

Reduccionismo y extensividad en Química

Francisco Rivadulla

Resumen: A diferencia de lo que sucede en otras disciplinas, como la Física o la Biología, un enfoque filosófico de los aspectos más fundamentales de la Química está prácticamente ausente del debate en la comunidad, excepto en el reducido círculo de especialistas en filosofía de la Química. Sin embargo, como discuto en este breve artículo, debates como la conexión entre reduccionismo y extensividad de una disciplina y su relevancia científica, o la relación de dependencia y subsidiariedad de la Química con la Física y la Biología, merecen una mayor atención de nuestra comunidad y deben ser introducidos a los estudiantes de Química.

Palabras clave: Filosofía de la Química, pedagogía Química, reduccionismo, extensividad, propiedades emergentes.

Abstract: Unlike Physics or Biology, a philosophical approach to the most fundamental aspects of Chemistry is practically absent from the debate in the community, except in the small circle of specialists in the philosophy of Chemistry. However, as I argue in this short paper, debates such as the connection between reductionism and extensivity of a discipline and its scientific relevance, or the relationship of dependency and subsidiarity of Chemistry with Physics and Biology, deserve greater attention from our community and should be introduced to students of Chemistry.

Keywords: Philosophy of Chemistry, chemical pedagogy, reductionism, extensivity, emergent properties.

LA ESENCIA DE LA QUÍMICA EN UNA TABLA: REDUCCIONISMO Y LOS ELEMENTOS PROPIOS DE UNA DISCIPLINA

En palabras del químico y filósofo Eric Scerri, la Tabla Periódica de los Elementos Químicos (TPEQ) es:

[...] uno de los íconos más importantes de la ciencia: un documento único que contiene la esencia de la Química de una manera elegante. De hecho, no hay nada igual en biología o física ni en ninguna otra rama de la ciencia.^[1]

Los químicos reconocemos la importancia científica de la TPEQ como manifestación de la existencia de un patrón recurrente de las propiedades físicas y químicas de los elementos, la llamada Ley Periódica. Sin embargo, no es fácil encontrar un argumento rápido y convincente para justificar cómo la ley periódica determina las estrategias complejas de la síntesis orgánica moderna, por ejemplo, o cómo influye en la intuición necesaria para

dilucidar el mecanismo de una reacción, con todos sus pasos intermedios y limitantes, a partir de un estudio cinético.

En realidad, tengo la impresión de que muchos químicos no sienten que su investigación cotidiana esté tan influenciada por la TPEQ, en el sentido de que no recurren a ella cuando están atrapados en medio de un problema aparentemente irresoluble.^[2] Entonces, ¿en qué sentido la TPEQ contiene la “esencia de la Química”?

En lo que todos estaremos de acuerdo es en que las leyes fundamentales de nuestra disciplina son construcciones para describir las relaciones entre átomos, a través de la formulación de nuevos conceptos como el enlace químico, la hibridación, la resonancia, etc. Estas leyes sintetizan nuestra comprensión del siguiente nivel de complejidad: las moléculas. Las estructuras supramoleculares (*i.e.* biomoléculas complejas autoensambladas) comprenden un nivel de complejidad todavía mayor, y así sucesivamente. La mayoría de la Química se realiza en el segundo (molecular) o tercer (supramolecular) nivel.

Cada vez que nos movemos a un nivel superior de complejidad, surgen nuevas propiedades (emergentes) y se deben construir nuevas herramientas conceptuales para abordarlas.^[3,4] los enlaces químicos describen la interacción entre pares de átomos (nivel 1-2); complejos funcionales de la densidad electrónica modelan las energías de correlación y predicen las propiedades fisicoquímicas de las moléculas (nivel 2) y las reacciones químicas simples (nivel 2-3); etc.

Por tanto, las propiedades emergentes conducen a la formulación de nuevas leyes que, sin embargo, no son autónomas, sino que dependen de las leyes del nivel inferior. En el caso de las leyes químicas estas dependen



F. Rivadulla

Departamento de Química-Física
y Centro de Investigación en Química Biológica
e Materiais Moleculares (CIQUS)
Universidade de Santiago de Compostela
15782 Santiago de Compostela, España
C-e: f.rivadulla@usc.es

Recibido: 27/10/2020. Aceptado: 26/01/2021.

en última instancia de las propiedades de los átomos individuales, *i.e.* su electronegatividad, configuración electrónica, etc., todas ellas reflejo de la Ley periódica, sintetizada en la TPEQ.^[5] Por lo tanto, los átomos son los *elementos propios* de la Química y establecen el nivel sobre el cual esta disciplina formula sus leyes más generales.

Por eso decimos que el TPEQ contiene la “esencia de la Química”.

¿POR QUÉ DEBERÍA IMPORTARNOS EL REDUCCIONISMO?^[6]

Creo que todos los químicos somos reduccionistas, al menos desde una perspectiva conceptual (ontológica). Sin embargo, muchos no tienen este sentimiento porque *el reduccionismo no implica constructivismo*: la Química se puede considerar como un nivel superior de complejidad de los modelos físicos que tratan sistemas de partículas interaccionantes (*many body physics*),^[9] pero la construcción de la Química a partir de estos modelos y teorías es imposible, porque incluso los procesos químicos más simples tienen *demasiados cuerpos* (*too many bodies!*). En este momento de nuestro desarrollo científico, no sabemos cómo reducir muchas leyes y conceptos químicos (incluso algunos de los más simples) a leyes físicas más fundamentales, pero aceptamos que es conceptualmente posible.

Para ilustrar este razonamiento, citaré la famosa charla de Richard Feynman en una reunión de la American Physical Society en 1959, “There is plenty of room at the bottom”.^[7] Para incitar a los científicos presentes a iniciar un nuevo campo de la física mediante la manipulación de átomos individuales (lo que ahora conocemos como nanociencia y nanotecnología), Feynman dijo: “No discutiré cómo lo vamos a hacer, sino solo lo que es posible en principio, en otras palabras, lo que es posible de acuerdo con las leyes de la Física”. ¿Cuán imposible parecería en 1959 manipular átomos individuales para fabricar dispositivos cuánticos? Bastante, supongo. Sin embargo, ¿viola alguna ley de la física? Si la respuesta es no, entonces el mensaje de Feynman es “adelante, porque es factible”.

¿Pero estaríamos dispuestos a aceptar con el mismo entusiasmo una propuesta similar sobre la base de que no viola ninguna “ley de la Química”? Probablemente no, porque aceptamos que las leyes químicas no son tan fundamentales como las leyes de la Física a las que Feynman se refería,^[8] en el sentido de que se pueden incorporar excepciones al edificio sin tener que reconstruirlo desde la base. Al aceptar este tipo de proposiciones, nos reconocemos como reduccionistas conceptuales.

Es muy importante aclarar que “más fundamental” no debe tomarse nunca como sinónimo de “más importante”, sino solo de “menos dependiente” de principios científicos más fundamentales (enraizados en un nivel de complejidad inferior).^[9] Este tipo de debates intelectuales definen la identidad y la existencia de algunas disciplinas científicas como independientes de otras y, como

si eso no fuera lo suficientemente importante, influyen en el desarrollo de su agenda de investigación y en su financiación. El famoso artículo de Phillip Anderson sobre fenómenos emergentes en física “More is different”.^[4] Originalmente publicado en 1972, tuvo una gran influencia en el desarrollo posterior de la física de la materia condensada, y todavía la tiene hoy, décadas después.

El debate del “reduccionismo” versus “emergentismo” (o disciplinas intensivas/extensivas en la clasificación de Weisskopf)^[10] sigue vivo en todas las disciplinas y está muy relacionado con la distribución de fondos para investigación, debido a la confusión, o malentendido deliberado, entre “más fundamental” y “más importante”.

Esa visión radical, errónea, del reduccionismo lleva a algunos científicos y profesores a despreciar algunas disciplinas al considerarlas solo como versiones más elaboradas de las disciplinas verdaderamente importantes y dignas de estudio. En mi opinión, un enfoque reduccionista bien entendido, basado en la premisa de que “más fundamental” no significa “más importante”, revela la conexión entre diferentes disciplinas científicas sin negar su relevancia y oportunidad independientes.

En conclusión, aunque los investigadores de diferentes subdisciplinas de la Química deberían continuar buscando leyes generales de comportamiento que pertenezcan al nivel de complejidad de su área, deben ser conscientes también de que, en última instancia, esas leyes dependen de la existencia de una ley periódica de los átomos.

CUESTIÓN DE VIDA Y TIEMPO

Un enfoque filosófico de las construcciones conceptuales de la Química no es común en la educación de nuestra disciplina, o al menos mucho menos común que en física o biología.^[12] La profesora Anna Estany^[11] ha sugerido que el olvido filosófico de la Química está ligado a su dependencia de postulados más fundamentales, en este caso de la mecánica cuántica (esta sí, objeto de atención filosófica), así como a su carácter de ciencia extensiva, menos interesantes para la filosofía que las ciencias intensivas o teóricas.

En mi opinión, una perspectiva filosófica de la Química es menos evidente para los no especialistas porque los elementos y las leyes propias de la Química no involucran ninguno de los temas centrales y tradicionales de la filosofía.

El origen de la vida, la residencia física de la conciencia o el carácter, son temas centrales en filosofía y objeto de estudio científico en diversas áreas de la biología.^[13,14]

Del mismo modo, el viejo debate filosófico sobre la existencia independiente del tiempo o el espacio como conceptos empíricos más allá de la intuición subjetiva, fue aclarado por la teoría de la relatividad y es fundamental en muchas áreas de investigación en física moderna.

La ausencia de los temas de la Química en la tradición filosófica resultó en una falta de interés por parte de

los profesores e investigadores, y mantiene debates sobre temas como el reduccionismo o la extensividad, fuera de las aulas donde se enseña nuestra disciplina.

¿CUÁNTO SINGULARIZA LA TPEQ LA QUÍMICA DE OTRAS DISCIPLINAS?

Para terminar, me gustaría referirme a la última parte de la frase de Eric Scerri que dio lugar a esta reflexión: “De hecho, no hay nada igual en biología o física ni en ninguna otra rama de la ciencia.”

La comprensión de un mundo enormemente complejo requiere la identificación de patrones de comportamiento general. Esto es lo que son las leyes naturales: expresiones breves y asequibles que relacionan (cualitativa y cuantitativamente) los parámetros relevantes de sistemas complejos para comprender y predecir su evolución. Esta estrategia es seguida invariablemente por diferentes disciplinas, y es la forma en que las ciencias naturales se desarrollaron y evolucionaron históricamente para tratar problemas muy complejos.

Pensemos por un momento en el desarrollo de la Biología: la inmensa biodiversidad del planeta impuso la necesidad de desarrollar sistemas para clasificar los organismos vivos en dominios, reinos, órdenes, etc. Linneo culminó su esquema de clasificación taxonómica en el siglo XVIII, que luego se expandió y modificó para incorporar relaciones evolutivas entre organismos, que condujeron al nacimiento de ramas completamente nuevas de la Biología, algunas de ellas en un nivel inferior de complejidad (genética molecular con sus leyes formuladas sobre la base de nucleótidos bien identificados que se combinan de acuerdo con un conjunto de reglas) y otras en un nivel superior (como la ecología, que trata la relación entre diferentes organismos y su entorno). Muchos otros niveles de complejidad están en medio, y una reflexión cuidadosa nos revelaría sus *elementos propios*.

En el nivel más básico (en nuestra comprensión actual de la ciencia) se encuentra el modelo estándar de Física de Partículas:^[9] unos pocos pares de fermiones y bosones agrupados en generaciones según su estabilidad y masa, para formular leyes de combinación que dan lugar a toda la materia en el universo.

Estos son dos ejemplos que muestran cómo las disciplinas científicas alcanzan un punto de madurez donde identifican sus *elementos propios* y proponen sistemas de clasificación, desarrollan herramientas y finalmente formulan leyes generales de comportamiento.

En este sentido, las innumerables combinaciones entre elementos químicos conocidas a mediados del siglo XIX también exigían algún tipo de clasificación para profundizar en su conocimiento y explotar su utilidad práctica. Desde este punto de vista, la evolución de la Química es muy similar a la de otras ciencias naturales, y la TPEQ es solo la consecuencia natural, o la culminación, de esta evolución.

Por ello, no comparto la visión de la TPEQ como una construcción que distingue a la Química de otras disciplinas naturales, si no que la TPEQ conecta la evolución de la Química con la de las otras dos grandes disciplinas científicas naturales, la Física y la Biología.

CONCLUSIONES

Como científicos, deberíamos estar preparados para articular un discurso coherente sobre los diferentes valores de la ciencia, sobre las diversas formas de comprender la importancia de una disciplina particular y su posición en el panorama científico general. Como químicos, no podemos ser ajenos a los debates que definen el papel de la Química como una disciplina científica independiente, y temas como los expuestos en este artículo deberían ser objeto de discusión más frecuente en nuestra comunidad.

Cuestiones como la extensividad de la Química definirán su relación de independencia conceptual y utilitaria de la Física y la Biología.^[15] Los estudiantes deberían ser conscientes de cómo estos conceptos influyeron, y aún lo hacen, en el origen y desarrollo de nuestra disciplina.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco la discusión con el Dr. Manuel Bermejo, Dra. Verónica Salgueiriño, Dr. Jorge Carrazana, Dr. Joaquín Fernández-Rossier, Dra. Flor Rodríguez, Dr. Casto Rivadulla, Verónica Paz Vidal y Carlos López-Bueno.

REFERENCIAS

- [1] Eric R. Scerri. *The Periodic Table. Its Story and Its Significance*. Oxford Univ. Press, 2007.
- [2] Una excepción a esta afirmación la constituyen, tal vez, los espectroscopistas, ya que el patrón de la TPEQ sigue la configuración electrónica y el momento angular total para describir los átomos, que a su vez determinan las reglas de selección espectroscópicas.
- [3] Una reacción Química del tipo $A+B \rightarrow C$ es uno de los ejemplos más simples para ilustrar cómo las propiedades del producto son distintas de las de la suma de las partes que lo componen, i.e. propiedades emergentes. El emergentismo tiene una larga tradición en Química y Biología desde el siglo XIX. Ver, por ejemplo: <https://plato.stanford.edu/entries/properties-emergent/>
- [4] Esto fue sintetizado de forma brillante por Phillip Anderson en su famoso artículo “More is Different”. P. W. Anderson, *Science* **1972** 177, 393.
- [5] Por supuesto, la Ley Periódica está determinada por las leyes de la física nuclear, pero ese es un nivel de complejidad inferior, que no es objeto de estudio químico.
- [6] No es mi intención entrar en una discusión profunda sobre la validez o no de los argumentos que apoyan el reduccionismo epistemológico en química. Para una discusión más completa

- sugiero al lector la lectura de Eric R. Scerri and Lee McIntyre, The Case for Philosophy of Chemistry, *Synthese* **1997** 111 213-232; Eric R. Scerri, "Has Chemistry Been at Least Approximately Reduced to Quantum Mechanics?". PSA: Proceedings of the Biennial Meeting of the Philosophy of Science Association, Volume 1994 (1994), 160-170.
- [7] Richard Feynman, *The Pleasure of Finding Things Out Helix Books*, Perseus Publishing, Cambridge, Massachusetts, 1999.
- [8] Richard Feynman, *The character of a physical law*. The MIT Press, 2017.
- [9] Steven Weinberg, *Dreams of a Final Theory. The scientist's search for the ultimate laws of nature*. Vintage Books, Random House Inc. NY, 1992.
- [10] Siendo director general del CERN en 1965, Victor Weisskopf escribió un artículo en el que defendía el valor de la inversión pública en instalaciones científicas dedicadas a la investigación básica ("En defensa de la física de altas energías", *Cern Courier* **1965** 5, 54). En este ensayo, el profesor Weisskopf introdujo los términos de las ciencias "intensivas", para referirse a aquellas disciplinas que persiguen desentrañar las leyes fundamentales de la naturaleza, y "extensivas", aquellas cuya investigación intenta explicar los fenómenos en términos de leyes fundamentales conocidas. Según esta clasificación, la Química sería una disciplina científica extensiva.
- [11] Anna Estany, ¿Es posible una filosofía de la química?. *Investigación y Ciencia (Temas)* **2020** 100, 66.
- [12] Para una justificación de la relevancia de la filosofía Química, ver Eric R. Scerri *Collected Papers on Philosophy of Chemistry*, Imperial College Press, 2008.
- [13] D. J. Nicholson and R. Gawne, "Neither logical empiricism nor vitalism, but organicism: what the philosophy of biology was". *History and Philosophy of the Life Sciences* **2015** 37, 345.
- [14] Ana Soto, Carlos Sonnenschein, "Reductionism, Organicism, and Causality in the Biomedical Sciences: A Critique". *Perspectives in Biology and Medicine* **2018** 61(4): 489-502.
- [15] Para ilustrar lo que llamo una visión utilitarista de la química para determinadas áreas de la biología o la biomedicina, reproduzco aquí la motivación de algunos de los premios Nobel de Química otorgados desde 2009: "por la evolución dirigida de enzimas"; "por la investigación de péptidos y anticuerpos en fagos"; "por los estudios mecanicistas de reparación del ADN"; "por los estudios de receptores acoplados a proteína G"; "por los estudios de la estructura y función del ribosoma". Esto fue revisado en un artículo reciente de Jeffrey I. Seeman y Guillermo Restrepo, "The Mutation of the "Nobel Prize in Chemistry" into the "Nobel Prize in Chemistry or Life Sciences": Several Decades of Transparent and Opaque Evidence of Change within the Nobel Prize Program", *Angew. Chem. Ed. Int.* 59,2942 (2020); ver también Philip Ball "¿El premio Nobel de química se ha convertido realmente en el premio de biología?", *Chemistry World*, enero de 2020.

Connecting
the best minds

 **Chemistry
Europe**
European Chemical
Societies Publishing