

2008 Istituto di Filosofia Arturo Massolo
Università di Urbino
Isonomia



La formula chimica di struttura: un problema per l'epistemologia popperiana?*

Andrea Tontini

Istituto di chimica farmaceutica e tossicologica, Università di Urbino "Carlo Bo"
andrea@uniurb.it

Abstract

Twentieth-century philosophy of science should be considered as mainly a philosophy of physics, not taking into account the originality and autonomy of chemical knowledge and, consequently, leaving the analysis of this fundamental branch of modern science underdeveloped. This paper begins by studying the constituent elements of the chemistry, thereby highlighting the profound difference between its method and scope and those of physics. The generation of chemical knowledge involves as a primary operation the isolation of elements and compounds and their structural characterization. Structural formulas must be consistent with experimental data from diverse spectroscopic techniques, which vouches for their truthfulness and irrefutability. It is argued that a structure formula is not to be held as an arbitrary intellectual construct possessing high heuristic value, but rather as a definitive, if rudimentary, statement regarding the authentic structure of a molecule, i.e. its atomic frame. This is at odds with Kuhn's interpretation of scientific activity as well as with Feyerabend's epistemology. Furthermore, the fact that structural formulas are not liable to falsification appears to contrast with Popperian fallibilism.

* Questo lavoro prende le mosse da un intervento tenuto il 14 novembre 2006 nell'ambito del "Ciclo di seminari all'interno del corso di filosofia della scienza 1 del prof. Vincenzo Fano", che ringrazio per l'invito e per l'interesse per i temi qui trattati.

1. Perché una filosofia della chimica?

Chi si propone di indagare con i mezzi della filosofia la struttura e il significato della scienza dovrebbe innanzitutto, a mio avviso, tenere in considerazione la diversità delle dimensioni, della struttura e del comportamento degli oggetti di studio di questa e, conseguentemente, dei linguaggi usati per descrivere tali oggetti. Siamo capaci di indicare in maniera schematica il significato di termini come “botanica”, “immunologia”, “teoria della relatività”, eccetera. Rispondere alla domanda: “Che cos’è la scienza?” è molto più arduo. Potremmo affermare che la scienza studia la materia (e l’energia attraverso gli effetti che questa produce sulla materia), dunque ciò che è misurabile. Chi pensa (chi scrive non è tra costoro) che solo ciò che è misurabile è conoscibile aggiungerebbe che la scienza equivale alla dimensione oggettiva della conoscenza. Potremmo naturalmente reperire definizioni più tecniche della scienza, ad esempio:

[C]iò che contraddistingue la modellizzazione scientifica – si tratti di corpi celesti, di corpi umani o di corpi sociali – è che sappiamo sempre riconoscere la natura provvisoria degli schemi e delle procedure cui abbiamo fatto ricorso.¹

Formulazioni tutte molto generiche, che non sembrano riferirsi alla pratica effettiva delle discipline scientifiche, alla scienza vissuta. È compito del filosofo, d’altro canto, far luce sui principi essenziali cui sottostanno aree più o meno estese di realtà. Se non alla scienza nel suo insieme, dove orientare la riflessione? L’impostazione che ritengo più ragionevole – in quanto basata su fattori empirici e storici palesemente oggettivi – segue la tripartizione classica della scienza in fisica, chimica e biologia. Che questi tre fondamentali domini si siano sviluppati, a partire dal ‘600, in modo primariamente autonomo, rappresenta un dato innegabile. Prima ancora che epistemologici, i motivi di ciò sono di carattere empirico: sono esistiti ed esistono individui, gruppi e comunità di persone interessati a manifestazioni del mondo materiale affatto diverse. Le si possono facilmente suddividere in tre categorie: a) fenomeni di tipo generale, quale il moto dei corpi, il comportamento e le proprietà della luce e del calore, i fenomeni elettrici e magnetici, eccetera; b) la composizione e le trasformazioni dei corpi, sia quelle indotte artificialmente che quelle che avvengono spontaneamente; c) gli organismi viventi e il loro comportamento. Lo studio di sistemi e di processi tanto dissimili ha dato origine a

tradizioni conoscitive (fisica, chimica e biologia) che è necessario, credo, analizzare separatamente, eventualmente articolando e integrando i risultati allo scopo di costruire sistemi di interpretazione più comprensivi. Le figure e le scuole più rappresentative della filosofia della scienza del Novecento (che non ho alcuna intenzione di svalutare, non fosse altro che per l'enorme quantità di riflessioni svolte) hanno seguito questa impostazione solo in parte. La filosofia della scienza infatti è stata finora essenzialmente una filosofia della fisica. Presupposto, a mio parere inaccettabile, di tale approccio è che il metodo della fisica costituisca il prototipo del metodo scientifico.

Per contro, la *philosophy of chemistry* è un settore di studi che inizia a svilupparsi solo negli anni '90², benché la produttività di conoscenze e l'impatto sulla società e sull'economia della scienza delle molecole – o scienza centrale, come si è preso in modo alquanto celebrativo a chiamarla – non siano stati meno forti di quelli della fisica e della biologia. Sulla base di dati scientometrici, Schummer³ ha anzi recentemente sostenuto che il ritmo di sviluppo della chimica è superiore a quello di queste ultime. L'analisi dello studioso tedesco, pur basandosi su un indicatore grossolanamente quantitativo come il numero di articoli di ricerca e di brevetti, testimonia l'importanza e la vitalità della chimica e indirettamente rimarca la noncuranza di intellettuali e filosofi nei suoi confronti⁴.

2. Chimica e fysicalismo. La chimica come incarnazione dell'emergenza

Ritengo (mi affido a personali impressioni più che a dati precisi) che sia tornato a sfavore della chimica la distinzione, largamente diffusa e accettata, fra scienze dure e scienze morbide. Oltre alla matematica e alla fisica, normalmente si considerano le discipline molecolari appartenenti alla prima categoria⁵, laddove si collocano la biologia e scienze umane quali l'economia e la psicologia nella seconda. Stante ciò, non si vede perché mai il filosofo debba ricercare in una scienza concettualmente rudimentale come la chimica quanto la fisica può veicolare in modo più perfetto ed esauriente. È forse per questo che chi ha affrontato la scienza delle molecole sotto il profilo filosofico⁶ si è finora più che altro impegnato sulla questione se essa sia o no riducibile alla fisica. Diversi studi⁷ hanno mostrato, a mio parere in modo assai

convincente, la indeducibilità delle teorie classiche della chimica dal paradigma quantistico. Ciò ha contribuito al

declino del riduzionismo radicale [e allo] svilupp[ò di] una nuova epistemologia. La possiamo chiamare epistemologia della complessità. Essa sorge da una nuova concezione del mondo fisico (...) Secondo tale concezione (...) la realtà deve esser vista come una stratificazione di livelli. Il sorgere della biologia ha convinto la maggior parte degli scienziati che non è più possibile affermare che la materia ordinaria è soltanto 'atomi e quanti'. Essa è, sì, atomi e quanti, ma i concetti e il formalismo sufficienti a descrivere atomi e quanti (...) non bastano a una scienza che tratti livelli superiori. A ogni livello si applicano nuovi concetti e nuove leggi poiché quivi emergono nuove proprietà della realtà. Tali proprietà non sono soltanto ciò che i fisici chiamano proprietà collettive di particolari configurazioni di particelle. Esse sono proprietà di oggetti che hanno in quel livello lo stesso rango delle particelle elementari in fisica. (...)

Proprio in virtù della necessità di nuovi concetti e leggi per ogni livello esiste un gruppo di 'scienze della complessità' (...)

L'organismo scientifico è un'insieme di discipline diverse, ciascuna attinente a un particolare livello di complessità (...)

Secondo la nuova concezione della scienza e della Natura, definita in tal modo, la chimica (...) ha il compito di guardare la materia cercando di far risalire le sue proprietà alle proprietà degli enti che caratterizzano il livello più basso in cui compaiono nuovi aspetti del reale dovuti alla complessità, per esempio delle molecole. Forse proprio nel fatto che le molecole si situano al livello di minima complessità troviamo la ragione principale per cui la chimica costituisce un riferimento essenziale per la filosofia della scienza e della Natura. La sua importanza deriva dalla considerazione che sistemi di particelle elementari fino a, e comprendenti, gli atomi non mostrano proprietà o regolarità che richiedono concetti e leggi *ad hoc*. Essi possono benissimo essere visti come particolari configurazioni di particelle elementari. Non è questo il caso delle molecole. Esse rappresentano il caso più semplice di entità persistenti la cui straordinariamente ricca diversità richiede una scienza specifica.⁸

Salendo la scala della complessità si incontrano dunque, stando a Del Re, come primi sistemi olistici le molecole; queste rappresenterebbero le strutture più semplici e fondamentali in cui, seguendo l'ormai arcinota formula, "il tutto è più della somma delle parti". «[L']emergenza è una caratteristica basilare delle scienze molecolari in generale e della chimica in particolare», insiste un altro studioso⁹, sollecitando gli

specialisti del tema dell'emergenza perché trattino di chimica, da lui ripetutamente definita «the embodiment of emergence».

Ho poco da aggiungere o da commentare. Peraltro la questione che la filosofia dell'emergenza ritiene più fondamentale per la comprensione delle scienze naturali – se le proprietà emergenti siano indeducibili in linea principio («strong emergence») o per ragioni pratiche («weak emergence») – mi pare abbia senso solo sovrapponendo e confondendo i piani ontologico ed epistemologico, il che ritengo illecito. Il discorso, non il reale, è a strati¹⁰. È possibile ottenere immagini diverse, addirittura inconfrontabili, del *medesimo* oggetto macroscopico (pensiamo a fotografie dei diversi versanti di una montagna); parimenti è ammissibile che teorie basate su presupposti diversi, perciò non riconducibili una all'altra, possano validamente descrivere parti di una stessa realtà microscopica: «[Q]uando studiamo», annota Villani,

i fenomeni delle energie atomiche, non dobbiamo preoccuparci della struttura interna dei nuclei e quando studiamo la meccanica dei gas, a temperature normali, non dobbiamo occuparci della struttura interna degli atomi. Nel primo caso dobbiamo considerare come unità identiche e immutabili i nuclei; nel secondo caso i singoli atomi. In tal modo i fenomeni osservati risultano più semplici e, fintanto che le energie prevalenti sono basse al punto di consentirci di considerare i costituenti come unità inerti, i sistemi possono venire capiti senza alcuna conoscenza della struttura interna dei costituenti.¹¹

L'epistemologia della complessità non contiene, da quanto riesco a intendere, idee nuove e originali¹². Essa è nondimeno un antemurale contro il fisicalismo. Il fallimento del programma fisicalista è sotto gli occhi di tutti, eppure non sembra completamente accettata l'idea della discontinuità del sapere. Per quanto riguarda questo contributo, considereremo la chimica in sé e per sé in un'ottica filosofica.

3. La struttura della conoscenza chimica. La chimica come scienza delle sostanze (pure)

Obiettivo della chimica è comprendere come la *struttura molecolare* determini o influisca sulle proprietà chimico-fisiche e sulla reattività di sostanze pure¹³ nonché sulle caratteristiche e sul comportamento di miscugli (ad esempio un alimento¹⁴, uno strato di vernice, la parete di un microorganismo) (la nozione di sostanza pura e quella, ad essa

collegata, di miscuglio, verranno esaminate tra breve). La chimica può a ragione essere concepita, pertanto, come “la scienza delle *molecole*”. Ancor più profondamente, tuttavia, essa è determinabile come “scienza delle *trasformazioni*”. Esaminiamo brevemente questa definizione. A tale riguardo è utile notare il modo in cui sono state rese le parole “fisica” e “chimica” nella lingua di un paese di grande cultura scientifica, la giapponese. “Chimica” è *kagaku*, letteralmente scienza, dottrina (*gaku*) del mutamento (*ka* viene dal verbo *kasaru*, che significa trasformare, cambiare); “fisica” è invece *butsurigaku*, letteralmente studio della legge degli oggetti materiali (*butsuri* è composto da *butsu*, cosa, materia, e *ri*, ragione, verità). La fisica insomma è la scienza dei principi che regolano la natura, la chimica la scienza delle sue trasformazioni. In effetti, basta dare una scorsa alla storia della chimica per convincersi di come coloro che praticarono tale scienza abbiano costantemente e anzitutto diretto l’attenzione verso le alterazioni che i corpi naturali subiscono sia spontaneamente, con l’andare del tempo, sia quando vengono posti a contatto con altri corpi. L’interpretazione razionale dei processi trasformativi non fu tuttavia possibile, o comunque fu assai limitata, fino a quando ci si dedicò a fenomeni quali, per intenderci, la bruciatura del legno o la fermentazione dell’uva. Oggi sappiamo che eventi come questi sono il risultato di innumerevoli processi chimici, i quali devono essere studiati singolarmente dal momento che solo gli esperimenti con *sostanze pure*¹⁵ risultano interpretabili in modo teoricamente coerente: è dalla conoscenza delle proprietà chimiche e chimico-fisiche di composti puri come il glucosio e l’alcol etilico che deriva la comprensione scientifica della fermentazione alcolica. L’ottenimento di elementi e composti allo stato puro costituisce la base dell’edificio chimico. «Le leggi più fondamentali [della chimica]», per dirla con Van Brakel,

sono quelle che affermano l’esistenza di particolari materie pure (*pure stuffs*) e delle loro proprietà, cioè l’identificazione, la sintesi e la misurazione riproducibile delle proprietà delle sostanze (...) Tutta la teorizzazione successiva resta dipendente dalla validità di queste leggi fondamentali, a loro volta legate a ciò che è tecnicamente possibile fare.¹⁶

La chimica si regge pertanto su basi di tipo tecnico: mediante procedure meccaniche e chimico-fisiche (procedure che non implicano trasformazioni chimiche, cioè la rottura di legami chimici forti: distillazione, cristallizzazione, cromatografia, eccetera) è possibile scindere materiali composti in corpi semplici, corpi dalle caratteristiche

macroscopiche (densità, indice di rifrazione, punti di fusione e di ebollizione...) ben definite. L'operazione è stata realizzata così tante volte (sono oltre dieci milioni i composti chimici a tutt'oggi conosciuti) che è assurdo dubitare, a meno che siete humeani di stretta osservanza, della possibilità di isolare *pure stuff* da campioni vegetali e atmosferici, o piuttosto da grezzi di reazione ottenuti in laboratorio.

“Scienza delle molecole”, dicevamo sopra. Il pensiero chimico moderno, uno dei cui capisaldi è la nozione di struttura molecolare, si sviluppa, a partire dalla seconda metà del '700 [non è possibile in questa sede descrivere le tappe di tale percorso; si veda un qualunque testo di storia della chimica, ad es. Leicester (1956)], attraverso lo studio della reattività di sostanze pure. Interpretando in modo rigorosamente logico fatti sperimentali relativi alle trasformazioni chimiche di elementi e di composti (specialmente, a partire dalla seconda metà dell'Ottocento, di composti del carbonio – composti ancora oggi definiti, a causa della provenienza di molti di essi, organici), i chimici concludono che la materia è costituita da particelle fondamentali, denominate molecole, e concepiscono una notazione che permette loro di individuare lo schema di fondo di tali oggetti microscopici: chimicamente, una goccia di, poniamo, alcol etilico puro è l'insieme di numerosissime unità (molecole)¹⁷ formate da due atomi di carbonio, sei di idrogeno e uno di ossigeno configurati nel modo indicato in figura 1.

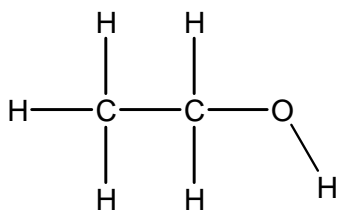


Figura 1: Formula di struttura dell'alcol etilico.

Ritengo (nel prosieguo fornirò le ragioni di questa mia convinzione) che l'attribuzione, effettuata secondo i criteri accettati dalla comunità chimica, di una formula di struttura a un composto puro non sia una costruzione intellettuale arbitraria, di elevato valore euristico, ma l'acquisizione di una conoscenza certa.

4. La canfora del viaggiatore del tempo. Ovvero ancora sulle sostanze pure e sulla struttura dell'*episteme* della chimica

Una pagina letteraria, tratta da *La macchina del tempo*¹⁸, romanzo capostipite del genere fantascientifico, puntualizza quanto esposto finora. All'ottavo capitolo si narra della visita del protagonista del libro al Palazzo di Porcellana Verde, edificio in rovina un tempo adibito a museo della scienza. Attraversata la sezione di paleontologia, quelle di mineralogia e di scienze naturali (dove si trovano scheletri, fossili, «resti anneriti e accartocciati di quelli che un tempo erano stati animali imbalsamati»), il viaggiatore del tempo entra in una sala di grandi dimensioni, dove ammira enormi macchine, «tutte molto corrose, molte a pezzi, qualcuna in realtà ancora abbastanza integra». Infine, dopo aver visitato un locale che dapprima gli ricorda «una cappella militare alle cui pareti sono appese bandiere stracciate», dimostrandosi poi una biblioteca piena di libri rovinati, dove si rammarica «soprattutto per i *Philosophical Transactions* e i suoi diciassette lavori di ottica fisica», l'uomo accede per uno scalone a una «galleria di chimica tecnica». La scatola di cerini e la canfora, contenuta in «barattolo sigillato, suppongo per caso, ermeticamente», trovate nelle sale chimiche, risparmieranno all'avventuroso scienziato una finaccia: bruciando la sostanza, che «[s]tav[a] per gettar[e] quando [gli] sovvenne che era infiammabile e bruciava con una fiamma molto luminosa», il nostro eroe potrà infatti respingere gli attacchi dei *Morlock* (cannibali), i cui occhi non reggono all'intensa luce sprigionata dalla reazione.

L'unico brandello di sapere (scientifico) preservato dal «vecchio monumento dell'era intellettuale» è sotto forma di sostanza chimica pura. La definizione delle proprietà che permettono di identificare tale materiale («l'odore inconfondibile», il fatto che «era infiammabile e bruciava con una fiamma molto luminosa»; propriamente il suo punto di fusione e sua formula bruta), rappresenta, abbiamo detto, il fattore di conoscenza più primitivo e fondante della chimica. La canfora dell'anno 802701, è bene notarlo, oltre che dal protagonista del libro, potrebbe – dopo avere eventualmente verificato lo stato del campione tramite cromatografia su strato sottile e averlo ricristallizzato, all'occorrenza – ben essere utilizzata da uno sperimentatore dei nostri giorni. Nel futuro immaginato da Wells le apparecchiature con cui si indagano i fenomeni fisici sono invece ormai inservibili: simulacri di conoscenza. La storia della fisica mostra che

nuove teorie sostituiscono le teorie esistenti. Per esempio alla legge di gravitazione newtoniana, accettata fino agli inizi del ventesimo secolo, è subentrata la conoscenza derivante dalla teoria della relatività generale. Si può ritenere in questo caso specifico che la nuova teoria costituisca un'interpretazione più generale di un certo tipo di fenomeni rispetto alla vecchia concezione e che racchiuda quest'ultima come caso particolare. Potremmo, generalizzando, pensare alla storia della fisica come a un ampliamento, non come a un'interminabile avvicendamento, di impianti teorici e concettuali, se altre vicende (si consideri l'evoluzione dei modelli atomici) non evidenziassero la possibilità di costruire modelli tra loro logicamente e concettualmente incompatibili del medesimo oggetto o evento fisico. Gran parte della filosofia della scienza del secolo appena trascorso si sviluppa come risposta a tali difficoltà, cioè come disputa fra realismo e antirealismo. A questo proposito è significativo, per esempio, quanto scrive Marino Badiale¹⁹:

Nella lunga contesa fra interpretazioni 'realistiche' e interpretazioni 'strumentalistiche' della scienza il presente saggio si schiera (...) con queste ultime, e per questo inizia con una critica delle posizioni 'realistiche'.²⁰

Leggiamo il saggio e ci rendiamo conto che l'argomentare del matematico torinese, non privo di saldezza, riguarda esclusivamente la scienza fisica. Egli (e altri) non dimostra(no) il "carattere pragmatico-strumentale della conoscenza *scientifica*"; egli dimostra casomai il "carattere pragmatico-strumentale della conoscenza *fisica*"!

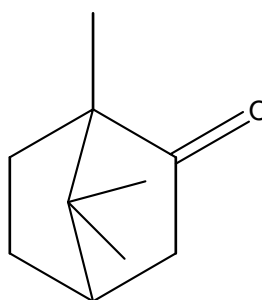
Si potrebbe a questo punto, rifacendosi al caso della scoperta, dovuta a Lavoisier, dell'ossigeno e al conseguente superamento della teoria del flogisto, tappa fondamentale nella nascita della chimica moderna, cui Thomas Kuhn diede non poco rilievo in un suo celebre saggio, obiettare che il problema della transitorietà del sapere riguarda tutta la scienza, chimica compresa. Ebbene, personalmente ritengo che da quella vicenda non si possa estrapolare l'idea che i capisaldi della dottrina chimica moderna (legge periodica e teoria strutturale) debbano prima o poi essere rivoluzionati. Sappiamo che *La struttura delle rivoluzioni scientifiche* è costellato di riferimenti alla chimica: nel saggio, maturato in una temperie contrassegnata da

un interesse costante sia della filosofia della scienza propriamente detta che della sociologia (o dell'antropologia) della scienza per gli studi storici, il che costituiva una reazione allo statico metodo 'strutturale' in filosofia della scienza[.]²¹

si parla di Boyle, Dalton, Lavoisier, Priestly. Conoscere la storia della scienza è essenziale per comprendere la natura della scienza. Penso tuttavia che in sede filosofica non si possa trascurare il presente, nel nostro caso il potere conoscitivo e tecnico del paradigma attuale della chimica. Da più di un secolo il linguaggio strutturale consente la progettazione e la realizzazione di nuove molecole (e perciò di materiali dotati di particolari e spesso utili proprietà, materiali che entrano nella composizione di pressoché tutti gli oggetti di cui ci circondiamo e ci serviamo). Ciò ha comportato una continua evoluzione teorica del paradigma chimico²², senza che si producessero anomalie in grado di minarne l'intelaiatura. Questo è dovuto, credo, al fatto che la formula di struttura (figura 2b) di un composto puro (figura 2a) costituisce (vedi sotto, paragrafo 5) un livello certo di conoscenza; una verità definitiva, sebbene, come vedremo, estremamente parziale, estremamente superficiale.



a)



b)

Figura 2: a) Canfora reperibile nella struttura di afferenza dell'autore e b) relativa formula di struttura.

Notiamo di passaggio che tale credenza prevale tra i chimici praticanti. Esempio a riguardo il caso riportato da J. A. Berson:

La comunità [chimica] è unanime nel ritenere particolarmente obbrobriosa la pubblicazione (...) di una struttura che si rivelerà sbagliata (;...) una struttura sbagliata è sbagliata e basta

(...). La strutturalistica chimica ha un impianto così rigido da non lasciare spazio ad approssimazioni. Questo atteggiamento è evidente nell'effetto che la scoperta dei riarrangiamenti terpenici, dovuta a Wagner (...) ebbe sul celebre chimico tedesco Adolf von Bayer. Per molti anni quest'ultimo si era sforzato di chiarire la struttura di tali molecole. Egli aveva assegnato una quantità di formule di struttura a membri importanti della serie senza sapere della frequente insorgenza dei riarrangiamenti di Wagner. Quando apparve il lavoro di quest'ultimo, Bayer pubblicò un articolo in cui faceva riferimento ad esso con parole contrite: 'Secondo la nuova teoria, quasi tutte le formule di struttura da me proposte sono sbagliate'. C'è una ragione particolare per l'afflizione dimostrata da Bayer in questo bozzetto, ci spiega Willstätter, uno dei suoi studenti: 'Bayer non evitò mai con ansia quello che molti di noi percepivano come non scientifico, cioè proporre un'ipotesi non suffragata da sufficienti prove sperimentali, un'ipotesi che avrebbe sicuramente avuto vita breve. Egli usava le ipotesi perché erano utili. Le formule di struttura erano invece per Bayer cose importantissime, addirittura definitive; il loro contenuto (...) indipendente dalle teorie del momento e dunque immutabile (...)'.²³

5. Le formule di struttura come rappresentazioni (non ingenuamente) realistiche: chimica ed epistemologia feyerabendiana

La concezione strumentalistica della scienza risponde a un problema, quello della competizione fra teorie, che invero emerge con il progredire della ricerca fisica. La teoria dei quadri di Feyerabend costituisce un tentativo di dare uno spessore filosofico adeguato allo strumentalismo. Secondo l'epistemologo austriaco lo scienziato non osserva semplici fatti; egli osserva piuttosto ciò che un determinato "quadro teorico", a lui connaturale, gli impone di cogliere. All'impossibilità di giustificare l'esistenza di spiegazioni diverse o contraddittorie si fa fronte con un ribaltamento epistemologico per cui il discorso scientifico non è primariamente determinato (e, pertanto, capace di attestare) l'oggettività del reale: «Ogni osservazione risulta», come riassume bene Alberto Strumia,

filtrata dalla struttura a priori del soggetto conoscente: dal punto di vista dell'osservazione scientifica ciò significa che ogni esperienza è esperimento, essendo determinata da una teoria dell'oggetto da osservare sulla base della quale viene progettata la strumentazione sperimentale. Di conseguenza ciò che si osserva non è la realtà in se stessa, ma il fenomeno che risulta dall'interazione tra teoria e fatto. Spingendo al massimo questa idea Feyerabend

concepisce il *fatto* che noi chiamiamo *sperimentale*, come prevalentemente determinato, nel suo contenuto informativo, dalla teoria che lo inquadra e lo interpreta. Un fatto sperimentale è in realtà un *fatto teorico*, perché non può essere concepito se non attraverso un *linguaggio osservativo*, cambiando il quale non è più interpretabile né comprensibile. Per cui non ha più senso distinguere tra *teoria e osservazione*, in quanto tutto è fondamentalmente *teoria*.²⁴

Se ne deve concludere che la materia è qualcosa di non oggettivamente strutturato; che attraverso l'applicazione delle teorie si possa dare forma alla materialità come a una creta duttile.

È possibile rapportare allo schema feyerabendiano la determinazione della struttura di un composto chimico? Notiamo come ogni nuovo prodotto la cui esistenza intenda essere registrata nelle riviste di chimica sintetica debba essere corredato di una formula di struttura compatibile *almeno* con i risultati della microanalisi e con dati ¹H-NMR (*hydrogen nuclear magnetic resonance*, vedi sotto); ad essi gli autori aggiungono frequentemente dati IR (spettroscopia infrarossa) e di spettrometria di massa. È proprio l'uso simultaneo di metodi analitici diversi, il fatto, ripetutosi centinaia di migliaia di volte, che l'analisi del medesimo ente materiale, un campione di sostanza pura, tramite dispositivi basati su fenomeni fisici e dunque su teorie o "linguaggi osservativi" completamente diversi, fornisce risultati che non solo non si contraddicono, ma si conciliano in maniera evidente e stringente, a garantire l'univocità e la correttezza della determinazione strutturale. Si dovrebbe desumerne che le formule di struttura dipendono da un aspetto oggettivo della materia.

Illustriamo ciò con un esempio concreto. Considereremo gli spettri di massa a impatto elettronico e i risultati dell'analisi ¹H-NMR del composto URB614, recentemente sintetizzato dal gruppo di ricerca con cui collaboro²⁵.

Nello spettro di massa è registrata l'abbondanza percentuale dei frammenti ionizzati di molecola (a ciascuno dei quali corrisponde una linea verticale, il picco, che ne identifica la massa) generati vaporizzando e bombardando con elettroni un minuscolo campione di sostanza. È significativa la presenza nello spettro di URB614 (figura 3) di picchi relativi a specie derivanti dallo spezzettamento della struttura del composto (vedi riquadro) e di quello dello ione molecolare (M+).

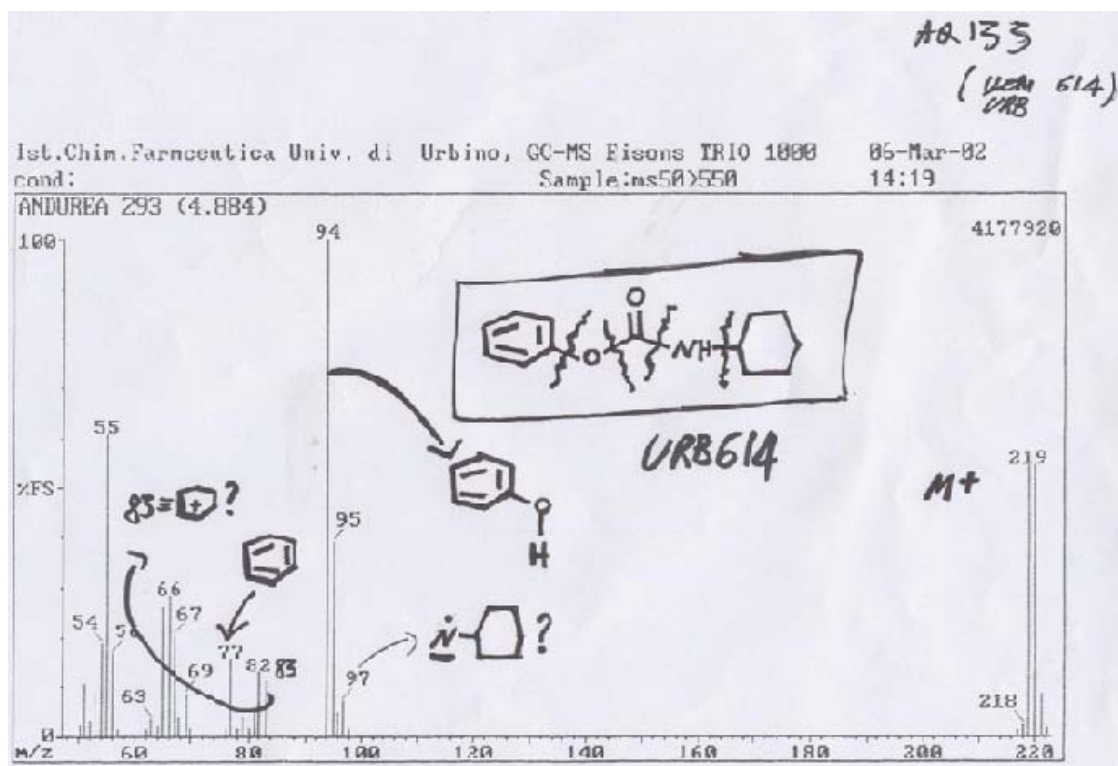


Figura 3: Spettro di massa (EI) del composto URB614.

Veniamo ora, brevemente, all'¹H-NMR. Sappiamo che i nuclei che possiedono un numero dispari di protoni o di neutroni – tra essi figurano, e sono indicati col simbolo ¹H, quelli dell'isotopo più abbondante dell'idrogeno – sono paragonabili a minuscoli magneti. Quando le molecole vengono immerse in un campo magnetico una frazione di tali nuclei assume una disposizione a bassa energia, parallela alla direzione del campo e i rimanenti (a energia più elevata) si allineano in modo antiparallelo ad essa. L'assorbimento di radiazioni (a bassa frequenza) di energia ben definita provoca la transizione tra questi livelli di energia magnetica nucleare. La spettroscopia NMR rende i vari atomi di idrogeno di un composto distinguibili poiché i rispettivi nuclei, a seconda del proprio contorno strutturale, assorbono, eccitandosi, radiazioni di energia leggermente diversa (*chemical shift*). Possiamo pertanto riconoscere, sulla base dello spettro ¹H-NMR di un composto, la presenza nelle sue molecole di, per esempio, protoni alchilici, vinilici, aromatici, e per di più determinare i rapporti fra il numero di atomi di idrogeno di uno o dell'altro tipo e il numero totale di atomi di idrogeno. Lo spettro ¹H-NMR di URB614 è mostrato in figura 4. Si constata l'assenza di segnali non

attribuibili agli atomi di idrogeno della struttura assegnata al composto e si nota, per converso, che a ciascun atomo di idrogeno della struttura di URB 614 corrisponde un preciso segnale.

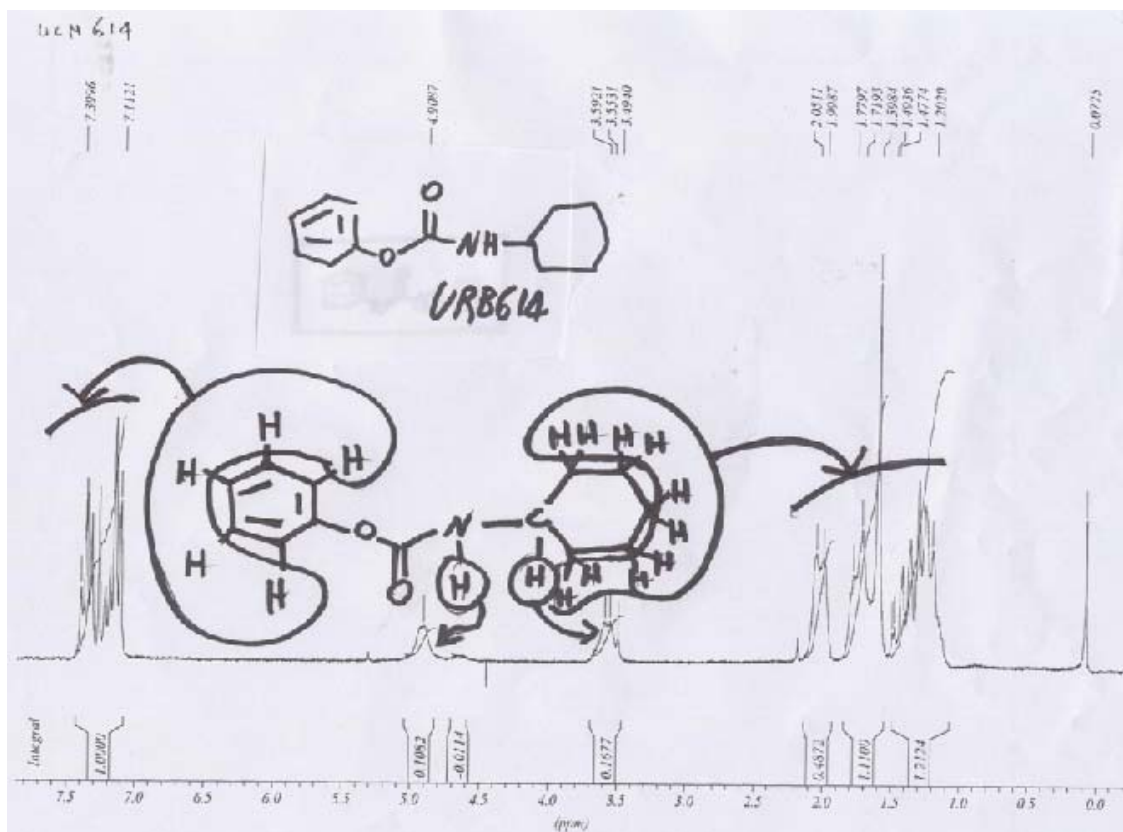


Figura 4: Spettro $^1\text{H-NMR}$ del composto URB614.

Bisogna infine ricordare che, prima dell'introduzione dei metodi strumentali di analisi, la struttura chimica di sostanze anche molto complesse, quali zuccheri, alcaloidi e steroidi, veniva determinata mediante la loro sintesi, partendo da composti a struttura nota, ovvero sottoponendo le stesse a una serie ragionata di reazioni degradative, che conducevano alla formazione di prodotti noti. Significativamente, la maggior parte delle formule di struttura dedotte con tale approccio, basato su principi e tecniche esclusivamente chimici, è stata successivamente confermata per via spettroscopica.

6. Determinazione strutturale ed epistemologia popperiana

Credo, in definitiva, che assegnare la formula di struttura a una sostanza chimica pura costituisca una proposizione scientifica conforme alla realtà oggettiva, la quale non abbisogna di ulteriori conferme (ovvero non è passibile di eliminazione). Siamo con ciò portati ad esaminare il rapporto fra chimica e fallibilismo popperiano.

Il razionalismo critico è abitualmente (e a ragione) contrapposto alle prospettive, in definitiva scettiche, di filosofi come Kuhn e Feyerabend, secondo le quali le scienze non creano un accumulo di sapere; in accordo con questa prospettiva, in altri termini, il discorso scientifico non si avvicina in modo graduale e continuo alla natura reale dei processi fisici. La falsificazione, sostiene dall'altro canto Popper in *All Life is Problem Solving*, è alla base di un processo evolutivo attraverso cui vengono selezionate le teorie più adatte ai problemi da studiare, problemi che divengono sempre più complessi e interessanti. Infine, interpretando la teoria semantica di Tarski come passaggio dalla nozione di verità a quella di adeguatezza ai fatti, il filosofo austriaco elabora una visione della conoscenza che viene comunemente ritenuta "oggettivista". Centrata com'è sull'idea di "verosimiglianza" (si tratta, in sintesi, della misura della "quantità" di verità, e conseguentemente di falsità, di una teoria)²⁶, la prospettiva dell'ultimo Popper tutto è fuorché incredula rispetto all'oggettività del discorso scientifico; essa mi sembra comunque imparentata più con la gnoseologia tradizionale, quella gnoseologia che assume una "*adaequatio rei et intellectus*"²⁷, che con le posizioni esasperatamente antirealiste tipiche di tanta epistemologia contemporanea, di indirizzo storicistico o relativistico. Potremmo – di certo banalizzando il discorso – figurarci le teorie scientifiche, così come le concepisce in fine Popper, come calchi del reale²⁸. C'è del vero sia in un calco preciso che in un calco imperfetto, anche se in misura diversa: il primo non costituisce un'impronta pienamente fedele, così come il secondo non è un'impronta del tutto inesatta, dell'oggetto con cui entrambi sono stati ottenuti. Tuttavia, se lo scopo è quello di riprodurre quanto più fedelmente possibile una struttura, abbiamo da scegliere il calco meno approssimativo: nello sforzo incessante di conformare il discorso scientifico alla complessità inesauribile dei fenomeni materiali, ogni modello teorico di questi deve essere prima o poi modificato, rettificato, in

determinati casi rovesciato. Tutta la filosofia della scienza del '900, basata com'è sulla fisica, è insomma intrinsecamente congetturale, e Popper non fa eccezione.

Possiamo applicare tale prospettiva a quei risultati teorici, le formule di struttura, intorno alle quali tutto il discorso chimico ruota? Come argomentato in precedenza, quelle formule rappresentano leggi non falsificabili. Si verrebbe a incrinare, pertanto, la convinzione secondo cui l'accoglimento di qualsiasi proposizione scientifica è un fatto provvisorio.

Due considerazioni conclusive si rendono opportune. La prima: che la ricerca non abbia fine, per dirla ancora con Popper, vale anche per la chimica. La stabilità della strutturistica non impedisce l'evoluzione teorica e metodologica della "scienza centrale":

Dal momento che anche i migliori esempi di legge chimica sembrano presentare eccezioni, si è suggerito che in chimica non vi siano leggi. Contro ciò è stato sostenuto che in chimica esistono due tipi di legge: primo, affermazioni secondo le quali esistono tipi di materiale ben determinati; secondo, affermazioni intorno alle relazioni funzionali che esprimono le proprietà di tali sostanze. (...) Secondo Leitko la nozione di 'generalità' relativa alle leggi non dovrebbe essere intesa nel senso di 'applicabile a tutti gli oggetti', ma come 'universale' anche se essa si applica a un numero limitato di oggetti. La chimica, pertanto, ha milioni di leggi [-] ogni equazione di reazione fornisce una legge [-]²⁹

ed è possibile – aggiungiamo – crearne sempre di nuove. L'insieme delle sostanze pure è in corrispondenza biunivoca (cfr. figura 2) con l'insieme delle formule di struttura stabilite sperimentalmente. Le reazioni chimiche sono pertanto esprimibili come relazioni tra formule di struttura (equazioni di reazione). In altre parole, l'indagine chimica può valersi di un linguaggio (di tipo essenzialmente formale) incentrato sulle formule di struttura per ipotizzare e realizzare la sintesi di nuovi composti, il cui numero è potenzialmente illimitato. All'attività sintetica si è accompagnata un'ampia trasformazione concettuale e pratica della chimica: la sintesi di nuove molecole costituisce il terreno per lo sviluppo di concetti e teorie, nelle quali vengono talora integrati elementi di altre discipline, di ambito soprattutto fisico. Su questa base sono state prodotte rappresentazioni e modelli (questi sì rivedibili o confutabili) sempre più elaborati di strutture e processi molecolari; grazie ad essi è cresciuta la nostra capacità di costruire composti organici complessi, di preparare materiali dotati di specifiche proprietà, di indagare e interpretare a livello molecolare i fenomeni biologici, geologici,

astronomici. Ma di questo secondo livello della conoscenza chimica ci occuperemo in un successivo scritto.

Infine una precisazione. Avere una concezione realistica della rappresentazione classica delle molecole non significa affatto sostenere che queste esprimono il nucleo più autentico della realtà molecolare³⁰. Pur mettendo, per così dire, perfettamente a fuoco un aspetto della realtà molecolare (e cioè la disposizione degli atomi in una molecola), una formula di struttura è infatti un'immagine che soffre di scarsa profondità di campo. Le formule di struttura sono immagini logiche di enti, le molecole, dalla complicata fisionomia. Le formule di struttura tacciono (o quasi) riguardo a fenomeni (equilibri conformazionali, stati indotti dall'assorbimento di energia, formazione, in seguito a interazioni intermolecolari, di aggregati o di complessi attivati) assai importanti da un punto di vista chimico. Ecco perché, sebbene sia indispensabile per prevedere (non di rado, per giustificare a posteriori) i prodotti di una reazione chimica, conoscere la struttura molecolare dei reagenti risulta molto meno informativo relativamente ad aspetti quali la resa, la velocità e il meccanismo della reazione. Una formula di struttura è, inoltre, relativamente utile per comprendere gli effetti biologici di un composto chimico³¹.

Potremmo paragonare una formula di struttura alla piantina di una città³². Questa semplifica radicalmente la fisionomia dell'abitato, della quale fanno parte, nel caso di Roma, la lanterna a spirale di Sant'Ivo alla Sapienza, la chiazza sul terzo finestrino a destra dell'autobus numero 98, eccetera. Una rappresentazione planimetrica non fornisce alcuna informazione su particolari di questo genere; pur costituendo un'immagine molto stilizzata della città, essa ne riporta tuttavia lo schema di fondo in maniera oggettiva. Di conseguenza, per attraversare Roma serve la mappa di Roma, non quella di Bari, e viceversa.

Bibliografia

- Badiale, M., 2002, «Un altro dibattito sulla scienza?», *Punti critici*, 7, pp. 9-55.
- Benfey, T., 2000, «Reflections on the Philosophy of Chemistry and a Rallying Call for Our Discipline», *Foundations of Chemistry*, 2, pp. 195-205.
- Berson, J.A., 2000, *Chemical Discovery and the Logicians' Program – A Problematic Pairing*, WILEY-WCH.
- Christie, M., Christie, J.R., 2000, «'Laws' and 'Theories' in Chemistry Do Not Obey the Rules», in Bhushan, N., Rosenfeld, S., (eds.), *Of Minds and Molecules*, Oxford, Oxford University Press, pp. 34-50.
- Del Re, G., 1994, «The Specificity of Chemistry and the Philosophy of Science», in Mosini, V. (ed.), *Philosophers in The Laboratory*, Roma, Editrice Universitaria, pp. 11-20.
- Giorello, G., 2005, «I confini della scienza non ci sono, sono come l'anima», *Il Riformista*, 15/4/05.
- Good, R.J., 1999, «Why are Chemists 'turned Off' by Philosophy of Science?», *Foundations of Chemistry*, 1, pp. 65-95.
- Leicester, H.M., 1956, *The Historical Background of Chemistry*, New York, John Wiley & Sons.
- Luisi, P.L., 2002, «Emergence in Chemistry: Chemistry as the Embodiment of Emergence», *Foundations of Chemistry*, 4, pp. 183-200.
- Mecacci, L., 1992, *Storia della psicologia del '900*, Roma, Laterza.
- Scerri, E., 1994, «Has Chemistry been at Least Approximately Reduced to Quantum Mechanics?», in Hull, D., Forbes, M., Burian, R. (eds.), *Philosophy of Science Association*, Vol. 1, Philosophy of Science Association, East Lansing, pp. 160-170.
- , 2000, «Realism, Reduction, and the 'Intermediate Position'», in Bhushan, N., Rosenfeld, S. (eds.), *Of Minds and Molecules*, Oxford, Oxford University Press, pp. 51-72.
- Schummer, J., 1997, «Challenging Standard Distinctions between Science and Technology: The Case of Preparative Chemistry», *HYLE*, 3, pp. 81-94.
- Strumia, A., 1992, *Introduzione alla filosofia delle scienze*, Bologna, Edizioni Studio Domenicano.

- Tarzia, G. *et al.*, 2003, «Design, Synthesis, and Structure-Activity Relationships of Alkylcarbamic Acid Aryl Esters, a New Class of Fatty Acid Amide Hydrolase Inhibitors», *Journal of Medicinal Chemistry*, 46, pp. 2352-2360.
- Tontini, A., 2004, «On the Limits of Chemical Knowledge», *HYLE*, 10, pp. 23-46.
- , 2005, «Scienza e stupore», *emmeciquadro*, 24, pp. 63-66.
- Van Brakel, J., 2000, *Philosophy of Chemistry – Between the Manifest and the Scientific Image*, Leuven University Press.
- Villani, G., 2001, *La Chiave del Mondo – Dalla filosofia alla scienza: l'onnipotenza delle molecole*, CUEN.
- Wells, H.G., 1995, *The Time Machine – The centennial edition – Edited by John Lawton*, London, Everyman.
- Woody, A., Glymour, C., 2000, «Missing Elements – What Philosophers of Science Might Discover in Chemistry», in Bhushan, N., Rosenfeld, S. (eds.), *Of Minds and Molecules*, Oxford, Oxford University Press, pp. 17-33.
- de Wulf, M., *The Philosophical System of Thomas Aquinas*, Center for Applied Philosophy: The Radical Academy, s.d., <http://radicalacademy.com/philaquinasmdw0.htm>.

Note

¹ Giorello (2005); ho commentato questa e altre affermazioni del filosofo milanese in Tontini (2005).

² Per una ricostruzione dettagliata dell'interpretazione filosofica della chimica da Kant fino ad anni recentissimi: van Brakel (2000, cap.1).

³ (1997).

⁴ Sull'argomento si veda Good (1999).

⁵ Ciò è in parte condivisibile, ma non scevro di problematicità: tratterò di questo altrove.

⁶ Più compiuto del rapporto fra filosofia e chimica è quello tra filosofia e biologia. I filosofi della scienza, sottraendo le scienze della vita, a motivo della loro evidente sofferenza, al confronto con la fisica, hanno diretto l'attenzione su quanto in esse vi è di più specifico. La filosofia della biologia è oggi una disciplina attiva e ben organizzata. Vasta la produzione di saggistica, incentrata su temi quali la definizione di specie biologica, la relazione fra genotipo e fenotipo, il ruolo delle spiegazioni teleologiche e storiche nella descrizione del comportamento dei sistemi viventi, ecc.

⁷ Tra gli altri Benfey (2000), Christie e Christie (2000), Scerri (1994; 2000), Van Brakel (2000, cap. 5), Woody e Glymour (2000).

⁸ Del Re (1994, 17-19; traduzione mia).

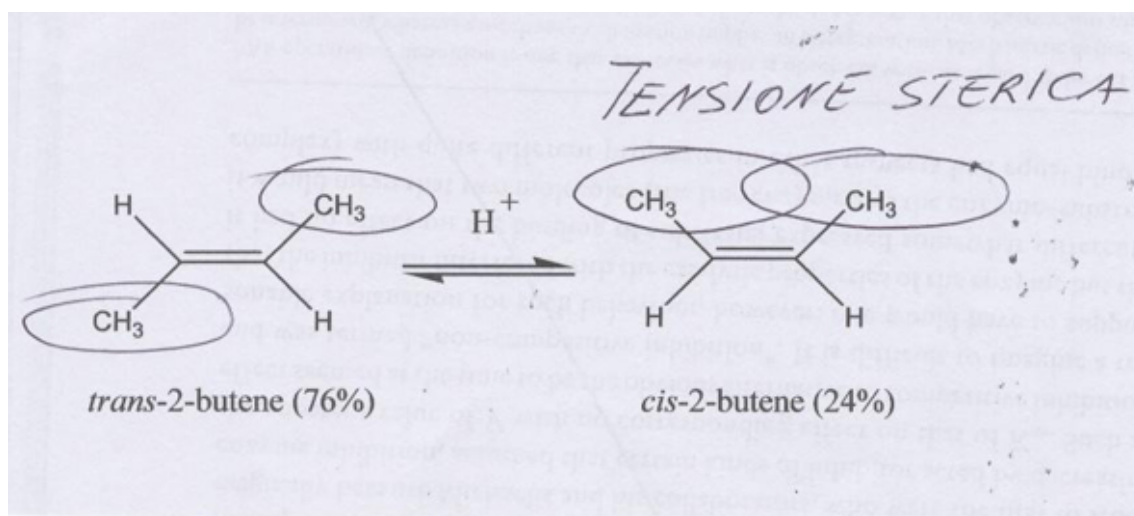
⁹ Luisi (2002, 183; traduzione mia).

¹⁰ D'altro canto, se ammettiamo che la conoscenza scientifica possa raggiungere un certo grado di verosimiglianza, che, in altri termini, ciò che si predica di un oggetto corrisponda almeno in parte alle sue proprietà, non possiamo escludere che in futuro possano essere sviluppate teorie fisiche (fisiche nel senso, indicato sopra, di attinente agli aspetti più fondamentali della natura) capaci di descrivere e di spiegare il comportamento di sistemi complessi come e più delle molecole. In effetti, l'impresa appare titanica, se non addirittura assurda.

¹¹ Villani (2001, 198).

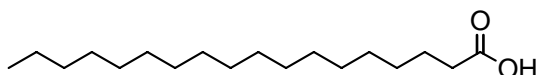
¹² Dopo aver letto una pagina [citata in Mecacci (1992, 55-9)] di Willis D. Ellis, scritta nel '22, dove sono riassunte le considerazioni di Max Wertheimer a proposito dei fondamenti della *gestalt*, mi domandai se la filosofia della complessità non fosse altro che la trasposizione nelle scienze naturali dei principi individuati dagli psicologi di quella famosa scuola già agli inizi del novecento.

¹³ L'equazione sottostante rappresenta, per esempio, l'interconversione, catalizzata da acidi, degli isomeri geometrici del 2-butene. La miscela di equilibrio contiene il 76% dell'isomero *trans*, che dunque risulta un composto più stabile del *cis*-2-butene. Osserviamo le formule di struttura dei due composti. Nell'isomero *trans* i due gruppi metilici (CH₃) sono situati da parti opposte del doppio legame, nell'isomero *cis* dalla stessa parte. La prossimità dei metili nel *cis*-2-butene produce una tensione sterica (cioè un aumento di energia dovuto alla repulsione coulombiana delle nubi elettroniche di atomi troppo ravvicinati) nella struttura molecolare.

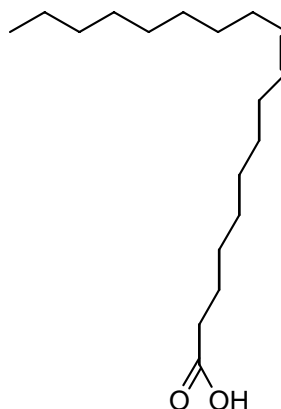


¹⁴ Per esempio gli acidi grassi, una classe di composti organici di grande importanza in biologia, sono costituiti da molecole caratterizzate da una lunga catena alchilica e si dividono in saturi e insaturi: i primi non contengono nessun doppio legame, laddove nei secondi sono presenti uno o più doppi legami. Osserviamo le formule di struttura di un acido grasso saturo (ac. stearico) e di uno insaturo (ac. oleico). Il doppio legame impone allo scheletro molecolare una curvatura che rende più difficile l'impaccamento delle molecole in un reticolo cristallino. Ciò si traduce, a livello macroscopico, nel fatto che gli acidi grassi saturi, presenti principalmente nei grassi di origine animale (burro, lardo), sono *solidi* a temperatura ambiente, mentre gli acidi grassi insaturi, presenti principalmente negli oli vegetali, sono *liquidi* a temperatura ambiente.

Acido stearico:



Acido oleico:



¹⁵ Da un punto di vista microscopico si tratta, come vedremo, di corpi costituiti da particelle dello stesso tipo; chimicamente, ogni altro corpo (sia esso una semplice miscela di gas come l'aria o una struttura anatomicamente complessa quale il fusto di una pianta) rientra nella categoria dei miscugli. Un miscuglio è cioè un aggregato di due o più sostanze pure. Da un punto di vista microscopico esso è formato da più insiemi di strutture molecolari.

¹⁶ Van Brakel (2000, 160-1; traduzione mia).

¹⁷ In un campione di sostanza pura esiste in realtà una percentuale irrilevante di specie (per esempio ioni) aventi struttura molecolare diversa da quella assegnata al composto; percentuale non trascurabile nel caso di acidi e basi non deboli e di composti caratterizzati da tautomeria. Del resto ciò è senza rilevanza rispetto alle questioni trattate in questo saggio.

¹⁸ Wells (1995; la traduzione dei passi citati è mia). Riassumo brevemente la trama del libro, peraltro ben nota. Uno scienziato racconta ai suoi ospiti di aver viaggiato nel tempo (ma non nello spazio: il racconto si svolge per intero nel luogo dove sorge la città di Londra) grazie a uno strano marchingegno, raggiungendo l'anno 802701. Allora l'umanità sarà stata scissa dal meccanismo evolutivo in due specie, gli *Eloi*, sorta di fanciulli ritardati, dediti al libero amore, ed esseri bestiali chiamati *Morlock*, abitanti di gallerie sotterranee. Dopo varie avventure il viaggiatore si proietterà in un futuro remotissimo (migliaia e migliaia di milioni di anni), in cui la vita avrà assunto la forma di «un coso tondeggiante, dalle dimensioni di un pallone da football o forse maggiori, con tentacoli striscianti che partivano da sotto. Appariva nero sullo sfondo dell'acqua agitata, color rosso sangue, del mare e ballonzolava spasmodicamente qua e là». (Molto ottimista).

¹⁹ (2002).

²⁰ Badiale (2002, 10).

²¹ Van Brakel (*cit.*, 34; traduzione mia).

²² Tontini (2004, 29-30).

²³ Berson (2000, 148-9; traduzione mia).

²⁴ Strumia (1992, 169-70; corsivo nell'originale). Che nel processo gnoseologico ciò che ci si aspetta precede ciò che si osserva è, del resto, anche la tesi di Popper. Una filosofia come quella di Nancy Cartwright ha più di recente estremizzato tale concezione.

²⁵ La preparazione, la caratterizzazione strutturale e l'attività biologica di URB614 sono riportate in Tarzia *et al.* (2003), dove il composto è contrassegnato con la sigla **9a**. Esso fa parte di una serie di O-

amil-N-alchilcarbammati studiati come inibitori della idrolasi delle ammidi degli acidi grassi (FAAH), enzima che disattiva le etanolammidi degli acidi grassi, tra cui il cannabinoide endogeno anandamide. Sostanze in grado di bloccare la FAAH potrebbero offrire nuove possibilità di trattamento del dolore, dell'ansia e dell'ipertensione.

²⁶ Nozione che però Popper non è riuscito a definire con rigore logico.

²⁷ Questa è la nota formula con cui San Tommaso designa la verità. Essa è derivata dalla nozione, rigidamente corrispondentista, di verità di Aristotele, che l'aquinate opportunamente ridimensiona: «*cognitum est in cognoscente secundum modum cognoscentis. Omnis cognitio fit secundum similitudinem cogniti in cognoscente*». Queste, che erano massime comuni, riassumono bene il punto di vista degli psicologi del tredicesimo secolo (...): la conoscenza non proviene semplicemente dalla cosa; piuttosto la cosa conosciuta e il soggetto conoscente cooperano alla produzione del fenomeno; tale mediazione del soggetto conoscente ci mostra perché la scolastica rigettava il "realismo ingenuo", che trascura l'azione del soggetto conoscente e considera l'oggetto conosciuto come se fosse proiettato nella mente alla stregua di un'immagine su uno specchio senza vita e passivo. D'altra parte, essendoci un'attività della cosa conosciuta sul soggetto conoscente, le nostre rappresentazioni della realtà saranno in qualche misura fedeli e corrispondenti a tale realtà (De Wulf, s.d., par. II.A, traduzione mia).

²⁸ Dopotutto il vocabolo con cui il grande epistemologo designa il valore e dunque la capacità di sopravvivenza di una teoria è "fit". Sappiamo che "fitness" è usato in etologia per indicare «la misura della capacità riproduttiva e di sopravvivenza di un organismo in un dato ambiente e in rapporto agli organismi della stessa specie» (*Dizionario De Mauro Paravia on-line*, <http://www.demauroparavia.it>, alla voce), e questo è in linea con l'impostazione evolutzionistica del pensiero popperiano. Oltre ad "adattare", il verbo "fit" comprende comunque i significati di "essere della giusta dimensione o taglia" e "prendere le misure" («[t]he tailor fitted the trousers by shortening them»; «[t]hese shoes fit me»; «[s]he fitted me for a new jacket») e quelli di "incastrare, inserire in modo corretto, far combaciare" («[f]it a handle on a door») (gli esempi sono tratti da *The American Heritage Dictionary of the English Language: Fourth Edition*, 2000, <http://www.bartleby.com/61>, alla voce).

²⁹ Van Brakel (2000, 152-3; traduzione mia).

³⁰ Per una critica argomentata dell'essenzialismo chimico vedi Van Brakel (2000, cap. 4).

³¹ Cfr. Tontini (2004, 36-39).

³² Esiste naturalmente una differenza basilare tra i due tipi di rappresentazione. Contrariamente a una mappa, infatti, una formula di struttura rappresenta una realtà non osservabile!