

Libro de resúmenes de las I Jornadas de Fundamentos de Química

I Jornadas de Fundamentos de Química

15 de diciembre de 2020
en modalidad de videoconferencia



Informes:



<http://www.filoexactas.exactas.uba.ar/jfq2020>

Organiza el Grupo de Filosofía de la Química de Buenos Aires:
Martín Labarca, Sebastián Fortin y Fiorella Alassia



15 de Diciembre de 2020 - Buenos Aires – Argentina

Labarca, Martín; Fortin, Sebastian y Alassia, Fiorela

Libro de resúmenes de las I Jornadas de Fundamentos de Química / Labarca, Martín; Fortin, Sebastian y Alassia, Fiorela Editores. -1a edición electrónica, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina, 2020.

1. Filosofía de la química. 2. Historia de la química. 3. Fundamentos de la química.

Título: Libro de resúmenes de las I Jornadas de Fundamentos de Química

Editores: Labarca, Martín; Fortin, Sebastian y Alassia, Fiorela

Editorial: Grupo de filosofía de la química de Buenos Aires

Lugar: Buenos Aires, Argentina

Año: 2020

Diseño editorial y diseño de portada: Sebastian Fortin

Coordinación editorial: Sebastian Fortin

Corrección: Martín Labarca y Fiorela Alassia

Impreso en Argentina

Printed in Argentina

Las opiniones expuestas en los trabajos publicados en esta colección son de la exclusiva responsabilidad de sus autores.

Índice

Prólogo. I Jornadas de Fundamentos de Química: memorias breves en un año particular	4
Programa	7
Ponencia: “La Relacionalidad de las Propiedades Químicas en la Filosofía de Robert Boyle”, M. Banchetti-Robino	8
Ponencia: “Electronegatividad, FSGO y Polarizabilidad”, M. Labarca	9
Ponencia: “Una relectura de la distinción ab initio y semiempírico en el contexto actual de la química cuántica computacional: el caso de las simulaciones computacionales DFT”, P. Lodeyro y M. S. Polzella	10
Ponencia: “DFT y la independencia de la química cuántica”, S. Fortin y J. A. Jaimes Arriaga	11
Ponencia: “Entre la química y la biología: ¿es posible una visión procesual de las biomoléculas? El caso de los receptores celulares”, F. Alassia	12
Ponencia: “Modelos en química cuántica”, O. Lombardi	13

Prólogo

I Jornadas de Fundamentos de Química: memorias breves en un año particular

Usualmente, los libros de resúmenes de eventos académicos incluyen un prólogo en el cual se suelen comentar algunos aspectos relacionados a la organización del evento, menciones resumidas de lo más destacado o de los objetivos alcanzados, agradecimientos a los diferentes actores e instituciones involucradas en su realización, y otras tantas posibles cuestiones. Quienes llevamos adelante la organización de las *I Jornadas de Fundamentos de Química* y la edición del presente libro quisimos llevarla a cabo principalmente, por dos razones.

La primera de ellas es por el acontecimiento de ser estas Jornadas las inaugurales de una posible –y, esperemos, extensa– progresión en el tiempo. Durante los últimos años, la comunidad académica dedicada a temas de fundamentos y filosofía de la química ha crecido notablemente, no solo en nuestro país sino también en Sudamérica. La principal motivación que impulsó llevar adelante este evento fue propiciar un espacio de intercambio amplio y abierto a todas las personas que trabajan en dichos temas, para acompañar y apoyar la conformación de esa comunidad.

La segunda razón que motiva este prólogo es su deliberada función memorial, en uno de esos momentos de la historia en el que quienes somos contemporáneos al mismo, sospechamos –algunos por lo bajo, otros a viva voz– que posiblemente resultará una bisagra en muchos aspectos de nuestra sociedad. Por cierto, la gran cantidad de cambios que ya hemos experimentado en nuestra vida cotidiana a raíz de la pandemia de COVID-19 que azota al mundo desde los primeros meses del 2020 nos lleva, más bien, a confirmar la sospecha. *Estamos viviendo una bisagra histórica.*

El necesario aislamiento sanitario hace que resulten imposibles las reuniones presenciales, las charlas cara a cara, el compartir un café, los encuentros de pasillos, etcétera. Sin embargo, el irrefrenable deseo de continuar interactuando, debatiendo y compartiendo ideas nos ha obligado a realizar un esfuerzo adaptativo, incorporando la tecnología para realizar la reunión en formato de video conferencia.

En este contexto, por demás especial, transcurrieron la organización y la realización de las *I Jornadas*, finalmente celebradas en modalidad completamente “a distancia” durante la tarde del 15 de diciembre de 2020. Las seis ponencias incluyeron conferencistas de

diferentes puntos del mapamundi, entre ellos, Argentina, Brasil, Uruguay y Estados Unidos.

Sin duda esto atrajo a múltiples participantes de diversos lugares del país y el continente, con quienes conversamos, ya distendidamente y hacia el final del evento, acerca de su impresión sobre las Jornadas y sus distintos pareceres sobre la época que nos toca vivir. Entre otras cuestiones, nos animamos a decir que tocamos un punto en común para la mayoría de la audiencia: la desventaja de no poder realizar un intercambio cara a cara se vio compensada con la presencia de un número inédito de participantes para un evento de esta temática -aproximadamente setenta participantes-. La modalidad a distancia permitió que el evento se volviera accesible para muchas personas de puntos remotos que de otro modo no hubiesen podido hacerlo.

Por este motivo, logramos rescatar un aspecto positivo, que es el de haber acercar estas temáticas a un importante número de químicos, profesores y docentes en formación. Esto seguramente tendrá repercusiones en el futuro, y la tarea de mantener y expandir el número de integrantes de la comunidad de filosofía y fundamentos de la química es un desafío que hacemos nuestro.

El Comité Organizador

Febrero de 2021

La Relacionalidad de las Propiedades Químicas en la Filosofía de Robert Boyle



Marina Paola Banchetti-Robino
Florida Atlantic University, U.S.A.

Primeras Jornadas de Fundamentos de Química
Buenos Aires, 15 de Diciembre 2020

Electronegatividad, FSGO y Polarizabilidad

Martín Labarca
CONICET - Universidad de Buenos Aires

Una relectura de la distinción ab initio y semiempírico en el contexto actual de la química cuántica computacional: el caso de las simulaciones computacionales DFT

Penélope Lodeyro - Ma. Silvia Polzella
FONCYT - FFYH - UNC

CONICET



DFT Y LA INDEPENDENCIA DE LA QUÍMICA CUÁNTICA

Sebastian Fortin y Jesús Alberto Jaimes Arriaga
CONICET - Universidad de Buenos Aires

I Jornadas de Fundamentos de Química
15 de diciembre de 2020
Ciberspacio

I Jornadas de Fundamentos de Química 2020

Entre la química y la biología:
¿es posible una visión procesual de las biomoléculas?
El caso de los receptores celulares

Fiorela Alassia
Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco

Models in (quantum) chemistry

Olimpia Lombardi
En colaboración con Hernán Accorinti y Juan Camilo Martínez González
CONICET - Universidad de Buenos Aires

I Jornadas de Fundamentos de Química
Buenos Aires, 15 de Diciembre de 2020

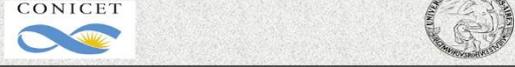


Figura. Compilado de las diapositivas de presentación de cada una de las ponencias realizadas a través de la plataforma virtual Zoom®.

Programa

Martes 15 de Diciembre

13:45 - 13:55 Ingreso al auditorio virtual

13:55 - 14:00 Apertura

Bloque I Moderador: Sebastian Fortin

14:00 - 14:30 **Marina Paola Banchetti-Robino** “La relacionalidad de las propiedades químicas en la filosofía de Robert Boyle”
Florida Atlantic University

14:30 - 15:00 **Martin Labarca** “Electronegatividad, FSGO y Polarizabilidad”
Universidad de Buenos Aires

15:00 - 15:30 **Penelope Lodeyro y María Silvia Polzella** “Una relectura de la distinción ab initio y semiempirico en el contexto actual de la química cuántica computacional: el caso de las simulaciones computacionales DFT”
Universidad Nacional de Córdoba

15:30 - 16:00 Descanso y café

Bloque II Moderador: Martin Labarca

16:00 - 16:30 **Sebastian Fortin y Jesús A. Jaimes Arriaga** “DFT y la independencia de la química cuántica”
Universidad de Buenos Aires

16:30 - 17:00 **Fiorela Alassia** “Entre la química y la biología: ¿es posible una visión procesual de las biomoléculas? El caso de los receptores celulares”
Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco

17:00 - 17:30 **Olimpia Lombardi** “Modelos en química cuántica”
Universidad de Buenos Aires

La relacionalidad de las propiedades químicas en la filosofía de Robert Boyle

MARINA PAOLA BANCHETTI-ROBINO

Florida Atlantic University, U.S.A.

Esta presentación establece que, aunque Robert Boyle (1627-1691) es considerado como uno de los más fuertes defensores de la teoría mecanicista de la materia, su compleja ontología química contiene implícitamente una concepción no reductiva de las cualidades químicas.

En esta presentación, llevo esta afirmación de no reduccionismo un paso más allá y establezco que Boyle considera que las cualidades químicas son disposicionales y relacionales. Aunque este argumento constituye un primer paso para establecer una interpretación no reduccionista de la ontología química de Boyle, argumento además que Boyle concibe cualidades químicas no sólo como disposicionales y relacionales, sino también, y lo más importante, como propiedades emergentes que sobrevienen la microestructura de los ‘átomos químicos’, que son para Boyle lo que Gassendi llamaba ‘moléculas’. Para establecer este punto, establezco también que Boyle considera las cualidades químicas como algo novedoso, "más allá" de los átomos químicos de los que emergen.

Más específicamente, argumento que Boyle considera las propiedades químicas y otras propiedades de nivel superior como propiedades supervenientes que surgen de las disposiciones de sustancias químicas en relación con otras sustancias. Sus escritos proporcionan pruebas de que el concibe claramente sustancias químicas como enteros funcionales cuyas propiedades surgen no sólo del ordenamiento estructural de sus partes, sino también de su relación con otras sustancias químicas en el contexto de la práctica experimental.

Estas conclusiones servirán de base para una discusión de la teoría mereológica que está implícita en la concepción de Boyle de átomos químicos y que es más consistente con esta interpretación no reductiva de su ontología química.

Electronegatividad, FSGO y polarizabilidad

MARTIN LABARCA

CONICET—Universidad de Buenos Aires

La electronegatividad es una herramienta indispensable en cada campo teórico y experimental de la química. Sus aplicaciones son múltiples y variadas: acidez de los solventes, mecanismos de reacción, distribución electrónica, polaridades de enlace y periodicidad química, entre otras. En 1932 el premio Nobel Linus Pauling fue el primero en definir y cuantificar una escala de electronegatividad sobre la base de un enfoque termoquímico, utilizando los calores de disociación o formación de sustancias heteronucleares del tipo A_nB_m . Sin embargo, el hecho de que la electronegatividad no pueda medirse directamente sino sólo indirectamente a través de otras propiedades como la entalpía, la afinidad electrónica o la energía de ionización, dio lugar a una proliferación de modelos muy diversos que coexisten en la práctica científica.

En este trabajo presentaré un nuevo modelo de electronegatividad en desarrollo, sobre la base de la polarizabilidad estática del dipolo eléctrico y el modelo FSGO (floating spherical Gaussian orbital). El enfoque toma como punto de partida el trabajo de Simons, Zandler y Talaty quienes en 1976 presentaron la primera escala no empírica de electronegatividad, basada en el modelo FSGO, y toma en cuenta también la fuerte correlación existente entre electronegatividad y polarizabilidad que fuera demostrada por Nagle en 1990. Expondré, asimismo, algunas ventajas comparativas que este nuevo modelo presenta e indagaré en algunas consideraciones filosóficas que pueden extraerse al respecto.

Referencias

- Accorinti, H.; Labarca, M. (2020). Commentary on the models of electronegativity. *J. Chem. Educ.* 10: 3474–3477.
- Frost, A. A. (1977). The floating spherical gaussian method. En N. F. Schaefer III (ed.). *Methods of Electronic Structure Theory*, Plenum Press, New York, pp. 29–49.
- Hinze, J.; Jaffé, H. H. (1962). Electronegativity. I. Orbital electronegativity of neutral atoms. *J. Am. Chem. Soc.* 84: 540–546.
- Nagle, J. K. (1990). Atomic polarizability and electronegativity. *J. Am. Chem. Soc.* 112: 4741–4747.
- Simons, G.; Zandler, M. E.; Talaty, E. R. (1976). Nonempirical electronegativity scale. *J. Am. Chem. Soc.* 98: 7869–7870.

Una relectura de la distinción ab initio y semiempírico en el contexto actual de la química cuántica computacional: el caso de las simulaciones computacionales DFT

PENELOPE LODEYRO Y MARÍA SILVIA POLZELLA

Universidad Nacional de Córdoba

Tradicionalmente, se presentaron dos criterios constructivos para los métodos aproximativos de la química cuántica: ab initio y semiempírico y la cuestión de qué criterio debería seguirse continúa abierta. En este trabajo analizamos algunos rasgos constructivos de las simulaciones computacionales de la teoría del funcional de la densidad (DFT) para mostrar que sus desarrollos ponen en evidencia que no hay una clara distinción entre métodos ab initio y semiempírico sino un amplio espectro de empiria. Ponemos de relieve que esta práctica es rica y compleja, y los modelos se desarrollan en función de su implementación. En esa dirección resaltamos el rol clave de las computadoras y las características particulares que imprimen a estas prácticas. Asimismo, ponemos de relieve el carácter aproximativo de todos los desarrollos y el hecho de que por sus rasgos constructivos las simulaciones computacionales son mucho más autónomas respecto del marco teórico en el que se fundan de lo que suele pensarse.

DFT y la independencia de la química cuántica

SEBASTIAN FORTIN Y J. A. JAIMES ARRIAGA

CONICET – Universidad de Buenos Aires

Desde su nacimiento, la mecánica cuántica ha protagonizado todos los intentos de reducir la química a la física. Sin embargo los procedimientos utilizados por los químicos cuánticos utilizan hipótesis que chocan abiertamente con los postulados de la mecánica cuántica. En este trabajo argumentamos que el choque de ontologías es de tal magnitud que el programa reduccionista resulta imposible de sostener. Sin embargo, es posible utilizar una teoría separada de la mecánica cuántica tradicional como DFT para fundamentar gran parte de la química.

Entre la química y la biología: ¿es posible una visión procesual de las biomoléculas? El caso de los receptores celulares

FIGORELA ALASSIA

Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco

Entre las discusiones actuales sobre la naturaleza de las entidades químicas, han sido propuestas diferentes categorías en el plano ontológico, como “individuos” y “*stuff*” para la física y la macroquímica, respectivamente, y más recientemente “nanoindividuos”, para el ámbito de la nanotecnología y nanomateriales.

Asimismo, podemos considerar otra importante rama de conocimientos como lo es la bioquímica. En relación a esto, es posible preguntarse acerca de qué tipo de objetos son las entidades bioquímicas o si las categorías mencionadas anteriormente resultan adecuadas para su caracterización. Las entidades del dominio bioquímico son las biomoléculas que componen los seres vivos. Sin embargo, muchas de estas sustancias bioquímicas también presentan dificultades para ser consideradas bajo las categorías de individuos o *stuff*, en el sentido tradicional.

En este trabajo pondremos a consideración otra perspectiva ontológica para analizar las particularidades de las biomoléculas, la ontología procesual, según la cual el mundo (en particular, el mundo viviente) no está poblado de individuos “sustanciales”, sino de una jerarquía dinámica de procesos. Intentaremos analizar si es posible una visión procesual de las biomoléculas, anclándonos en un tipo particular de entidades: los receptores celulares. Estas macromoléculas de naturaleza proteica se encuentran en las células y actúan como mediadores o transmisores de señales químicas internas o externas (por ejemplo, una hormona o un fármaco), lo cual desencadena una determinada respuesta biológica.

A partir de la consideración del caso de los receptores celulares y tomando como base conocimientos actuales sobre sus estructuras y funcionamiento, analizaremos algunos beneficios (y limitaciones) que puede ofrecer la ontología procesual para elucidar adecuadamente la naturaleza de estas entidades bioquímicas.

Modelos en química cuántica

OLIMPIA LOMBARDI

CONICET - Universidad de Buenos Aires

Durante las últimas décadas, el interés de los filósofos de la ciencia, tradicionalmente centrado en las teorías científicas se ha trasladado a los modelos científicos: su naturaleza, y el papel que juegan en la investigación. Respecto de la primera cuestión, de un modo muy general puede decirse que conviven y se enfrentan dos posiciones incompatibles acerca de la naturaleza de los modelos científicos. Desde una perspectiva representacionista, es esencial al modelo científico su capacidad de representar, al menos aproximadamente, al sistema al cual refiere. Desde una posición opuesta, los modelos científicos son concebidos como herramientas útiles para la producción de conocimiento, independientemente de su capacidad de representar.

En las discusiones entre ambas posiciones, el caso de diferentes modelos de un mismo sistema ha sido ampliamente estudiado en la bibliografía tomando principalmente ejemplos provenientes de las ciencias físicas. Sin embargo, la química parece ser un terreno apropiado para discutir el problema de la naturaleza de los modelos científicos, puesto que el uso de modelos es central en el conocimiento químico.

En el presente trabajo analizaremos algunos ejemplos de modelos provenientes de la química cuántica, ya que esta disciplina muestra casos en los que un solo modelo incorpora elementos contradictorios. En particular, presentaremos (i) un caso de modelos incompatibles de un mismo sistema (el caso de los modelos de enlace), (ii) un caso en cual el modelo integra un supuesto que contradice una consecuencia de la teoría sobre la cual dicho modelo se basa (el caso de la aproximación orbital), y finalmente (iii) un caso donde se asume un supuesto que contradice un postulado de la teoría sobre la que se basa el modelo, ya que proviene de una teoría diferente, ontológicamente incompatible (el caso de la aproximación de Born-Oppenheimer). En este tipo de ejemplos provenientes de la química cuántica parecen ofrecer un desafío mayor y más fuerte a la visión representacionista de los modelos científicos.