

El enlace químico y la filosofía de Xavier Zubiri

Gabriela García Zerecero
Departamento de Humanidades.
Universidad Panamericana, México
gagarcia@up.edu.mx

Resumen:

El enlace es un elemento crucial para entender cómo se comporta la materia y juega un papel importante en las explicaciones, predicciones e intervenciones químicas; sin embargo, es un concepto difícil de definir con precisión. Si tenemos en cuenta, además, el desarrollo de la mecánica cuántica, la tarea de determinar su naturaleza parece exigir una perspectiva filosófica que sea compatible con los nuevos modos de realidad revelados por la ciencia moderna. En este trabajo queremos mostrar que la filosofía de Xavier Zubiri resulta útil en para este cometido. En la primera parte hacemos una breve aproximación a la evolución del concepto de enlace químico desde la perspectiva científica. En la segunda exponemos los algunos elementos de la filosofía de Zubiri y en la tercera tratamos de mostrar su aplicación en el estudio de la naturaleza del enlace químico.

Palabras clave: enlace químico, realidad, dinamismo, Zubiri

The chemical bond and the philosophy of Xavier Zubiri

Abstract:

The chemical bond is a crucial element to understand how matter behaves and plays an important role in explanations, predictions and chemical interventions; however, it is a difficult concept to define precisely. Considering the development of quantum mechanics, the task of determining its nature seems to demand a philosophical perspective that is compatible with the new modes of reality revealed by modern science. In this paper we want to show that Xavier Zubiri's philosophy is useful for this purpose. In the first part, there is a brief approach to the chemical bond concept evolution from a scientific perspective. In the second part some Zubiri's philosophy concepts are presented, and in the third part we try to point out its application to the study of the chemical bond nature.

Keywords: chemical bond, reality, dynamism, Zubiri

La liaison chimique et la philosophie de Xavier Zubiri

Résumé :

La liaison est un élément crucial pour comprendre le comportement de la matière et joue un rôle important dans les explications, les prédictions et les interventions chimiques. cependant, c'est un concept difficile à définir avec précision. Si l'on tient également compte du développement de la mécanique quantique, la tâche de déterminer sa nature semble exiger une perspective philosophique compatible avec les nouveaux modes de réalité révélés par la science moderne. Dans ce travail, nous voulons montrer que la philosophie de Xavier Zubiri est utile à cette fin. Dans la première partie, nous faisons une brève approche de l'évolution du concept de liaison chimique du point de vue scientifique. Dans la seconde nous exposons quelques éléments de la philosophie de Zubiri et dans la troisième nous essayons de montrer son application dans l'étude de la nature de la liaison chimique.

Mots clés : chemical bond, reality, dynamism, Zubiri

A ligação química e a filosofia de Xavier Zubiri

Resumo:

A ligação é um elemento crucial na compreensão de como a matéria se comporta e desempenha um papel importante nas explicações, previsões e intervenções químicas; no entanto, é um conceito difícil de definir com precisão. Se levarmos em conta também o desenvolvimento da mecânica quântica, a tarefa de determinar a sua natureza parece exigir uma perspectiva filosófica compatível com os novos modos de realidade revelados pela ciência moderna. Neste trabalho queremos mostrar que a filosofia de Xavier Zubiri é útil para este propósito. Na primeira parte fazemos uma breve abordagem sobre a evolução do conceito de ligação química do ponto de vista científico. Na segunda expomos alguns elementos da filosofia de Zubiri e na terceira procuramos mostrar a sua aplicação no estudo da natureza da ligação química.

Palavras-chave : ligação química, realidade, dinamismo, Zubiri

1. Introducción

Si hubiera que elegir un único concepto básico sobre el que se construye la Química, optaríamos sin duda, por el de enlace químico, ya que éste permite definir y caracterizar las entidades químicas. El desarrollo del concepto de enlace químico conduce no solo a la comprensión de las moléculas a través de las reglas de Lewis y la creación de pares de electrones, sino también a la definición de reacciones químicas como una reestructuración de uniones entre átomos.¹

El concepto de enlace químico aparece ya en la Antigüedad prácticamente junto a la noción de átomo. Desde el momento en que se admitió la existencia de partículas elementales, fue necesario también imaginar una fuerza capaz de unirlos para asegurar la cohesión de la materia. Sin embargo, hubo que esperar hasta el siglo XIX para la aparición de las primeras teorías físicas sobre el enlace. Es también, a partir de entonces, cuando los químicos comienzan a explicar el comportamiento de las sustancias en términos de fórmulas estructurales. Las reacciones químicas se entienden en términos de ruptura y formación de enlaces de estructuras moleculares, que no son sino un conjunto de átomos unidos entre sí de maneras determinadas. Y, a partir de las vibraciones y rotaciones de los enlaces, pueden explicarse los espectros moleculares.

Recientemente y gracias al uso de métodos experimentales más desarrollados y la aplicación de la física moderna, los principios generales sobre la estructura molecular y la naturaleza del enlace químico, formulados por inducción a partir de un gran conjunto de hechos químicos, se han hecho más precisos e incluso han aportado elementos importantes para el desarrollo de la química estructural.²

¹ Cfr., Julia Contreras García, Alberto Otero de la Rosa, Juan Manuel Recio: “El enlace químico y su supervivencia en la Química Cuántica”, pp. 113-120, *Anales de Química*, n.º. 110 (2), España, (2014): 113.

² Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An*

El enlace es un elemento crucial para entender cómo se comporta la materia y juega un papel importante en las explicaciones, predicciones e intervenciones químicas; sin embargo, es un concepto difícil de definir con precisión. Por ejemplo, existen diferencias fundamentales entre la concepción clásica del enlace químico y la concepción de la mecánica cuántica, así como diferencias entre los diversos modelos de la mecánica cuántica. Y, al profundizar en la bibliografía sobre el tema, aunque se encuentran muchas aproximaciones teóricas, son pocas las caracterizaciones directas sobre el enlace. Lo anterior pone de manifiesto la incertidumbre o tal vez la ambivalencia sobre el estatus del enlace químico.³

2. La evolución del concepto de enlace químico

2.1 El desarrollo de la teoría de valencia. El enlace covalente

El estudio de la estructura de las moléculas fue realizado inicialmente utilizando métodos de naturaleza esencialmente química relacionados con la composición química de las sustancias, la existencia de isómeros, la naturaleza de las reacciones químicas en las que una sustancia toma parte, etc. De la consideración de hechos de este tipo, se llegó a establecer la teoría de valencia y las primeras fórmulas estructurales. La estereoquímica orgánica alcanzó su formulación final con la postulación de la orientación tetraédrica de los cuatro enlaces de valencia del átomo de carbono y con el desarrollo de la estereoquímica de sustancias inorgánicas complejas.⁴

Una vez determinada la relación ponderal de los diversos elementos de una sustancia

Introduction to Modern Structural Chemistry, (U.S.A.: Cornell University Press, edic.; 1960 (1939)): 3.

³ Cfr., Michael Weisberg: "Challenges to the Structural Conception of Chemical Bonding", pp. 932-946, *Philosophy of Science*, n.º. 75, Chicago, (2008): 933.

⁴ Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, (U.S.A.: Cornell University Press, edic.; 1960 (1939)): 4.

química, gracias a la balanza de Lavoisier, surge la cuestión de cómo se unen estos elementos. Cuando se hubo completado el paso de la medición del peso, en el enfoque intelectual inductivo de los químicos aparece la idea de interacción entre los distintos elementos que componen la molécula, la categoría de relación entre los elementos (partes) de un mismo conjunto (todo). En esta categoría de relación interna debemos distinguir entre la noción de fuerza —más o menos intensa— de interacción, y el concepto que nos interesa ahora, el de la valencia química. Esta categoría de relación puede considerarse bajo su aspecto de interacción, de fuerzas interactivas entre los corpúsculos, o bajo su aspecto numérico y geométrico.

A propósito de la intensidad o fuerza de interacción, muy pronto, los químicos hablaron de afinidad química, noción que fue objeto de algunas controversias ya que la valencia es simplemente el número de enlaces que un átomo, en condiciones físico-químicas determinadas, puede establecer con otros elementos. Es B. Frankland quien establece claramente la distinción entre la fuerza de enlace (la afinidad química) y el simple hecho que ese enlace existe, una vez reconocido que los átomos tienen capacidades combinatorias numéricamente definidas. Las valencias son los índices numéricos atribuidos a los diferentes elementos y dan cuenta de las regularidades observadas en los grupos de los elementos en moléculas. Lo importante en la noción de valencia no es tanto que, en la molécula de agua, el hidrógeno esté más fuertemente ligado al átomo de oxígeno de lo que lo está en la molécula de amoníaco, sino que, en el caso de la molécula de agua, el átomo de oxígeno porta dos átomos de hidrógeno mientras que en el amoníaco el átomo de nitrógeno está ligado a tres átomos de hidrógeno.⁵

A partir del s. XIX el enlace de valencia comenzó a representarse con un guion trazado entre los símbolos de dos elementos químicos y pretendía expresar, de una forma concisa, varios hechos químicos, aunque solo tenía una significación cualitativa por lo que se refiere a la

⁵ Cfr., Alexandre Manfredi: *Le caractère holistique des systèmes matériels en chimie moléculaire*, (Roma : Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita ; 2003) : 65.

estructura molecular. La naturaleza del enlace era completamente desconocida. Una vez descubierto el electrón, se realizaron numerosos esfuerzos para construir una teoría electrónica del enlace químico. Esos esfuerzos tuvieron su coronación con el trabajo de G. N. Lewis. En su artículo publicado en 1916 que constituye la base de la teoría moderna de valencia, Lewis estudia no solamente la formación de los iones por la saturación de capas estables de electrones, sino también la formación de un enlace químico que ahora designamos con el nombre de covalente, en el que se comparten dos electrones entre dos átomos.⁶

Con sus trabajos, Lewis puso las bases de la comprensión del enlace que une en una molécula dos átomos idénticos (enlace homopolar o covalente). Para esto, formuló la hipótesis de que la configuración más estable de átomos que componen la molécula se realiza por la constitución de pares de electrones compartidos por los átomos, de tal suerte que para estos electrones no es posible decir que pertenecen a uno u otro de los átomos. Admitió así que los dos electrones, por el hecho de constituir un enlace, forman parte simultáneamente de dos configuraciones atómicas.⁷ Para expresar simbólicamente la idea de la combinación química, Lewis utilizó dos puntos como enlace de la unión entre dos átomos de manera que se puede escribir, por ejemplo, H:H para la molécula de hidrógeno. Lewis destacó, además, la importancia del fenómeno de emparejamiento de electrones no compartidos y compartidos y de la estabilidad del grupo de ocho electrones (compartidos o no compartidos) de los átomos más ligeros.

Las ideas de Lewis fueron desarrolladas posteriormente, entre otros, por I. Langmuir cuyo trabajo es especialmente significativo pues muestra que muchos hechos químicos pueden aclararse y explicarse con la aplicación de esta nueva teoría del enlace químico.⁸

⁶ Cfr., Lewis Gilbert Newton: "The atom and the molecule", pp. 763-785, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 38, n.º. 4, Washington, (1916): 762

⁷ Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, (U.S.A.: Cornell University Press, edic.; 1960 (1939)): 5.

⁸ Cfr., Irving Langmuir: "Types of Valence", pp. 59-67, *Science*, New Series, vol. 54, n.º. 1386, New York, (1921).

Aunque desde el ámbito de la física, la teoría de Lewis ha sido cuestionada, es innegable que ha ejercido una notable influencia en el desarrollo de la química. En 1927, en una investigación que hizo época, W. Heitler y F. London consiguieron formular la teoría del par electrónico de Lewis de una forma física más satisfactoria con la ayuda de la mecánica cuántica.⁹

Sin embargo, hay algunas cuestiones químicas en la teoría del par de electrones que no han sido resueltas satisfactoriamente ni en su forma original, ni en la formulación dada por la mecánica cuántica, entre ellas las que se refieren a compuestos insaturados. Para entender cómo pueden unirse los átomos en moléculas complejas es necesario primero tener una idea clara de la constitución de un átomo individual. La solución a este problema de química teórica fue dada por el físico N. Bohr quién, en 1922, mostró que los electrones en un átomo se mueven de tal manera que pueden ser asignados a diferentes capas con diversas distancias del núcleo. Los electrones de la capa más externa son los más libres y los responsables de las propiedades químicas del elemento.¹⁰

La química molecular se convirtió, a partir de este momento, en la ciencia del comportamiento de los electrones periféricos de la entidad química. Las propiedades del electrón o de los electrones en tanto que tales, desaparecen. Esta configuración es la que se reconoce como la causa directa o indirecta de todas las propiedades químicas.

La reintroducción del simbolismo del guion que representa el enlace entre los átomos de un compuesto químico se acompaña de una significación nueva del mismo. A partir de Lewis, el guion entre dos elementos significa interacción electrónica entre los dos átomos y expresa no

⁹ Cfr., Inga Fisher-HJalmars: "Presentation Speech to R. Mulliken Nobel Prize in Chemistry", (1966), En: "Nobelprize.org". Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014, en: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html [Consulta: 5 de abril de 2021].

¹⁰ Cfr., Inga Fisher-HJalmars: "Presentation Speech to R. Mulliken Nobel Prize in Chemistry", (1966), En: "Nobelprize.org". Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014, en: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html [Consulta: 5 de abril de 2021].

solamente el enlace sino el cometido de dicho enlace. El formalismo de guiones significa una interacción recíproca de naturaleza electrónica entre dos átomos, interacción que, por naturaleza, supone una modificación física de los átomos involucrados, porque cualquier interacción mutua entre dos objetos provoca ordinariamente una modificación más o menos importante de las partes comprometidas.¹¹

El simbolismo del guion tiene, de alguna manera, un valor de globalidad que expresa el fenómeno de enlace, la interacción como tal. En otras palabras, el carácter cualitativo del simbolismo del enlace tiene su significado propio y eficiente en tanto que sintetiza un conjunto de hechos físicos que serán explicitados como la causa de este enlace.¹² Estos hechos serán expresados posteriormente de manera cuantitativa por la aplicación de la mecánica cuántica. La realidad de la unidad molecular está enteramente ligada a la del enlace químico y a la naturaleza de dicho enlace.

Mucho antes de su explicación físico-matemática, el simple simbolismo del guion entre dos átomos será ya portador de toda una concepción de entes materiales, e implícitamente, de una visión del ensamble en la Naturaleza. En primer lugar, hay que reconocer y afirmar que una sustancia química está estructurada. La molécula no es un montón de átomos. El guion significa pues que las interacciones entre átomos respectivos en una molécula no son intercambiables. Con la adopción del guion, los químicos afirman una organización interna, un orden intramolecular, antes de haber obtenido una verificación experimental de manera exhaustiva.

Admitir que el guion (o los guiones) estructuran, significa también admitir que hay algo que se diferencia en la molécula, una heterogeneidad intrínseca a la misma. Existen partes

¹¹ Cfr., Alexandre Manfredi: *Le caractère holistique des systèmes matériels en chimie moléculaire*, (Roma : Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita ; 2003) : 67.

¹² Cfr., Peter J., Ramberg: "Pragmatism, Belief, and Reduction. Stereoformulas and Atomic Models in Early Stereochemistry", pp. 35-61, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, vol. 6, Berlin, (2000): 35.

diferentes de otras partes y su contigüidad está asegurada por esos guiones. El guion de enlace entre dos átomos significa reconocer un orden relacional determinado en el interior de dicha molécula. Y con este, también una cierta permanencia de las interacciones atómicas. Para los químicos el símbolo de un simple guion tiene un contenido noético, un valor de inteligibilidad de lo que es la molécula en su interior.¹³

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

El refinamiento de la teoría electrónica de la valencia en su forma actual se ha debido casi enteramente al desarrollo de la mecánica cuántica, que no solo ha proporcionado un método para el cálculo de las propiedades de las moléculas simples, lo que ha conducido a la elucidación completa de los fenómenos implicaron la formación de un enlace covalente entre dos átomos, sino que también ha introducido en la teoría química un nuevo concepto, el de resonancia, que si bien no fue del todo inesperado en su aplicación a la química, no había sido claramente reconocido y comprendido.¹⁴

¹³ Cfr., Alexandre Manfredi: *Le caractère holistique des systèmes matériels en chimie moléculaire*, (Roma : Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita ; 2003) : 69.

¹⁴ Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An*

2.2 El concepto de enlace químico y la química cuántica

De manera general, suele considerarse que los enlaces en química se dividen en tres tipos generales característicos: el enlace electrónico, el enlace covalente y el enlace metálico. Esta clasificación no es rigurosa pues, aunque los enlaces de cada tipo extremo tienen propiedades bien definidas, la transición de un tipo extremo a otro puede ser gradual, permitiendo la existencia de enlaces de tipo intermedio.¹⁵

La mecánica cuántica ha operado una unificación al proponer una reinterpretación más general de la interacción electrónica en una molécula. Esta reinterpretación ha dado lugar al concepto moderno de enlace químico. Sin embargo, la distinción más clásica entre diferentes tipos sigue vigente porque esta distinción aporta una comprensión tanto didáctica como operativa del carácter unitario del modelo molecular, que está estrechamente relacionado con el de enlace químico. Lo anterior queda mejor expresado en la definición de enlace químico propuesta por Pauling: "... existe un enlace químico entre dos átomos o grupos de átomos cuando las fuerzas que actúan entre ellos son tales que dan lugar a la formación de un agregado con la suficiente estabilidad para que el químico pueda considerarlo una especie molecular independiente".¹⁶ Con esta definición se incluyen dentro de la categoría de enlace químico no solo el enlace de valencia dirigido, de los químicos orgánicos, sino también aquellos enlaces en los que se puede asignar a cada uno de dos átomos o grupos de átomos una estructura electrónica definida, esencialmente independiente de la presencia del otro átomo o grupo, y de tal manera que las interacciones electrostáticas conducen a una fuerte atracción y a la formación de un enlace

Introduction to Modern Structural Chemistry, (U.S.A.: Cornell University Press, edic.; 1960 (1939)): 5.

¹⁵ Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, (U.S.A.: Cornell University Press, edic.; 1960 (1939)): 6.

¹⁶ Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, (U.S.A.: Cornell University Press, edic.; 1960 (1939)): 6.

químico. Pauling no nos dice que el enlace es una fuerza o un conjunto de fuerzas, sino que el enlace existe cuando estas fuerzas actúan. Estas fuerzas son de naturaleza electromagnética y el enlace entre dos átomos es el resultado de interacciones recíprocas. No es inexacto, por tanto, hablar de cambio cualitativo y entender el enlace químico como una alteración física que hace posible que exista un cierto tipo de unidad.

El enlace químico puede entenderse como el proceso físico responsable de las interacciones entre átomos y moléculas que confiere estabilidad a los compuestos químicos. Pero la interacción enlazante tiene un límite, ya que no toda interacción entre dos átomos o grupos de átomos es necesariamente un enlace químico. Es el caso, por ejemplo, de las fuerzas de van der Waals, que son distintas y relativamente débiles en comparación con las de los enlaces químicos.¹⁷

La concepción de enlace covalente como un par de electrones compartidos resultó ser muy útil para los químicos, en concreto para el desarrollo de los mecanismos de reacción en la química orgánica. Sin embargo, la idea fundamental sobre la concepción de enlace de Lewis resulta paradójica si se tienen en cuenta las leyes clásicas de la física que se refieren a las propiedades de las partículas cargadas eléctricamente. ¿Cómo pueden dos electrones cargados negativamente formar un enlace cuando, de acuerdo con la ley de Coulomb, deberían repelerse entre sí?¹⁸

Una posible solución a este problema parecía encontrarse en la aplicación de la mecánica cuántica ya que esta considera las moléculas como sistemas de electrones y núcleos que interactúan electrostáticamente. Bajo esta premisa, el enlace covalente podría explicarse como la

¹⁷ Cfr., Berson Jerome A.: "Molecules with Very Weak Bonds. The Edge of Covalency", pp. 947-957, *Philosophy of Science*, vol. 75, n.º 5, Chicago, (2006): 952.

¹⁸ Cfr., Paul Needham: "The Source of Chemical Bonding", pp. 1-13, *Studies in History and Philosophy of Science*, n.º 45, (2014): 1.

participación de una acumulación de carga electrónica entre los núcleos, lo que permitiría a los electrones ser atraídos por ambos núcleos al mismo tiempo a la vez que se reduciría su energía potencial.¹⁹

Hemos visto que el guion que representa el enlace no es una pura convención, sino que quiere hacer presente a la inteligibilidad del químico una realidad. Esta realidad es una interacción específica entre dos átomos en el interior de una entidad material más extensa. Aunque la noción de enlace químico ha sido un concepto fundamental anterior a la mecánica cuántica, actualmente los químicos explican el hecho del enlace adoptando la noción de interacción orbital que es una aplicación a la química de la mecánica ondulatoria. El objeto fundamental de la química cuántica es describir, según el formalismo matemático de la mecánica cuántica la estructura interna de los átomos y de las moléculas.

En 1924 los trabajos de L. de Broglie y E. Schrödinger marcaron el nacimiento de la mecánica ondulatoria. L. de Broglie propuso que no solo la luz tiene las propiedades duales de ondas y partículas, sino que también las partículas de la materia poseen propiedades ondulatorias. Por tanto, para describir las propiedades de la materia, así como las de la luz, las ondas y los corpúsculos deben referirse uno al otro y al mismo tiempo. El electrón ya no puede ser concebido, como una pequeña partícula eléctrica; debe asociarse a una onda; la longitud de la misma puede ser medida y sus interferencias pueden predecirse.²⁰

La mecánica cuántica describe el estado instantáneo de un sistema (estado cuántico) con una función de onda que codifica la distribución de probabilidad de todas las propiedades medibles u observables. Algunas propiedades observables posibles en un sistema dado son la

¹⁹ Cfr., Paul Needham: "The Source of Chemical Bonding", pp. 1-13, *Studies in History and Philosophy of Science*, n.º. 45, (2014): 1.

²⁰ Cfr., Louis De Broglie: "The Wave Nature of the Electron", Nobel Lecture, December 12, (1929), En: <https://www.nobelprize.org/uploads/2016/04/broglie-lecture.pdf> [Consulta: 5 de abril de 2021].

energía, la posición, el momento y el momento angular. La mecánica cuántica no asigna valores definidos a dichas propiedades, sino que hace predicciones sobre sus distribuciones de probabilidad dentro de un intervalo de valores numéricos. Las propiedades ondulatorias de la materia son explicadas por la interferencia de las funciones de onda.²¹

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

$$H \Psi = E \Psi$$

en donde Ψ es la función de onda del sistema, E designa la energía de la partícula o las partículas del sistema considerado, H es un operador diferencial llamado Hamiltoniano. La resolución de esta ecuación proporciona una función de onda (Ψ) que permite el cálculo de todas las magnitudes físicas características del edificio molecular (magnitudes observables).²²

Esta función de onda, según los físicos, no tiene sentido físico en ella misma, pero $|\Psi|^2$, el cuadrado de su producto escalar, representa la probabilidad de encontrar la partícula en el instante t en las coordenadas correspondientes. Es como si la partícula hubiese perdido su ubicación precisa individual para ser reemplazada por una nube continua de densidad $|\Psi|^2$. El estudio matemático de las soluciones de la ecuación de Schrödinger muestra que la energía no puede tomar valores continuos, lo que se traduce por la existencia de niveles discretos de energía.²³

²¹ Cfr., Jerome L. Rosenberg; Laurence M., Epstein; Peter J., Krieger: *Química*, (México: Mac Graw Hill; 2013): 114.

²² Cfr., Olimpia Lombardi, Juan Camilo Martínez: "Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué se refiere la química cuántica?", pp. 649-670, *Scientiae Studia*, vol. 10, n.º. 4, (2012): 650.

²³ Cfr., Alexandre Manfredi: *Le caractère holistique des systèmes matériels en chimie moléculaire*, (Roma : Thesis

La solución a la ecuación de Schrödinger relativa al átomo más simple, el hidrógeno (o los iones hidrogenoides He^{2+} , Li^{3+} , etc.), que posee un solo electrón, proporciona soluciones para los estados estacionarios que se agrupan en familias de energía. De una manera general se obtienen n^2 funciones de onda para la familia de energía: $-Z^2 / (2n^2)$, siendo Z la carga nuclear y n , un entero positivo. Estas funciones se denominan orbitales atómicos. El ensamble de los orbitales correspondiente al mismo valor de n , forman una capa. Así, para $n = 1$, la función de onda es de simetría esférica y se denomina 1 s. Para $n = 2$ la función de onda es de simetría esférica 2 s y tres funciones 2p, denominadas 2p_x, 2p_y y 2p_z correspondientes a tres ejes de rotación. Para $n = 3$ hay una función de simetría esférica (3 s) y tres funciones del tipo p: (3 p) y cinco funciones de estructura más compleja: 3 d. Una magnitud significativa derivada de la función orbital es la densidad de probabilidad de presencia del electrón que describe en el espacio que rodea al núcleo.

La resolución exacta de la ecuación de Schrödinger es imposible para moléculas poli electrónicas, por lo que se precisa realizar algunas aproximaciones las cuales se basan en dos modelos alternativos: la teoría del enlace de valencia y la teoría del orbital molecular. Cada uno de estos métodos contiene un algoritmo particular para generar funciones de onda, y la justificación para elegir ese algoritmo descansa en supuestos conceptuales y cualitativos acerca de la forma que debería tener la función de onda molecular. Para la teoría del enlace de valencia, las moléculas están compuestas por sus átomos constituyentes, en los cuales los electrones tienen una ubicación localizada, es decir, se encuentran asociados a un núcleo particular. De este modo, las funciones de onda deberán reflejar esta característica a través de una combinación lineal de funciones de onda atómicas correspondientes a los átomos de la molécula. Por su parte, la teoría del orbital molecular concibe el sistema molecular como una nueva entidad en la cual los átomos constituyentes ya no pueden ser identificados y, por lo tanto, los electrones ya no pueden ser

ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita ; 2003) : 76-77.

ubicados en torno a un único núcleo. Es decir, los electrones se encuentran deslocalizados en la molécula completa, de manera que las funciones de onda que describen el sistema incluyen componentes que asocian los mismos electrones con más de un núcleo.²⁴

2.3 La teoría del enlace de valencia desde la perspectiva de la mecánica cuántica

Como ya se señaló, la primera aplicación de la mecánica cuántica a sistemas químicos fue desarrollada por Heitler y London en 1927 y se convirtió en la base para tratamientos posteriores. Para resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, estos autores parten de una función de onda construida para representar la molécula de hidrógeno H₂. Para encontrar dicha función de onda, consideran al sistema como compuesto de dos núcleos y dos electrones completamente separados. La función de onda se puede representar entonces como sigue:

$$\Psi' = \Psi_a (1) \Psi_b (2)$$

en donde 1 y 2 representan los electrones, y $\Psi_a (1)$ y $\Psi_b (2)$ denotan las funciones de onda atómicas del hidrógeno en el estado basal (1s) para los núcleos a y b respectivamente. Debido a que los electrones son partículas indistinguibles y cumplen el principio de exclusión de Ernst Pauli (1900-1958), debe existir también otra posibilidad, igualmente legítima, para representar la molécula, donde cambia el núcleo al cual cada uno de los electrones se encuentra asociado:

$$\Psi'' = \Psi_a (2) \Psi_b (1)$$

Estas posibilidades son dos descripciones igualmente admisibles del sistema; por esta razón, desde esta perspectiva, la mejor forma de representar la molécula de H₂ es mediante una

²⁴ Cfr., Olimpia Lombardi, Juan Camilo Martínez: “Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué se refiere la química cuántica?”, pp. 649-670, *Scientiae Studia*, vol. 10, n.º. 4, (2012): 653.

combinación lineal de ambas descripciones:

$$\Psi = \Psi' + \Psi'' = \Psi_a (1) \Psi_b (2) + \Psi_a (2) \Psi_b (1)$$

Resolviendo la ecuación de Schrödinger ($H \Psi = E \Psi$) con esta función Ψ para obtener la energía del sistema enlazado, se encontró que, si bien en el enlace de hidrógeno molecular existe una fuerte componente electrostática, la mayor parte de la energía proviene de la naturaleza mecánico-cuántica del sistema y, por ello, fue descrita como una energía de resonancia, que corresponde al intercambio de los dos electrones previsto por el enfoque del enlace de valencia.²⁵

El trabajo de Heitler y London fue considerado como la demostración de la naturaleza mecánico-cuántica del enlace químico, y promovió las investigaciones dirigidas al desarrollo de métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, fue Pauling quien relacionó este método con las estructuras estáticas propuestas por Lewis, interpretando los estados mecánico-cuánticos de la molécula como las superposiciones de los estados correspondientes a las estructuras clásicas. Según Pauling el enlace de valencia no se aparta de la química estructural gracias a que cada término de la función de onda de prueba se corresponde con una estructura química definida. Es posible diseñar estructuras del tipo de Lewis que representan las posiciones de los electrones en las moléculas, aunque, de acuerdo con la mecánica cuántica, el estado real de la molécula es un híbrido de resonancia entre las diferentes estructuras unidas clásicamente y, en consecuencia, se representa como una superposición de los estados correspondientes a tales estructuras clásicas.²⁶

²⁵ Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, U.S.A., Cornell University Press, edic., 1960 (1939): 262-264.

²⁶ Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, U.S.A., Cornell University Press, edic., 1960 (1939): 264 y Hendry Robin Findlay: "Two Conceptions of the Chemical Bond", pp. 909-920, *Philosophy of Science*, vol. 75, n.º. 5, (2008): 914 y 917.

La amplia popularidad entre los químicos de la teoría de Lewis y de su versión mecánico cuántica, la teoría del enlace de valencia, se debe a que permiten interpretar y predecir propiedades importantes de las moléculas de una forma muy simple. Ambos modelos asumen que en la unión entre dos átomos en una molécula interviene un par de electrones que se localiza entre ambos. El modelo de enlace de valencia interpreta dichos enlaces en términos del apareamiento de electrones alojados en orbitales atómicos o híbridos de los mismos de cada átomo enlazado. Sin embargo, no todas las situaciones de enlace ni todas las propiedades moleculares se pueden justificar de forma adecuada mediante los modelos de enlaces localizados; un ejemplo bien conocido es el del benceno.²⁷

2.4 La teoría del orbital molecular

La teoría del orbital molecular, fue propuesta por F. Hund y R. Mulliken como un enfoque alternativo para diseñar las funciones de onda para resolver la ecuación de Schrödinger para una molécula. El término orbital designa, en mecánica cuántica, la función orbital basada en la atracción del núcleo sobre el electrón más el promedio de la repulsión de los demás electrones. Para obtener la función de onda de un electrón, se requiere asumir la función de onda de los otros electrones, y para encontrarla hay que considerar que cuando un electrón está cerca de un núcleo particular en un sistema molecular, todas las fuerzas que actúan sobre él son debidas a ese núcleo y a los electrones cercanos al mismo; de este modo, la función de onda de ese electrón es muy similar a la función de onda del átomo aislado. La manera más apropiada para representar lo anterior es mediante una combinación lineal de orbitales atómicos para cada electrón. Esta función de onda se denomina orbital molecular, y a ello debe su nombre esta teoría.²⁸

²⁷ Cfr., Ernesto Alcañiz: "Enlace químico y estructura de la materia", Universidad de Valencia, En: <http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/EQEM.htm> [Consultada el 7-abril-2021].

²⁸ Cfr., Olimpia Lombardi, Juan Camilo Martínez: "Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué se refiere la química cuántica?", pp. 649-670, *Scientiae Studia*, vol. 10, n.º. 4, (2012): 655 y Robert S., Mulliken: "Spectroscopy, Molecular Orbitals, and Chemical Bonding", Nobel Lecture December 12, (1966), En:

Los orbitales moleculares tienen muchas de las características de los orbitales atómicos. Por ejemplo, al igual que un orbital atómico, el orbital molecular puede contener como máximo dos electrones (con espines opuestos) y tiene una energía definida. Si el orbital atómico es una función de onda que describe los electrones de los átomos, el orbital molecular es una función de onda que describe los electrones de la molécula. Pero, a diferencia de los orbitales atómicos, los orbitales moleculares están asociados a la molécula entera y no a un solo átomo.²⁹

Para explicar la teoría del orbital molecular, se suele utilizar la molécula más sencilla: la de hidrógeno, H₂. Siempre que dos orbitales atómicos se traslapan, se forman dos orbitales moleculares; por tanto, el traslape de los dos orbitales atómicos 1s (uno para cada átomo de hidrógeno) para formar H₂ produce dos orbitales moleculares. El orbital molecular de menor energía concentra la densidad electrónica entre los dos núcleos de hidrógeno dando como resultado una función simétrica respecto del plano de los dos núcleos (Ψ^s); se denomina orbital molecular de enlace. Este orbital molecular es el resultado de sumar los dos orbitales atómicos de modo que las funciones de onda de dichos orbitales se refuerzan mutuamente en la región del enlace. El orbital de mayor energía tiene muy poca densidad electrónica entre los dos núcleos y da como resultado una función asimétrica respecto del plano de los dos núcleos (Ψ^a); se denomina orbital molecular de anti enlace. En lugar de reforzarse mutuamente en la región entre los núcleos, los orbitales atómicos se cancelan mutuamente en esta región, y la mayor densidad electrónica está en los lados opuestos de los núcleos. Este orbital molecular excluye a los electrones de la región en la que se debe formar un enlace. El hidrógeno tiene dos electrones de enlace y ninguno de anti enlace. De acuerdo con la teoría del orbital molecular, el hidrógeno forma moléculas diatómicas.³⁰

<https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/mulliken-lecture.pdf> [Consulta: 8 de abril de 2021].

²⁹ Cfr., Theodore L., Brown, H. Eugene, Lemay Jr., Bruce E., Burstein y Julia R., Burdge: *Química*. La ciencia central, México, Pearson, (2004): 343.

³⁰ Cfr., Ernesto Alcañiz: "Enlace químico y estructura de la materia", Universidad de Valencia, En: <http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/EQEM.htm> [Consulta: 7 de abril de 2021].

Mientras que en la teoría del enlace de valencia los orbitales atómicos se combinan a través del producto de las funciones de onda que los representan, en la teoría del orbital molecular son los orbitales moleculares los que se combinan a través del producto de las funciones de onda que los representan. Se trata de dos modos distintos de concebir la molécula que dan lugar a diferentes estados desde el punto de vista cuántico, y no de dos teorías que proponen, bajo distintas bases, un mismo estado cuántico molecular. Esto explica por qué, en muchos casos, ambas teorías brinden resultados diferentes. En definitiva, el enfoque de la teoría del orbital molecular presenta una descripción de un sistema molecular completamente distinto a la que ofrece la teoría del enlace de valencia. Para la teoría del orbital molecular, las moléculas, en tanto moléculas, son un todo; no pueden identificarse en ella componentes atómicos pues los electrones no están localizados en orbitales atómicos sino en orbitales moleculares deslocalizados alrededor de la molécula entera.³¹

Al adoptar la mecánica cuántica para describir más rigurosamente los modelos moleculares, los químicos debieron en cierto modo heredar la problemática epistemológica del dualismo onda-partícula y el de la localización determinada o no de los electrones. Sin embargo, la aplicación de la mecánica cuántica a la química molecular no invalida el hecho del carácter local de las interacciones electrónicas enlazantes. ¿Cómo se produce entonces el paso de lo no localizable cuántico y de lo indiscernible de los electrones, a lo localizable en la química molecular teórica?³²

Por lo dicho hasta ahora, hemos constatado que los físicos y los químicos teóricos del

³¹ Cfr., Olimpia Lombardi, Juan Camilo Martínez: “Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué se refiere la química cuántica?”, pp. 649-670, *Scientiae Studia*, vol. 10, n.º. 4, (2012): 655-656 y Robert S., Mulliken: “Spectroscopy, Molecular Orbitals, and Chemical Bonding”, Nobel Lecture December 12, (1966), En: <https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/mulliken-lecture.pdf> [Consulta: 8 de abril de 2021].

³² Cfr., Alexandre Manfredi: *Le caractère holistique des systèmes matériels en chimie moléculaire*, (Roma : Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita ; 2003) : 87-91.

enlace covalente, lejos de ignorar, explotan el concepto de no localización de las partículas de la mecánica ondulatoria estableciendo, por procedimientos de aproximación, el de localización relativa del enlace covalente representado clásicamente de manera simbólica mediante un guion entre dos átomos.

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

Como ya hemos señalado, el concepto de enlace químico es crucial para entender cómo se comporta la materia. Las propiedades de un agregado molecular dependen de la forma en la que se enlacen los átomos. Los átomos, al formar una molécula, pierden toda individualidad. La mecánica cuántica concibe el sistema molecular como una nueva entidad en la que los átomos individuales ya no pueden ser identificados y, en consecuencia, los electrones están deslocalizados en la molécula completa. Se trata de verdaderos sistemas químicos que no se explican mediante meras interacciones externas de sus componentes, sino que poseen aspectos holísticos y direccionales propios. Este nuevo modo de entender el modo de ser de las moléculas apunta a

reforzar su carácter sustantivo.

Hasta aquí nos hemos propuesto dar, en líneas generales, una caracterización del enlace químico. Intentaremos ahora realizar una reflexión sobre su naturaleza. Para ello nos valdremos de la filosofía de X. Zubiri que consideramos más acorde con las ciencias modernas que las filosofías tradicionales.³³

3. Estructura dinámica de la realidad en X. Zubiri

Si quisiéramos caracterizar con un término la filosofía de X. Zubiri, este sería el de realidad.³⁴ Pero, ¿qué entiende Zubiri por realidad?

Cuando Zubiri se enfrenta con el problema de la realidad, lo aborda desde dos perspectivas distintas. En su libro *Sobre la Esencia* explica lo que la realidad es actualmente, y en *Realidad y Proceso* añade que la realidad deviene. “La realidad no es solamente lo que es actualmente; también esta, en una o en otra forma, incura en eso que de una manera más o menos vaga podemos llamar el devenir. Las cosas devienen, la realidad deviene”. La realidad no es ‘en sí’ ni ‘para sí’ sino que es ‘de suyo’ y ‘da de sí’.³⁵

Por lo que se refiere a la primera perspectiva, es decir, explicar lo que la realidad es actualmente, el problema consiste en averiguar cuál es la estructura última y radical de la realidad, es decir, qué son la sustancia y la esencia. Zubiri da la siguiente definición provisional de esencia: “conjunto unitario de todas las notas que no pueden faltar a una cosa real sin que ésta deje en

³³ Cfr., Thomas B., Fowler: “Quantum Field Theory and Zubiri’s Philosophy of Reality”, pp. 12-41, *The Xavier Zubiri Review*, vol. 13, Washington, D.C.,(2013-2015): 12.

³⁴ Cfr., Saturnino Calvo-Losada, José Joaquín Quirante: “Towards a Philosophy of Chemical Reactivity Through the Molecule in Atoms-of Concept”, *Axiomathes*, (2020). En: <https://doi.org/10.1007/s10516-020-09497-5> [Consulta: 15 de abril de 2021].

³⁵ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, (Madrid: Alianza; 1995 (1989)); p. iv.

estricto rigor de ser lo que es”.³⁶ Pero, ¿en qué consiste, más exactamente, la esencia?

El pensamiento de Zubiri arranca de un enfrentamiento con Aristóteles. La primera cuestión consiste pues, en averiguar cuáles son las cosas que poseen esencia. Para el estagirita, solamente los entes naturales poseen esencia y en estos hay que distinguir la sustancia y los accidentes. La sustancia es el sujeto último de toda predicación, no se predica de otro ni existe en otro. Los accidentes existen apoyados en la sustancia y se predicán de ella. Según Aristóteles, solo las sustancias tienen esencia. Dicho de otro modo, la realidad esenciada es la sustancia. En cambio, Zubiri asevera que esencia la tienen todas las cosas reales, es decir, las que actúan por las propiedades que poseen.³⁷

Si para Aristóteles la realidad esenciada es la sustancia, para Zubiri lo es la sustantividad. “Lo que llamamos cosas no son precisamente sustancias a las cuales son inherentes unos accidentes y unas propiedades, sino que son sistemas sustantivos de notas y propiedades”.³⁸ Son notas no solo las propiedades de la cosa, sino todos los momentos que posee (materia, estructura, composición, etc.), o sea, todo aquello que pertenece a la cosa o forma parte de ella como algo suyo.

Las notas de una cosa pueden ser o adventicias, que son las debidas a la conexión de la cosa con otras, o, constitucionales, que le pertenecen por sí mismas, que forman parte de la condición misma de la cosa, por ejemplo, el calor específico y la valencia de un elemento. Estas notas son las que posee la realidad en cierto modo ‘de suyo’.³⁹

Ahora bien, ¿en qué consiste que las notas formen un sistema? Un sistema es un conjunto

³⁶ Xavier Zubiri: *Sobre la Esencia*, (Madrid: Alianza Editorial; 1985 (1962)): 17

³⁷ Cfr., Gonzalo Fernández de la Mora: *Filósofos españoles del siglo XX*, (Barcelona: Planeta; 1987): 139 y 141.

³⁸ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, (Madrid: Alianza; 1995 (1989)): 32.

³⁹ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 32.

concatenado y conexo de notas posicionalmente interdependientes y relativamente indisociables. Es decir, las notas no solo se van co-determinando las unas a las otras, sino que, si una de ellas se separa, el sistema se desintegra. Todas y cada una de las notas repercute sobre las demás.

La sustantividad es el sistema clausurado y total de notas constitucionales. La razón formal de las sustantividades es la suficiencia constitucional. La clausura da al sistema un carácter de totalidad.⁴⁰ Se trata de una suficiencia en el orden de la constitución. Toda sustantividad está montada sobre un sistema básico que ya no es solo constitucional sino constitutivo que posee todas las notas necesarias y suficientes para que una realidad sustantiva sea lo que es, lo que llamamos esencia.⁴¹

En el sistema, cada nota es nota-de, es decir, cada nota no es lo que es sino siendo precisa y formalmente de las demás y refiriéndose a ellas y esto le confiere un carácter constructo y por tanto unidad. Las notas son coherentes entre sí y en ellas está actualizado el sistema constructo. Y este carácter constructo es precisamente el carácter de respectividad interna que tienen todas las realidades sustantivas. El sistema es un ex-tracto, una estructura, la actualidad de la unidad en un sistema constructo de notas. La realidad es algo 'de suyo', y este 'de suyo' es algo radicalmente estructural. La realidad es constitutivamente estructura y no constitutivamente sustancia. No es sujeto, sino que es estructura. Y aquí es donde hay que inscribir el problema del devenir, pues el devenir no es algo que acontece al sujeto, sino que se inscribe en las estructuras mismas de la sustantividad.⁴²

¿Se cambia porque se deviene o se deviene porque se cambia? El problema del dinamismo no se identifica con el carácter cambiante de las cosas, pues afecta *primo et per se* a la realidad. Ya señalamos que la realidad es una sustantividad que está esencial y estructuralmente en

⁴⁰ Cfr., Xavier Zubiri: *Sobre la Esencia*, (Madrid: Alianza Editorial; 1985 (1962)): 163.

⁴¹ Cfr., Xavier Zubiri: *Sobre la Esencia*, (Madrid: Alianza Editorial; 1985 (1962)): 34-35.

⁴² Cfr., Xavier Zubiri: *Sobre la Esencia*, (Madrid: Alianza Editorial; 1985 (1962)): 37-39.

condición de respectividad. Esta respectividad tiene distintas dimensiones. Una externa, por la que cada cosa es en su propia constitución función de las demás, y otra interna, por la que cada nota es justamente nota de las demás. Por esto es que podemos decir que la realidad es ‘de suyo’ o si se prefiere que ‘de suyo’ es intrínseca y formalmente respectiva.

La respectividad nos da la pauta para introducirnos en el dinamismo. Una cosa es siendo lo que es y, también, siendo todo lo que puede ‘dar de sí’. Por tanto, el ‘dar de sí’, no es algo ajeno al ‘de suyo’. El ‘dar de sí’, el dinamismo, forma parte del ‘de suyo’, de la esencia misma de las cosas. Dependiendo de cómo sea la esencia, será el dinamismo⁴³. Es la estructura concreta, como dinamismo, la que ‘da de sí’: es la realidad que ‘da de sí’.⁴⁴

Zubiri identifica tres tipos de dinamismo: el dinamismo de la variación, el dinamismo de la alteración y el dinamismo de la mismidad. Estos dinamismos son distintos, pero además están organizados; los posteriores suponen los anteriores, siendo el más básico el de la variación.

El dinamismo de la variación afecta únicamente a las notas adherentes. Conviene apuntar aquí que estas notas provienen de la respectividad extrínseca de las sustantividades, es decir, notas que le vienen a una cosa por su relación con otras realidades. El constitutivo formal de estas notas, por tanto, no es *in-haerere* sino *ad-haerere*. A diferencia de la filosofía clásica en la que el *ad* se toma en el sentido de *eese-ad* (ser en otro, a saber, la sustancia), aquí el *ad-haerere* significa que la esencia ejerce una función trascendental sobre estas notas. La esencia no solamente es *res* sino que reifica. No significa esto hacer que esas notas sean *res*, sino hacer de ellas en la esencia una *res*. Pongamos, por ejemplo, el lugar. A un cuerpo no le es esencial estar en un lugar u otro, pero sí le es esencial estar en alguno. La esencia, aunque no está constituida por estas notas, que

⁴³ Cfr., Manuel Calleja Salado: “Realidad, esencia y estructura dinámica en Xavier Zubiri”, pp. 101-119, *The Xavier Zubiri Review*, vol. 3, Sevilla, (2000-2001): 113.

⁴⁴ Cfr. Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989): 62.

le son adherentes, prefija en su constitución esencial y formal el tipo posible de notas adherentes de que esa esencia es capaz.⁴⁵

La variación afecta a la realidad entera, hace de la realidad sustantiva una sustantividad que está en variación. En una u otra medida, todo devenir está apoyado en una variación, porque, como ya hemos señalado, la variación es la forma básica de todos los dinamismos de la realidad. Del dinamismo de la variación depende de los tipos de variación que hay en la realidad.

Este dinamismo consiste en un dar de sí y hacer ver todo lo que puede dar de sí un cuerpo, por razón de sus estructuras y de sus notas, para ocupar distintos lugares en el espacio. No cualquier cuerpo puede ocupar cualquier lugar en el espacio. Pero, como acabamos de señalar, es esencial que ocupe alguno. El elenco de posibles lugares no es accesible a todos los cuerpos. Y, precisamente porque no puede ocupar todos los lugares posibles, decimos que es un dar de sí.⁴⁶

El cambio de lugar, la variación local, es la estructura dinámica básica de cuanto acontece en la realidad. Sin movimiento local no existen ni so posibles los demás dinamismos que hay en la realidad.⁴⁷

El dinamismo de la alteración, por su parte, incide sobre la sustantividad en cuanto tal. Mientras que la variación consiste en prefijar el elenco de notas adherenciales que puede tener una realidad, la alteración es un dar de sí, en el que lo que se da de sí es otro, un *alter*.⁴⁸

Dado que este dinamismo, como todos los dinamismos, se apoya en el de la variación, se sigue que de la presencia de algo en un lugar o en lugares distintos, se deriva el distanciamiento

⁴⁵ Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 105-106.

⁴⁶ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 121-122.

⁴⁷ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 110.

⁴⁸ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 133.

que es la forma más elemental de la distinción. Y este distanciamiento se produce como una alteración, un *alter*. No es que se altere la estructura de una realidad, sino que esa estructura produce por su dinamismo otra alteridad, otra sustantividad.

Este dinamismo tiene tres tipos posibles: la transformación, la repetición y la génesis.

La transformación consiste en que una estructura en tanto que estructura, es decir, ella desde sí misma, de lugar desde sí a una estructura completamente distinta. Por ejemplo, el hidrógeno y el cloro por su posición en la tabla periódica, por sus características atómicas, eléctricas, etc., dan lugar, precisamente por estas características, a una estructura nueva. Como se puede notar, la transformación está constitutivamente montada sobre un desplazamiento ya que, si los elementos que la integran no se pusieran en continuidad, no habría reacción química.⁴⁹

Puede ser que lo que dé de sí la transformación de las estructuras a causa de su interacción no sea una estructura nueva (como lo sería el ácido clorhídrico, siguiendo con el ejemplo anterior, sino que simplemente la transformación produzca un elemento o una partícula igual a las que han reaccionado. En este caso tendríamos el segundo tipo de dinamismo: la repetición.

El dinamismo de la repetición es, por tanto, un momento del dinamismo de la transformación. Y el resultado de la repetición es sumamente importante ya que da lugar a una multiplicidad de elementos que son iguales. Esta multiplicidad de elementos iguales conlleva la singularidad. Por ejemplo, toda la realidad de los electrones en cuanto *singuli* consiste —aparte de su masa, carga, radio y el resto de sus cualidades— en ser este y no el otro electrón. Son *singuli* y constituyen una mera multiplicidad. Y esta multiplicidad da a todos estos *singuli* el carácter de lo que se denomina clase natural.⁵⁰

⁴⁹ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 140.

⁵⁰ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 141.

Cuando el dinamismo de la repetición tiene un carácter evolutivo, entonces tenemos el tercer tipo de dinamismo: la génesis. Hay una génesis de estructuras, las unas generadas por las otras. Una génesis que constituye un *phylum*, una unidad filética en virtud de la cual se constituyen las esencias constituyentes en esencias específicas o quidificadas. La génesis puede lograrse o por vía de generación o por evolución. A diferencia de la generación que produce sólo la actualización de virtualidades, la evolución produce nuevas virtualidades. La evolución no es actualización de virtualidades sino actualización de potencialidades para producir nuevas virtualidades. La evolución es aquel proceso en virtud del cual el ‘de suyo’ que consiste en un ‘dar de sí’, construye nuevos ámbitos y nuevas formas del sí del ‘de suyo’.⁵¹

Por último, el dinamismo de la mismidad aparece en cierto tipo de estructuras sustantivas, aquellas que son estructuralmente estables. Pero se trata de una estabilidad dinámica. Es decir, de la estabilidad de unas sustantividades que, efectivamente, por su dinamismo continúan siendo las mismas en una forma y otra. Las sustantividades dinámicas estables pueden ser de dos tipos: la sustantividad molecular y la sustantividad transmolecular. La primera se refiere a la estabilidad de las moléculas de diverso tipo y tamaño, que implican una persistencia estructural. La segunda, implica la realización de actividades que involucran un sistema de moléculas para mantener la propia estructura o identidad estructural. Es el dinamismo propio de lo vivo. No hay un ser vivo que sea una sola molécula; en este sentido es transmolecular. Los seres vivos son sistemas de moléculas no una conjunción o mero acoplamiento de las mismas. Por tanto, para persistir en su propia sustantividad, en su propia identidad de sustantividad, ejercen una enorme actividad.⁵²

La realidad es en sí y por sí misma, constitutivamente dinámica. Y en este sentido, debe

⁵¹ Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 159-160.

⁵² Cfr., Xavier Zubiri: *Estructura Dinámica de la Realidad*, Madrid, Alianza 1995 (1989)): 164-165.

decirse que cambia porque deviene, porque hay un dar de sí previo, que es precisamente el que constituye la actividad de la respectividad del todo. Todo dinamismo no tiene sentido sino desde el punto de vista de la respectividad.

4. La estructura dinámica de la realidad según Zubiri y el enlace químico

La filosofía no es una ciencia empírica, como la física o la química. Pero tiene una base empírica, porque la filosofía es, en última instancia, un conocimiento de la realidad que no forma parte de la experiencia ordinaria. Todas las filosofías —todos los sistemas filosóficos— toman como punto de partida algún aspecto de nuestra experiencia y se basan en él para crear una visión integral de la realidad.⁵³

En el caso particular de la filosofía de la naturaleza, el avance de la ciencia moderna ha permitido nuevos ámbitos del conocimiento de la realidad lo que implica también que cualquier nueva filosofía, debe ser lo suficientemente consistente no solo para ser acorde con respecto a los posibles avances de la ciencia, sino que además ha de incorporar lo que la ciencia ya nos ha enseñado sobre la realidad. Por esto consideramos que la filosofía de Zubiri es compatible con la naturaleza de la realidad tal y como la revela la ciencia moderna.

Zubiri entiende bien la teoría cuántica y reconoce que ésta trajo consigo nuevos modos de realidad como son las partículas elementales inmersas en el dinamismo onda partícula que no son posibles de explicar por la física clásica y que no son visualizables en el sentido ordinario.⁵⁴ Las teorías sobre el enlace químico aunque finalmente pertenecen al ámbito teórico (las realidades sobre las que tratan no son observables directamente), sin embargo, aportan elementos para un

⁵³ Cfr., Thomas B Fowler: “Quantum Field Theory and Zubiri’s Philosophy of Reality”, pp. 12-41, *The Xavier Zubiri Review*, vol. 13, Washington, D.C., (2013-2015): 23.

⁵⁴ Cfr., Thomas B Fowler: “Quantum Field Theory and Zubiri’s Philosophy of Reality”, pp. 12-41, *The Xavier Zubiri Review*, vol. 13, Washington, D.C., (2013-2015): 24.

conocimiento verídico de la realidad.

Como ya hemos señalado, la realidad, como la concibe Zubiri es algo que es ‘de suyo’ y ‘da de sí’. En el epígrafe anterior mencionábamos un doble aspecto de esta definición: el ‘de suyo’ en cuanto hace referencia a la esencia de las cosas, y el ‘dar de sí’ en el que se incluye el aspecto dinámico que, finalmente, está en estrecha dependencia con la esencia. En otras palabras, estructuración y dinamismo están perfectamente concatenados en esta manera de concebir la realidad.

Esta manera de concebir la realidad implica que en ella se encuentra inmerso un dinamismo que se despliega con toda su riqueza y de acuerdo con sus posibles virtualidades según las diferentes entidades naturales. Y esto se visualiza de una manera muy clara en el tema que nos ocupa que es el del enlace químico.

Hemos dicho, siguiendo a Pauling⁵⁵, que existe un enlace químico entre dos átomos o grupos de átomos cuando las fuerzas que actúan entre ellos son tales que dan lugar a la formación de un agregado con la suficiente estabilidad para que el químico pueda considerarlo una especie molecular independiente. ¿Cuál es la naturaleza del enlace químico? Según acabamos de anotar, el enlace químico se concibe como una fuerza de interacción. Pero ¿qué características o que implicaciones tiene el ‘de suyo’ de esta fuerza enlazante? En una primera aproximación el enlace químico posibilita el modo de ser de una u otra realidad molecular sustantiva. No todas las fuerzas son enlazantes ni todas las posibles combinaciones de enlace de los elementos dan lugar a las mismas sustantividades. Si una cosa es siendo lo que es y, también siendo lo que puede dar de sí, podemos entender este papel posibilitador de unas y no otras sustantividades del enlace químico.

⁵⁵ Cfr., Linus Pauling: *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, (U.S.A.: Cornell University Press, edic.; 1960 (1939): 6.

¿Podemos considerar el enlace como una nota constitutiva del sistema que es la sustantividad molecular? Me parece que la respuesta es afirmativa pues según Zubiri, cada nota se basa en la esencia. La unidad del sistema está presente de antemano de alguna manera en cada nota-de, y cada nota-de esencial gira hacia el otro (respectividad). La esencia determina la posición de cada nota dentro del sistema y, por lo tanto, es la base para la modalidad de las notas. Podemos decir que, en virtud del tipo de enlace se van desplegando, en distintos niveles, los distintos dinamismos de la realidad pues esta es ‘de suyo’ y ‘da de sí’.

5. Conclusiones

En la primera parte de este trabajo hicimos referencia a distintas teorías que intentan dar una explicación sobre la evolución del concepto del enlace químico. En el marco de la química molecular, el concepto de enlace hace referencia a una relación de causa-efecto entre fuerzas e interacciones; bajo la perspectiva de la física cuántica, los químicos explican el hecho del enlace adoptando la noción de interacción orbital. Al final, desde una u otra perspectiva queda de manifiesto el dinamismo y la estructuración propias de la realidad natural.

En un primer momento, al plantearse la cuestión de cómo se enlazan los elementos de una sustancia química, en el enfoque intelectual inductivo de los químicos aparece la categoría de relación interna en la que distinguimos entre la noción de fuerza de interacción y el concepto de valencia química. Así, mientras que con el concepto de valencia se subraya el aspecto numérico o geométrico y se da cuenta de las regularidades observadas en los grupos de elementos y sus capacidades combinatorias; la fuerza de interacción remite a la categoría de afinidad química, es decir a la posibilidad de formar un enlace.

Con los trabajos de Lewis, la formación del enlace químico que se designa como covalente y en el que se comparten dos electrones entre dos átomos apunta, por una parte, a la idea de

estabilidad y por otra parece introducir la categoría de sistema unitario: en el enlace covalente no es posible decir qué electrones de enlace pertenecen a uno u otro átomo ya que, por el hecho de constituir un enlace, estos electrones forman parte simultáneamente de dos configuraciones atómicas. Se destaca también la categoría de combinación química y la de estabilidad producto de la interacción enlazante. La química molecular pasa a convertirse en la ciencia del comportamiento de los electrones periféricos de la entidad química, las propiedades de los electrones en tanto que tales desaparecen y la configuración que posibilita en fenómeno del enlace se reconoce como la causa de las propiedades químicas.

La introducción del simbolismo de un guion para representar el enlace químico permite reconocer que hay una organización interna, un orden relacional determinado en el interior de la molécula y, por consiguiente, que la sustancia química está estructurada. ¿Sobre qué fundamento categorial de razonamiento inductivo pudieron los químicos proponer la idea de enlace? La única razón parece ser la de orden estable, de arreglo ordenado permanente, de orden en la naturaleza que conlleva la idea de relación entre las partes.

Al adoptar la mecánica cuántica para describir los modelos moleculares, los químicos heredaron la problemática epistemológica del dualismo onda partícula y el de la localización determinada o no de los electrones. La mecánica cuántica concibe el sistema molecular como una nueva entidad en la que los átomos individuales ya no pueden ser identificados; los electrones están deslocalizados en la molécula completa. Se trata de una manera novedosa de entender el modo de ser de las moléculas como verdaderos sistemas químicos que poseen aspectos holísticos y direccionales propios.

En la concepción zubiriana de la realidad como aquello que no es ‘en sí’ ni ‘para sí’, sino que es ‘de suyo’ y ‘da de sí’ encuadra perfectamente todo lo que hemos venido diciendo sobre el enlace químico. El enlace lleva a la generación de estructuras o lo que es lo mismo, de

sustantividades. Se trata de verdaderos sistemas sustantivos de notas y propiedades. Y el dinamismo de la realidad material se manifiesta con toda su riqueza y de manera evidente en la estructuración de lo real.

Fuentes Bibliográficas.

Berson, Jerome A.. "Molecules with Very Weak Bonds. The Edge of Covalency", *Phylosophy of Science*, vol. 75, n.º. 5, Chicago, (2006): 947-957.

Brown, Theodore L.; Eugene, Lemay Jr. H.; Burstein, Bruce E., y Burdge, Julia R.. *Química. La ciencia central*, (México: Pearson; 2004).

Calleja Salado, Manuel. "Realidad, esencia y estructura dinámica en Xavier Zubiri", *The Xavier Zubiri Review*, vol. 3, Sevilla, (2000-2001):101-119.

Calvo-Losada, Saturnino y Quirante, José Joaquín. "Towards a Philosophy of Chemical Reactivity Through the Molecule in Atoms-of Concept", *Axiomathes*, (2020). En: <https://doi.org/10.1007/s10516-020-09497-5> [Consulta: 15 de abril de 2021].

Contreras García, Julia; Otero de la Rosa, Alberto y Recio, Juan Manuel. "El enlace químico y su supervivencia en la Química Cuántica", *Anales de Química*, n.º. 110 (2), España, (2014): 113-120.

De Broglie, Louis. "The Wave Nature of the Electron", *Nobel Lecture*, December 12, (1929). En: <https://www.nobelprize.org/uploads/2016/04/broglie-lecture.pdf> [Consulta 5 de abril de 2021].

Fernández de la Mora, Gonzalo. *Filósofos españoles del siglo XX*, (Barcelona: Planeta; 1987).

Fisher-HJalmars, Inga. "Presentation Speech to R. Mulliken Nobel Prize in Chemistry", (1966). En: "Nobelprize.org". Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014, En: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/press.html [Consulta5 de abril de 2021].

Fowler, Thomas B.. "Quantum Field Theory and Zubiri's Philosophy of Reality", *The Xavier*

Zubiri Review, vol. 13, Washington, D.C., (2013-2015): 12-41.

Langmuir, Irving. "Types of Valence", , Science, New Series, vol. 54, n°. 1386, New York, (1921): 59-67.

Lombardi, Olimpia y Martínez, Juan Camilo. "Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué se refiere la química cuántica?", Scientiae Studia, vol. 10, n°. 4, (2012): 649-670.

Manfredi, Alexandre. Le caractère holistique des systèmes matériels en chimie moléculaire, (Roma : Thesis ad Doctorandum in Philosophia totaliter edita ; 2003).

Needham, Paul: "The Source of Chemical Bonding", Studies in History and Philosophy of Science, n°. 45, (2014): 1-13.

Newton, Lewis Gilbert. "The atom and the molecule", Journal of the American Chemical Society, vol. 38, n°. 4, Washington, (1916): 763-785.

Pauling, Linus. *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, (U.S.A.: Cornell University Press, edic.;1960 (1939)).

Ramberg, Peter, J.. "Pragmatism, Belief, and Reduction. Stereoformulas and Atomic Models in Early Stereochemistry", HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry, vol. 6, Berlin, (2000): 35-61.

Rosemberg, Jerome L.; Epstein, Laurence M., y Krieger, Peter J.. *Química*, (México: Mac Graw Hill; 2013): 114.

Weisberg, Michael. "Challenges to the Structural Conception of Chemical Bonding", Philosophy of Science, n°. 75, Chicago, (2008): 932-946.

Zubiri, Xavier. *Estructura Dinámica de la Realidad*, (Madrid: Alianza; 1995 (1989)).

Zubiri, Xavier. *Sobre la Esencia*, (Madrid: Alianza; 1985 (1962)).