HAL
open science

Filosofia della chimica

Riccardo Spezia

To cite this version:

Riccardo Spezia. Filosofia della chimica. Aphex, 2017, 15. hal-01575060

HAL Id: hal-01575060
https://hal.science/hal-01575060

Submitted on 17 Aug 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

APhEx 15, 2017 (ed. Vera Tripodi)
Ricevuto il: 02/01/2016
Accettato il: 05/12/2016
Redattore: Vera Tripodi

APhEx
PORTALE ITALIANO DI FILOSOFIA ANALITICA
GIORNALE DI FILOSOFIA
NETWORK
N° 15 GIUGNO 2017

T E M I

Filosofia della chimica

Riccardo Spezia

In questo breve articolo presenterò i concetti di base e gli argomenti di discussione attuali della filosofia della chimica, un settore relativamente nuovo della filosofia della scienza. Partendo dalla contrapposizione tipica tra riduzionismo ed emergentismo mostrerò in che modo scienziati e filosofi considerano i problemi concettuali della chimica. Questo sarà il filo conduttore di una panoramica che dagli atomi arriverà alle sostanze macroscopiche. Mostrerò infine come la questione dei generi naturali, ancora poco affrontata in filosofia della chimica, sia cruciale per caratterizzare epistemologicamente e ontologicamente i diversi concetti della chimica e quindi dell'intera scienza chimica.

1. INTRODUZIONE
2. RIDUZIONISMO ED EMERGENTISMO
   2.1 Riduzionismo nella scienza
   2.2 Riduzionismo nella filosofia della scienza
   2.3 Proprietà (chimiche) emergenti
3. I CONCETTI CHIMICI DI BASE
   3.1 Elementi
   3.2 Molecole
   3.3 Sostanze
4. GENERI NATURALI E GENERI CHIMICI
5. CONCLUSIONI
6. BIBLIOGRAFIA

1. Introduzione

Nel campo della filosofia delle scienze speciali si sta ritagliando uno spazio interessante, dalla metà degli anni novanta, una nuova disciplina, la filosofia della chimica. Meno nota forse della filosofia della fisica o della biologia, è però in notevole ascesa, in particolare nel mondo anglosassone. Recentemente, grazie all'apparizione di due riviste specifiche, *Hyle*[1] e *Foundations of Chemistry*[2], la filosofia della chimica ha ottenuto, nel panorama accademico, un suo spazio indipendente. Negli anni novanta e duemila si è consolidata una comunità autonoma di filosofi della scienza e di chimici, che ha sempre mantenuto stretti contatti con le tradizioni precedenti. Infine, da poco esiste l'*International Society for the Philosophy of Chemistry*[3] che è stata fondata con lo scopo di promuovere lo scambio di idee tra chimici, biochimici, filosofi, storici, sociologi ed educatori[4]. Nella *Stanford Encyclopedia of Philosophy* la voce *Philosophy of Chemistry* è apparsa solamente nel

[1] Il primo volume è del 1995, http://www.hyle.org/.
[2] Il primo volume è del 1999, http://www.springer.com/philosophy/epistemology+and+philosophy+of+science/journal/10698.
[3] http://ispc.sas.upenn.edu/.
[4] Come riporta il sito della ISPC: La Società Internazionale per la Filosofia della Chimica (ISPC) si occupa degli scambi internazionali di idee sulle basi filosofiche delle scienze chimiche e delle aree affini. Questo scambio favorisce il discorso tra chimici, biochimici, filosofi, storici, sociologi e educatori. Originale in inglese (tradotto dall'autore): *The International Society for the Philosophy of Chemistry (ISPC) is devoted to the international exchange of ideas concerning the philosophical foundations of the chemical sciences and related areas. This exchange fosters discourse between chemists, biochemists, philosophers, historians, sociologists and educators.*

2011 grazie ai contributi di Michael Weisberg, Paul Needham e Robin Hendry (Weisberg et al. 2011).

Se solo da venti anni[5] si parla esplicitamente di filosofia della chimica, esempi e problemi chimici in filosofia della scienza sono presenti da molto più tempo, in un certo senso dalle origini della filosofia. In questo breve saggio presenterò alcuni temi attuali, e in particolare quelli che si riferiscono a quella parte della filosofia della chimica che si inserisce nella tradizione della filosofia analitica. Non mancheranno, quando necessarie, alcune digressioni verso temi trattati già nella filosofia della scienza generale prima della costituzione formale di una disciplina specifica chimica[6].

La chimica non è mai stata protagonista in filosofia della scienza (tranne qualche rara eccezione). Per Schummer (2003) i motivi di questa marginalità sono dovuti a due aspetti: (i) teorici, a causa della mancanza di una *big question*; (ii) storici[7]. Seppure (oggi) la chimica non si occupi di grandi domande, contrariamente alla fisica dell'immensamente grande o dell'infinitamente piccolo (domande quali "di cosa è composta nell'intimo la materia?" o "qual è l'origine dell'Universo?"), non mancano per questo questioni metafisiche. Per quanto riguarda le motivazioni storiche, secondo Schummer la predilezione esplicita originaria dei membri del Circolo di Vienna per la fisica è stata uno dei motivi per cui la filosofia analitica sembra quasi aver dimenticato l'esistenza della chimica per molti anni. Bisogna però porre l'accento sul fatto che, se da una parte nella tradizione analitica si parla più esplicitamente di fisica che di chimica, non si può dimenticare che sia Nagel sia Kuhn prendono in prestito concetti della chimica nelle loro opere più classiche[8].

In questo breve articolo esporrò concisamente gli argomenti e gli interrogativi intorno ai quali si è sviluppata e si sviluppa ancor oggi la discussio-

[5] È del 1994 la prima conferenza internazionale dedicata esclusivamente alla filosofia della chimica.

[6] Lo studio della storia della chimica, importante soprattutto nei paesi latini, non sarà qui trattato. Un altro aspetto, che qui non tratterò, ma che spesso costituisce la motivazione iniziale di molti chimici che ha suscitato il proprio interesse alla filosofia della chimica, è quello della didattica (come è stato per uno degli autori più attivi in filosofia della chimica, Eric Scerri).

[7] Un'eccezione notevole è data dal materialismo dialettico di Engels che mette la chimica al centro della riflessione filosofica. La chimica non solamente è distinta dalla meccanica e dalla biologia ma serve per illustrare le leggi generali del materialismo dialettico. Grazie all'importanza attribuita da Engels alla chimica, nella tradizione filosofica della Germania Orientale la chimica ha sempre avuto un ruolo centrale. Si può leggere a tal proposito Schummer (1996).

[8] Si vedano Kuhn (1962) e Nagel (1979).

ne filosofica. In particolare mostrerò il punto di vista dei filosofi della chimica contemporanei, dei filosofi generali della scienza e, non ultimi, degli scienziati. Partirò dalla discussione che è storicamente centrale in filosofia della chimica: la sua riduzione (o meno) alla micro-fisica. Dopo aver discusso di come alcuni scienziati e filosofi considerino i concetti generali di riduzionismo ed emergentismo, ripartirò dagli oggetti classici di cui si occupa la chimica – elementi, molecole e sostanze – analizzando, in primo luogo, come le due posizioni riduzioniste ed emergentiste siano giustificate dai diversi autori nella loro applicazione a casi specifici della chimica. Questa discussione, seppur importante e centrale nel dibattito, è però incompleta se non estesa al problema dei generi naturali, che esporrò in conclusione ponendo l'accento sulle sue applicazioni ai problemi chimici. La questione della definizione dei generi naturali è particolarmente importante perché legata alla definizione delle leggi. Un approfondimento particolare dovrebbe rivolgersi a quest'ultimo aspetto che, se da una parte abbraccia in sé la questione del riduzionismo, dall'altra è stato poco discusso nella letteratura specifica della filosofia della chimica, mentre meriterebbe maggiori e più approfonditi studi.

2. Riduzionismo ed emergentismo

2.1 Riduzionismo nella scienza

Una delle questioni centrali in filosofia della chimica è il problema della riduzione della chimica alla micro-fisica, ed è forse l'argomento più trattato nella letteratura specializzata. E non può non esserlo perché, oltre ad essere un tema chiave della filosofia della scienza in generale, rappresenta per la chimica (e per la filosofia della chimica) la questione principale che può giustificarne l'autonomia dalla fisica. Il problema può essere formulato con una semplice domanda: "è possibile in ultima istanza ridurre la chimica alla fisica?"

Gli scienziati che hanno fondato la meccanica quantistica sembravano esserne certi. Celebre è la frase di Dirac (1929): «Le leggi di base necessarie per la teoria matematica di gran parte della fisica e di tutta la chimica sono completamente note, e il difficile è solamente che le applicazioni esatte di

queste leggi portano a equazioni che sono troppo complicate per essere risolte»[9].

Tutte le leggi necessarie a una teoria matematica dei processi chimici, per Dirac, sono quindi note, si tratta solo di risolvere delle equazioni che sono troppo complesse perché si trovi una soluzione analitica semplice. Il problema è quindi puramente tecnico e con i computer attuali la questione è risolvibile: alla soluzione analitica si sostituisce una soluzione numerica, meno elegante, forse, ma che produce gli stessi risultati. Per Dirac sarà, in ogni caso, solamente una questione numerica e temporale.

Sul rapporto tra chimica e fisica è interessante il punto di vista di Heisenberg (1972), per il quale non c'è dipendenza ma fusione, ovvero sintesi di due aspetti di un'unica teoria: «La fisica e la chimica si sono fuse nella chimica quantistica»[10]. Nella chimica quantistica (che possiamo definire brevemente come la scienza che studia l'equazione di Schrödinger su Hamiltoniani molecolari[11]) si fondono, ovvero convergono, la chimica e la fisica per come erano conosciute e praticate in quanto scienze distinte. Già prima che nascesse la nuova teoria quantistica, si era pensato di rendere la chimica una mera applicazione delle leggi fondamentali della fisica; la chimica-fisica pre-quantistica si era riproposta di spiegare i fenomeni chimici nei termini meccanici della termodinamica di Gibbs e Boltzmann. Un esempio notevole ci è dato da Jean Perrin, premio Nobel della fisica nel 1926 per aver mostrato la natura atomico/molecolare della materia[12]. Professore di chimica-fisica alla Sorbona di Parigi, il suo programma scientifico era proprio quello di usare i principi della meccanica per studiare la materia[13]. Perrin, analogamente a quanto scriverà Heisenberg decenni dopo, costituisce una chimica-fisica in cui si fondono la fisica e la chimica. Per Perrin la chi-

[9] Originale in inglese (t.d.a.): «The underlying laws necessary for the mathamatical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that exact applications of these laws lead to equations which are too complicated to be soluble».

[10] Originale in inglese (t.d.a.): «Physics and chemistry have become fused in quantum chemistry».

[11] L'Hamiltoniano molecolare è l'operatore quanto-meccanico di energia cinetica e potenziale di una molecola. La parte di energia cinetica non è altro che la somma degli operatori energia cinetica di nuclei ed elettroni ; la parte di energia potenziale è composta da interazioni coulombiane tra gli elettroni (repulsive), i nuclei (repulsive) e tra nuclei ed elettroni (attrattive).

[12] La motivazione del premio è la seguente: «mettere fine alla lunga lotta sulla reale esistenza delle molecole». T.d.a. da «put a definite end to the long struggle regarding the real existence of molecules».

[13] Sui lavori di Perrin si può leggere, tra gli altri, un recente articolo di Charlotte Bigg (2008).

mica-fisica costituisce una sintesi tra la fisica (che per lui si occupa dei fenomeni continui) e la chimica (che per lui si occupa dei fenomeni discontinui)[14]. Unendo le risorse teoriche e sperimentali di entrambi i campi sarà possibile, secondo Perrin (1903), studiare quei fenomeni trascurati dalle due scienze.

2.2 Riduzionismo nella filosofia della scienza

La questione dell'unità della scienza si pone quindi in modo cruciale, e la chimica fornisce un esempio utile per discutere il problema della riduzione e dell'emergenza. Infatti, in una classificazione del mondo fisico per livelli spaziali, la prima scienza speciale che nasce (emerge) dalla micro-fisica atomica è la chimica (Putnam e Oppenheim 1958). Si può quindi usare la chimica come esempio paradigmatico. In più la chimica presenta due vantaggi non indifferenti per i filosofi della scienza: (1) è una scienza matura. Le sue leggi sono chiare e studiate approfonditamente; inoltre i fenomeni chimici sono più facilmente riproducibili di quelli di altre scienze speciali come la biologia (per non parlare della sociologia o della medicina); (2) non pone questioni morali e quindi la discussione resta al riparo da interferenze ideologiche, che, invece, si presentano più facilmente quando si parla di riduzione e coscienza.

La questione del riduzionismo è stata al centro della discussione in filosofia della scienza almeno da Nagel (1979, prima edizione 1961) in poi. L'altra faccia della medaglia del riduzionismo è l'emergentismo, che viene introdotto dallo stesso Nagel[15]: «L'analisi della riduzione è intimamente rilevante per molte tesi attualmente discusse in filosofia generale, specialmente la dottrina nota come 'evoluzione emergente' od 'olismo'»[16].

Purtroppo ogni autore definisce il riduzionismo (e di conseguenza l'emergentismo) in modo diverso, ed è perciò difficile darne una definizione

[14] All'epoca di Perrin la fisica atomica non era ancora sviluppata, per fenomeni continui si intendono, per esempio, il moto, newtoniano, dei corpi o ancora le proprietà dei fluidi. Per fenomeni chimici discontinui invece si intendono le reazioni chimiche, che possono considerarsi come una discontinuità nella natura della materia. Per esempio in $H_2 + O_2 \rightarrow 2\ H_2O$ si ha uno stato iniziale "continuo" formato da H_2 e O_2 i quali reagendo diventano H_2O rompendo quindi la continuità della natura della materia che "improvvisamente" diventa acqua.

[15] Bigg (2008, 366).

[16] Dall'inglese (t.d.a.): «The analysis of reduction is intimately relevant to a number of currently debated theses in general philosophy, especially the doctrine known as 'emergent evolution' or 'holism'».

accettata da tutti. La condizione più forte di riduzione è quella enunciata da Nagel (1979) che si riferisce alla riduzione tra teorie[17] la quale, per essere effettuata, ha bisogno di leggi ponte tra la teoria riducente e quella ridotta. Un paradigma differente è, per esempio, quello esposto da Kemeney e Oppenheim (1956) secondo cui la riduzione avviene tra conseguenze osservabili[18]. Elemento comune alle differenti teorie è quello secondo il quale si hanno proprietà emergenti quando queste non sono riducibili[19]. Per molti filosofi della scienza la chimica rappresenta un tipico esempio di riduzione alla fisica atomica e molecolare. Kemeny e Oppenheim (1956) sembrano (quasi) chiudere la questione: «Una gran parte della chimica classica è stata ridotta alla fisica atomica»[20]. E lo stesso pensa Nagel (1979): «Alcune parti della chimica del novecento (e forse tutta questa scienza) sono riconducibili alla fisica post-1925»[21]. Sembra quindi che, riprendendo Dirac (1929), dal punto di vista teorico nulla si frappone al ridurre completamente la chimica alla fisica. Perché dunque, proprio quando sembrano non esserci più problemi tecnici per ricavare le proprietà chimiche dalle leggi fisiche[22] (ovvero per applicare sia la meccanica quantistica sia quella statistica) grazie all'enorme aumento delle capacità di calcolo scientifico, nasce una nuova disciplina chiamata filosofia della chimica?

I processi chimici hanno sempre avuto un posto rilevante nella filosofia della scienza, anche se poi è stata la fisica (e più specificatamente la fisica

[17] La riduzione per Nagel (1979, 338) è «la spiegazione di una teoria o di un insieme di leggi sperimentali stabilite in un ambito attraverso una teoria, generalmente pensata non invariabile per un altro ambito». Dall'inglese (t.d.a.): «Reduction [...] is the explanation of a theory or a set of experimental laws established in one area of inquiry, by a theory usually though not invariably formulated for some other domain».

[18] Per un'esposizione critica dei diversi concetti di riduzione (ed emergentismo) si veda per esempio Kistler (2007).

[19] Le proprietà possono anche sopravvenire. Una discussione breve sulla *supervenience* sarà data più avanti in questo capitolo.

[20] Dall'inglese (t.d.a.): «A great part of classical chemistry has been reduced to atomic physics».

[21] Dall'inglese (t.d.a.): «Certain parts of nineteenth chemistry (and perhaps the whole of this science) is reducible to post-1925 physics».

[22] Nel 2013 il premio Nobel per la chimica è stato assegnato a Karplus, Levitt e Warshel per «lo sviluppo di modelli multiscala per sistemi chimici complessi» (t.d.a. dall'originale: «the development of multiscale models for complex chemical systems»). In particolare il premio è stato assegnato per gli sviluppi nei metodi teorici che consentono di ottenere le proprietà di sistemi chimici da modelli quantistici e classici. Le informazioni si possono trovare sul sito della fondazione Nobel:
http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/
http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/advanced-chemistryprize2013.pdf.

teorica delle particelle) a essere stata considerata sempre più come "la" scienza. Secondo Schummer, una causa non marginale si ritrova nella tradizione accademica, di cui fanno parte sia i filosofi Kantiani sia i membri del Circolo di Vienna (e i suoi eredi in particolare in USA e Germania), che prediligevano la fisica (Schummer 2003)[23]. Un primo motivo sarebbe quindi legato alla storia della filosofia della scienza analitica e ai "gusti" dei suoi maggiori esponenti nel mondo accademico. Una ragione del fiorire odierno della filosofia della chimica, seguendo il punto di vista di Schummer, si troverebbe nel fatto che oggigiorno, a distanza di anni dalle tradizioni accademiche che avrebbero prediletto la fisica come scienza di interesse filosofico, i moderni filosofi della scienza si interesserebbero alla chimica perché vi trovano un terreno relativamente inesplorato. In più per i filosofi emergentisti è sembrato poter fornire un (potenziale) esempio di emergentismo.

L'altra tradizione, quella dell'emergentismo britannico rappresentato da Mill e Broad, ebbe poca fortuna per motivi storici. Broad scrive nel 1925 che la chimica sarebbe «il più chiaro esempio di comportamento emergente» (Broad 1925), poiché non è, per lui, possibile predire il comportamento di un composto chimico solamente dai suoi costituenti. In questa visione sarebbe impossibile, perciò, determinare il comportamento di una molecola unicamente dall'unione dei suoi costituenti. La meccanica quantistica, grazie alla quale tutte le proprietà di un sistema molecolare si possono ottenere risolvendo l'equazione di Schrödinger, si svilupperà pienamente pochi anni dopo relegando rapidamente la visione di Broad al passato.

L'emergenza della chimica dalla fisica è importante non solo per determinarne lo statuto ontologico come scienza autonoma ma anche per la filosofia della chimica, poiché ne giustifica, come detto, l'esistenza. Tuttavia, come mostrerò in seguito, il dilemma tra riduzionismo ed emergentismo non è l'unica questione della filosofia della chimica (né quindi si può, a mio parere, sostenere che tale questione sia dirimente per la sua esistenza come disciplina autonoma).

[23] Come già discusso nella nota 7 un'eccezione importante è data dal materialismo dialettico. La chimica viene largamente considerata e discussa nei lavori di Engels (si vedano il saggio anti-Dühring (Engels 1878) e la Dialettica della Natura (Engels 1883). Questo interesse di Engels per la chimica ha generato una tradizione di filosofia della chimica nei paesi dell'ex blocco sovietico e in particolare in Germania Est (Schummer 1996).

2.3 Proprietà (chimiche) emergenti

Se, come ho mostrato, molti autori sostengono la completa riduzione della chimica alla fisica, altri, al contrario, (sia in scienza e sia in filosofia) sono dell'avviso che la chimica si occupa di proprietà emergenti. Bisogna, innanzitutto, qui distinguere due possibili posizioni emergentiste: (1) epistemologica, (2) ontologica[24].

Si dice di una proprietà chimica essere emergente epistemologicamente quando non è possibile spiegarla a partire dagli oggetti che la costituiscono. Questo però non comporta l'impossibilità di poter compiere questa riduzione, ovvero spiegare il fenomeno basandosi sui suoi elementi costituenti, nel futuro. Si parla perciò di emergentismo epistemologico. Il progresso scientifico potrà eliminare questi ostacoli epistemologici, e, seguendo la visione di Hempel (1966) sarà un giorno possibile spiegare anche quei fenomeni (nel senso di ricondurne la causalità agli elementi costituenti) che oggi consideriamo irriducibili. La tensione tra riduzionismo ed emergentismo è per Hempel (1966) feconda perché stimola la ricerca scientifica verso spiegazioni più approfondite al fine di meglio comprendere il mondo che ci circonda. È questa la chiave del progresso nelle conoscenze chimiche: trovarne le loro basi microfisiche.

La chimica però sembra conservare una sua autonomia e potere esplicativo (e predittivo) anche senza dover sempre far ricorso alla microfisica. È interessante riportare quanto scrive Pauling (1939), uno dei più eminenti chimici del XX secolo: «Non penso che i conti di meccanica quantistica della struttura molecolare o cristallina renderanno mai obsoleti gli argomenti chimici del mio libro»[25]. Dopo più di settant'anni dal libro di Pauling, se da una parte i conti di meccanica quantistica applicati alla struttura molecolare e cristallina hanno assunto un ruolo fondamentale nell'interpretazione di quasi tutti i fenomeni chimici associati, i concetti espressi da Pauling sono quotidianamente usati dai chimici per fornire una spiegazione qualitativa dei fenomeni osservati.

Le proprietà delle molecole, l'abilità del chimico di immaginare nuove reazioni senza far appello alla meccanica quantistica, i concetti di molecola e di reattività conservano un loro statuto autonomo per molti autori. È pos-

[24] Non voglio, né posso qui, approfondire i concetti di emergenza, sarebbe una digressione troppo lunga e ci porterebbe troppo lontano dalle motivazioni del presente articolo. Un lettore interessato ad approfondire può iniziare da O'Connor e Wong (2012).

[25] Originale in inglese (t.d.a.): «I do not think that quantum mechanical calculations of molecular structure or crystal structure will ever make the sort of chemical arguments in my book obsolete».

sibile quindi che le proprietà chimiche siano emergenti in senso più profondo? Ovvero: sono ontologicamente emergenti? L'emergenza ontologica è, chiaramente, una condizione più forte. Infatti, in questo caso, eseguire il processo di riduzione di un fenomeno ai suoi costituenti microscopici rende impossibile la spiegazione del fenomeno stesso. Tale impossibilità non è solo pragmatica o empirica ma è concettuale e, ovviamente, la discussione tra emergentismo e riduzionismo dipenderà dal tipo di riduzione che si considera.

In molti casi se una proprietà chimica è pensata ontologicamente emergente essa avrà almeno tre caratteristiche: (1) avere nuovi poteri causali (al livello della proprietà stessa ma impossibili da generare a partire dalle proprietà del livello inferiore); (2) avere la capacità di influenzare le proprietà del livello inferiore (quella che viene chiamata *downward causation*)[26]; (3) rendere conto di proprietà globali.

L'emergentismo ontologico, che può diventare confuso se applicato con leggerezza in altri campi, trova nella filosofia della chimica un dominio d'indagine rigoroso, perché avulso da possibili contaminazioni non scientifiche. Un campo però anche fertile perché può portare all'evoluzione dei concetti di riduzionismo[27] ed emergentismo a partire da una discussione che si fonda su basi solide. La filosofia della chimica perciò si sviluppa analizzando nei dettagli concetti chimici, la loro connessione (o mancanza di connessione) con la fisica e in che modo le leggi chimiche abbiano (o non abbiano) uno statuto indipendente. Questo ha portato negli ultimi anni sia filosofi (della scienza e principalmente di tradizione analitica) sia scienziati a confrontarsi con problemi fondamentali della chimica da un punto di vista filosofico/teorico, ovvero interessandosi ai fondamenti delle leggi chimiche, al senso delle proprietà chimiche e delle entità che costituiscono la chimica.

Prima di continuare è importante ricordare come una proprietà possa sopravvenire anziché emergere. In generale si dice che un insieme di proprietà A sopravviene a un altro insieme B se non ci sono due oggetti che possono differire rispetto alle proprietà A senza differenziarsi anche nelle proprietà B (McLaughlin e Bennet 2014). Il concetto di sopravvenire (*supervenience* in inglese) è legato spesso al riduzionismo (Kim 1993): se una serie di proprietà A si riduce a un'altra serie di proprietà B, allora non ci potrà essere una differenza nelle proprietà A senza avere una differenza nelle proprietà B. Per i non-riduzionisti, invece, sopravvenire è un chiaro esempio

[26] Concetto originariamente introdotto da Campbell (1974).
[27] Non si possono, anche solo per motivi di spazio, qui descrivere tutti i diversi concetti di riduzionismo, il lettore può trovare un'interessante esposizione nello già citato Kistler (2007).

di nuovi poteri causali provenienti dal livello superiore a quello inferiore (la cosiddetta *downward causation*). Come spesso avviene quando si tratta di riduzionismo/emergentismo ogni scuola (e spesso ogni autore) presenta i diversi concetti con differenti sfumature interpretative. In chimica si possono trovare molti esempi di proprietà che sopravvengono: l'acqua sopravviene a H_2O, gli odori sopravvengono alle molecole (per esempio l'odore di mandorla amara sopravviene all'acido cianidrico o quello di pesce putrefatto alla cadaverina[28]). Altro esempio è dato dalle proprietà colligative[29] delle soluzioni le quali sopravvengono alla concentrazione delle particelle del soluto. Per Micha Newman, che in un articolo del 2008 riporta nel dettaglio la connessione tra sopravvenire e chimica, la chimica è pervasa dalla *supervenience* (Newman 2008).

Come già detto, la chimica, rispetto ad altre discipline, ha il vantaggio di essere una scienza matura e sufficientemente formalizzata perché la discussione, per esempio, tra riduzionismo ed emergentismo avvenga su concetti ben definiti scientificamente. La potenza della meccanica quantistica enunciata da Dirac può ai giorni nostri trovare una prova empirica. Una molecola è un sistema complesso (ma non così complesso come la coscienza o una società) e la sua connessione con la fisica può essere studiata direttamente analizzando in che modo, partendo dall'equazione di Schrödinger, si possono ottenere le proprietà della molecola data[30]. La discussione filosofica sul riduzionismo si sviluppa su queste basi, come fa, per esempio, Hendry (2010) in un recente lavoro sulla riduzione ontologica e le strutture

[28] Un esempio interessante, che ben mette in luce la complessità tra struttura molecolare e odore, è quello della molecola dello scatolo, la quale ha l'odore delle feci ma in soluzione diluita odora di muschio ed è perciò usato come fissatore per i profumi. A tal proposito si possono citare i versi di Alberto Cavaliere (1928) riferite allo scatolo: «…forma squamette candide / di forte odor fecale, / assai caratteristico; / eppure (è madornale!) / questo composto fetido / vilissimo e meschino / è nelle essenze magiche / d'arancio e gelsomino».

[29] Le proprietà colligative sono quelle proprietà delle soluzioni che dipendono unicamente dalla concentrazione dei soluti. Esse sono l'abbassamento della temperatura di solidificazione (abbassamento crioscopico), l'innalzamento della temperatura di evaporazione (innalzamento ebullioscopico), e quindi l'abbassamento della tensione di vapore, e la pressione osmotica (date due soluzioni in contatto attraverso una membrana semi-permeabile, che consente il passaggio del solvente ma non del soluto, il solvente tenderà a passare dalla soluzione più diluita a quella più concentrata con conseguente innalzamento di quest'ultima; la pressione che occorre per riportare la soluzione più concentrata allo stesso livello di quella meno concentrata è detta pressione osmotica).

[30] Per maggiori informazioni si possono leggere i libri di base della chimica quantistica; si può, per esempio, iniziare dal testo di Cramer (2004). Alcune spiegazioni più semplici matematicamente si possono trovare anche nella letteratura di filosofia della chimica (Sutcliffe e Wooley 2012; Woody 2012).

molecolari. Egli, rifacendosi alla tradizione dell'emergentismo britannico, riformula in termini moderni e attuali il concetto originariamente introdotto da Broad di "forza configurazionale" che diventa un "Hamiltoniano configurazionale" (Hendry 2010). Un Hamiltoniano risultante è determinato unicamente dalle forze che sono implicate, mentre un Hamiltoniano configurazionale è determinato dalla struttura molecolare. Il primo sarà evocato dai riduzionisti, il secondo dai non-riduzionisti, come Hendry. Il punto di partenza è la rottura della simmetria[31]che si determina quando si applica l'approssimazione di Born-Oppenheimer[32], che è il punto di partenza della chimica quantistica. Le forze che si esercitano tra elettroni e nuclei sono puramente elettrostatiche, quindi simmetriche. Se gli atomi, come l'atomo di idrogeno per il quale l'equazione di Schrödinger può essere risolta analiticamente, hanno una funzione d'onda simmetrica, questo non vale per le molecole. L'esempio tipico di Hendry è l'acido cloridrico, HCl[33]. Questa molecola ha una distribuzione di carica non-simmetrica (maggiore densità di carica negativa sul Cl) che è alla base delle sue caratteristiche chimiche di acidità. Per ottenerne la funzione d'onda (con metodi approssimati, non essendo possibile la soluzione analitica dell'equazione di Schrödinger associata), bisogna imporre e fissare la disposizione degli atomi nello spazio. Questo, per Hendry, determina un Hamiltoniano configurazionale ed è un tipico caso di *downward causation*. Come, infatti, è possibile pre-determinare una geometria? Un secondo problema sollevato dalla rottura della simmetria riguarda il principio di completezza della fisica, secondo il quale la meccanica unifica il movimento di ogni sistema fisico grazie all'applicazione di un numero limitato di forze che hanno un carattere completamente generale.

[31] L'argomento della rottura della simmetria era già stato utilizzato nel contesto più generale di filosofia della scienza da Anderson (1972) nel suo famoso articolo More Is Different, che è stato (ed è tuttora) uno dei riferimenti scientifici delle posizioni non-riduzioniste.

[32] Nell'approssimazione di Born-Oppenheimer si assume che gli elettroni si equilibrino istantaneamente al muoversi dei nuclei poiché i primi sono molto più leggeri dei secondi. E' possibile così dividere la soluzione della funzione d'onda nucleare da quella elettronica. Questo semplifica l'equazione di Schrödinger di un sistema molecolare ed è alla base della teoria della struttura elettronica usata quotidianamente in Chimica Quantistica. Per ogni configurazione nucleare si deve calcolare semplicemente la funzione d'onda elettronica, ottenendo i legami chimici e le forze esercitate sui nuclei. È possibile così trovare le geometrie corrispondenti ai minimi di energia potenziale o applicare le equazioni del moto sui nuclei. Per descrizioni più approfondite si possono consultare i testi di Chimica Quantistica.

[33] Hendry (2010, 187): «l'asimmetria non è data dalle basi fisiche della molecola secondo le leggi fisiche» (originale in inglese (t.d.a.): «the asymmetry is not conferred by the molecule's physical basis according to physical laws»).

Però, come argomenta Hendry, la spiegazione quanto-meccanica della struttura chimica e dei legami presuppone una rottura della simmetria che non deriva da nessun principio micro-fisico e, anzi, presuppone l'intervento di forze configurazionali, che non sono né poche né generali. Hendry quindi, partendo da una posizione di non-riduzionismo ontologico al livello molecolare (ovvero le proprietà molecolari non sono ontolgicamente riducibili a quelle degli atomi che le compongono), risponde alle obiezioni tipiche rivolte alla posizione emergentista.

Non si tratta però di verificare una riduzione nageliana inter-teoretica[34] (ovvero derivare le leggi della chimica dalle leggi della fisica), che viene considerata impossibile in senso strettamente nageliano sia da riduzionisti che da non-riduzionisti. La posizione di Hendry (2010) si può riassumere in tre punti: (1) le molecole sono costituite unicamente da atomi (nuclei ed elettroni). Hendry resta quindi nel fisicalismo; (2) i suoi costituenti non ne esauriscono i poteri causali. Qui è centrale la tensione tra Hamiltoniano risultante, posizione riduzionista, e Hamiltoniano configurazionale, posizione emergentista che, come abbiamo detto, è la versione moderna delle forze configurazionali di Broad; (3) tra questi nuovi poteri causali c'è anche quello verso il basso (*downward causation*), ovvero il comportamento dei costituenti di base (*basic stuff*) è governato (anche) dall'Hamiltoniano configurazionale.

La posizione emergentista è spesso di difficile digeribilità per molti scienziati, che probabilmente accettano più facilmente la posizione di Scerri il quale, in risposta allo stesso Hendry, dichiara il suo scetticismo (Scerri 2012). La forza del ragionamento di Hendry è quello di basarsi sulla rottura della simmetria, ma per Scerri ne è anche la sua debolezza («È questa misteriosa rottura della simmetria che Hendry identifica con la *downward causation*»[35]). In ogni modo, l'articolo di Hendry è un chiaro esempio di come lo studio del rapporto tra chimica e fisica possa essere alla base di una discussione tra riduzionismo ed emergentismo che utilizzi risultati scientifici solidi e che hanno raggiunto un livello di formalismo maturo e sviluppato nei dettagli, come è il caso dell'approssimazione di Born-Oppenheimer. Partendo dall'ontologia della struttura molecolare, si possono applicare in modo rigoroso le posizioni riduzioniste ed emergentiste e mostrare cosa ciascuna di essa implichi (o su cosa si possono e devono basare).

[34] Per la riduzione tra teorie si veda la già citata opera di Nagel (1979).
[35] Scerri (2010, 24): originale in inglese (t.d.a.): «It is this mysterious symmetry breaking that Hendry identifies with downward causation».

Come abbiamo visto il dibattito tra riduzionismo ed emergentismo è al centro della filosofia della chimica e sicuramente molto è ancora il lavoro da fare in questo campo. La filosofia della chimica però non si limita al riduzionismo e all'emergentismo, ma si sviluppa analizzando i concetti di elementi, atomi, sostanze e trasformazioni. Nel prossimo capitolo esporrò come questi concetti di base sono discussi da scienziati e filosofi anche in rapporto a come sono definiti ufficialmente dalla IUPAC[36]. Inoltre un aspetto importante da considerare non è solo come questi concetti si inseriscono nella discussione riduzionismo/emergentismo, ma anche come partecipano ad un altro tema centrale in filosofia della scienza che è quello dei generi naturali. Quest'ultimo aspetto sarà discusso nel quarto capitolo.

3. I concetti chimici di base

3.1 Elementi

La chimica internazionale è "amministrata" dalla IUPAC, la società internazionale di chimica pura e applicata che, tra le altre cose, decide i nomi delle molecole e stabilisce le definizioni ufficiali. La IUPAC riporta le seguenti definizioni di elemento chimico[37]:

> 1. Una specie di atomi; tutti gli atomi con lo stesso numero di protoni nel nucleo atomico[38].
>
> 2. Una sostanza chimica pura composta di atomi con lo stesso numero di protoni nel nucleo atomico. Talora questo concetto è chiamato sostanza elementare per distinzione dall'elemento chimico definito in 1, ma spesso il termine elemento chimico è usato per entrambi i concetti[39].

[36] La IUPAC è la *International Union of Pure and Applied Chemistry* che, tra le altre cose, definisce tutti i concetti della chimica, oltre a stabilire i nomi degli elementi e dei composti.
[37] IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book"). Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997). XML on-line corrected version: http://goldbook.iupac.org (2006-) created by M. Nic, J. Jirat, B. Kosata; updates compiled by A. Jenkins. ISBN 0-9678550-9-8. doi:10.1351/goldbook.
[38] Originale in inglese (t.d.a.): «A species of atoms; all atoms with the same number of protons in the atomic nucleus».
[39] Originale in inglese (t.d.a.): «A pure chemical substance composed of atoms with the same number of protons in the atomic nucleus. Sometimes this concept is called the elementary substance as distinct from the chemical element as defined under 1, but mostly the term chemical element is used for both concepts».

La definizione (1) è quella di elemento come *basic substance* mentre la (2), che non è propriamente corretta, come sottolinea la IUPAC stessa ma che è comunque spesso usata, è quella di *pure substance* (si veda Scerri (2005)). Quest'ambiguità ha pervaso la filosofia dall'antichità fino ai giorni nostri. Gli elementi in chimica trovano la loro cattedrale nella tavola periodica, costruita inizialmente da Mendeleev il quale individuò dapprima la massa (che fu la proprietà fondamentale della chimica sin da Lavoisier) come la caratteristica necessaria per distinguere un elemento dagli altri. Anche se si è poi sostituito alla massa il numero di protoni del nucleo (ovvero il numero atomico) come proprietà distintiva di ogni elemento, è proprio lo stesso Mendeleev (1891) a spiegare chiaramente la differenza tra le due definizioni:

> È utile in questo senso fare una chiara distinzione tra il concetto di un elemento come una distinta sostanza omogenea e come una parte materiale ma invisibile di un composto. L'ossido di mercurio non contiene due semplici corpi, un gas e un metallo, ma due elementi, mercurio e ossigeno, i quali, da liberi, sono un gas e un metallo. Né il mercurio come metallo, né l'ossigeno come gas sono contenuti nell'ossido di mercurio; questo contiene solamente la sostanza degli elementi, come il vapore contiene la sostanza del ghiaccio, ma non il ghiaccio stesso, o come il mais contiene la sostanza del seme ma non il seme stesso[40].

Gli elementi sono perciò una sostanza pura non-osservabile con una proprietà, la massa per Mendeleev. Il numero atomico ha poi sostituito la massa come proprietà che si mantiene costante quando gli atomi si uniscono per formare le molecole, in modo da conservare la sistematicità della tavola periodica dopo la scoperta degli isotopi: nuovi isotopi non aggiungeranno altri elementi alla tavola periodica. Gli isotopi, infatti, sono degli atomi che pur avendo lo stesso numero di protoni hanno massa diversa (perché hanno un diverso numero di neutroni), ma hanno le stesse proprietà chimiche. Le proprietà chimiche perciò sono definite dal numero di protoni, perché questi determinano il numero di elettroni e sono gli elettroni i principali attori in chimica.

[40] T.d.a. dalla versione inglese: «It is useful in this sense to make a clear distinction between the conception of an element as a separate homogeneous substance and as a material but invisible part of a compound. Mercury oxide does not contain two simple bodies, a gas and a metal, but two elements, mercury and oxygen, which, when free, are a gas and a metal. Neither mercury as a metal nor oxygen as a gas is contained in mercury oxide; it only contains the substance of the elements, just as steam only contains the substance of ice, but not ice itself, or as corn contains the substance of the seed but not the seed itself».

Questa definizione scientifica di elemento coincide (come fa notare Scerri (2005)) con il concetto di elemento come genere naturale secondo la teoria causale del riferimento di Kripke-Putnam (Kripke 1972; Putnam 1975). Kripke, infatti, prima rifiuta la dualità del concetto di elemento:

> Ciò può far pensare subito a qualcuno che ci sono in realtà due concetti di metallo che agiscono qui, uno fenomenologico e uno scientifico che quindi lo sostituisce. Questo lo rifiuto, ma poiché ciò può tentare molti, e potrà essere confutato solo dopo che avrò sviluppato una mia visione, non si potrà usare 'L'oro è un metallo' come esempio per introdurre questi punti di vista[41].

giungendo poi alla conclusione secondo la quale l'oro si identifica (come specie naturale) grazie al suo numero atomico, 79: «… la teoria scientifica attuale è tale che è parte della natura dell'oro essere un elemento con numero atomico 79. Sarà quindi necessario e non contingente che l'oro sia un elemento con numero atomico 79»[42]. Il concetto di elemento della IUPAC e quello della teoria causale del riferimento di Kripke-Putnam vengono così a sovrapporsi (Scerri 2005).

Gli elementi sono perciò delle specie naturali. Qual è allora lo status della tavola periodica? Puramente epistemologico, come sostengono, tra gli altri, Mazurs (1974) e Stewart (2004)? Per Scerri (2005) c'è qualcosa di più se la si riorganizza, come già suggerì Janet (1929), in gruppi che costituiscono anch'essi una specie naturale:

> Io credo che sia necessario affermare che una particolare rappresentazione riflette la periodicità chimica, vista come un fatto obiettivo, nel miglior modo possibile. Sto quindi suggerendo una visione realista della legge periodica che richiede il credere che gruppi di elementi, come gli elementi stessi, siano generi naturali[43].

[41] Originale in inglese (t.d.a.): «This may make some people think right away that there are really two concepts of metal operating here, a phenomenological one and a scientific one which then replaces it. This I reject, but since the move will tempt many, and can be refuted only after I develop my own views, it will not be suitable to use 'Gold is a metal' as all example to introduce these views».

[42] Originale in inglese (t.d.a.): «… present scientific theory is such that it is part of the nature of gold as we have it to be an element with atomic number 79. It will therefore be necessary and not contingent that gold be an element with atomic number 79».

[43] Originale in inglese (t.d.a.): «I believe that one may still maintain that one particular representation reflects chemical periodicity, regarded as an objective fact, in the best possible manner. I am thus suggesting a realist view of the periodic law that requires believing that groups of elements, as well as elements themselves, are natural kinds».

Gli elementi (chimici) sono quindi definiti e classificati in base al numero di protoni e organizzati per periodi che seguono un numero quantico (per l'organizzazione tradizionale) o due numeri quantici (per l'organizzazione di Janet riproposta da Scerri). L'elemento diventa così un esempio di applicazione del micro-riduzionismo? Se così fosse, tuttavia, perché dovremmo scegliere il numero atomico e non più la massa come proprietà distintiva? Come abbiamo già detto, due isotopi hanno diversa massa ma medesime proprietà chimiche. Esistono quindi delle proprietà specifiche alla chimica, e queste proprietà determinano la distinzione (e per alcuni i generi naturali) tra gli elementi. Un riduzionista radicale, però, potrebbe obiettare che abbiamo scelto deliberatamente il numero atomico, ovvero il numero di protoni, ma non abbiamo considerato la massa, ovvero abbiamo dimenticato il numero di neutroni. Prendiamo l'esempio di due molecole biatomiche, H_2 la molecola di idrogeno (composta da due atomi di idrogeno, H) e D_2 quella di deuterio (composta da due atomi di deuterio, D). L'atomo di idrogeno è composto da un protone e un elettrone, mentre quello di deuterio da un protone, un elettrone e un neutrone, ha quindi massa atomica doppia (circa) dell'idrogeno. Una molecola biatomica vibra come una molla con una frequenza che dipende dalla forza del legame (ovvero dalle interazioni Coulombiane tra i suoi costituenti che dipendono dalle cariche e non dalle masse – il neutrone è una particella neutra) e dalla massa degli atomi. In H_2 e D_2 la forza del legame è la stessa, mentre cambia la massa e quindi la frequenza della vibrazione. Reagiscono nello stesso modo (uguali proprietà chimiche[44]) ma, per esempio, hanno due spettri vibrazionali diversi. Esiste quindi almeno una proprietà misurabile che distingue H_2 da D_2. Questa diversa proprietà non è più chimica? E' una proprietà fisica? Senza entrare in una discussione che merita sicuramente un approfondimento maggiore, dobbiamo rilevare che il processo che porta alla definizione di elemento come *basic substance* non è completamente ridotto ai suoi costituenti fisici. È un concetto, infatti, che trova la sua identità e il suo potere esplicativo nella chimica, una scienza che si pone, in un certo senso, a un livello superiore rispetto alla micro-fisica. È forse però più appropriato dire che la chimica si occupa di uno specifico insieme di proprietà diverso (in larga parte) da quelle di cui si occupa la fisica benché gli oggetti in esame siano gli stessi.

Se quindi accettiamo che la distinzione tra gli elementi si basa sul numero atomico stiamo indirettamente accettando che ci interessano le sue

[44] Quando si dice "reagire allo stesso modo" si sottintende "reagire fornendo gli stessi prodotti", ma se, per esempio, consideriamo la velocità di reazione due isotopi non reagiranno esattamente nello stesso tempo perché hanno massa diversa e la massa influisce, a parità di forza esercitata, sull'accelerazione (semplice considerazione Newtoniana).

proprietà chimiche. Il suo modo di combinarsi con altri elementi determina, in ultima analisi, la sua natura (chimica). Questa discussione, che potrebbe sembrare dal punto di vista scientifico un problema storico, tutt'al più interessante per chi si occupa di didattica della chimica (o di filosofia), ha trovato invece recentemente nuova e feconda linfa negli studi sui *cluster*. Castelman (2011), riassumendo i suoi lavori, ha scritto recentemente: «L'espansione della definizione di "elemento" per includere specie che si comportano come entità composite, allarga lo scopo della "tavola periodica" ad una terza dimensione»[45].

La terza dimensione della tavola periodica porta a concepire nuovi "superatomi" e, da questi, nuovi nano-materiali: «Il recente successo nel progettare questi superatomi che compongono una "tavola periodica 3D" e il comprendere le leggi fondamentali che governano le loro proprietà e la stabilità sono discusse, come anche le prospettive per il futuro di questo campo» (Castelman 2011)[46].

3.2 Molecole

Le molecole sono, in ordine di dimensione, il secondo oggetto della chimica: esse sono composte di atomi uniti insieme dai legami chimici. Come abbiamo già visto, le molecole intervengono nella discussione tra riduzionisti ed emergentisti (si veda la sezione 2.3 e in particolare l'articolo di Hendry (2010) lì discusso). Nella chimica quantistica per risolvere l'equazione di Schrödinger molecolare si usa molto spesso una funzione d'onda che ha per base[47] le funzioni d'onda atomiche. Ciò procura un grande vantaggio pratico nella sua risoluzione e anche nell'interpretazione. La teoria di Bader (1990) chiamata *quantum theory of atoms in molecules* (QTAIM)[48] è stata sviluppata e utilizzata per ritrovare la fisica atomica nelle molecole e si basa proprio sulla possibilità di proiettare le funzioni d'onda molecolari su quelle degli atomi che la compongono. Non vogliamo qui entrare nel dettaglio

[45] Originale in inglese (t.d.a.): «Expanding the definition of an "element" to include species that behave as composite entities broadens the scope of the "periodic table" to a third dimension».
[46] Original in inglese (t.d.a.): «Recent success in designing these superatoms composing a '3D periodic table' and understanding the fundamentals governing their properties and stability are discussed, as well as prospects for the future of this field».
[47] Si intende qui base in senso matematico, ovvero come insieme di funzioni (generalmente semplici e chiaramente definite e note) con cui si può esprimere un'altra funzione, come tipicamente in meccanica quantistica.
[48] In italiano: teoria quantistica degli atomi nelle molecole.

dell'uso di questo metodo, ma considerarne le implicazioni filosofiche. La posizione e la motivazione di Bader sono chiaramente riduzioniste (Bader 1990): «La teoria quantistica degli atomi nelle molecole, QTAIM, dimostra che ogni proprietà misurabile di un sistema, finito o periodico, può essere equiparata alla somma di contributi dagli atomi che lo compongono»[49]. La posizione di Bader è riassunta in un suo recente articolo (Bader e Matta 2013) dove si riafferma una posizione radicalmente riduzionista: «La chimica è fisica, la fisica di un atomo in una molecola o in un sistema esteso come un cristallo»[50, 51]. In questo modo Bader identifica gli atomi e le molecole, ispirato da Russell (1945) (e da Russell che cita Aristotele): «Ogni atomo, comunque, se è una "cosa", lo è in virtù del suo essere delimitato da altri atomi, avendo così, in un certo senso, una "forma"»[52]. Le molecole sono ottenute semplicemente sommando tra loro gli atomi; la quantità chiave della misura di Bader, la densità elettronica che si ottiene una volta risolta (in qualsiasi modo si voglia risolverla) l'equazione di Schrödinger molecolare, serve a: (1) definire i confini degli atomi, e quindi la forma; (2) verificare il principio per cui una molecola è poco più di una somma di atomi (perché la densità sugli atomi è molto più grande di quella tra gli atomi, si veda per esempio la figura 1 in Bader e Matta (2013)); (3) identificare i legami chimici (a partire dalla topologia della densità elettronica). E' possibile così identificare una molecola: «i nuclei legati da questo cammino di legame sono legati l'uno con l'altro […] e l'insieme di questi cammini di legame per una data molecola definisce il suo grafo molecolare»[53].

Evidentemente la posizione riduzionista radicale di Bader si può contestare come fa Hendry (2010) perché tutta la teoria QTAIM è basata sulla soluzione dell'equazione di Schrödinger dove si utilizza un Hamiltoniano molecolare[54] (che per Hendry è un Hamiltoniano configurazionale, quindi imposto dal fatto stesso che si costituisce una molecola e che ha quella partico-

[49] Originale in inglese (t.d.a.): «The quantum theory of atoms in molecules, QTAIM, demonstrates that every measurable property of a system, finite or periodic, can be equated to a sum of contributions from its composite atoms».
[50] Bader e Matta 2013, 254.
[51] Originale in inglese (t.d.a.): «Chemistry is physics, the physics of an atom in a molecule or in an extended system such as a crystal».
[52] Originale in inglese (t.d.a.): «Each atom, however, if it is a "thing", is so in virtue of its being delimited from other atoms, and so having, in some sense, a "form" ».
[53] Originale in inglese (t.d.a.): «Nuclei linked by such a bond path are bonded to one another […] and the set of bond paths for a given molecule defines its molecular graph».
[54] L'Hamiltoniano molecolare è brevemente descritto in nota 11. Per maggiori approfondimenti si possono consultare i testi di base della chimica quantistica, come quelli Cramer (2004) o Atkins e Friedman (2011).

lare conformazione). La posizione micro-riduzionista assunta da Bader è legata da una parte alla questione dell'identità di una sostanza (*Is water H_2O?* può riassumere questa discussione, come vedremo meglio nella prossima sezione), e dall'altra al concetto di legame chimico. Che cosa è quindi un legame chimico? Nella letteratura chimica due approcci si sono contesi il campo della teoria del legame chimico (ovvero di una teoria che non solo risponde a cosa è un legame chimico ma che operativamente consente di spiegare e predire le geometrie molecolari): la teoria del legame di valenza e quella degli orbitali molecolari[55]. La teoria del legame di valenza prende le mosse dal concetto di valenza data da Lewis (1923): «La valenza di un atomo in una molecola organica rappresenta il numero fisso di "legami" che unisce questo atomo ad altri atomi»[56]. Le connessioni tra gli atomi costituiscono i legami e definiscono le molecole, in una visione realista (dopo che nell'Ottocento i chimici organici, anche influenzati dalle posizioni antiatomistiche prevalenti, consideravano le strutture chimiche come un modo di rappresentare le molecole senza una necessaria base fisica – si veda per esempio Hendry (2012)) secondo la quale «il legame chimico non è una mera astrazione; è una definita realtà fisica, un qualcosa che lega un atomo a un altro» (Lewis, 1923)[57]. La teoria del legame di valenza quindi, partendo da questo qualcosa, costruisce le possibili strutture e, utilizzando i concetti di elettronegatività e di risonanza, fornisce un'interpretazione delle strutture molecolari (e un certo grado di predizione).

Il realismo del legame chimico è invece quasi negato (in particolare da Coulson (1961)) nella teoria degli orbitali molecolari che è una diretta applicazione della meccanica quantistica: la funzione d'onda molecolare è decomposta, analogamente a quella atomica, in orbitali (molecolari). I legami non sono imposti e non esistono se non come interazione tra due elettroni: «per sua intima natura un legame è un rapporto tra due elettroni»[58]. Questi, inseriti nella teoria quantistica, forniscono dei diagrammi di densità, facendo così quasi perdere, sfuggire, la realtà dei legami chimici. Nella funzione

[55] Per approfondire le due teorie esistono molti testi scientifici: Coulson (1961) è sicuramente un testo storico ma ancora attuale ; il testo di Shaik e Hiberty (2008) è istruttivo per capire come la «vecchia» teoria *Valence Bond* sia ancora attuale e utilizzabile nella sua versione moderna (più quantitativa). Infine per la teoria degli orbitali molecolari una delle esposizioni più «semplici» si può trovare in Atkins e Friedman (2011).
[56] Originale in inglese (t.d.a.): «The valence of an atom in an organic molecule represents the fixed number of "bonds" which tie this atom to other atoms».
[57] Originale in inglese (t.d.a.): «the chemical bond is not mere abstraction; it is a definite physical reality, a something which binds atom to atom».
[58] Originale in inglese (t.d.a.): «From its very nature a bond is a statement of two electrons».

d'onda molecolare, soluzione dell'equazione di Schrödinger associata, si ha un'informazione su quelle zone tra i nuclei che hanno una maggiore (o minore) probabilità di essere visitate dagli elettroni, ma alcuna che ci riconduca direttamente al legame chimico. Quando due o più elettroni interagiscono in una molecola (ovvero in presenza di protoni che li attraggono a sé) la soluzione delle equazioni della meccanica quantistica non è una unione tra due particelle chiaramente definita nello spazio (ovvero un legame covalente), ma una funzione, da cui si può ottenere una densità di probabilità. Se questa è sufficientemente elevata (e non presenta nodi) e se quindi l'energia per separare i due nuclei è dell'ordine di grandezza dell'elettronvolt (eV)[59], allora si considerano legati da un legame covalente. Se si poteva sperare che partendo dai principi primi (*ab initio*, per utilizzare un'espressione della chimica quantistica) si sarebbe ottenuto un legame chimico, questa speranza si infrange nella sua soluzione, «bellissimo diagramma di densità [..]» in cui, citando Coulson «il semplice legame è scomparso»[60].

Abbiamo così due concetti del legame chimico, uno "strutturalista", che deriva da Lewis e Pauling e uno "energetico", espresso dalla posizione scettica di Coulson. La prima visione è quella che è più legata alla pratica della chimica organica e alla spiegazione delle reazioni, la seconda è alla base della chimica quantistica. Dietro le due posizioni si cela la questione più profonda del realismo del legame chimico. Ovvero, i legami hanno una loro indipendenza fisica o sono una convenzione dei chimici per aiutarsi nell'interpretazione degli orbitali e delle densità molecolari? La questione è sorta con più forza quando la teoria strutturalista è stata sviluppata da Pauling avvicinandola alle nuove (all'epoca) teorie quantistiche e introducendo il concetto di "strutture di risonanza". Ma per Pauling la nuova teoria chimica, pur mutuando dalla meccanica quantistica alcuni concetti, è una teoria eminentemente chimica. Pauling, al contrario di Bader, considera le teorie chimiche indipendenti da quelle fisiche. La risposta di Pauling ai critici che accusavano la sua teoria di arbitrarietà ha un duplice carattere, empirico ed epistemologico: (i) la praticità della teoria è così riconosciuta dalla comunità scientifica che lo svantaggio dell'elemento arbitrario è irrilevante[61]; (ii) l'idealizzazione è presente anche nella teoria strutturale classica. Partendo dalle posizioni realiste della teoria strutturalista, Pauling giunge a posizioni

[59] Per esempio H_2 ha un'energia di legame di circa 4 eV.
[60] Originale in inglese (t.d.a.): «In the beautiful density diagram of today the simple bond has got lost».
[61] Nella *Nobel lecture* del 1954 Pauling afferma: «the convenience and usefulness are so great as to make the disadvantage of the element of arbitrariness of little significance».

quasi anti-realiste[62]: «i legami sono costruzioni teoriche, idealizzazioni, che hanno aiutato i chimici negli ultimi cento anni. […] La teoria della risonanza costituisce un'estensione di questa teoria»[63].

Il problema del realismo, che sembra meno presente da Perrin in poi, rinasce nella teoria chimica e nell'applicazione della meccanica quantistica: si tratta di puri oggetti matematici? E cosa ne è dei concetti di legame chimico, di elettronegatività o di valenza che sono centrali nella spiegazione in chimica? Se il legame chimico scompare (per dirla come Coulson), qual è il potere esplicativo della nuova teoria? Evidentemente le posizioni emergentiste sposeranno una concezione strutturale in cui nascono delle nuove entità (i legami chimici) con poteri causali (le reazioni) che non possono essere dati riducendo la questione ai suoi costituenti elementari. I riduzionisti, al contrario, cercheranno nuove definizioni e nessi causali dai nuovi concetti elaborati dalla chimica quantistica (ovvero dalla meccanica quantistica applicata alle molecole); la posizione di Coulson (e la visione energetica dei legami) è, per esempio, più affine a questi ultimi.

3.3 Sostanze

Ho considerato, finora, i concetti di atomo e molecola, ovvero i costituenti elementari della chimica. Se mi fermassi qui, però, non si completerebbe la discussione sulla filosofia della chimica, perché quest'ultima si occupa della trasformazione della materia ed è quindi, *in fine*, volta a capire come si comportano e si costituiscono le differenti sostanze del mondo che ci circonda. Il termine sostanza (e in particolare la sostanza chimica), che ha le sue origini in Empedocle, è definito così dalla IUPAC[64]: «Materia di composizione costante caratterizzata al meglio dalle entità (molecole, formule unitarie, atomi) di cui è composta. Le proprietà fisiche come densità, indice di rifrazione, conduttività elettrica, punto di fusione, etc. … caratterizzano la

[62] Si vedano le citazioni di Pauling in Hendry (2012).
[63] Originale in inglese (t.d.a.): «Bonds are theoretical constructs, idealizations, which have aided chemists during the past one hundred years. [….] The theory of resonance constitutes an extension of this theory».
[64] IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book"). Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997). XML on-line corrected version: http://goldbook.iupac.org (2006-) created by M. Nic, J. Jirat, B. Kosata; updates compiled by A. Jenkins. ISBN 0-9678550-9-8. doi:10.1351/goldbook.

sostanza chimica»[65]. Anche in questo caso la IUPAC sembra, in apparenza, chiudere la discussione, fornendo una definizione che delimita il campo di cosa, in chimica, si può considerare sostanza. Ritornando alla discussione sugli elementi, esposta nella sezione 3.1, le sostanze sono le *pure substances*. Poiché le sostanze sono composte da molecole o atomi, una parte della discussione rientra in quella del micro-riduzionismo. Una questione è quindi quella della definizione di entità macroscopica (la sostanza) a partire dai suoi costituenti. Poiché, oggi come ai tempi degli antichi greci, la sostanza più alla portata di mano è l'acqua, la discussione anche nella letteratura recente si è sviluppata principalmente intorno ad una domanda prototipica: *is water* H_2O?

Se ricorriamo alla teoria di Kripke-Putnam la risposta dovrebbe essere semplice: l'acqua è una specie naturale ed è composta di molecole di H_2O, come l'oro è una specie naturale determinata da atomi aventi numero atomico 79. Esistono però due complicazioni, che hanno stimolato il dibattito: (1) oltre alla classificazione esternalista *à la* Putnam che si rifà alla scienza, nel caso dell'acqua (come in quello dell'oro) entrano in gioco altre classificazioni; (2) se con l'oro il numero atomico è qualcosa di chiaramente definibile, con l'acqua esistono delle differenze che rendono più complicata una possibile risposta semplice alla domanda e che sono legate al microfisicalismo.

Tra le posizioni alternative a quelle di Kripke-Putnam[66] una delle più discusse è la posizione pluralista di Dupré (1981): nel caso dell'acqua esiste uno spazio per differenziare la classificazione scientifica (ovvero è acqua ciò che è fatto di H_2O) da quella popolare? Malt (1994) e Chomsky (1995) hanno sostenuto, per esempio, che l'uso quotidiano del termine "acqua" non corrisponde alla quantità (percentuale) di H_2O. L'affermazione di Malt è basata su un semplice esperimento fatto con alcuni studenti, cui è stato chiesto di definire come acqua o non-acqua una serie di liquidi (acqua del rubinetto, tè, etc. …): il risultato è stato che molti liquidi sono stati classificati come acqua pur avendo meno quantità di H_2O al proprio interno (acque molto salate tipicamente) di altri che pur contenendo più H_2O non sono stati considerati acqua (come per esempio tè o caffè). Oltre alle critiche a Malt degli

[65] Originale in inglese (t.d.a.): «Matter of constant composition best characterized by the entities (molecules, formula units, atoms) it is composed of. Physical properties such as density, refractive index, electric conductivity, melting point etc. characterize the chemical substance».

[66] Non vogliamo qui entrare nei dettagli del dibattito sui generi naturali ma solamente inquadrare la questione di "*is water* H_2O?" come prototipica per ogni sostanza macroscopica. Per maggiori dettagli sui generi naturali si può vedere Bird e Tobin (2015).

esternalisti (si veda per esempio Weisberg (2006) e Abbott (1997)), una critica (che potremmo definire emergentista-esternalista) della posizione linguistica è avanzata da Hendry (2010b) che riconosce la necessità dell'acqua di essere composta da H_2O e di poter essere utilizzata *as-such* o *in-a-mixture* in chimica come un genere naturale: «Anche nel linguaggio comune, l'uso di 'acqua' segue strettamente il suo contenuto in H_2O. Questo non dovrebbe sorprendere, poiché identificare l'acqua con H_2O è uno dei molti frutti della sottigliezza chimica del pensiero composizionale negli ultimi trecento anni. E' sensato rimettersi a questo»[67].

Il secondo aspetto è legato alla distinzione tra "immagine scientifica" e "immagine naturale", ed è riconducibile al micro-fisicalismo. Per Kim (e gran parte degli scienziati) l'immagine naturale è l'immagine scientifica e gli oggetti manifesti sono un'apparenza dei propri costituenti microfisici (Kim 1990). Questa posizione, esternalista-riduzionista, può essere attaccata considerando che: (i) anche il vapore acqueo e il ghiaccio sono costituiti da H_2O, ma non sono acqua, (ii) l'acqua microscopicamente vede un continuo equilibrio tra H_2O (due atomi di H e uno di O legati) e gli ioni H^+ e OH^- e (iii) esistono strutture di cluster (H_4O_2, H_6O_3 etc. …) che si formano e si distruggono continuamente nella sostanza chiamata acqua. Quale sostanza è quindi un genere naturale (sempre che lo sia)? Per van Brakel (2000) la chimica è la scienza delle "immagini manifeste" e l'acqua è una di queste sostanze manifeste cui si applicano le leggi chimiche:

> Queste sostanze manifeste, le loro proprietà e i loro usi non possono essere ridotti a parlare di molecole o a soluzioni dell'equazione di Schrödinger. L'assunzione comune per la quale la chimica può essere ridotta alla fisica è incorretta. La mia analisi della nozione di sostanza chimica supporta la visione per la quale se la questione della priorità è evocata, è l'immagine manifesta, macroscopica, che è precedente all'immagine scientifica, microriduzionista, non solo in senso metodologico ma anche epistemologico e ontologico[68].

[67] Originale in inglese (t.d.a.): «Even in the vernacular, application of 'water' tracks H_2O-content closely. That should be no surprise, because identifying water as H_2O is one of the many fruits of chemistry's refinement of compositional thinking over three centuries. It makes sense to defer to it».

[68] Originale in inglese (t.d.a.): «These manifest substances, their properties and uses cannot be reduced to talk of molecules or solutions of the Schrödinger equation. The common assumption that chemistry can be reduced to physics is incorrect. My analysis of the notion of chemical substance supports the view that if the question of priority is raised, it is the manifest, macroscopic image that is prior to the scientific, microreductionist image, not only in a methodological sense, but also in an epistemological and ontological sense».

Per van Brakel le sostanze macroscopiche costituisco la base di un'ontologia autonoma della chimica. Infatti, sempre secondo van Brakel (2012), le proprietà chimiche relazionali si identificano con le sostanze (per le quali le sostanze pure costituiscono un limite ideale): «La formazione di concetti e modelli in chimica è basata sulle assunzioni di sostanze pure distinte, poiché le proprietà chimiche sono relazionali»[69].

La centralità dell'aspetto relazionale in chimica è evidenziato anche da Schummer, per il quale le sostanze sono alla base dello "spazio chimico" che è una rete non-lineare i cui nodi sono appunto le sostanze collegati da relazioni che sono le reazioni chimiche date dalla pratica sperimentale. Questo definisce la vera natura (l'ontologia) della chimica (Schummer 1998): «la rete chimica, con le sostanze chimiche come i nodi e le relazioni chimiche come le connessioni, forma il nocciolo chimico della chimica sperimentale».

La sostanza pura in chimica quindi non è (sempre) una collezione di molecole dello stesso tipo. Per identificarla è necessario verificare sperimentalmente che le sue proprietà siano invarianti pur subendo processi di purificazione e transizione di fase. Operativamente è possibile perciò distinguere le sostanze pure dalle miscele: una sostanza è pura se è omogenea dopo aver subito diverse operazioni di frazionamento[70], con diverse tecniche sperimentali. Si avranno quindi differenti gradi di purezza, secondo le tecniche usate, e il limite ideale di purezza si ottiene quando una sostanza avrà subito un processo di frazionamento a risoluzione infinita (van Brakel 2012).

Le sostanze costituiscono il ponte tra la chimica del microscopico (atomi, molecole) e il mondo macroscopico. E un ruolo cruciale per definire una sostanza lo gioca il concetto di fase e di transizione di fase. Gli oggetti (i nodi della rete dello spazio chimico secondo la terminologia di Schummer) della chimica sperimentale sono quindi definiti macroscopicamente. È possibile perciò considerare parte della filosofia della chimica (o meglio di interesse in una riflessione filosofica sulla chimica) anche i lavori di Batterman sulle transizioni di fase e sull'idrodinamica (Batterman 2002)[71]. In particolare i concetti di multi-realizzabilità esposti da Batterman nell'ambito della scienza dei materiali sono stati ripresi ed ampliati recentemente da Manafu nel campo della chimica. Per Manafu, infatti, in chimica non si ha emergen-

[69] Originale in inglese (t.d.a.): «Formation of concepts and models in chemistry is based on the assumptions of distinct pure substances because chemical properties are relational».
[70] Esempi di tecniche di «frazionamento» sono la cristallizzazione, l'elettroforesi etc …
[71] Una lettura critica in italiano del libro di Batterman (2002) è stata scritta da Laura Felline (2010).

za delle entità ma delle leggi, delle proprietà e delle spiegazioni (Manafu 2015). Le leggi sono intimamente connesse ai generi naturali[72], i quali sono stati discussi (anche) nell'ambito dei sistemi chimici sia nella letteratura di filosofia della scienza, sia nel più recente dibattito di filosofia della chimica. Nel prossimo paragrafo presenterò i generi naturali in chimica.

4. Generi naturali e generi chimici

La discussione sui generi naturali (*natural kinds*) è una questione centrale in filosofia della scienza: individuare le giunture con cui dividere la natura è da sempre il cuore di ogni discussione ed è alla base di ogni visione del mondo. In filosofia della scienza una posizione preminente è assunta dalla teoria del riferimento di Kripke-Putnam. Intorno a questa visione essenzialista (un genere naturale richiede l'esistenza di una proprietà che sia necessaria e sufficiente perché si faccia parte della specie stessa) si sono sviluppati negli ultimi decenni diversi modi di intendere i generi naturali (Bird e Tobin 2015). Sia Putnam sia, soprattutto, Kripke (1972), che non sono certamente dei filosofi della chimica in senso attuale, hanno usato i concetti di elemento e sostanza per definire i loro concetti di genere naturale. Come abbiamo già detto (vedi sezione 3.1), il genere naturale "oro" coincide con "l'elemento il cui numero atomico è 79". La definizione IUPAC di elemento definisce quindi i generi naturali, e individua nel numero atomico la proprietà che caratterizza ogni membro del genere naturale. L'oro degli stolti (la pirite), pur somigliando all'oro, qualora rimpiazzasse il vero oro in tutti i giacimenti presenti sulla terra, non potrebbe mai essere oro perché il suo numero atomico non è 79. La fenomenologia (giallo) dell'oro non è la proprietà che lo caratterizza. La sua metallicità è un concetto più sfuggente, come nota Kripke, il quale si affida alle distinzioni microfisiche per identificare i generi naturali. Lo stesso vale per l'acqua e per l'esperimento della terra-gemella di Putnam (1975): *water is* H_2O. Elementi e composti sono usati come esempi e non si fa alcuna distinzione esplicita tra generi naturali e generi chimici nelle esposizioni di Kripke e Putnam. Si è, infatti, pienamente in una visione unitaria della scienza, in cui si trattano allo stesso modo elementi, composti, sostanze e animali (un altro esempio utilizzato negli stessi testi è quello della tigre). La stessa posizione unitaria è assunta da Quine (1970) per il quale i generi sono istintivi e naturali perché conseguenza di un giudizio di somi-

[72] Possiamo citare una frase di Fodor (1974), uno dei padri del concetto di multirealizzabilità: «If we disagree about what is a natural kind, we will probably disagree about what is a law, and for the same reasons».

glianza cui siamo predisposti in modo innato. Quine usa solamente di sfuggita le molecole per fornire un esempio di somiglianza.

Pur non potendo, in questo articolo, passare in rassegna tutta la letteratura della filosofia della scienza sul vasto tema dei generi naturali, è interessante far notare che recentemente Khalidi (2013) trova nelle molecole un esempio di generi *fuzzy*. Per Khalidi, infatti, se in molti casi la distinzione tra due generi è chiara e non ci sono istanze intermedie tra i due generi, questo non è vero sempre. Quando non si possono individuare distinzioni nette tra due generi si è in presenza di generi *fuzzy*. Un esempio fornito da Khalidi di genere *fuzzy* è proprio la distinzione tra due isomeri: «le frontiere tra due composti chimici isomeri sono vaghe, e gli isomeri sono certamente generi naturali chimici diversi poiché le loro proprietà chimiche sono generalmente molto diverse»[73]. I composti chimici sono dei generi *fuzzy* perché a essi è associata almeno una proprietà che varia in modo continuo lungo una dimensione. Khalidi riporta solo gli isomeri come esempio di generi chimici *fuzzy*, ma considerando i diversi concetti praticati in chimica non è difficile trovarne altri (e probabilmente migliori[74]). Per esempio i concetti chimici di "acidità" o "ossidabilità" o "nucleofilicità" sono definiti non in modo univoco (acido/non acido, per esempio) ma su una scala continua (più o meno acido) in quanto proprietà relazionali. I generi chimici relazionali (come acidità/basicità o nucleofilicità/elettrofilicità) sono più difficilmente classificabili secondo la teoria classica di Kriepke-Putnam. Possono però essere individuati come generi *fuzzy*, poiché si può passare da essere un acido al non esserlo in modo non netto. Purtroppo poco ancora si è discusso nella letteratura specifica della filosofia della chimica in termini di proprietà relazionali. Anche in quella più recente, infatti, la discussione è incentrata principalmente sui concetti di elemento e sostanza (come abbiamo già visto). Sia van Braakel sia Needham, infatti, si riferiscono al concetto di genere naturale

[73] Originale in inglese (t.d.a.): «the boundaries between isomeric chemical compounds are vague, and isomers are surely different chemical natural kinds since their chemical properties are generally very different».

[74] Khalidi porta come esempio di isomeri l'etanolo e il di-metil etere, che sono due composti dalle proprietà molto diverse. Ma non specifica qual è questa proprietà che varia in modo continuo. Si dovrebbe pensare a una coordinata di reazione tra le due molecole, ma questa non è né banale né esiste un equilibrio tra le due specie. Se invece si prendessero come esempio due isomeri strutturali (ovvero due molecole che differiscono, per esempio, per un diverso orientamento nello spazio ma che abbiano gli stessi legami), allora spesso quello che si presenta è un equilibrio tra le due forme. In questo caso ci si potrebbe porre la domanda: "chi è chi"?

per criticare la visione di Kripke-Putnam[75]. Il concetto di acidità viene solo nominato da van Brakel (2012) proprio a proposito dei gruppi funzionali, che sono soggetti a delle regole che non possono essere gerarchizzate: «Dobbiamo chiamare gli acidi di Bronsted-Lowry e Lewis due modelli di uno stesso genere naturale o due generi naturali alternativi ognuno con il proprio contesto di applicazione?»[76]. Il concetto di proprietà relazionale è alla base della "emergenza delle proprietà" proposta recentemente da Manafu e discussa nella sezione precedente (Manafu 2015).

Mentre molti autori (tra cui i già citati van Brakel, Needham ed Hendry) criticano la visione essenzialista, a questa si avvicina molto Scerri (2005) nella sua definizione di elemento chimico. In particolare l'enunciazione della legge periodica come regola n+l per definire elementi e gruppi è un modo *à la* Kripke-Putnam per definire i generi naturali (chimici). Il problema sembra, quindi, quello di definizione di legge chimica. Più in generale ritorna la questione della definizione di classi in base alle leggi della scienza. Partendo dal problema di capire come si interconnettono le entità che formano l'oggetto di studio della chimica si arriva alla necessità di classificare questi oggetti. Ma per farlo e per definire in termine rigoroso queste classi, ovvero questi generi chimici, si deve far appello alle leggi. Per citare Khalidi (2013): «Siamo partiti da una concezione epistemica dei generi naturali e questo ci ha portati a una caratterizzazione dei generi naturali in termini di causalità, o, in altre parole, in termini metafisici»[77]. Nel caso specifico della chimica, il problema è reso più complicato dal fatto di non poter definire in modo univoco quando una proprietà (e quindi una legge) appartiene alla chimica o no (o meglio interessa agli studi chimici). Si può a tal proposito riprendere l'esempio discusso in precedenza degli isotopi H_2 e D_2: stesse

[75] La critica di van Braakel è anche dura quando afferma che spesso i filosofi mancano di *scientific sophistication*, per cui: «Per esempio, troppo spesso i filosofi pensano ancora che una sostanza pura può essere definita come "una collezione di molecole dello stesso tipo". Comunque questa definizione si applica in casi rari, se mai si applica» (van Brakel 2012). Originale in inglese (t.d.a.): «For example, too often philosophers still think that a pure substance can be defined as "a collection of molecules of the same type. However, this definition only applies in rare cases if ever». La critica di Needham è invece più classica: si critica il microstrutturalismo della posizione di Kripke-Putnam (Needham 2012), riportando così la discussione nell'alveo del dibattito tra riduzionismo ed emergentismo visto in precedenza.

[76] Originale in inglese (t.d.a.): «Should we call Bronsted-Lowry and Lewis acids two models of one natural kind or two "alternative" natural kinds having their own context of application?».

[77] Originale in inglese (t.d.a.): «What started as an epistemic conception of natural kinds has led us to a characterization of natural kinds in terms of causality, or, in other words, in metaphysical terms».

proprietà chimiche ma diversi spettri vibrazionali. Circoscrivere le leggi chimiche necessita una definizione dei nessi causali, significa definire la rete connettiva tra oggetti, proprietà e funzioni che definiscono la scienza e che dovrebbero determinarne i confini. La discussione sui generi naturali in chimica, normalmente lasciata in second'ordine rispetto a quella su riduzionismo/emergentismo, merita sicuramente una discussione più esplicita ed approfondita nei prossimi anni. Essa, infatti, comprende il problema del riduzionismo ma allarga la prospettiva alle leggi e quindi alla causalità. Discutere in profondità i generi naturali abbraccia, in ultima analisi, i diversi aspetti discussi dalla filosofia della chimica e sintetizza, a mio modo di vedere, tutte le questioni profonde della chimica.

5. Conclusioni

Nel presente articolo ho voluto fornire un quadro d'insieme delle questioni che maggiormente animano la discussione in filosofia della chimica. Un aspetto fondamentale è quello del riduzionismo alla micro-fisica. Se per molti scienziati è quasi naturale assumere la posizione riduzionista, facendo proprie le parole di Dirac, Oppenheim e Nagel, non pochi sposano la posizione emergentista, senza ovviamente negare il fisicalismo. È interessante notare come il rigore fisicalista inevitabile negli scienziati, unito alla consapevolezza che qualcosa di diverso nasca quando dal microscopico si passa al macroscopico, ha generato in alcuni, come Perrin e Heisemberg, una posizione fusionista che si può in qualche modo accostare alla posizione di Humphrey, il quale individua negli "operatori di fusione" i meccanismi per i quali possiamo dire che una proprietà emerge (Humphrey 1997).

Infine ho cercato di mostrare come la discussione su riduzionismo/emergentismo, e più in generale quella sullo statuto dei principali oggetti studiati dalla chimica, si è sviluppata e si sviluppa attualmente. In particolare, seguendo un approccio che è apparentemente epistemologico, il cuore del problema risiede nella causalità (trasponendo alle questioni di filosofia della chimica quanto dice Khalidi in generale). La definizione dei generi naturali, il loro rapporto con le leggi e con l'identificazione delle leggi chimiche (in contrapposizione a leggi non chimiche) e come, di conseguenza, si definiscono gli enti, è forse lo scoglio finale di molte discussioni in filosofia della chimica. Il rapporto stretto tra leggi ed entità fa della chimica un fertile terreno, ricco di esempi e di dati riproducibili, per discutere e analizzare, basandosi sui risultati scientifici, i concetti più sottili e astratti.

Bibliografia

Abbott B., 1997, «A note on the nature of 'water'», *Mind,* 106, pp. 311-319.

Anderson, P.W., 1972, «More Is Different», *Science*, 177, pp. 393-396.

Atkins P., Friedman R., 2011, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford.

Bader R.F.W., 1990, *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Oxford University Press, Oxford.

Bader R.F.W., Matta C.F., 2013, «Atoms in molecules as non-overlapping, bounded, space-filling open quantum systems», *Foundations of Chemistry,* 15, pp. 253-276.

Batterman R.W., 2002, *The Devil in the Details: Asymptotic Reasoning in Explanation, Reduction, and Emergence*, Oxford studies in philosophy of science, Oxford University Press, Oxford.

Bigg C., 2008, «Evident atoms: visuality in Jean Perrin's Brownian motion research», *Studies in History and Philosophy of Science*, 39, pp. 312-322.

Bird A., Tobin E., 2015, «Natural Kinds», *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2015 Edition), E.N. Zalta (ed.). Online: http://plato.stanford.edu/archives/spr2015/entries/natural-kinds/.

Broad C.D., 1925, *The mind and its place in nature*, Harcourt, Brace & company, New York.

Campbell D.T., 1974, «Downward causation in hierarchically organised biological systems», in Ayala F.J., Dobzhansky T. (eds.), *Studies in the Philosophy of Biology: Reduction and Related Problems*, Macmillan, London/Basingstoke.

Castelman Jr. A.W., 2011, «From Elements to Clusters: The Periodic Table Revisited», *The Journal of Physical Chemistry Letters,* 2, pp. 1062-1069.

Cavaliere A., 1928, *La chimica in versi*, Zanichelli, Bologna.

Chomsky N., 1995, «Language and nature», *Mind,* 104, pp. 1-61.

Cramer C.J., 2004, *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, Wiley, New York.

Coulson C.A., 1961, *Valence*, Oxford University Press (second edition), London.

Dirac P.A.M., 1929, «Quantum mechanics of many-electron systems», *Proceedings of the Royal Society of London*, A123, pp. 714-733.

Dupré J., 1981, «Natural kinds and biological taxa», *Philosophical Review,* 90, pp. 66-90.

Engels F., 1878, *Anti-Dühring*. Disponibile in inglese nella raccolta:. Marx K., Engels F., *Collected Works*, Vol. 25, International Publishers, New York.

Engels F., 1883, *Dialektik der Natur.* Disponibile in inglese nella raccolta: K.Marx and F.Engels, *Collected Works*, Vol. 25, International Publishers, New York.

Felline L., 2010, «Lettura critica di: Robert W. Batterman, The Devil in Details: Asymptotic Reasoning in Explanation, Reduction and Emergence", Oxford University Press, Oxford Studies in the Philosophy of Science, Oxford, 2001, pp. 160», *Aphex – Portale Italiano di Filosofia Analitica*, vol. 2. Online: http://www.aphex.it/public/file/Content20141210_06.APhEx2,2010RecensioniFellineTheDevilintheDetails.pdf

Fodor J., 1974, «Special sciences, or the disunity of sciences as a working hypothesis», *Synthese,* 28, pp. 97-115.

Kuhn T., 1962, *The Structure of Scientific Revolutions*, University of Chicago Press, Chicago.

Heisenberg W., 1972, *Physics and Beyond: Encounters and Conversations*, Harper & Row, New York.

Hempel C.G., 1966, *Philosophy of Natural Science,* Prentice Hall, Englewood Clifs.

Hendry R.F., 2005, «Lavoisier and Mendeleev on the Elements», *Foundations of Chemistry* 7, pp. 31-48.

Hendry R.F., 2010, «Ontological reduction and molecular structure», *Studies in History and Philosophy of Science*, 41, pp. 183-191.

Hendry R.F., 2010b, «Science and Everyday Life: Water vs H_2O», *Insights,* 3, pp. 1-10.

Hendry R.F., 2012, «The chemical bond», in Hendry R.F., Needham P., Woody A.I. (eds.), *Handbook of Philosophy of Science. Volume 6: Philosophy of Chemistry*, Elsevier BV, Amsterdam.

Humphrey P., 1997, «How Properties Emerge», *Philosophy of Science*, 64, pp. 1-17.

Janet C., 1929, «The Helicoidal Classification of the Elements», *Chemical News*, 138, pp. 372-374 e pp. 388-393.

Kemeny J.G., Oppenheim P., 1956, «On reduction», *Philosophical Studies*, 7, pp. 6-19.

Khalidi M.A., 2013, *Natural Categories and Human Kinds*, Cambridge University Press, Cambridge.

Kim J., 1990, «Supervenience as a philosophical concept», *Metaphilosophy,* 21, pp. 1-27.

Kim J., 1993, «Concepts of Supervenience», in Kim, J. (ed.), *Supervenience and Mind: Selected Philosophical Essays*, Cambridge University Press, Cambridge, pp. 53-78.

Kistler M., 2007, «La réduction, l'émergence, l'unité de la science et les niveaux de réalité», *Matière Première*, 2, pp. 67-97.

Kripke S., 1972, «Naming and Necessity», in Davidson D., Harman G. (eds.), *Semantics of Natural Language*, Reidel, Dordrecht, pp. 253-355.

Lewis G.N., 1923, *Valence and the Structure of Atoms and Molecules*, Chemical Catalogue Company, Washington D.C.

Malt B., 1994, «Water is *Not* H_2O», *Cognitive Psychology,* 27, pp. 41-70.

Manafu A., 2015. «A Novel Approach to Emergence in Chemistry», in Scerri E., McIntyre L. (eds.), *Philosophy of Chemistry*, Boston Studies in the Philosophy and History of Science 306, Springer Science, Dordrecht.

Mazurs E., 1974, *Graphic Representation of the Periodic System During One Hundred Years*, Alabama UP, Tuscaloosa, AL.

McLaughlin B., Bennett K., 2014, «Supervenience», in Zalta E.N. (ed.), *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2014 Edition). Online: http://plato.stanford.edu/archives/spr2014/entries/supervenience/.

Mendeleev D.I., 1891, *The Principles of Chemistry, Longmans*, Green and Co., London [prima edizione inglese dalla quinta edizione russa].

Nagel E., 1979, *The Structure of Science.* Hackett Publishing Company, Indianapolis, Indiana . [Prima edizione del 1961]

Needham P., 2012, «Modality, Mereology and Substance», in Hendry R.F., Needham P., Woody A.I., *Handbook of Philosophy of Science. Volume 6: Philosophy of Chemistry*, Elsevier BV, Amsterdam.

Newman M., 2008, «Chemical supervenience», *Foundations of Chemistry*, 10, pp. 49-62.

O'Connor T., Wong H.Y., 2012, «Emergent Properties», in Zalta E.N. (ed.), *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2012 Edition). Online: http://plato.stanford.edu/archives/spr2012/entries/properties-emergent/.

Pauling L., 1939, *The Nature of the Chemical Bond, and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, Cornell University Press, Ithaca.

Perrin J., 1903, *Traité de Chimie Physique*, Les principes, Gauthier-Villars, Paris.

Putnam H., Oppenheim P., 1958, «The unity of science as a woking hypothesis», *Minnesota Studies in the Philosophy of Science*, 2, pp. 3-36.

Putnam H., 1975, «The Meaning of Meaning», in *Philosophical Papers*, vol. 2, Cambridge University Press, Cambridge.

Quine W.V., 1970, «Natural Kinds», in Rescher N. (eds.), *Essays in Honor of Carl G. Hempel*, D.Reidel Publishing Company, Dordrecht.

Russel B., 1945, *A History of Western Philosophy*, Simon and Schuster, New York.

Scerri E.R., 2005, «Some Aspects of the Metaphysics of Chemistry and the Nature of the Elements», *Hyle*, 11, pp. 127-145.

Scerri E.R., 2012, «Top-down causation regarding the chemistry-physics interface: a sceptical view», *Interface Focus*, 2, pp. 20-25.

Schummer J., 1996, «Bibliographie chemiephilosophischer Literatur der DDR», *Hyle*, 2, pp. 2-11.

Schummer J., 1998, «The Chemical Core of Chemistry I: A Conceptual Approach», *Hyle,* 4, pp. 129-162.

Schummer J., 2003, «The philosophy of chemistry», *Endeavour*, 27, pp. 37-41.

Shaik S.S., Hiberty P.C., 2008, *A Chemist's Guide to Valence Bond Theory*, John Wiley & Sons, Inc. Hoboken, New Jersey.

Stewart P., 2005, «A New Image of the Periodic Table», *Education in Chemistry*, 6, pp. 156-158.

Sutcliffe B.T., Woolley R.G., 2012, «Atoms and molecules in classical chemistry and quantum mechanics», in Hendry R.F., Needham P., Woody A.I., *Handbook of Philosophy of Science. Volume 6: Philosophy of Chemistry*, Elsevier BV, Amsterdam.

van Brakel J., 2000, *Philosophy of Chemistry*, Leuven University Press, Leuven.

van Brakel J., 2012, «Substances: The Ontology of Chemistry», in Hendry R.F., Needham P., Woody A.I. (eds.), *Handbook of Philosophy of Science. Volume 6: Philosophy of Chemistry*, Elsevier BV, Amsterdam.

Weisberg M., 2006, «Water is Not H_2O», in Baird D., McIntyre L., Scerri E. (eds.), *Philosophy of Chemistry: Synthesis of a New Discipline*, Springer, New York.

Weisberg M., Needham P., Hendry R.F., 2011, «Philosophy of Chemistry», in Zalta E.N. (ed.), *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Winter 2011 Edition). Online: http://plato.stanford.edu/archives/win2011/entries/chemistry/.

Woody A.I., 2012, «Concept amalgamation and representation in quantum chemistry», in Hendry R.F., Needham P., Woody A.I., *Handbook of Philosophy of Science. Volume 6: Philosophy of Chemistry*, Elsevier BV, Amsterdam.

Aphex.it è un periodico elettronico, registrazione n° ISSN 2036-9972. Il copyright degli articoli è libero. Chiunque può riprodurli. Unica condizione: mettere in evidenza che il testo riprodotto è tratto da www.aphex.it

Condizioni per riprodurre i materiali --> Tutti i materiali, i dati e le informazioni pubblicati all'interno di questo sito web sono "no copyright", nel senso che possono essere riprodotti, modificati, distribuiti, trasmessi, ripubblicati o in altro modo utilizzati, in tutto o in parte, senza il preventivo consenso di Aphex.it, a condizione che tali utilizzazioni avvengano per finalità di uso personale, studio, ricerca o comunque non commerciali e che sia citata la fonte attraverso la seguente dicitura, impressa in caratteri ben visibili: "www.aphex.it". Ove i materiali, dati o informazioni siano utilizzati in forma digitale, la citazione della fonte dovrà essere effettuata in modo da consentire un collegamento ipertestuale (link) alla home page www.aphex.it o alla pagina dalla quale i materiali, dati o informazioni sono tratti. In ogni caso, dell'avvenuta riproduzione, in forma analogica o digitale, dei materiali tratti da www.aphex.it dovrà essere data tempestiva comunicazione al seguente indirizzo (redazione@aphex.it), allegando, laddove possibile, copia elettronica dell'articolo in cui i materiali sono stati riprodotti.

In caso di citazione su materiale cartaceo è possibile citare il materiale pubblicato su Aphex.it come una rivista cartacea, indicando il numero in cui è stato pubblicato l'articolo e l'anno di pubblicazione riportato anche nell'intestazione del pdf. Esempio: Autore, *Titolo*, <<*www.aphex.it*>>, 1 (2010).