral de la Cátedra Miguel Sánchez-Mazas (Sección: Filosofía de la Ciencia) de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU).

chemical representations which are not necessarily to be reduced to physics.

**Key-words:** reductionism, chemistry, education

En la actualidad se acepta que tanto ciencia como tecnología constituyen una fuente común e inagotable de cuestiones de interés filosófico y didáctico de gran calado.<sup>1</sup> La historia de ambos ámbitos del saber ha mostrado la gran importancia que la ciencia y la tecnología han tenido en el desarrollo de las civilizaciones, en su modo de influir sobre nuestras concepciones del mundo, de entender la naturaleza. A partir del siglo XVII las revoluciones científicas, entendidas al modo de Kuhn (1962), dieron lugar a los más grandes retos para el intelecto humano desde la Antigüedad. Sin embargo, la creación y escisión de las diferentes especialidades científicas, debido a tales revoluciones, obligó a que la filosofía detentara un nuevo rol, más difuminado, mediante el que plantearse continuamente en qué consiste eso a lo que llamamos 'filosofía'.

La reacción práctica más palpable ante esta situación de deshilache del saber tomó cuerpo en una imagen de la filosofía en la que ésta se *especializaba* en diversas ramas, acorde cada una de ellas al objeto del análisis filosófico que la soportaba. De este modo surgieron las diferentes filosofías que aún hoy abundan en los planes de estudio universitarios: la filosofía moral, la filosofía política, del arte, de la religión y, por supuesto, la filosofía de la ciencia y la tecnología.<sup>2</sup> Desde el primer tercio del siglo XX, la filosofía de la

---

<sup>1</sup> El artículo ya clásico de Mario Bunge (1979) sobre filosofía de la tecnología muestra claramente la riqueza y variedad de las cuestiones que surgen en este área, desde la ingeniería físico-química a las ciencias de la informática, sin obviar por supuesto la epistemología, la ontología, la ética y la divulgación.

<sup>2</sup> Varios textos introductorios en lengua española acerca de la cuestión son Mitcham (1989), Alonso *et al.* (1996), González *et al.* (1996) y Echeverría (2003). Por otro lado, un recopilatorio muy comprehensivo y comprensible es el editado por Scharff y Dusek (2003), rico tanto en lo que respecta a la tendencia de los autores como respecto al estilo y la fecha original de los textos.

ciencia se convirtió en una de las ramas más importantes del escenario filosófico. Los positivistas lógicos de Viena y Berlín irrumpieron con varias tesis analíticas y enfatizaron el hecho de que la filosofía avanzara paralelamente a los descubrimientos y desarrollos más novedosos de la matemática, la lógica y la física —relativista y cuántica—.<sup>3</sup> En este sentido, los filósofos analíticos, y también los neokantianos, de la ciencia propusieron nuevas maneras de concebir el mundo vinculadas a los adelantos científicos y que sirvieran para superar de algún modo el modelo kantiano, de inspiración newtoniana y aristotélica, insuficiente a todas luces para dar cuenta de los problemas filosóficos que los avances científicos del siglo XX originaban. En esta situación general de escisión, la filosofía misma comenzó a especializarse hasta el punto de procurar abarcar bajo el epígrafe de “filosofía de” las diversas disciplinas científicas ya institucionalizadas. De ahí que con el devenir del pasado siglo se instituyeran también las filosofías de la física, la biología, la matemática, la economía, etc.

Ahora bien, crea cierta perplejidad que entre todas las subdisciplinas de la filosofía de la ciencia no se haya tomado en consideración hasta la década de 1980 la instauración *de hecho* de la filosofía acerca de una de las ciencias mejor establecidas en la academia: la filosofía de la química. Hay quien sostiene<sup>4</sup> que ello ha sido motivado por la tendencia entre los filósofos de la ciencia a

---

<sup>3</sup> Un interesante y esmerado estudio del estado de la cuestión en la época es el de Michael Friedman (2001), que compara las contribuciones del neokantiano Ernst Cassirer, el miembro del Círculo de Viena, Rudolf Carnap, y Martin Heidegger, uno de los primeros en estudiar con detalle la función social de la tecnología.

<sup>4</sup> Liegener y Del Re (1987: 269) o Mario Bunge (1982: 209), entre los primeros filósofos en tratar esta cuestión, consideran que aunque los químicos estudien sistemas químicos, es decir, sistemas de poco interés para los físicos habitualmente, lo hacen en realidad con ayuda de la disciplina física, de tal modo que la química resulta dependiente de la física. Sin embargo, añade, la física no es suficiente para hacer química debido a que ha de ser enriquecida con conceptos e hipótesis propiamente químicos a la hora de resolver problemas de esta ciencia particular. Para obtener una visión general y didáctica del tema, véase el número especial de la revista *Synthese* (nº 111, año 1997) bajo el rótulo de “Philosophy of Chemistry”.

reducir automática e instintivamente la posible problemática filosófica que la química genera a aquella otra de orden físico. Pero esta respuesta no es satisfactoria por varios motivos.

Es bien sabido que a partir de 1926 el surgimiento de la teoría cuántica en física posibilitó la creación de un *marco*, el de la teoría atómica, al que supuestamente resultaban supeditadas las explicaciones de los fenómenos tanto físicos como químicos. Las teorías químicas, en este sentido, dependían de dicho marco y sus resultados sólo podían ser avalados en virtud de que se adecuaban a la mecánica ondulatoria de Schrödinger, pues era el marco de la teoría atómica el que daba cuenta satisfactoriamente de los fenómenos químicos básicos del *enlace mediante pares de electrones* y de la *estabilidad estructural* derivada de dichos enlaces, y proporcionaba el fundamento para un tratamiento general apropiado del comportamiento químico (BOGAARD, 1978: 345). Pero este optimismo de carácter fisicista llegó demasiado lejos, hasta el punto de afirmar que la química era exclusivamente una ciencia experimental sin teoría propia y que lo que parecía ser una teoría química no era sino una teoría completamente dependiente de la física atómica. En este sentido, los filósofos de la ciencia de la *concepción heredada* [*received view*] no dudaron en aceptar que el caso de la química era un ejemplo indudable de reducción entre teorías. De ahí sus reticencias a desarrollar una filosofía de la química.

Desde nuestra perspectiva, este planteamiento es contraproducente tanto para la química como para la filosofía y la didáctica de la química. En el caso de la química, porque pone en duda su propia identidad en tanto disciplina; en el de la filosofía, porque induce a un tratamiento confuso de los conceptos y teorías relevantes de cada disciplina; y en el de la didáctica, porque de lo anterior se podría derivar una imagen desviada del papel real que la química desempeña en el conocimiento científico general, por no hablar del desprestigio en el que podrían caer muchos modelos didácticos propios de la enseñanza de la química. En este artículo, por tanto, nuestro objetivo consiste en mostrar básicamente que (i) la tesis reduccionista es equivocada, (ii) la autonomía química proporciona buenas teorías y modelos para representar los fenómenos químicos, y (iii) la educación química necesita de las

representaciones propiamente químicas, no sólo de las de naturaleza física, para ser satisfactoria.

## 1. Filosofía de la química y reduccionismo

Son apenas dos décadas<sup>5</sup> desde que la filosofía de la química comenzó a constituirse en lo que en términos kuhnianos se denomina un *paradigma* para la filosofía de la ciencia. Temas recurrentes en la filosofía de la ciencia como la explicación, las leyes científicas, la inducción, el estatus ontológico de los términos teóricos, los problemas en torno a la noción de materia y otros dominaban el marco de los primeros textos dedicados al examen de los problemas filosóficos que la química originaba.

Con anterioridad al establecimiento de este paradigma, la filosofía de la ciencia se reducía casi exclusivamente a filosofía de la física y de la matemática junto a algunas reflexiones en torno a la biología. Textos canónicos como *La estructura de la ciencia* (1961) de Nagel o *La explicación científica* (1965) de Hempel, o artículos en revistas como *Erkenntnis* o *Synthese*, así lo evidencian. En general, apenas se podían encontrar referencias a la química y su filosofía, a excepción de las vinculadas directamente con estudios históricos de la ciencia, como es el caso de Kuhn (1962) o Bachelard (1932). Tampoco las dos principales revistas anglosajonas de filosofía de la ciencia (*The British Journal for the Philosophy of Science* y *Philosophy of Science*) dedicaban especial atención al tema.

Los motivos de esta falta de interés son varios y se pueden resumir del siguiente modo (VAN BRAKEL, 2000: 18s):

---

<sup>5</sup> La literatura filosófica acerca de la química comienza a ofrecer resultados protosistemáticos a finales de la década de 1970, si bien la subdisciplina como tal no se reafirma hasta bien entrada la década de 1990, años en los que se institucionaliza mediante la organización de reuniones científicas y la creación de publicaciones —las revistas *HYLE* en Alemania y *Foundations of Chemistry* en Estados Unidos de América— y sociedades específicas —principalmente la ISPC, *International Society for the Philosophy of Chemistry*—. Aún resta, sin embargo, lo más importante: la incorporación a los planes universitarios de filosofía y/o de química de la asignatura ‘filosofía de la química’.

(1) tal y como hemos señalado anteriormente, antes de 1960 el interés de los filósofos se decantaba por la ciencia exclusivamente *teórica*—incluso la física experimental quedaba fuera de sus objetivos de análisis—. Esto lo percibió atinadamente el químico y filósofo Michael Polanyi (1958: 156), según el cual fueron los propios químicos los que se encargaron de sostener la visión pro-experimental de su disciplina al desconfiar de los teóricos y sus ‘especulaciones’. Así pues, tanto la ciencia experimental como la teórica fueron encajonadas en el compartimiento de las ciencias exactas, de las cuales los filósofos tan sólo deberían analizar su estructura lógica, dado que lo único que les interesaba entonces era concebir las leyes científicas en su forma matemática; es decir, en tanto fueran ecuaciones que vinculaban magnitudes. Por ello requerían que las teorías fueran axiomatizadas. Como consecuencia de todo ello, los filósofos consideraron que la química, en lo que respecta a la forma de sus leyes, era en realidad una parte de la física, pues eran las leyes de esta disciplina las que se conseguía matematizar según el formato de la axiomatización (MULCKHUYSE, 1961).

(2) también es importante subrayar el hecho de que históricamente, en particular desde 1500 hasta 1900, ha habido más teorías físicas que químicas catalogadas como “grandes teorías”. Si a ello le añadimos que a partir de comienzos del siglo XX la idea de una ciencia unificada recobra todo su auge e intenta unificar las teorías de la ciencia en un proceso que las reduzca a una gran teoría física, entonces se comprende aún mejor el prestigio de la disciplina física y su carácter general. En este contexto los filósofos no aportaron nada a favor de las tesis en pro de la autonomía de la química (PETER y PSARROS, 1998); incluso ya avanzada la década de 1970 poco se decía sobre química en los, por esas fechas ya contados, intentos unificadores (CAUSEY, 1977: 51ss), y lo poco que se mencionaba era en un sentido reduccionista.

Sin embargo, aparecen en 1960 algunas publicaciones específicas que coquetean con la filosofía de la química y en las que se aprecian indicios que sugieren que la noción de teoría no significa lo mismo en química que en física teórica (Cf. CALDIN, 1960). Como veremos posteriormente, a ello se ha de añadir el surgimiento de algunas

tesis contrarias al modelo nomológico-deductivo (ND, en adelante) de explicación de Hempel, que ya no consideraban apto para las aplicaciones a fenómenos y teorías químicos.

Es en este proceso de revitalización y auge del análisis inmanente de la química donde la reflexión filosófica se aproxima progresivamente a patrones de indagación que hoy ya identificamos como propios de la filosofía de la química, aunque pudieran ser extensibles a la filosofía de otras disciplinas científicas. En particular, hasta finales de la década de 1980 es el problema de la *reducción* el tema principal sobre el que se entreteje la red de publicaciones más relevantes. Es Nagel (1961) quien plantea explícitamente lo que hoy se denomina la *concepción clásica o acumulativa* de la reducción. En ella se presupone que las teorías debían ser axiomatizadas —según los instrumentos de la lógica de primer orden— y el objetivo inicial consistía en identificar ciertas relaciones formales entre cada par de ellas. Por ende, el reduccionismo planteado por Nagel se considera que es teórico y explicativo,<sup>6</sup> dado que erige la noción de reducción a modo de relación entre teorías. Según Nagel, reducir una teoría T1 a otra T2 es lo mismo que explicar T1 mediante T2. El fundamento de la explicación se constituye a partir del modelo ND (HEMPEL & OPPENHEIM, 1948), que impone dos condiciones básicas para la reducción, la *deducibilidad* y la *conectabilidad*:

Cuando las leyes de la ciencia secundaria contienen algún término 'A' que está ausente de las suposiciones teóricas de la ciencia primaria, hay dos condiciones formales necesarias para reducir la primera a la segunda: (1) Deben

---

<sup>6</sup> Sarkar (1992: 170s) distingue tres categorías generales de reduccionismo: el *reduccionismo teórico*, constituido por modelos de reducción en los que ésta es una relación que ocurre *necesariamente* entre teorías; el *reduccionismo explicativo*, consistente en modelos en los que la reducción se entiende como una relación de explicación según la cual la entidad reducida se explica mediante una entidad reductora (sin importar si estas entidades son teorías, leyes, generalizaciones empíricas o informes individuales de observación); y, por último, el *reduccionismo constitutivo*, basado en modelos reductivos según los cuales los sistemas de niveles superiores están al menos compuestos de sistemas de niveles inferiores, a cuyas leyes se ven supeditados.

introducirse suposiciones de algún tipo que postulen relaciones adecuadas entre lo significado por 'A' y características indicadas en términos teóricos ya presentes en la ciencia primaria. (...) Será conveniente llamar a esta condición la 'condición de conectabilidad'. (2) Con ayuda de estas suposiciones adicionales, todas las leyes de la ciencia secundaria, inclusive las que contienen el término 'A', deben ser lógicamente deducibles de las permisivas teóricas y de las definiciones coordinadoras asociadas con ellas en la disciplina primaria. Llamemos a esta condición la 'condición de deducibilidad' (NAGEL, 1961: 324s).

Dos son los tipos básicos de reducción teórica. Por un lado, la reducción homogénea, que se obtiene cuando la T2 (teoría reducida) contiene términos que aparecen en T1 (teoría reductora). Este tipo de reducción se puede intentar llevar a cabo sin ningún añadido extraordinario. Es decir, puede ser inmediata. Por otro lado tenemos la reducción heterogénea, la que realmente ocupa a Nagel. Según este tipo, si T2 contiene términos que no aparecen en T1, antes de dar inicio al proceso se deben conectar los términos de ambas teorías (Ibid.: 315). A estas conexiones Nagel las denomina *leyes puente*. Tienen la forma de condicionales o bicondicionales y se pueden interpretar como convenciones o enunciados factuales dependientes siempre de algún contexto. Por consiguiente, la reducción es para Nagel una cuestión epistemológica no vinculada a compromisos ontológicos de ningún tipo.<sup>7</sup>

### 1.1. Reducción aproximada

Las ideas de Nagel están íntimamente ligadas al modelo ND de Hempel. La concepción de éste tiene por meta ofrecer un esquema

---

<sup>7</sup> La falta de compromiso ontológico se observa claramente cuando Nagel (1961: 320) subraya que en los enunciados de observación él no se compromete con la ontología de los datos de observación. La única reserva que introduce exige únicamente que no se identifique datos de observación con datos de los sentidos.



del funcionamiento de los procesos explicativos en la ciencia. La idea básica subraya que la tarea de la ciencia consiste básicamente en subsumir fenómenos, particulares o generales, bajo leyes generales.

Hempel desarrolló su modelo ND de explicación con el fin de responder a quienes consideraban que existían dos tipos de explicaciones, cada uno de los cuales correspondía a las *Geisteswissenschaften* y las *Naturwissenschaften* del siglo XIX. Esto es, Hempel se oponía a la tesis de que los científicos podían manejar un tipo de explicación histórico o bien uno de tipo científico-natural, pero nunca ambos, dado que eran incompatibles. La tesis unificadora de Hempel no reconocía diferencias explicativas de tal talante; a lo sumo, aceptaba distinciones entre explicaciones y pseudoexplicaciones. Su modelo, por tanto, sólo pretendía satisfacer este último objetivo diferenciador y unificar las explicaciones bajo un único esquema general.

La explicación según el modelo ND —también denominado explicación por subsunción a leyes generales— consta de dos partes iniciales: un *explanandum* (o ítem a explicar) y un *explanans* (ítem explicativo). Las proposiciones que se incorporen al *explanans* son de dos tipos: enunciados de hechos particulares —aquí se pueden incluir las condiciones antecedentes y las hipótesis concomitantes— y leyes generales (científicas). Pues bien, las condiciones que la explicación ha de satisfacer son las cuatro siguientes: (i) el *explanandum* debe ser consecuencia lógica del *explanans*, (ii) el *explanans* debe contener leyes generales que de hecho sean efectivas en la derivación del *explanandum*, (iii) el *explanans* ha de tener contenido empírico, y (iv) las proposiciones del *explanans* han de ser verdaderas. De las cuatro condiciones, tal y como se observa, las tres primeras son lógicas y la cuarta es empírica (HEMPEL, 1965: 297ss).

Sin embargo, estas restricciones del modelo ND requieren un argumento deductivo excesivamente fuerte que podría tachar de erróneas o no válidas a muchas explicaciones científicas utilizadas en la práctica con éxito. Como enmienda, parcial, a esta situación, Hempel suavizó sus exigencias mediante la incorporación de lo que denominó *esbozo explicativo*. Éste consistía simplemente en una

“indicación más o menos vaga de las leyes y las condiciones iniciales consideradas relevantes” (HEMPEL 1965: 240), indicación que posteriormente habría que completar para convertirla en una verdadera explicación. Este ‘proceso de relajación’ le permitió a Hempel abrir una vía a otros tipos de explicación exitosos en la práctica científica real, como es el caso de la explicación *estadística* o la *aproximada* (Ibid.: 340). Pero esta alternativa parece adjudicar al término “aproximado” una marca que sólo devalúa la noción de explicación ND genuina y que la aleja de su idea de *covering law explanation*. Expresiones como “buen argumento explicativo” o “argumento aproximado” ya sugieren cierta vaguedad derivada de los intentos de Hempel por distinguir entre explicaciones adecuadas y pseudoexplicaciones. Sin embargo, no hay caso real alguno de explicación científica —no idealizado— que se ajuste válidamente al modelo debilitado de Hempel.

## 2. La química y los problemas de la reducción

En el contexto de la actividad química y sus teorías, los modelos del tipo Nagel-Hempel no son satisfactorios debido a dos trabas básicas: por un lado, no resulta claro que, en el caso de existir, las leyes de la química se puedan axiomatizar y, por otro, incluso contando con teorías axiomatizadas, Nagel no proporciona una idea satisfactoria de cómo adecuar las condiciones formales a una reducción exitosa, tal y como hemos señalado arriba. Así pues, los filósofos no han identificado aún —desde la fecha de los escritos de Nagel y Hempel hasta hoy— una noción suficiente de reducción.

Según Primas (1991: 163), la filosofía que ha estudiado la noción de reducción sigue aún cargada de muchos sinsentidos científicos que, aunque parezca extraño, son el fundamento de afirmaciones como la de que la química clásica se reduce sin problema a la física atómica. Van Brakel (2000) considera que estos relatos reduccionistas —incluidos sus sinsentidos— en realidad no siempre han sido ideados por filósofos, pues no hemos de olvidar que aquellos que, como Kemeny y Oppenheim, estaban convencidos de que la química se reduce a la física, estaban próximos a las tesis y a la actividad de

Dirac o Heisenberg. Parece pues que el entorno proclive a que los pensadores, filósofos o no, vieran en la física el modelo supremo del saber y el conocimiento, hizo que las tesis conducentes a aproximar todo modelo de conocimiento al modelo físico tuviera más aceptación que otras alternativas.

Ahora bien, si la reducción consiste —a pesar de los problemas del modelo ND de explicación y de la reducción a él anexada— en que la teoría de nivel superior (sea una teoría química, por ejemplo) se ha de poder deducir a partir de la teoría básica (la teoría física), entonces las siguientes afirmaciones parecen evidentes:

(i) la química no ha sido reducida completamente a la física, pues existen contraejemplos de ello, como es el caso de la imposibilidad de derivar las ecuaciones diferenciales no lineales de la cinética química a partir de la mecánica cuántica lineal; y

(ii) tampoco resulta en absoluto claro establecer en sus términos adecuados la cuestión de la posible reducción de la química a la física, dado que hay varios aspectos dificultosos:

- no se ha establecido con claridad la frontera entre los dos polos a comparar (reducir), la química y la física. Aquí podríamos cometer una *petitio principii* si admitiéramos de antemano la autonomía del polo a reducir,

- sigue sin haber una noción satisfactoria de reducción, por lo que la cuestión de su establecimiento conceptual está sin resolver,

- como mínimo, la noción de reducción debe ser desgranada de tal modo que se dé cuenta explícitamente de aquello que se pretende comparar: ¿qué hay que reducir: teorías, conceptos, propiedades, disciplinas, leyes?, ¿en qué se distingue la reducción de otros conceptos relacionados como son la sustitución, la eliminación, la integración o la superveniencia?

Además, la tesis reduccionista está supeditada a dos hipótesis independientes presupuestas acriticamente por los filósofos de la ciencia, pero que un análisis más pormenorizado puede cuestionar, a saber:

(1) que son los principios físicos los que explican la estructura atómica y el sistema periódico de los elementos químicos, y

(2) que las explicaciones diversas ofrecidas en las materias de química inorgánica se canalizan exclusivamente a través de

principios físicos, no por medio del manejo de problemas cualitativos o mediante la comprensión de la riqueza y la pluralidad de los fenómenos realmente observados en dicha área.

Ambas hipótesis han permitido regular procedimientos de acción a la hora de establecer programas didácticos y de confeccionar libros de texto y material informático para la enseñanza de la química. Ahora bien, lo que aquí nos interesa recalcar es que ambas hipótesis no se pueden sostener independientemente desde una perspectiva filosófica y educacional. Para que los modelos en química inorgánica sean significativos, ya no es suficiente con acumular descriptivamente varios principios inconexos y utilizarlos como explicación, más o menos degenerada, de lo que la ciencia realiza, sino que hay que unificar los dos supuestos. Y esto sólo se puede llevar a cabo si se desecha la tesis reduccionista. Sobre este telón de fondo presentamos este trabajo en nuestro afán por comprender mejor una ciencia que se ha de enseñar con *claridad y coherencia* en las escuelas.

## **2.1. Los intentos reduccionistas de la química cuántica computacional**

La reducción conceptual lleva implícito el análisis de una posible, aunque muy difícil, reducción de conceptos propiamente químicos —composición, estructura molecular, enlace químico, etc.— a otros conceptos extraños a la química, básicamente físicos. La principal dificultad a la que se enfrenta este tipo de reducción es la *definibilidad* de los dominios científicos y la consiguiente imposibilidad de evitar sucumbir al nivel químico cuando de conceptos químicos se refiere. Tomemos como ejemplo la noción de *composición química*. Según Bunge (1982: 210), la definición de un dominio científico en el que insertar un concepto puede acarrear malentendidos si no captamos adecuadamente el fundamento de éste. Tal y como señala,

a primera vista la química está incluida en la física porque los sistemas químicos parecen constituir una clase especial

de sistemas físicos. Pero esta impresión es errónea, pues lo que es físico de un sistema químico son sus componentes más que el sistema mismo, el cual posee propiedades emergentes —aunque explicables— además de las físicas (Ibid.).

Así pues, antes de afirmar taxativamente que un concepto utilizado en la química se puede reducir sin excepción a conceptos físicos, mejor sería articular una agenda de problemas conceptuales vinculados a las particularidades que atañen exclusivamente a la disciplina química y a sus teorías más estrechamente relacionadas con las cuestiones de la reducción, aun siendo conscientes de los posibles solapamientos con otras teorías y disciplinas. Ello nos facilitaría referirnos más claramente a aquello que cuenta como químico o no cuenta como tal. En este sentido, la tarea previa a la constatación de una tesis reduccionista—o autonomista—aplicable a conceptos químicos puede partir de las tres cuestiones generales siguientes:

- (1) el papel que desempeña la teoría en la química,
- (2) las estrategias de construcción de una teoría en química, y
- (3) la legitimación del discurso propio de la química.

De entre estas tres cuestiones, en el debate acerca del reduccionismo conceptual surge la pregunta clave sobre cuál es la dependencia que la teoría química tiene respecto a la física en el proceso de construcción de una teoría de la química. Y la respuesta no es definitiva ni tajante: no se puede hablar ni de reducción conceptual estricta ni de autonomía completa para la química. Este resultado puede parecer decepcionante, pero no obstante también lo podemos entender como una vía abierta para soluciones más sofisticadas y realistas respecto a cómo funciona realmente la relación entre la física y la química y cómo se puede divulgar y enseñar.

El reduccionismo tiene como objeto de estudio básico las relaciones que se establecen tanto entre teorías como entre disciplinas científicas, si bien ambos ámbitos están estrechamente vinculados, y las tesis principales se sitúan en una gama cuyos polos opuestos y

extremos son el reduccionista y el autonomista. Los reduccionistas sostienen que la química se reduce o es parte de la física; los autonomistas, en cambio, prefieren debilitar la relación de dependencia de la química para con la física y dejar un espacio de autonomía a la primera disciplina. Durante el siglo XX, hay que reconocerlo, los propios químicos estuvieron al tanto de los trabajos reduccionistas que pudieran poner en peligro la existencia de su disciplina. Pero lejos de afanes corporativistas, lo cierto es que nunca fue fácil para el reduccionismo defender firmemente su agresiva tesis. La práctica científica así lo ha mostrado y la tarea filosófica reduccionista tan sólo ha podido justificar una reducción teórica parcial vinculada fundamentalmente a la química cuántica. La praxis química continúa contando con características propiamente químicas que hacen de la química una disciplina irreducible a otras y que obliga a que el concepto de reducción teórica, ámbito primordial para el filósofo de la ciencia, se conceptualice muy cuidadosamente en el seno de una noción amplia de lo que es una teoría.

Por mencionar un ejemplo de la química teórica, la cuántica computacional, vemos que en ella un objetivo básico consiste en calcular propiedades de átomos, moléculas y sus reactividades a partir de una serie de postulados y mediante la ecuación de Schrödinger, principal instrumento de la mecánica cuántica aplicada. El planteamiento de los químicos cuánticos es, por lo tanto, puramente teórico y sus resultados, en la medida en que atañen al problema de la reducción, sólo se refieren a la reducción *teórica*. Y sin embargo podemos observar que en este ámbito teórico los procedimientos habituales del tratamiento del problema de la reducción dependen en último término de datos que no sólo son experimentales, sino que además provienen de la ciencia que se supone ha de reducirse, la química. Estos procedimientos son los cálculos semi-empíricos basados en la teoría mecano-cuántica y que emplean datos propiamente químicos elaborados en teorías químicas, no físicas. Por lo tanto, como primera aproximación, una noción de reducción matizada por los procedimientos semi-empíricos no tiene como consecuencia una tesis reduccionista satisfactoria (ATKINS 1989).

Observemos entonces el que en la actualidad es el caso de

reducción cuantitativa teórica más genuino: los cálculos *ab initio*. En éstos no se admite dato computacional alguno en los cálculos, salvo constantes fundamentales como la masa o la carga del electrón, y lo que se persigue con ellos es el cálculo de la energía de una molécula, la medida de un ángulo de enlace, el resultado de un momento dipolar o las causas de una reacción a la luz de los postulados mecano-cuánticos. Según los reduccionistas, éste sería un caso bastante evidente de reducción de lo que antaño se consideraba era 'químico' a lo que hoy aceptamos que es 'físico'. Sin embargo, algo insatisfactorio infecta también a esta tesis. Se trata del carácter meramente aproximativo de la aplicación de la ecuación de Schrödinger, dado que incluso en un sistema tan simple como el átomo de helio nos sitúa ante el *many-body problem*, cuyas soluciones son sólo aproximadas.<sup>8</sup> Y todavía está por ver si las soluciones aproximadas se pueden adecuar conceptualmente a un marco reduccionista sin pérdida de contenido en sus tesis. La cuestión, por tanto, parece necesitada de un análisis crítico más pormenorizado.

Una tentativa viable a primera vista es la de utilizar aproximaciones en la química cuántica computacional que impliquen la expansión de funciones de onda a modo de series infinitas de términos, a semejanza del análisis de Fourier y su representación de una función compleja cual si fuere una serie infinita de términos separados. De este modo podríamos, al menos virtualmente, modelar una función compleja para cualquier grado de precisión siempre y cuando estuviéramos prestos a introducir una cantidad cada vez mayor de términos correctores en la expansión de la serie. Así pues, al añadir mayor flexibilidad a la función de onda se obtendrían mejores aproximaciones a los datos que pretendiéramos calcular mediante observación experimental.

Pero aquí también nos encontramos con obstáculos de difícil solución. Aunque un cálculo funcionara correctamente en un determinado *test* y se pudiera adoptar en situaciones experimentales

---

<sup>8</sup> La ecuación de Schrödinger ofrece una solución exacta sólo en el caso del átomo de hidrógeno.

nuevas, el método calibrado *ab initio* siempre podría ser objeto de una crítica similar a la que hemos dirigido contra los cálculos semiempíricos, a saber: que ambos procedimientos implican la importación de datos desde el nivel de los hechos de la disciplina a reducir (química) hasta el nivel de los hechos de la disciplina supuestamente reductora (física). De ahí que esta tentativa para calcular 'hechos' químicos a partir de postulados se enfrente todavía a una dificultad insoslayable por el momento en el contexto de una concepción reduccionista cuantitativa y computacional.

Ni que decir tiene que el dominio de interés de la química es bastante más amplio que aquel que se limita a una propiedad —un momento dipolar, un ángulo de enlace, etc.—, pero bien es cierto también que la satisfacción de una tesis reduccionista como las aquí mencionadas requiere una definición, o al menos una caracterización, más refinada de lo que entendemos por reducción epistemológica. Las dificultades esbozadas, por consiguiente, no hacen sino subrayar la debilidad de la concepción cuantitativa y su excesiva confianza en la hipótesis según la cual los fenómenos químicos se pueden concebir y explicar adecuadamente mediante nociones teóricas de la física únicamente. Confianza no justificada por el momento y menos aún avanzada teóricamente. Tal vez la mejora de los cálculos *ab initio* ofrezca resultados positivos para la reducción aproximada o parcial de determinadas propiedades cuantitativas, aunque la reducción estricta resulta una mera utopía para los proyectos reduccionistas actuales.<sup>9</sup>

### 3. Filosofía y enseñanza de la química

Llegados al punto de relacionar los planteamientos conceptuales del reduccionismo con la cuestión de la enseñanza de la química, el debate aún abierto acerca de si la química es autónoma respecto a la física o de si se reduce en sus aspectos fundamentales a la mecánica

---

<sup>9</sup> Como ya hemos señalado, esta dificultad se debe a que la ecuación de Schrödinger posee solamente una solución exacta, la del átomo de hidrógeno.



cuántica plantea una serie de interrogantes prácticas de interés didáctico: ¿por qué los libros de texto en química parten acríticamente de un tratamiento de la mecánica cuántica, la estructura atómica y las configuraciones electrónicas?, ¿se debe tal vez ello a que los diseños curriculares en química *desatienden* las cuestiones y los debates abiertos que podrían implicar serias reservas para los contenidos que proponen? ¿O simplemente todo es debido a una cuestión de política científica preocupada únicamente en mantener el equilibrio entre docentes de disciplinas que deberían reciclarse, aunque no se sabe bien cómo, en algo que fuera resultado de una interdisciplinaria tan en boga hoy en día?

Lo cierto es que el debate de la reducción está abierto hasta el punto de haber colapsado casi en su totalidad todo intento por reducir la química a la física. Y, sin embargo, parece que muchos científicos y docentes consideran que los resultados de los reduccionistas contribuyen más fructíferamente que los de los autonomistas al avance de la enseñanza de la química. Si bien es verdad que el grado de desarrollo actual hace que el reduccionismo más avanzado se discuta en términos de la química cuántica computacional y sobre la base de la noción de *reducción aproximada*, no es menos cierto que el concepto de *aproximación* es si cabe más oscuro que el de reducción y, por ende, no sirve para justificar satisfactoriamente ningún enfoque reduccionista aplicado a la enseñanza de la química. En suma, es obvio que en este sentido los educadores de la química no aciertan al presentar esta disciplina estrechamente vinculada a, y dependiente de, la mecánica cuántica.

Tomemos el caso de dos conceptos analizados por Scerri (2000): *orbital* y *configuración electrónica*. Sería interesante que los libros de texto continuaran utilizando estos conceptos, pero siempre y cuando se reconociera que no están vinculados directamente con la moderna mecánica cuántica; es decir, debemos ser conscientes de que el concepto de orbital utilizado en la química orgánica e inorgánica continúa siendo deudor de la *antigua* teoría cuántica de Bohr. Por supuesto, sería un error olvidar que el discurso acerca de los orbitales está muy extendido en la química, no sólo en la orgánica y la inorgánica, pero consideramos que la búsqueda de una ontología de los orbitales se ha ceñido en exceso a los patrones de la mecánica

cuántica, y ello ha acarreado una larga serie de diversos y variados problemas (Cf. PSARROS, 2001).

En particular, hace poco más de una década se originó un debate ontológico interesante en el seno de la filosofía de la química en torno a la *existencia* de los orbitales. En 1990, J.F. Ogilvie lo inició con una afirmación tajante: “no hay algo como los orbitales”, y cuyo fin no era otro que atacar a la línea de flotación de los *realistas científicos* y su tesis de la existencia de orbitales, en concreto la defendida por Linus Pauling. Según Ogilvie, la no existencia de orbitales queda demostrada gracias a las diversas formulaciones de la mecánica cuántica, especialmente la mecánica matricial de Heisenberg y la mecánica ondulatoria de Schrödinger, en su nivel más elemental, pues la noción de orbital surge sólo en una de dichas interpretaciones, concretamente en la de Schrödinger. Por lo tanto, no parece correcto afirmar que *orbital* sea una entidad fundamental.

Si bien Pauling (1992) respondió a Ogilvie, aunque con argumentos *ad hominem* —acusaba a Ogilvie de no entender bien la mecánica cuántica—, la controversia finalizó y tan sólo dejó abierto un debate en torno a dos ejes: por un lado, respecto a cómo enseñar la química y, por otro, acerca de si hay que dar más importancia a la mecánica cuántica que a los hechos de carácter químico en dicha enseñanza (Scerri 2000: 414).

Pues bien, la tesis que aquí defendemos considera que la inviabilidad del proyecto reductivista es motivo suficiente para continuar manejando la noción de orbital en la enseñanza de la química, abandonando con ello los errores cometidos por los químicos en lo que hasta la fecha ha sido un posicionamiento *deferente* para con la mecánica cuántica. Con ello tan sólo pretendemos concebir una manera en la que el químico se pueda sentir ‘conceptualmente’ liberado para utilizar conceptos como el de orbital, a pesar de que la mecánica cuántica sea reticente ante su existencia. Por ello también consideramos oportuno realizar un viraje didáctico de peso de modo que los *orbitales químicos*<sup>10</sup> ya no se

---

<sup>10</sup> Es Scerri (2000) quien propone esta expresión para los orbitales que los químicos manejan.

identifiquen directamente con los orbitales físicos. Es decir, se podría continuar usando el paradigma tan productivo de los orbitales y las configuraciones electrónicas, siempre y cuando se explicitara que se trata de un paradigma distintivamente químico, no un paradigma dependiente de la mecánica cuántica. Pues sólo la independencia permite asignar un estatus de *realidad* a los orbitales químicos.

Las nociones de orbital físico y de orbital químico están íntimamente relacionados, tal y como lo muestra la historia de los conceptos de *órbita* y de *orbital*. En la actualidad se sostiene que la noción de *orbital atómico* equivale al término teórico “órbita” que entre 1900 y 1925 manejaban los físicos teóricos y que se suponía tenía un referente. Pero tras el surgimiento de la mecánica cuántica en 1926, la investigación llegó a la conclusión de que el término “órbita” no tenía ningún referente real en el mundo. En este punto, el establecimiento de una interpretación probabilista del movimiento electrónico condujo a adoptar el nuevo término de “orbital”. Sin embargo, y a pesar de los avances en física, los químicos utilizaron la noción probabilista de movimiento del electrón en la forma de orbital al tiempo que continuaban apelando—desde una perspectiva ontológica— al término antiguo “órbita”, entendido como algo que posee referencia.

Históricamente, el descubrimiento del electrón en 1897 supuso un gran avance en los intentos por comprender el sistema periódico según sus propiedades microscópicas, es decir, según las configuraciones electrónicas de los átomos de los elementos de la tabla periódica. Cuando en 1897 Thomson anunció el descubrimiento del átomo, predijo que esta partícula proporcionaría la clave para comprender y explicar la periodicidad química. Para ello fundamentó su análisis en dos postulados: (i) cada átomo ha de poseer un conjunto de configuraciones electrónicas y, (ii) los átomos de elementos sucesivos difieren por la suma de un electrón.

Sin embargo, los problemas de inestabilidad mecánica hicieron que primero el modelo de Thomson y, posteriormente, el de Rutherford, fueran descartados hasta que en 1913 Niels Bohr postuló la cuantización del momento angular del electrón en el átomo de hidrógeno en su deseo de explicar la periodicidad química. Bohr obtuvo un conjunto de configuraciones que se correlacionaban bien

con las valencias de los átomos, pues cada valencia coincidía con la cantidad de los electrones externos. De este modo, las semejanzas químicas de los elementos de un mismo grupo se podían explicar como resultado de compartir el mismo número de electrones externos, cuyas configuraciones se podían constituir sistemáticamente por medio del principio del *Aufbau* ideado por Bohr; es decir, mediante el aumento progresivo de la carga nuclear en una unidad añadiendo un electrón a cada átomo del elemento previo.

Tras nuevas comprobaciones por parte de Langmuir, Bury y otros, Bohr retomó la cuestión de la periodicidad química en 1923 y proporcionó un enfoque basado en dos números cuánticos, uno de ellos el número cuántico *azimutal* descubierto por Sommerfeld para cada electrón. Este nuevo esquema basado en los dos números cuánticos permitió enfocar más detalladamente los ordenamientos electrónicos:

S (azufre)  $\Rightarrow$  configuración, según Bohr: 2, 4, 4, 6. Como se observa, la valencia 6 se mantiene, tal y como dictan los experimentos químicos del S. Pero también puede tener valencias 2 y 4, dependiendo ello del compuesto en el que se integre. Esta anomalía obligó a incorporar un tercer número cuántico para tratar de entender la periodicidad con mayor exactitud.

En 1924, Stoner construyó tablas de configuraciones electrónicas basadas en el número cuántico *interno*, junto a los dos anteriores:

S (azufre)  $\Rightarrow$  configuración, según Stoner: 2, 2, 2, 4, 2, 2, 2. Los tres últimos números representan la configuración electrónica externa. Las valencias 2, 4 ó 6 se podían acomodar fácilmente en esta nueva versión.

El nuevo problema con el que se enfrentaron los científicos, si embargo, era el denominado *problema del cierre* de las capas de electrones. Lo importante aquí consistía en tratar de comprender las series de números enteros que comenzaban por 2, 8, 18 y 32

—cantidades que caracterizan la cantidad total de electrones que se pueden acomodar en capas electrónicas sucesivas en torno al núcleo del átomo—. La solución la propuso W. Pauli al postular un cuarto número cuántico, el *de espín*. Estipuló además el *Principio de Exclusión*, según el cual dos electrones no pueden compartir el mismo conjunto de cuatro números cuánticos. Esto permitió predecir lo siguiente:

( $n = 1$ ) para el primer nivel o primera capa, el máximo de electrones es 2, que compartirían los tres primeros números cuánticos y diferirían en el cuarto.

( $n = 2$ ) hay dos valores posibles para el segundo número cuántico (0 y 1). Cuando éste es 0, el tercero es también 0, pero si el segundo es 1, el tercero puede ser  $-1$ , 0 ó  $+1$ . Tomado el nivel  $n = 2$  en su totalidad, se predicen 8 electrones, lo que se adecua a la evidencia experimental.

( $n = 3$ ) Consideraciones análogas. Se obtienen 18 electrones.

( $n = 4$ ) Consideraciones análogas. Se obtienen 32 electrones.

La entrada en escena de la mecánica cuántica de Heisenberg y Schrödinger trajo consigo variaciones sustanciales en la teoría cuántica (antigua) de Bohr o Pauli, pero apenas afectó a los modelos de la tabla periódica de los elementos. Ello se debió a que la ecuación de Schrödinger, por ejemplo, no se podía, ni se puede, resolver con exactitud a excepción del caso del átomo de hidrógeno. Como consecuencia de ello, resultaba patente que no es posible derivar con estrictez a partir únicamente de postulados las configuraciones electrónicas del resto de los átomos. A lo sumo cabría proponer y desarrollar *aproximaciones*, posteriores a los hechos, que pudieran dar cuenta de las configuraciones observadas espectroscópicamente (Scerri 1994).

Ahora bien, tampoco el orden que esta concepción microscópica que utiliza configuraciones electrónicas establece en la tabla periódica es perfecto. Hay aproximadamente 20 elementos con configuraciones electrónicas anómalas; esto es, elementos que exhiben agrupamientos inesperados de electrones y que difieren de otros elementos de un mismo grupo. Un caso de ello es el del trío 'níquel, paladio y platino', elementos que, aun estando en la misma columna de la tabla periódica, exhiben configuraciones electrónicas externas diferentes. Por otro lado, hay elementos que no adoptan

las configuraciones que se esperaría sobre la base de la ordenación de la energía de los diversos orbitales atómicos. Así sucede, por ejemplo, con el escandio. Según cálculos basados en datos espectroscópicos, el orbital 3d posee menor energía que el orbital 4s y, no obstante, el orden de relleno de los orbitales del escandio ocupa antes el orbital 4s que el 3d. Pues bien, estos y otros efectos dificultan encontrar patrones racionales que expliquen la tabla periódica.

El modelo deductivo a partir de la mecánica cuántica es un modelo semejante al ND en cuanto procura una deducción a partir de la ecuación (ley) de Schrödinger. No obstante, la deducción pretendida no da lugar a predicciones *estrictas* de la configuración electrónica de los átomos. Esto se debe a que los cálculos dependen de la postulación de un conjunto base concreto —el conjunto de orbitales— que, sin embargo, sólo se puede obtener mediante observaciones espectroscópicas, es decir, experimentales.

Ahora bien, y dejando a un lado las pretensiones de la reducción completa, lo que se puede hacer es utilizar los cálculos de la mecánica cuántica para examinar cuál de varias configuraciones electrónicas alternativas posibles podría ser la que tuviera la menor energía. Veamos el caso del escandio:

Sc (escandio)  $\Rightarrow$  hay tres configuraciones candidatas para ser su *estado fundamental* o estado de menor energía: (1)  $[\text{Ar}]4s^23d^1$ , (2)  $[\text{Ar}]3d^3$  y (3)  $[\text{Ar}]4s^13d^2$ . Cálculos llevados a cabo por el método Hartree-Fock de aproximación han predicho que la configuración (1) es la que exhibe menor energía, lo cual se acomoda bien a las observaciones experimentales.

Por lo tanto, las configuraciones electrónicas y el concepto relacionado de orbital no se pueden reducir estrictamente a la mecánica cuántica en los casos de átomos con más de un electrón, pues *stricto sensu* la mecánica cuántica en su forma más general prohíbe la referencia a 'electrones en orbitales', dado que el operador que representa al número cuántico de cualquier electrón particular

—Vg., el momento angular de un electrón individual— no conmuta con el hamiltoniano de un átomo con más de un electrón. Esto significa que las *eigenfunciones* correspondientes al operador 'momento angular' de electrones sencillos no son cantidades definidas estrictamente. La asignación de números cuánticos individuales a electrones individuales no resulta válida como resultado de esta relación matemática. Como se observa, por tanto, la mecánica cuántica imposibilita la visualización de los orbitales atómicos y prohíbe definir éstos matemáticamente. Precisamente es en este sentido en el que la mecánica cuántica afirma que los orbitales y las configuraciones no existen.

#### 4. Conclusiones

Los químicos por lo general han considerado los orbitales como términos con referente. En la actualidad continúan pensando del mismo modo en la medida en que les es apropiado para la práctica explicativa y para la interpretación de los fenómenos químicos.

Sin embargo, el error tanto de este modo de concebir los fenómenos como de las pautas didácticas en química no ha consistido en usar excesivamente el concepto de orbital, sino más bien en ser excesivamente deferente ante la mecánica cuántica. Esta tendencia errónea ha dado lugar a la ilusión de pensar que en la mecánica cuántica hemos encontrado un fundamento para el orbital químico, cuando lo que ocurre es que este concepto se ha heredado de la teoría cuántica antigua. Y es que la autonomía de la química respecto de la mecánica cuántica viene dada por la existencia de un marco explicativo propio de la química, un marco fructífero y útil. En este sentido, los químicos se aferran a una interpretación realista respecto al orbital, a pesar de las tesis de los físicos y su reluctancia ontológica. Las teorías del químico se reducen a las del físico teórico; los químicos operan en un nivel separado, aunque vinculado, que puede requerir una versión más antigua y menos fundamental de una teoría física.

## 5. Bibliografía

ALONSO, A.; AYESTARÁN, I.; URSUA, N. (eds.) (1996) *Para comprender ... Ciencia, Tecnología, Sociedad*, Estella, Navarra, VD.

ATKINS, P.W. (1989) *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford, Oxford University Press.

BACHELARD, G. (1932) *Le pluralisme cohérent de la chimie moderne*, París, 1973 (2ª ed.).

BOGAARD, P.A. (1978) The Limitations of Physics as a Chemical Reducing Agent, *PSA*, Vol.2: 345-356.

BUNGE, M. (1979) Philosophical Inputs and Outputs of Technology. En: G. Bugliarello, D.B. Doner (eds.) *The History of Philosophy and Technology*, Urbana, University of Illinois Press: 262-281.

BUNGE, M. (1982) Is chemistry a branch of physics?, *Journal for the General Philosophy of Science* 13: 209-223.

CALDIN, E.F. (1960) Theories and the Development of Chemistry, *The British Journal for the Philosophy of Science* 10: 209-222.

CAUSEY, R.L. (1977) *Unity of Science*, Dordrecht, Reidel.

ECHEVERRÍA, J. (2003) *La revolución tecnocientífica*, Madrid, FCE de España.

FRIEDMAN, M. (2001) *A Parting of the Ways: Carnap, Cassirer, and Heidegger*, Chicago, Open Court.

GONZÁLEZ, M.I., LÓPEZ CERESO, J.A. y LUJÁN, J.L. (1996) *Ciencia, tecnología y sociedad: una introducción al estudio social de la ciencia y la tecnología*, Madrid, Tecnos.

HEMPEL, C. (1965) *La explicación científica*, Buenos Aires, Paidós, 1988.



HEMPEL, C.; OPPENHEIM, P. (1948) Studies in the Logic of Explanation, *Philosophy of Science*, Volume 15: 135-175.

KUHN, T. (1962) *The Structure of Scientific Revolutions*, Chicago, Chicago University Press.

MITCHAM, C. (1989) *¿Qué es la filosofía de la tecnología?* Barcelona, Anthropos.

MULCKHUYSE, J.J. (1961) Molecules and Models. En: H. Freudenthal (ed.), *The Concept and Role of the Model in Mathematics and Natural and Social Sciences*, Dordrecht, Reidel: 133-151.

NAGEL, E. (1961) *The Structure of Science*, New York, Harcourt Brace and World.

OGILVIE, J.F. (1990) The Nature of the Chemical Bond-1990, *Journal of Chemical Education* 67: 280-289.

PAULING, L. (1992) The Nature of the Chemical Bond-1992, *Journal of Chemical Education* 69: 519-521.

PETER, J.; PSARROS, N. (eds.) (1998) *The Autonomy of Chemistry*, 3<sup>rd</sup> Erlenmeyer-Colloquy for the Philosophy of Chemistry.

POLANYI, M. (1958) *Personal Knowledge*, Chicago University of Chicago Press.

PRIMAS, H. (1981) *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*, Berlín, Springer, 1983.

PSARROS, N. (2001) Things, stuffs, and coincidence. A non-ontological point of view, *HYLE-International Journal for Philosophy of Chemistry* 7/1: 23-29.

RAMBERG, P.J. (2000) Pragmatism, Belief, and Reduction. Stereoformulas and Atomic Models in Early Stereochemistry, *HYLE-International Journal for Philosophy of Chemistry* 6/1: 35-61.

SARKAR, S. (1992) Models of Reduction and Categories of Reductionism, *Synthese* 91: 167-194.

SCERRI, E. (1994) Has Chemistry Been at Least Approximately Reduced to Quantum Mechanics?. En: D. Hull, M. Forbes, and R. Burian, (eds.), *PSA 1994 Vol. I*, East Lansing, Mi.: 160-170.

SCERRI, E.R. (2000) Have Orbitals Really Been Observed?, *Journal of Chemical Education* 77/XX: 1492-1494.

SCHARFF, R.C.; DUSEK, V. (2003) *The Philosophy of Technology. The Technological Condition*, Oxford, Blackwell.

VAN BRAKEL, J. (2000) *Philosophy of Chemistry*, Lovaina, Leuven University Press.