

Libro de resúmenes de las IV Jornadas de Fundamentos de Química 2023

IV Jornadas de Fundamentos de Química

2 y 4 de octubre 2023
en modalidad de videoconferencia



Informes:



<http://www.filoexactas.exactas.uba.ar/jfq2023>

Organizadas en la Universidad Nacional de Cuyo por:
Rodolfo Vergne, Natalia Ordenes, Martín Labarca y Sebastián Fortin



Vergne, Rodolfo; Ordenes, Natalia; Labarca, Martín; Fortin, Sebastian
Libro de resúmenes de las IV Jornadas de Fundamentos de Química / Vergne,
Rodolfo; Ordenes, Natalia; Labarca, Martín; Fortin, Sebastian (Editores). 1° edición
electrónica, Grupo de Filosofía de la Química de Buenos Aires, Buenos Aires,
Argentina, 2023.

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

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

Editores: Vergne, Rodolfo; Ordenes, Natalia; Labarca, Martín; Fortin, Sebastian

Editorial: Grupo de Filosofía de la Química de Buenos Aires

Lugar: Buenos Aires, Argentina

Año: 2023

Diseño editorial: Sebastian Fortin

Diseño de portada: Rodolfo Vergne y Natalia Ordenes

Coordinación editorial: Sebastian Fortin y Martín Labarca

Corrección: Martín Labarca

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

Programa	5
“La utilización de los conceptos empíricos negativos en el trabajo de Daniel Sennert” - Marina P. Banchetti-Robino	7
“Por un diálogo entre la filosofía de la química y la enseñanza de la química: el caso de la electronegatividad” - Martin Labarca	8
“Química y Matemática ¿una relación intermediada por la Física?” - Leandro Andrini	10
“Sistema periódico dos elementos químicos: Algumas reflexões a partir da Didática da Química” - Adriano Lopes Romero	12
“Una propuesta para enriquecer la noción de sustancia básica” - Alfio Zambon	14
“Propagación de sesgos en la predicción de estructuras macromoleculares: El caso de AlphaFold” - Gabriel Vallejos Baccelliere	16
“Categorias centrais da Quimica” - Marcos Antonio Pinto Ribeiro y Lisandro Bacelar da Silva	17
“Sobre la naturaleza de las propiedades en química cuántica” - Jesus Alberto Jaimes Arriaga	18
“¿Qué es la densidad electrónica?” – Sebastian Fortin	19

“Las Teorías ácido-base abordadas desde Química Inorgánica en el primer año de la carrera de Ingeniería en Alimentos de la Universidad Nacional de Entre Ríos” – Horacio José Martínez	21
“Modelos científicos y sistema periódico. La clasificación de los elementos según la electronegatividad” – Rodolfo Vergne y Natalia Ordenes	23
“Filosofia e História da Química: aportes para o ensino de química” – Jailson Alves	25

Programa

Lunes 2 de octubre

12:30 - 12:55 Ingreso al auditorio virtual

12:55 - 13:00 Apertura

Bloque I: Rodolfo Vergne

13:00 - 13:30 "La utilización de los conceptos empíricos negativos en el trabajo de Daniel Sennert" **Marina P. Banchetti-Robino**
Florida Atlantic University, USA

13:30 - 14:00 "Por un diálogo entre la filosofía de la química y la enseñanza de la química: el caso de la electronegatividad" **Martin Labarca**
CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina

14:00 - 14:30 "Química y Matemática ¿una relación intermediada por la Física?" **Leandro Andrini**
Departamento de Matemática - Centro de Matemática de La Plata; Fac. de Ciencias Exactas - UNLP, Argentina

14:30 - 15:30 Descanso y café (intercambio libre)

Bloque II: Sebastian Fortin

15:30 - 16:00 "Sistema periódico dos elementos químicos: Algumas reflexões a partir da Didática da Química" **Adriano Lopes Romero**
Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Brasil

16:00 - 16:30 "Una propuesta para enriquecer la noción de sustancia básica" **Alfio Zambon**
Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina

16:30 - 17:00 "Propagación de sesgos en la predicción de estructuras macromoleculares: El caso de AlphaFold" **Gabriel Vallejos Baccelliere**
Laboratorio de Bioquímica y Biología Molecular. Departamento de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Chile

Miércoles 4 de octubre

12:30 - 13:00 Ingreso al auditorio virtual

Bloque III: Natalia Ordenes

13:00 - 13:30 "Categorias centrais da Quimica"	Marcos Antonio Pinto Ribeiro¹ y Lisandro Bacelar da Silva² ¹ Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB), Brasil ² Universidade Federal da Bahia, Brasil
--	---

13:30 - 14:00 "Sobre la naturaleza de las propiedades en química cuántica"	Jesus Alberto Jaimes Arriaga CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina
--	---

14:00 - 14:30 "¿Qué es la densidad electrónica?"	Sebastian Fortin CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina
--	---

14:30 - 15:30 Descanso y café (intercambio libre)

Bloque IV: Martin Labarca

15:30 - 16:00 "Las Teorías ácido-base abordadas desde Química Inorgánica en el primer año de la carrera de Ingeniería en Alimentos de la Universidad Nacional de Entre Ríos"	Horacio José Martínez Facultad de Ciencias de la Alimentación - Universidad Nacional de Entre Ríos, Argentina
--	---

16:00 - 16:30 "Modelos científicos y sistema periódico. La clasificación de los elementos según la electronegatividad"	Rodolfo Vergne¹ y Natalia Ordenes² ¹ Universidad Nacional de Cuyo, Argentina ² Universidad Nacional de Tres de Febrero, Argentina
--	--

17:00 - 17:30 Cierre	
----------------------	--

¿ La utilización de los conceptos empíricos negativos en el trabajo de Daniel Sennert?

Marina P. Banchetti-Robino

Florida Atlantic University, USA

Mi exposición busca demostrar que Daniel Sennert es una figura arquetípica de transición entre la alquimia post-Paracelsiana y la química temprano moderna. Su trabajo representa un primer intento de conceptualizar el atomismo en la alquimia post-Paracelsiana. El anticipa por varios siglos el papel del estructuralismo en la química moderna. Su metodología empírico-negativa para establecer cuales son las partículas atómicas influyó muchos químicos posteriores, como Robert Boyle. Su experimento de 'reducción al estado prístino' se convirtió en un experimento clave para químicos posteriores como Boyle.

Por un diálogo entre la filosofía de la química y la enseñanza de la química: el caso de la electronegatividad

Martin Labarca

CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina

La electronegatividad (EN) se ha constituido gradualmente en una herramienta indispensable en cada campo teórico y experimental de la química, encontrando aplicaciones también en física, ingeniería y biología. En el ámbito de la química, el concepto de EN ha sido utilizado para explicar propiedades como la acidez de los solventes, los mecanismos de reacción, la distribución electrónica, las polaridades de enlace y la periodicidad química, entre otras. Sin embargo, el hecho de que la EN no pueda medirse en forma directa fue una de las causas que dio lugar a una proliferación de modelos muy diversos y, junto con ello, a un incomprendimiento respecto de lo que la noción misma de EN significa.

El conjunto de modelos desarrollados ha dado lugar a varios trabajos de revisión y clasificación. En términos generales, es posible agruparlos en modelos termoquímicos, modelos espectroscópicos o geométricos y modelos cuánticos. Los valores numéricos de los múltiples modelos existentes convergen en una misma escala (denominada escala de EN) en la que se muestra, en general, un mismo ordenamiento de todos los elementos de la tabla periódica. Esta propiedad periódica muestra que la EN aumenta en los períodos de izquierda a derecha, y disminuye en un grupo, de arriba hacia abajo.

La pluralidad de modelos existentes no generó una mejor comprensión respecto de la intensidad y la extensión del concepto. En relación con su intensidad (lo que ‘dice’ un predicado: su sentido), la EN ha sido definida de diversos modos ya sea como una propiedad, una capacidad, un poder de atracción, un poder de expulsión o también como el resultante de una tensión entre propiedades del átomo; más aún, algunos autores afirman que la EN es simplemente un número que tiene propósitos comparativos. Asimismo, la extensión, es decir la referencia del concepto, tampoco es clara: ¿es el átomo, la molécula, un grupo, un ión o bien la especie química?

En este trabajo presentaremos y analizaremos tres modelos clásicos (Pauling, Mulliken y Allred-Rochow) mostrando las fuertes diferencias procedimentales, conceptuales y categoriales entre ellos. A la luz del análisis científico-filosófico mostrado, esbozaremos algunas reflexiones en la medida en que este tema presenta una importante cuestión que es necesario considerar a la luz de su enseñanza.

Referencias bibliográficas

Accorinti, H. (2019). “Incompatible models in chemistry: the case of electronegativity”, *Foundations of Chemistry* 21: 71–81.

Accorinti, H. y Labarca, M. (2020). “Commentary on the models of electronegativity”, *Journal of Chemical Education* 97: 3474–3477.

Accorinti, H. y Labarca, M. (2023). “Modelos en química: el problema de la electronegatividad”, En: Labarca, M. y Fortin, S. (Eds.), *Introducción a la Filosofía de la Química*, Bella Terra. Sociedad Chilena de Historia, Didáctica y Filosofía de las Ciencias, en prensa.

Jensen, W. (1996). “Electronegativity from Avogadro to Pauling. Part I: Origins of the concept of electronegativity”, *Journal of Chemical Education* 1: 11–20.

Jensen, W. (2012). “The quantification of electronegativity: some precursors”, *Journal of Chemical Education* 89: 94–96.

Politzer, P. y Murray, J. S. (2018). “Electronegativity – A Perspective”, *Journal of Molecular Modeling* 24: 214–222.

Salas-Bannuet, G.; Ramírez-Vieyra, J. y Noguez-Amaya, M. E. (2011). “La incomprendida electronegatividad (trilogía). II. Evolución en la cuantificación de la electronegatividad”, *Educación Química* 2: 155–161.

Química y Matemática ¿una relación intermediada por la Física?

Leandro Andrini

Departamento de Matemática - Centro de Matemática de La Plata; Fac. de Ciencias Exactas - UNLP, Argentina

En este trabajo nos proponemos reflexionar sobre dos aspectos: el primero es el estatus onto-epistemológico heredado (es decir, la Química reductible a la Física), y el segundo, subsidiario al primero, la Matemática como mera herramienta y no proceso constitutivo propio de la Química (Rodríguez, 2011; Torres Quezada, 2018). Recordemos lo que ha aseverado Paul Dirac: “Las leyes físicas fundamentales para la teoría matemática de gran parte de la física y la totalidad de la química [son] completamente conocidas desde la mecánica cuántica” (citado de Lombardi y Labarca, 2004).

Vemos que la “teoría matemática” de la totalidad de la Química, según Dirac, ha quedado conocida desde la Mecánica Cuántica. A la luz del avance de las didácticas, desde la posición de Dirac se establece una concepción alternativa (errónea) a la vez que un sentido común de una cultura cotidiana de determinada comunidad que no se corresponde con el desarrollo histórico de la disciplina que se intenta reducir (Piaget y García, 1982).

Donati y Andrade Gamboa (2018) sostienen que los “principios epistemológicos definen el marco de referencia o el paradigma dentro del cual deberían ubicarse los nuevos hechos y su explicación. Los principios ontológicos están relacionados con la clasificación de las entidades y con las propiedades que dicha clasificación determina. Por último, los principios conceptuales están relacionados con la forma en que se estructuran y se correlacionan los conceptos”. Esta estructuración (jerárquica) junto con el principio de autonomía onto-epistemológica de la Química nos posibilitará encontrar relaciones entre la Química y la Matemática no supeditadas a la intermediación de la Física, y así trabajar las ideas de independencia onto-epistemológicas.

Bibliografía

- Donati, E. D., & Andrade Gamboa, J. J. (2018). El concepto de resonancia. Confusiones ontológicas y epistemológicas. *Educación química*, 17(2), 174-179.
- Lombardi, O., & Labarca, M. G. (2004). En defensa de la autonomía ontológica del mundo químico. *Diálogos*, (84), 51-70.
- Piaget, J., & García, R. (1982). *Psicogénesis e historia de la ciencia*. Siglo XXI.
- Rodríguez, M. E. (2011). La matemática y su relación con las ciencias como recurso pedagógico. *NÚMEROS. Revista de Didáctica de las Matemáticas*, 77, 35-49.

Torres Quezada, C. (2018). Relaciones de la química con matemática y lenguaje: propuesta de aprendizaje en un entorno virtual. *Educación química*, 29(2), 51-61.

Sistema periódico dos elementos químicos: Algumas reflexões a partir da Didática da Química

Adriano Lopes Romero

Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Brasil

Na Educação Básica, no âmbito da disciplina de Química, um dos conteúdos de destaque é a tabela periódica, uma representação do sistema periódico dos elementos químicos. O sistema periódico constitui um construto científico que se manifesta como um registro gráfico, o qual serve para organizar todos os elementos químicos atualmente conhecidos, recorrendo a um ou mais critérios de organização, alinhando-se com a lei periódica. A história da concepção do sistema periódico é compreendida como uma construção coletiva que envolveu diversos agentes históricos. Esta história teve início no século XVIII com tentativas iniciais de classificação dos elementos químicos. Posteriormente, evoluiu através de estudos que exploraram as relações numéricas entre os pesos atômicos, enfrentou períodos de mudanças conceituais e de padronização entre os praticantes da química, culminando na década de 1860-1870, período em que as primeiras representações gráficas do sistema periódico foram propostas. Desde então, uma variedade de arranjos gráficos foi desenvolvida, sendo as tabelas periódicas as mais comuns, tal como a “recomendada” pela IUPAC (ROMERO, 2021).

Considerando a Didática da Química enquanto área do conhecimento centrada em teorias e conceitos que fundamentam a prática do ensino da Química, na presente comunicação faremos algumas reflexões sobre o sistema periódico dos elementos químicos. Para isso, focamos nossa atenção para a formação inicial de professores de Química, em especial para a disciplina de Química Geral. A escolha deste enfoque se embasa na compreensão de que é nesse estágio que ocorre uma aprofundada exploração, e, por vezes, uma consolidação prematura, da edificação do conhecimento químico, o qual é socialmente reconhecido e compartilhado por uma determinada comunidade acadêmica (SILVA; EICHLER; DEL PINO, 2003). Os livros didáticos desempenham um papel fundamental na orientação do currículo da Educação Básica em diversas disciplinas. Não obstante, é importante notar que essa influência se estende também ao âmbito do ensino superior em Química. Para Bachelard e Kuhn, os livros didáticos são ferramentas poderosas porque são dogmáticos e conservadores, distorcendo a natureza real da atividade científica para fins didáticos (BENSAUDE-VINCENT, 2006). Essas distorções ocorrem com frequência ao se abordar aspectos conceituais, históricos e filosóficos do sistema periódico, estando presentes, inclusive, nos exercícios propostos. Estes, por sua vez, demandam dimensões do processo cognitivo relacionados à lembrar, entender e aplicar e dimensões do conhecimento relacionados ao conhecimento efetivo/factual e conhecimento conceitual e, em poucas ocasiões, conhecimento procedimental/procedural, que apresentam baixo ou médio nível de complexidade cognitiva (ROMERO, 2021).

BENSAUDE-VINCENT, B. Textbooks on the map of science studies. *Science & Education*, v. 15, n. 7, p. 667-670, 2006.

ROMERO, A. L. Aspectos históricos, filosóficos e sociológicos do sistema periódico dos elementos químicos: implicações para o ensino de Química. 2021. 408 f. Tese (Doutorado em Educação em Ciências e Educação Matemática) - Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Cascavel - PR.

SILVA, S. M.; EICHLER, M. L.; DEL PINO, J. C. As percepções dos professores de química geral sobre a seleção e a organização conceitual em sua disciplina. Química Nova, v. 26, p. 585-594, 2003.

Una propuesta para enriquecer la noción de sustancia básica

Alfio Zambon

Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina

En la filosofía clásica los elementos eran concebidos desde una perspectiva metafísica, como aquellos principios que conformaban el mundo material. Esta idea entró en la química a través de la alquimia, pero fue con Lavoisier que el concepto de elemento adquirió una definición operativa, como aquellas “sustancias que son el producto último del análisis químico”. Sin embargo, Mendeleev recuperó la dimensión metafísica del concepto de elemento al distinguir entre “sustancia simple”, que puede aislarse y tiene propiedades observables, y “sustancia básica”, que es portadora de propiedades no observables. Dotó a la sustancia básica al menos de un atributo: su peso atómico. Este fue utilizado como criterio para ordenar elementos en el sistema periódico (Scerri, 2005). En el siglo XX, Paneth asumió la naturaleza dual del concepto de elemento manteniendo su número atómico como única propiedad de la sustancia básica (Paneth, 1931). Como lo expresa con precisión Eric Scerri, “Paneth insistió en que el sistema periódico sólo clasifica los elementos como sustancias básicas. Desde esa perspectiva, es difícil entender cómo los elementos pueden proporcionar alguna indicación de la segunda dimensión de la tabla periódica, es decir, la agrupación de elementos en columnas verticales” (Scerri, 2012 p.72).

En este trabajo, asumiré la distinción de Paneth y trataré de especificar y enriquecer la noción de sustancia básica. Partiendo de una inspiración “libre” en la filosofía kantiana, propondré un enriquecimiento de la noción de sustancia básica, que podría superar el obstáculo señalado por Scerri. Muy sucintamente: el sujeto siempre percibe elementos de las formas a priori de la sensibilidad, el espacio y el tiempo. Sin embargo, el pensamiento puede abstraer uno del otro: el espacio abstraído del tiempo y el tiempo abstraído del espacio. Por tanto, los elementos como sustancias básicas pueden concebirse de dos maneras opuestas pero complementarias: en el espacio abstraído del tiempo, lo que permite captar aspectos cualitativos de los elementos, como las posibles manifestaciones de reactividad (Zambon, 2022); y en el tiempo abstraído del espacio, lo que permite dar cuenta de algunos de sus aspectos cuantitativos, como los inherentes al comportamiento cinético y termodinámico del elemento en una determinada reacción. Estas dos formas son estructuras a priori en el sentido kantiano: son anteriores a las experiencias empíricas y pueden considerarse como fundamentos de las mismas.

Posteriormente, reflexionaré sobre el concepto de elemento químico en el marco propuesto y sus posibles implicaciones en la comprensión de la reactividad química y la clasificación periódica. Finalmente, discutiré el alcance y las limitaciones de esta propuesta en el estado actual de desarrollo.

Referencias

Paneth, F. (1931). The epistemological status of the chemical concept of element [reprinted in *Foundations of Chemistry* 2003, 5: 113-145].

Scerri, E. (2005). "Some aspects of the metaphysics of chemistry and the nature of the elements". *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 11: 127-145.

Scerri, E. (2012). "What is an element? What is the periodic table? "What is an element? What is the periodic table? And what does quantum mechanics contribute to the question?", *Foundations of Chemistry* 14: 69-81.

Zambon, A. (2022). A Chemical reactivity: cause-effect or interaction?, *Foundations of Chemistry* 24: 375-387.

Propagación de sesgos en la predicción de estructuras macromoleculares: El caso de AlphaFold

Gabriel Vallejos Baccelliere

Laboratorio de Bioquímica y Biología Molecular. Departamento de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Chile

Durante el 2020, el software AlphaFold2 (DeepMind) obtuvo una victoria sin precedentes en la versión 14 del concurso bianual CASP, donde se ponen a prueba diversos softwares para la predicción de estructuras de proteínas. El éxito ha sido tal que incluso se ha afirmado que el problema de la predicción de estructuras macromoleculares está pronto a ser resuelto y que en un futuro próximo las metodologías computacionales sustituirán a las técnicas experimentales comúnmente utilizadas en esta tarea, como la cristalografía de rayos X.

En este trabajo defenderemos la posición de que el problema está lejos de ser resuelto y que es en principio imposible que las técnicas computacionales superen a las experimentales en la predicción de estructuras macromoleculares. Para esto realizaremos un análisis epistemológico de los procesos predictivos basados en el uso de bases de datos de resultados experimentales. Mostraremos que en este tipo de metodologías existen sesgos ineludibles, los cuales se propagan desde los experimentos hasta la confección de las bases de datos y, finalmente, quedan enquistados en los procedimientos computacionales para realizar las predicciones. Argumentaremos que solo a través de las metodologías experimentales se pueden generar estrategias para superar estos sesgos, y que solo a través de ellas es posible generar estándares de validación y establecer cuándo estamos frente a una predicción novedosa.

Finalmente analizaremos en qué consiste la revolución que han desencadenado AlphaFold2 y cuál es el lugar de las técnicas predictivas computacionales en la biología estructural y en las ciencias químico-biológicas en general. Para esto, las entenderemos como parte de la gran red metodológica interconectada que conforma la práctica científica en la biología, dentro de la que se han convertido en una poderosa fuente de insumos epistémicos destinados a aumentar el número de posibles hipótesis y puntos de partida para la investigación científica y para diversas aplicaciones.

Categorias centrais da Química

Marcos Antonio Pinto Ribeiro¹ y Lisandro Bacelar da Silva²

¹ *Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB), Brasil*

² *Universidade Federal da Bahia, Brasil*

As grandes ideias da Química são pensadas normalmente como fiduciárias do fisicalismo reduutivo. Atkins (1999) por exemplo, lista os átomos, moléculas e íons; ligação química; geometria e estrutura molecular; teoria cinética; reação química e energia e entropia como as grandes ideias da Química. Este trabalho busca, fundamentado no debate da Filosofia da Química, organizar algumas categorias básicas. Nossos resultados (RIBEIRO, 2014), obviamente não exaustivo, identifica as Contextualidade e Níveis; Comunidade e Ação; Narrativa e Aproximações; Relacionalidade e Recursividade. Em nossa consideração, isso dar conta de características identificadas para a Química pelos filósofos da Química: Polissemia dos conceitos, representações; Múltiplos níveis de descrição, análise; emergência; Razão prática, intervenção; Historicidade, inexatidão, criativa, dinâmica, aproximações, heurísticas; Relações internas, classificações, diagramaticidade, propriedades materiais e de inscrições filosóficas também identificadas pelos filósofos da Química: Filosofia pluralista, relacionista, processual e histórica.

ATKINS, P. (1999). Chemistry: the great ideas. Pure Appl. Chem., [S.l.], v.71, n.6, p.927-929

RIBEIRO, M.A.P. (2014). Integração da Filosofia da química no currículo de formação inicial de professores. Contributos para uma filosofia no ensino. Tese doutoral. Universidade de Lisboa: Lisboa.

Sobre la naturaleza de las propiedades en química cuántica

Jesus Alberto Jaimes Arriaga

CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina

En términos generales, en este trabajo se llevará a cabo el análisis de la naturaleza de la densidad electrónica, una importante magnitud en química cuántica, apelando a una ontología de cualidades poderosas. Para comenzar, se explicará qué es la densidad electrónica enfocándonos principalmente en la visión de Richard F. W. Bader y cuál es su papel en la descripción de los sistemas químicos microscópicos, es decir, las moléculas. A continuación, se introducirá la distinción entre sustancia como individuo y sustancia como “stuff”. Con esta distinción a mano, nos adentraremos en el análisis de la densidad electrónica al identificar una tensión filosófica en el discurso de Bader sobre su interpretación de este importante concepto. Con el objeto de resolver esta tensión, se introducirá la distinción categórico/disposicional, que constituye uno de los temas centrales en metafísica de propiedades, y abordaremos una propuesta particular que se propone en este contexto, a saber, la teoría de cualidades poderosas. Sobre esta base, se argumentará que una ontología de cualidades poderosas es capaz de explicar adecuadamente las múltiples funciones que juega la densidad electrónica en el contexto de la química cuántica, al tiempo que resuelve la tensión filosófica identificada en el discurso de Bader.

¿Qué es la densidad electrónica?

Sebastian Fortin

CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina

El concepto de densidad electrónica es central en la química cuántica. No hay dudas en la disciplina sobre cómo se calcula la función de densidad electrónica en términos de la función de onda electrónica de una molécula. Sin embargo, cuando lo que está en juego es la interpretación del concepto, no existe un acuerdo generalizado. Con frecuencia, el concepto se define como la densidad de probabilidad de encontrar un electrón en cada lugar específico del espacio. Sin embargo, a veces también se define como una medida del número de electrones por unidad de volumen de espacio. Este significado, a su vez, lleva a interpretar el concepto de densidad electrónica como una “nube” de carga negativa esparcida en el espacio físico. Esta es la interpretación adoptada por Richard Bader y Chérif Matta en el marco de la Teoría Cuántica de los Átomos en Moléculas (QTAIM) cuando dicen: “La carga electrónica, a diferencia de la de los núcleos más masivos, se distribuye por todo el espacio, y la materia está formado por núcleos puntuales incrustados en la distribución espacial relativamente difusa de la carga electrónica. La distribución de la carga electrónica se describe mediante la densidad electrónica que determina la cantidad de carga negativa por unidad de volumen”. (Bader y Matta 2013: 255). Según esta interpretación, la densidad electrónica ya no es una densidad de probabilidad, sino que adquiere materialidad: describe el tipo de materia de la que está hecha la parte electrónica de los átomos.

El objetivo del presente trabajo es examinar la interpretación material del concepto de densidad electrónica a la luz de la mecánica cuántica. Esta tarea es especialmente relevante en el contexto de una propuesta teórica como QTAIM, que afirma haber ofrecido una reducción completa de la química molecular a la mecánica cuántica. En particular, se mostrará en detalle cómo el cambio de una densidad de probabilidad a una materia distribuida es ajeno a la mecánica cuántica ortodoxa. Además, se argumentará que, si uno insiste en adoptar la interpretación material de la densidad electrónica en un marco cuántico, a la manera de la visión original de Schrödinger, se llega a una interpretación de muchos mundos de la mecánica cuántica. El trabajo concluirá con un alegato a favor de una ontología específica para la química cuántica, libre de las limitaciones impuestas por la mecánica cuántica en sus diferentes versiones.

Referencias

- Allori, V., Goldstein, S., Tumulka, R., and Zanghì, N. (2011). “Many worlds and Schrödinger’s first quantum theory.” *The British Journal for the Philosophy of Science*, **62**: 1-27.
- Bader, R. F. W. and Matta, C. F. (2013). “Atoms in molecules as non-overlapping, bounded, space-filling open quantum systems.” *Foundations of Chemistry*, **15**: 253-276.
- Gao, S. (2015). “How do electrons move in atoms? From the Bohr model to quantum mechanics.” Pp. 450-464 in F. Aaserud and H. Kragh (eds.), *One hundred years of the Bohr atom*. Copenhagen: Scientia Danica. Series M: Mathematica et Physica, vol. 1.

Sebens, C. (2021). "Electron charge density: a clue from quantum chemistry for quantum foundations." *Foundations of Physics*, **51**: 1-39.

Las Teorías ácido-base abordadas desde Química Inorgánica en el primer año de la carrera de Ingeniería en Alimentos de la Universidad Nacional de Entre Ríos

Horacio José Martínez

*Facultad de Ciencias de la Alimentación - Universidad Nacional de Entre Ríos,
Argentina*

Los procesos de fermentación, como por ejemplo la fermentación del vino para obtener vinagre, eran utilizados por las antiguas civilizaciones para la conservación de alimentos y la elaboración de subproductos. Del nombre latino vinagre, acetum deriva el término ácido, que designa tanto un sabor como una extensa familia de sustancias que tienen unas propiedades químicas parecidas.

Por otro lado, las bases, son otra familia de sustancias conocidas y utilizadas ampliamente por la industria desde tiempos remotos. Antes de la invención del jabón, las soluciones preparadas con ceniza vegetal, se empleaban como agentes limpiadores, debido a su elevada concentración en sales de sodio como de potasio. Del nombre árabe ceniza, al kali, procede el término álcali utilizado para referirnos a las soluciones de bases.

En la presente disertación, se presentarán características para ácidos y para bases que llevaron a pensar en una constitución química en común para esta familia de sustancias mediante las teorías ácido-base, abordadas desde Química Inorgánica en el primer año de la carrera de Ingeniería en Alimentos de la Universidad Nacional de Entre Ríos.

Comenzaremos este recorrido por la teoría de la disociación iónica, la cual defendía que algunas sustancias se disociaban en iones al disolverse en agua y por ello, esas disoluciones, denominadas electrolitos, mostraban conductividad eléctrica; propuesta en 1884 por el químico sueco Svante Arrhenius (1859-1927), (Brock, W. 1998, pág. 311); Con posterioridad a la misma en 1923, los químicos Johannes Nicolaus Brønsted (1879-1947) y Thomas Martin Lowry (1874-1936) propusieron una definición de ácido u base mucho más general que superaba las limitaciones de la teoría de Arrhenius (Shriver & Atkins, 2006, pág. 111). Una tercera teoría, aún más amplia fue propuesta por el químico norteamericano Gilbert Newton Lewis (1875-1946) introduciendo un concepto más general de ácido y base al partir de su teoría sobre el enlace covalente en 1938 (Shriver & Atkins, 2006, pág. 125). Al finalizar este recorrido, examinaremos si estas “teorías ácido-base” se ajustan mejor a la noción de “modelo” recordando lo argumentado por (Adúriz-Bravo, A.; Labarca, M.; Lombardi O. 2014).

Bibliografía

Brock, W. H. (1998), Historia de la Química. Ciencia y Tecnología. Editorial Alianza. Capítulo N°10. Pág. 311.

Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. (2006) Química Inorgánica. Cuarta Edición. Capítulo N°4, págs. 111-140.

Adúriz-Bravo, Agustín; Labarca, Martín; Lombardi, Olimpia. (2014). “Una noción de modelo útil para la formación del profesorado de química”. En Avances en Didáctica de la Química: Modelos y Lenguajes. Editado por Cristian Merino, Agustín Adúriz-Bravo y Marcela Arellano, 37-49. Valparaíso: Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.

Modelos científicos y sistema periódico. La clasificación de los elementos según la electronegatividad

Rodolfo Vergne¹ y Natalia Ordenes²

¹ *Universidad Nacional de Cuyo, Argentina*

² *Universidad Nacional de Tres de Febrero, Argentina*

La tabla periódica ordena y clasifica los elementos químicos de acuerdo a dos propiedades como criterios de clasificación: el primario o dimensión horizontal que establece los períodos y el secundario o dimensión vertical que establece los grupos de elementos químicamente similares. El criterio primario aceptado unívocamente está dado por el número atómico, mientras que el criterio secundario mayoritariamente aceptado -aunque no de modo unánime- está dado por la configuración electrónica externa del elemento. El presente trabajo tiene por objeto presentar a la electronegatividad como criterio secundario que permite incluir a todos los elementos en la clasificación y reconstruir los grupos de la tabla periódica estándar sin apelar a las configuraciones electrónicas. Analizaremos distintos modelos de electronegatividad, incompatibles entre sí, desde una perspectiva histórica y epistemológica. Se propone que los modelos científicos constituyen representaciones culturales construidas a partir de fenómenos reales y de postulados teóricos, que “median” entre la teoría y el mundo, y que tienen como propósito solucionar problemas determinados y reflejan la práctica efectiva de la ciencia. Suponiendo un único sistema real representado por medio de distintos modelos, cada uno de los cuales se aplica a un dominio disciplinar determinado, nada impide que distintas teorías puedan resultar empíricamente adecuadas a través de sus respectivos modelos. De ese modo, proponemos una pluralidad de modelos de tabla periódica que dé cuenta tanto de una ontología de partículas como una ontología química, que permita preservar información química (electronegatividades) e información física (configuraciones electrónicas), sin que ello fuerce a elegir una ontología. Esta perspectiva pluralista (no reduccionista) puede constituir un aporte a la discusión acerca de la posibilidad o imposibilidad de reducción de la tabla periódica a la mecánica cuántica. Además, puede mejorar la comprensión de la naturaleza de la ciencia en la educación científica.

Referencias

Accorinti, H. L. (2019). Incompatible models in chemistry: the case of electronegativity. *Foundations of Chemistry*, 21, 71-81.

Accorinti, H. L., & Martínez González, J. C. (2016). Modelos y representación. *Epistemología e Historia de la Ciencia*, 1(1); 21-34.

Accorinti, H., & Labarca, M. (2020). Commentary on the Models of Electronegativity. *Journal of Chemical Education*, 97(10), 3474-3477.

- Adúriz-Bravo, A. (2012). Algunas características clave de los modelos científicos relevantes para la educación química. *Educación química*, 23, 248-256.
- Adúriz-Bravo, A. (2013). Características epistemológicas clave de los modelos científicos relevantes para la didáctica de las ciencias. *Enseñanza de las ciencias: revista de investigación y experiencias didácticas*, (Extra), 22-26.
- Adúriz-Bravo, A., & Izquierdo-Aymerich, M. (2009). Un modelo de modelo científico para la enseñanza de las ciencias naturales. *Revista electrónica de investigación en educación en ciencias*, (ESP), 40-49.
- Adúriz-Bravo, A., Labarca, M., & Lombardi, O. (2014). Una noción de modelo útil para la formación del profesorado de química. *Avances en didáctica de la química: modelos y lenguajes*, 37-49.
- Ariza, Y. (2022). La noción de " modelo teórico" en la enseñanza de la química: representación y función del sistema periódico. *Educación química*, 33(4), 97-110.
- Izquierdo Aymerich, M., & Adúriz-Bravo, A. (2005). Los modelos teóricos para la ciencia escolar: Un ejemplo de química. *Enseñanza de las Ciencias*, (Extra).
- Izquierdo-Aymerich, M., & Adúriz-Bravo, A. (2009). Physical construction of the chemical atom: Is it convenient to go all the way back? *Science & Education*, 18, 443-455.
- Labarca, M. (2021). Por un diálogo entre la filosofía de la química y la enseñanza de la química: el caso de la electronegatividad. *Educación química*, (29), 48-53.
- Lombardi, O. I., Acorinti, H., & Martínez González, J. C. (2016). Modelos científicos: el problema de la representación. *Scientiæ Studia*, (14) 1, p. 151-74.

Filosofia e História da Química: aportes para o ensino de química

Jailson Alves

Instituto de Química/ Universidad Federal de Bahía (UFBA), Brasil

Os estudantes e professores que estão em contato com o conhecimento químico, especialmente no Brasil, têm tido dificuldades de relacionar posições filosóficas, posições epistemológicas e modelos estáveis de ensino que busquem alcançar uma posição crítica do conhecimento químico acumulado até então. Em geral, vinculam-se a posições epistemológicas confortáveis baseadas no realismo ingênuo, em que tomam a “Coisa em Si” como idêntica a “Coisa para Si” (crítica Kantiana sobre juízos sintéticos e juízos analíticos, in: *Crítica da razão pura* 1), como é o caso do modelo atômico de Rutherford em relação aos dados que emergem do seu experimento de “espalhamento de partículas alfa”, tomando como verdade um modelo que não está presente (e não é) na lâmina de ouro, e não é senão uma construção mental a partir de dados experimentais. Assim, ao extrair dos processos de narrativas histórias a respeito de experimentos que ajudam a compreender a realidade, trazem com o conjunto de dados que relacionam teorias, experimentos e modelos uma visão ingênua da realidade. E portanto, é necessário rever essas propostas de ensino e aprendizagem de conceitos e teorias, das relações entre estes e as técnicas e buscar mudar a VNOS, no sentido de uma encontrar epistemologias críticas, como o Racionalismo aplicado, em oposição ao realismo ingênuo.

Uma possibilidade de minimizar esse impacto no ensino e na aprendizagem é apresentar uma conexão coerente entre a história dos feitos científicos (descobertas, experimentos, etc) com epistemologias críticas (racionalismo aplicado), filósofos que tratam das possibilidades do conhecimento (Kant), confrontando dados experimentais com teorias construídas, apontando para modelos de ensino e de aprendizagem que possam driblar realismos ingênuos em busca de uma construção crítica do conhecimento.

KANT, I. *Crítica da razão pura*. Os pensadores Vol. II. São Paulo: Nova Cultural, 1988.