

Libro de resúmenes de las II Jornadas de Fundamentos de Química 2021

2021 - "Año de Homenaje al Premio Nobel de Medicina Dr. César Milstein"

II Jornadas de Fundamentos de Química

5 y 7 de octubre 2021
En modalidad de videoconferencia

Anfitriona:
UNPSJB-Com.Riv.



Informes e inscripciones:
www.filoexactas.exactas.uba.ar/jfq2021

Comité Organizador: Alfio Zambon y Fiorela Alassia (UNPSJB), Sebastián Fortín y Martín Labarca (CONICET-UBA).



Avaladas por la FCNyCS-UNPSJB (Res.DFCNyCS N°185/21) y por el Instituto de Filosofía, FFyL-UBA.

Zambon, Alfio; Alassia, Fiorela; Labarca, Martín; Fortin, Sebastian

Libro de resúmenes de las II Jornadas de Fundamentos de Química / Zambon, Alfio; Alassia, Fiorela; Labarca, Martín y Fortin, Sebastian (Editores). 1° edición electrónica, Grupo de Filosofía de la Química de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina, 2021.

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

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

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

Editorial: Grupo de Filosofía de la Química de Buenos Aires

Lugar: Comodoro Rivadavia, Argentina

Año: 2021

Diseño editorial: Sebastian Fortin

Diseño de portada: Fiorela Alassia

Coordinación editorial: Sebastian Fortin

Corrección: Alfio Zambon, Fiorela Alassia y 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

Prólogo.....	5
Programa	7
“Experiencia de innovación para introducir la historia de la ciencia en la formación del profesorado de química. De Lavoisier a Faraday” - Mario Quintanilla	9
“La teoría magnética de los electrones y el modelo cúbico del átomo” - Juan Camilo Martínez González	10
“Escalas alternativas de acidez (1920-1960)” - Santiago Lanterna y Martin Labarca	11
“La química versus la física, el debate de la reducción” - Esteban Szigety	12
“Una teoría aristotélica de composición en química cuántica” - Jesús Alberto Jaimes Arriaga	13
“El problema del isomerismo” - Sebastian Fortin y Olimpia Lombardi	14
“A química como ciência diagramática – crítica ao triângulo de Johnstone” - Jailson Alves	16
“Sobre el concepto de estructura en química y su relación con el concepto de estructura en matemática” - Leandro Andrini	17
“Juegos de representaciones en la química cuántica computacional” - Penélope Lodeyro y Silvia Polzella	18

“Cambios teóricos en la tabla periódica” - Rodolfo Vergne y Natalia Ordenes	20
“¿Es posible una química geométrica?” – Alfio Zambon	21
“Algunas observaciones sobre el mapeo causal (causal mapping) en química” – Chérif F. Matta	23

Prólogo

En el libro “Prólogos con un prólogo de prólogos”, Jorge Luis Borges expresa: “*Que yo sepa, nadie ha formulado hasta ahora una teoría del prólogo. La omisión no debe afligirnos, ya que todo sabemos de qué se trata. El prólogo, en la triste mayoría de los casos, linda con la oratoria de sobremesa o con los panegíricos fúnebres y abunda en hipérboles irresponsables, que la lectura incrédula acepta como convenciones del género*”. En esta oportunidad trataremos no estar en “la triste mayoría de los casos”.

Las Primeras Jornadas de Fundamentos de Química tuvieron su bautismo en 2020, en plena emergencia sanitaria dada por el COVID-19. Dicho evento fue organizado por la Universidad de Buenos Aires y su concreción trajo aparejados desafíos mayores y diferentes que toda organización de esta naturaleza conlleva, dado el contexto. Este año le dimos continuidad a este proyecto con la organización de la segunda edición, actuando como anfitrión la Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco. Si bien continuamos transitando esta pandemia, se avizora un horizonte esperanzador para atravesar esta dolorosa etapa de la humanidad.

La segunda edición de las Jornadas se realizó bajo la modalidad virtual, al igual que el año anterior, circunstancia que atrajo a múltiples participantes de buena parte del continente. En ese contexto se produjo un interesante espacio de intercambio y diálogo de experiencias docentes durante el receso, matizado como un “café virtual”, especialmente en el segundo día del evento. Es relevante destacar que creció el interés respecto de las Primeras Jornadas, al duplicar el número de inscriptos y aumentar considerablemente los asistentes en ambos días. 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.

Las temáticas abordadas por los expositores se han acercado 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 continuamos haciendo nuestro.

En el párrafo siguiente del texto referido al comienzo, Borges expresa: “*El prólogo, cuando son propicios los astros, no es una forma subalterna del brindis; es una especie lateral de la crítica*”. Esperamos encontrarnos más cerca de esta apreciación.

El Comité Organizador

Octubre de 2021

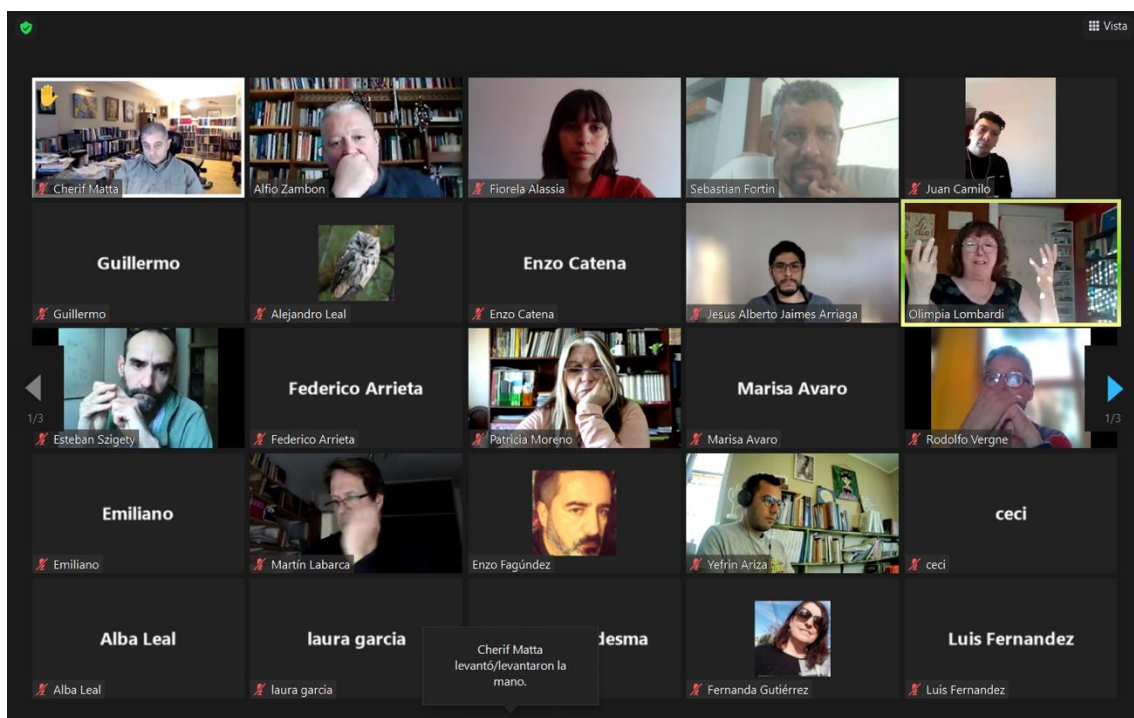


Figura. Captura de pantalla de la plataforma de videoconferencias Zoom®. Participantes y expositores conversando sobre una de las ponencias durante el primer día de las Jornadas.

Programa

Martes 5 de Octubre

- 13:45 - 13:55 Ingreso al auditorio virtual
- 13:55 - 14:00 Apertura de las Jornadas: Alfio Zambon (UNPSJB)

Bloque I – Moderador: Fiorela Alassia (UNPSJB)

- 14:00 - 14:30 **Mario Quintanilla (Universidad Católica de Chile)** - “Experiencia de innovación para introducir la historia de la ciencia en la formación del profesorado de química. De Lavoisier a Faraday”
- 14:30 - 15:00 **Juan Camilo Martínez González (CONICET)** - “La teoría magnética de los electrones y el modelo cúbico del átomo”
- 15:00 - 15:30 **Santiago Lanterna (Liceo 1, Paysandú, Uruguay) y Martín Labarca (CONICET-UBA)** - “Escalas alternativas de acidez (1920-1960)”
- 15:30 - 16:00 **Descanso y café (intercambio libre)**

Bloque II – Moderador: Alfio Zambon (UNPSJB)

- 16:00 - 16:30 **Esteban Szigety (UNMDP)** - “La química versus la física, el debate de la reducción”
- 16:30 - 17:00 **Jesús Alberto Jaimes Arriaga (CONICET-UBA)** - “Una teoría aristotélica de composición en química cuántica”
- 17:00 - 17:30 **Sebastian Fortin (CONICET-UBA) y Olimpia Lombardi (CONICET)** - “El problema del isomerismo”
- 17:30 - 18:00** **Café final (intercambio libre)**

Jueves 7 de Octubre

13:45 - 14:00 Ingreso al auditorio virtual

Bloque I – Moderador: Martín Labarca (CONICET-UBA)

- 14:00 - 14:30 **Jailson Alves (Universidad Federal de Bahía, Brasil)** - “A química como ciência diagramática – crítica ao triângulo de Johnstone”
- 14:30 - 15:00 **Leandro Andrini (UNLP-CONICET)** - “Sobre el concepto de estructura en química y su relación con el concepto de estructura en matemática”
- 15:00 - 15:30 **Penélope Lodeyro (UNC-FONCyT) y Silvia Polzella (UNC-FONCyT)** - “Juegos de representaciones en la química cuántica computacional”
- 15:30 - 16:00 **Descanso y café (intercambio libre)**

Bloque II – Moderador: Sebastian Fortin (CONICET-UBA)

- 16:00 - 16:30 **Rodolfo Vergne (UNCuyo) y Natalia Ordenes (UNCuyo)** - “Cambios teóricos en la tabla periódica”
- 16:30 - 17:00 **Alfio Zambon (UNPSJB)** - “¿Es posible una química geométrica?”
- 17:00 - 17:30 **Chérif F. Matta (Mount Saint Vincent University, Canadá)** - “Algunas observaciones sobre el mapeo causal (causal mapping) en química”
- 17:30 - 18:00 **Clausura y café final (intercambio libre)**

Experiencia de innovación para introducir la historia de la ciencia en la formación del profesorado de química. De Lavoisier a Faraday

MARIO QUINTANILLA

Universidad Católica de Chile

Presentamos y discutimos las directrices metateóricas y metodológicas de una experiencia de innovación que favorece introducir la historia de la ciencia y la filosofía de la ciencia en los cursos de didáctica de la química en la formación inicial del profesorado de química. Ello, con la finalidad de promover y desarrollar una visión más comprensiva, interesante y valiosa sobre la producción del conocimiento en este campo disciplinar de la ciencia, frente a los actuales y diversos desafíos que nos impone una nueva cultura de la enseñanza de la química. Se promueven así articulaciones teóricas, metodológicas y lingüísticas virtuosas, que contribuyen a superar la visión anacrónica del conocimiento científico, enfatizando su relevancia para el aprendizaje de la química escolar y la propia reconfiguración teórica del profesorado sobre la enseñanza de las ciencias. Los resultados revelan una interesante reflexión de cómo la orientación formativa y teórica del profesorado contribuye a una visión más humana de la química, su enseñanza y aprendizaje, estimulando una reflexión teorizada y competencial, para comprender su sentido y valor como estrategia e instrumento de aprendizaje de la química escolar.

La teoría magnética de los electrones y el modelo cubico del átomo

JUAN CAMILO MARTÍNEZ GONZÁLEZ

CONICET—Universidad de Buenos Aires / olimac62@hotmail.com

1916 marcó uno de los años más revolucionarios para las teorías de la química. Los influyentes trabajos de G. N. Lewis establecieron nuestra comprensión moderna de los enlaces químicos y las representaciones de estructuras moleculares. El programa de Lewis se amplió y desarrolló con gran detalle en su "Valence and Structure of Atoms and Molecules" de 1923. Sus ideas fueron lo suficientemente influyentes como para aparecer destacadas en la introducción de "La naturaleza del enlace químico" (Pauling 1931). El propio Linus Pauling, en una carta de 1939, le confesó a Lewis su admiración: "Sabes, por supuesto, que te tenía en mi mente continuamente mientras se escribía, y esperaba que mi tratamiento demostrara ser aceptable para ti." (Pauling, 1939).

El propósito de este artículo es recuperar la influencia del trabajo de Alfred Lauck Parson (1889 Lucknow, India - 1970 Allonby, Inglaterra) en el desarrollo de las ideas de Lewis sobre los aspectos químicos de la teoría de Bohr, el emparejamiento de electrones y la reconciliación entre dos teorías en conflicto sobre dinámica y estructura de electrones en átomos y moléculas. Parson fue un estudiante graduado de Harvard conocido por su "teoría magneton" del átomo. Entre 1913 y 1915, Parson fue estudiante visitante en la Universidad de California, Berkeley, donde casualmente Gilbert N. Lewis trabajaba como presidente del departamento de química. Durante estos años, Lewis tuvo contacto con el trabajo de Parson, que argumentó que el electrón, en el modelo de Bohr, podría ser un anillo de electricidad negativa que gira (un Magneton) con una alta velocidad alrededor de su eje y que un enlace químico resulta de dos electrones, siendo compartido entre dos átomos.

Referencias

- Lewis, G. N. (1916) Lewis, G. N. (1923a). Valence and the Structure of Atoms and Molecules. New York: The Chemical Catalog Company, reprinted by Dover Publications, 1966.
- Parson, A. L. (1915). "Magnetron theory of the structure of the atom." Smithsonian Miscellaneous Collection, Pub 2419, V65, N11, 1916; [Pub.no.2371, 80pgs, 2 plates, Nov, 29, 1915].
- Pauling, L. (1931). The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Atoms and Molecules. An Introduction to Modern Structural Chemistry. New York: Cornell University Press.
- Pauling (1939). Letter to Lewis. corr216.1-lp-lewis-19390829.

Escalas alternativas de acidez (1920–1960)

SANTIAGO LANTERNA¹ – MARTÍN LABARCA²

1 Liceo 1, Paysandú, Uruguay

2 CONICET – Universidad de Buenos Aires

En 1909 Sørensen introducía el concepto de pH, el cual es una magnitud que expresa la acidez y/o la alcalinidad de una solución. Su uso se extendió rápidamente en el campo de la bioquímica y la enzimología, y el gran número de artículos publicados en los años siguientes dan testimonio de una variedad de procesos que se investigaron vinculados a la función de dicha noción. Sin embargo, la concentración del ión hidrógeno no figuraba en los asuntos de interés de los químicos en la época. Más aún, a la luz de una serie de inconvenientes la utilidad de la escala de Sørensen fue puesta seriamente en duda.

En consecuencia, a partir de la década de 1920 y hasta 1960 varias formulaciones alternativas de acidez comenzaron a publicarse. La defensa de la escala de Sørensen fue llevada adelante por William Clark y principalmente por Izaak M. Kolthoff, habitualmente considerado el ‘padre’ de la química analítica moderna. Entre la variedad de escalas propuestas, la más consistente científicamente y que recibiera un fuerte respaldo de varios investigadores, fue formulada por Domingo Giribaldo, un destacado químico-farmacéutico uruguayo, profesor de Electroquímica en la Universidad de la República. El propósito de este trabajo es presentar una síntesis de las escalas más relevantes propuestas, así como reconstruir los aspectos destacados de la escala de Giribaldo, basada en el concepto de pR, e indagar en los motivos por los cuales se impuso la escala de Sørensen en las comunidades científicas.

Referencias

- Crane Jr., F. E. (1961). “Is there an alternative to pH?”, *Journal of Chemical Education* 38: 365-366.
- da Silva Gama, M. y Afonso, J. C. (2007). “E Svante Arrhenius ao peagâmetro digital: 100 anos de medida de acidez”, *Quimica Nova* 30: 232-239.
- Giribaldo, D. (1951). “Expresión de la reacción actual de las soluciones: la notación de Sorensen y sus desventajas. Nueva notación racional”, pR: *Órgano Oficial de la Asociación de Estudiantes de Química (Uruguay)* 1 (1): 20-36. RIQUIM - Repositorio Institucional de la Facultad de Química – UdelaR.

La química vs la física, el debate de la reducción.

ESTEBAN GUILLERMO SZIGETY

Departamento de Física. Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de Mar del Plata

En la presentación se analiza el debate sobre la reducción de la química a la física. Por un lado se encuentran las posturas que creen a la física lo suficientemente capaz para explicar y predecir soluciones a los problemas empíricos de la química. Por el otro lado, existe una resistencia a ver esto posible, dado que entidades y teorías propias de la química tienen la suficiente capacidad para explicar su entorno en forma eficiente. La zona fronteriza donde se dirime esta discusión es en aquellos ítems donde la mecánica cuántica parece tener la suficiente capacidad de cálculo para resolver propiedades e interacciones de moléculas complejas. Existen también puntos de reconciliación entre el reduccionista extremo y la independencia total que reclama la química. Algunas de estas posturas recurren a la realización múltiple, la superveniencia o el pluralismo ontológico como marco para describir las relaciones interteóricas entre física y química. El análisis de estos casos sugiere que la realización múltiple podría resultar en un marco teórico útil para describir las relaciones entre la física y la química.

Mereología e hilemorfismo en química cuántica

JESUS ALBERTO JAIMES ARRIAGA

CONICET—Universidad de Buenos Aires / ja.jaimes@conicet.gov.ar

La química cuántica es la disciplina en la que convergen principios y leyes de la química molecular y de la mecánica cuántica, razón por la cual es el escenario perfecto para el estudio de las relaciones interteóricas entre química y física. En este contexto, tomaremos como caso de estudio la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas (TCAeM) enfocándonos en la importante noción de densidad electrónica (DE) (Bader 1994). Empezaremos un análisis de los supuestos de la TCAeM a la luz de los principios de la mereología clásica, haciendo particular énfasis en el papel que juega la DE en la definición de átomos y moléculas. Este análisis nos llevará a argumentar por qué estas entidades, si bien respetan varios predicados mereológicos, no cumplen con el principio de fusión única irrestricta. Este hecho se verá reflejado justamente en la llamada impronta topológica, una propiedad expresada en términos de la DE, la cual caracteriza a los átomos topológicos como átomos en entornos moleculares determinados, esto es, los átomos al formar una molécula dada, adquieren ciertas características en virtud de pertenecer a esa y solo esa molécula. Así, dada la incapacidad de la mereología clásica para dar cuenta del átomo topológico, invocaremos al hilemorfismo aristotélico. De acuerdo a esta doctrina, las moléculas pueden ser concebidas como sustancias compuestas de partes materiales atómicas y forma química. Nuestro argumento se basará principalmente en versiones contemporáneas del hilemorfismo defendidas recientemente (Koons 2014, Marmodoro 2013, Tabaczeck 2019).

Referencias

- Bader, R. F. W. (1994). *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*. Clarendon Press, Oxford.
- Koons, R. (2014). Staunch Vs. Faint-hearted hylomorphism: Toward an aristotelian account of composition. *Res Philosophica*, 91(2):151–177.
- Marmodoro, A. (2013). Aristotle's Hylomorphism without Reconditioning. *Philosophical Inquiry*, 36(1-2):5–22.
- Tabaczeck, M. (2019). *Emergence. Towards A New Metaphysics and Philosophy of Science*. University of Notre Dame Press.

El problema del isomerismo

SEBASTIAN FORTINI Y OLIMPIA LOMBARDI²

1 CONICET – Universidad de Buenos Aires / sfortin@conicet.gov.ar

2 CONICET – Universidad de Buenos Aires / olimpiafilo@gmail.com

El problema del isomerismo se expresa mediante la siguiente pregunta: ¿Puede la mecánica cuántica explicar la existencia de isómeros? La dificultad para brindar una respuesta positiva es que, cuando una molécula se describe exclusivamente en términos cuánticos, la descripción no puede distinguir entre diferentes isómeros: dado que son sistemas cuánticos con el mismo número y tipo de elementos, los isómeros son descriptos por el mismo Hamiltoniano Coulombiano. La estrategia en química es, entonces, apelar a Hamiltonianos efectivos, obtenidos mediante la aproximación de Born-Oppenheimer, los cuales encarnan la estructura de cada isómero particular.

En este trabajo argumentaremos que, aunque el problema del isomerismo puede concebirse como un caso del problema de la simetría (¿Puede la mecánica cuántica dar cuenta de la existencia de ciertas asimetrías moleculares?), no puede resolverse como otros casos de asimetría, simplemente asumiendo una ruptura de simetría inducida externamente. En particular, la función de onda simétrica de la molécula no puede reconstruirse como una superposición de funciones de onda asimétricas correspondientes a los diferentes isómeros.

Bibliografía

- Fortin, S. & Lombardi, O. (2021). "Is the problem of molecular structure just the measurement problem?" *Foundations of Chemistry*, on line first.
- Fortin, S., Lombardi, O., & Martínez González, J. C. (2016). "Isomerism and decoherence." *Foundations of Chemistry*, 18: 225-240.
- Fortin, S., Lombardi, O., & Martínez González, J. C. (2018). "A new application of the modal-Hamiltonian interpretation of quantum mechanics: The problem of optical isomerism." *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, 62: 123-135.
- Franklin, A. & Seifert, V. (2020). "The problem of molecular structure just is the measurement problem." *The British Journal for the Philosophy of Science*, forthcoming.
- Hendry, R. F. (1998). "Models and approximations in quantum chemistry." In N. Shanks (ed.), *Idealization in Contemporary Physics*. Amsterdam-Atlanta: Rodopi.
- Hendry, R. F. (2010). "Ontological reduction and molecular structure." *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, 41: 183-191.
- Claverie, P. & Diner, S. (1980). "The concept of molecular structure in quantum theory: interpretation problems." *Israel Journal of Chemistry*, 19: 54-81.
- Sutcliffe, B. T. & Woolley, R. G. (2012). "Atoms and molecules in classical chemistry and quantum mechanics." In R. F. Hendry and A. Woody (eds), *Handbook of Philosophy of Science*. Vol. 6, *Philosophy of Chemistry*. Oxford: Elsevier.
- Sutcliffe, B. T. & Woolley, R. G. (2021). "Is chemistry really founded in quantum mechanics?" Forthcoming in O. Lombardi, S. Fortin, and J. C. Martínez González (eds.), *Quantum Chemistry: Philosophical Perspectives in Modern Chemistry*. Berlin-Heidelberg: Springer.

Woolley, R. G. (1978). "Must a molecule have a shape?" *Journal of the American Chemical Society*, 100: 1073-1078.

Woolley, R. G. and Sutcliffe, B. T. (1977). "Molecular structure and the Born-Oppenheimer approximation." *Chemical Physics Letters*, 45: 393-398.

**A química como ciência diagramática – crítica ao
triângulo de Johnstone**

JAILSON ALVES

Universidad Federal de Bahía, Brasil

TBC

Sobre el concepto de estructura en química y su relación con el concepto de estructura en matemática

LEANDRO ANDRINI

Dto. de Matemática – FCE – Universidad Nacional de La Plata

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA – UNLP/CONICET)

En esta presentación, sin agotar las posibilidades, se presentará un bosquejo de los desarrollos del concepto de estructura tanto desde el punto de vista de la matemática como desde el punto de vista de la química.

Trataremos de evidenciar cómo el concepto en el campo de la química ha sido influenciado a través de la física, es decir, el campo de la física como mediador y/o intercomunicador conceptual entre la matemática y la química. Además, sabemos que el área disciplinar de la Química-Matemática, en sí, es un área nueva respecto de cada una de las disciplinas autónomas que la conforman, y el concepto de estructura es usado con antelación a esta conformación disciplinar, por lo que las imbricaciones conceptuales pueden estar dando cuenta de la génesis de constitutiva de esta nueva disciplina.

Por último, será abordada la polisemia estructura en el campo de la química, propiamente, y sus inter-relaciones, poniendo en perspectiva el uso bien definido –o la intención de “bien definido”- del concepto en matemática.

Juegos de representaciones en la química cuántica computacional

PENÉLOPE LODEYRO ¹ Y SILVIA POLZELLA ²

1 Universidad Nacional de Córdoba - FONCyT

2 Universidad Nacional de Córdoba – FONCyT

Es ampliamente reconocido el hecho de que las simulaciones computacionales están transformando las prácticas científicas. La química cuántica no ha escapado a su impacto y éstas se han constituido en herramientas centrales para el desarrollo de la disciplina. El campo se vio revolucionado a partir de la década del '90 por los nuevos desarrollos en los métodos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) (Becke 1988). En las últimas tres décadas, las DFT dominan el estudio de la estructura electrónica. Uno de los principales atractivos de DFT radica en la expectativa que generó de realizar cálculos ab initio sencillos posibilitando así el estudio de sistemas químicos más grandes en un tiempo razonable. Es decir, con un costo computacional relativamente bajo. Los cálculos ab initio son aquellos que evitan el ajuste de parámetros a valores empíricos y el uso de aproximaciones drásticas, y habitualmente se distinguen de los semi empíricos que sí lo hacen.

A partir de DFT es posible escribir una ecuación para orbitales de una partícula, de los cuales se obtiene la densidad. Este enfoque trata a los electrones de alrededor del núcleo como una nube homogénea representados por la densidad de carga electrónica, disminuyendo la complejidad del problema de los N-cuerpos respecto del enfoque de función de onda. Sin embargo, DFT tiene una limitación intrínseca pues si bien, en su formulación es teóricamente exacta, la teoría no dice cuál es ese funcional, ni cómo encontrarlo (Segall et al., 2002). La construcción de los funcionales tiene una larga historia. Su desarrollo es muy rico y complejo. Su construcción contempla desde simplificaciones, idealizaciones, aproximaciones, hasta diversas estrategias de modelado matemático y computacional. El análisis de esta fase constructiva pone de relieve que, aunque se denominen ab initio, la inclusión de diversas estrategias pragmáticas las aleja del rigor teórico. El modelo matemático para posibilitar el cálculo obliga a incluir aproximaciones y a emplear estrategias como el ajuste a parámetros empíricos, la hibridación con otros marcos teóricos y, en la actualidad, a la incorporación de algoritmos de aprendizaje automatizado (machine learning), a fin de lograr una buena precisión a un

bajo costo computacional. Nuestro trabajo analiza estos juegos de representaciones en el modelo computacional en el que priman estrategias de búsquedas que desdibujan el marco teórico. En particular, las estrategias de aprendizaje automatizado están mostrando sus primeros resultados y prometen revolucionar el campo de DFT, mejorando la precisión y reduciendo el costo computacional (Nagai et al 2020). Mostramos que en las prácticas de construcción de simulaciones impera el interés de abordar sistemas más complejos por sobre el ideal de rigor teórico, sin por ello renunciar a los estándares de precisión. De este modo, consideramos que estamos asistiendo a un cambio radical que en gran medida dejará obsoleta la distinción ab initio/semiempírico.

Referencias

- Becke, A. D. (1988). Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic Behavior. *Physical Review A*, 38(6), 3098-3100.
- Nagai, R. et al. (2020) Completing density functional theory by machine learning hidden messages from molecules.npj *Computational Materials* 6:43.
- Segall, M. D., et al. (2002). First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(11), 2717-2744.

Cambios teóricos en la tabla periódica

RODOLFO VERGNE ¹ Y NATALIA ORDENES ²

1 Universidad Nacional de Cuyo, Facultad de Ciencias Aplicadas

2 Universidad Nacional de Cuyo, Facultad de Ciencias Aplicadas

El propósito de este trabajo es reflexionar sobre los cambios teóricos en la formación de la tabla periódica desde la perspectiva de Thomas Kuhn.

El aporte de Kuhn a la filosofía de la ciencia sigue siendo reconocido y resignificado en la actualidad. Las nociones de paradigma o matriz disciplinar, comunidad científica e inconmensurabilidad son claves para entender los cambios teóricos durante la ciencia normal y los cambios de teoría en las revoluciones científicas.

Recientemente Eric Scerri presenta y cuestiona los argumentos que el cambio del uso de peso atómico por número atómico para el ordenamiento del sistema periódico de elementos sea un caso de revolución kuhniana. Si bien mantiene una continuidad teórica dentro de la química, nos preguntamos si corresponde a dos modelos atómicos de teorías físicas distintas.

Referencias

- Kragh, H. (2000). Conceptual Changes in Chemistry: The Notion of Chemical Elements, ca. 1900–1925. *Studies in History and Philosophy of Physics* 31: 435–450.
- Scerri, E. R. (2021). Reassessing the Notion of a Kuhnian Revolution. Wray, B. (2021) *Interpreting Kuhn: Critical Essays*. Cambridge University Press, pp. 125-141.
- Scerri, E. y Ghibaudi, E. (2020) *What is an Element*, New York: Oxford University Press.
- Wray, K. B. (2018). The Atomic Number Revolution in Chemistry: A Kuhnian Analysis, *Foundations of Chemistry* 20: 209–217.

¿Es posible una química geométrica?

ALFIO ZAMBON

Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco / alfiozambon@gmail.com

En Química conviven dos acercamientos diferentes para el estudio de la materia: el macroscópico, basado en el estudio de las propiedades y relaciones determinadas en el laboratorio (ontológicamente “cosas”), y el microscópico, apoyado en la existencia de átomos y moléculas (ontológicamente “individuos”). En este trabajo propondré que es posible -o pensable- un tercer acercamiento: la Química geométrica, que ontológicamente está poblada de entidades formales. Este abordaje está basado en la filosofía kantiana.

Kant, para explicar cómo surgen las apariencias, postuló una concepción original del espacio y del tiempo, no como propiedades de las cosas, sino como estructuras a priori que nos permiten configurar el mundo. De esa manera, espacio y tiempo no son propiedades inherentes al “mundo en sí”, sino a nuestro modo de percibir el mundo. A partir de esas formas de percepción, el sujeto puede situar los objetos fuera de sí mismo, y formar una imagen coherente de ellos. Pero para que las percepciones den lugar al conocimiento, son necesarias otras condiciones transcendentales a priori: las categorías o formas puras del entendimiento. El conocimiento, para Kant, es el resultado de una especial conjunción de experiencia y razón, el sujeto requiere de los datos de los sentidos en el espacio y tiempo para poder construir sus intuiciones, y de las categorías transcendentales para conformar el conocimiento de la realidad.

En primer lugar, propondré que el concepto de sustancia implica un fenómeno que se desarrolla en el tiempo y el espacio. El concepto de sustancia se refiere a un espectro de infinitas formas de concebir fenómenos químicos entre dos formas extremas. Uno de ellos es el cambio manifestado en el tiempo, abstraído del espacio; el otro extremo es la relación geométrica entre entidades, manifestadas en el espacio, abstraídas del tiempo. El primer caso corresponde a la “sustancia temporal macroscópica” (MTS), el segundo caso corresponde a la “sustancia espacial geométrica” (GSS). A partir de las categorías del entendimiento, la MTS da lugar a la Química macroscópica, mientras que la GSS permite construir la Química geométrica aquí propuesta. El conjunto de percepciones intermedias permiten conformar la Química microscópica.

Las reacciones macroscópicas se pueden representar, mediante un gráfico de energía frente a la coordenada de reacción y las microscópicas mediante ecuaciones químicas (como es habitual). En cuanto a la representación de reacciones en el espacio geométrico, describiré un modelo denominado “diagrama de reacción”, que consiste someramente en colocar las diferentes sustancias en círculos concéntricos con proyecciones cilíndricas. Consideraré las relaciones entre la Química macroscópica, la Química microscópica, y la hipotética Química geométrica. Teorizaré que, así como las perspectivas macroscópicas y microscópica se relacionan mediante herramientas de la termodinámica estadística, entre la visión microscópica y geométrica, debería poder construirse una herramienta teórica de similar solidez. Finalmente discutiré el alcance y las limitaciones de la propuesta en el estado actual de desarrollo.

Algunas observaciones sobre el mapeo causal (causal mapping) en química

CHÉRIF F. MATTA

Universidad Mount Saint Vincent (Canadá)

Empiezo con una advertencia de no haber recibido formación como filósofo; de ahí que esta charla sea más para plantear preguntas que para dar respuestas. La causalidad, en un sentido restringido, se relaciona con un orden temporal de eventos, por el cual la causa-evento (C) siempre precede al efecto-evento (E) [1], $C \rightarrow E$. Dado que se invocamos el concepto de orden temporal, debemos respetar el requisito de la relatividad especial de permanecer dentro de los límites del cono de luz [2,3]. Pero las líneas del mundo dentro de este cono son insensibles a la dirección, es decir que el espacio-tiempo dentro del cono es isotrópico. Por lo tanto, uno debe respetar también la segunda ley de la termodinámica que nos proporciona el orden temporal al requerir que el último estado del universo, en el que el efecto E se manifiesta, debe ser más desordenado que el estado del universo cuando la causa C fue manifiesta [4]. Al presentador, le parece que la causalidad es, estrictamente, un concepto clásico, ya que es determinista y, por lo tanto, recuerda la idea del demonio de Laplace [5].

En la literatura química prevalecen afirmaciones como que “los enlaces químicos causan la estabilidad de una estructura molecular”. En todos los libros introductorios de bioquímica, leemos, por ejemplo, que la cooperatividad de los enlaces de hidrógeno estabiliza las estructuras de las proteínas. Aquí existe la suposición de un vínculo causal, según el cual la causa (el conjunto de enlaces de hidrógeno) está seguida por el efecto (la estabilidad, o en otras palabras, la disminución de la energía total del sistema). Se propone que este tipo de cadena causal carece de sentido y recuerda la falacia del huevo o la gallina (*petitio principii*).

El enlace químico, ya sea medido por un simple criterio de distancia (por ejemplo, que los núcleos están más cerca que la suma de sus radios de van der Waals), o un criterio cuántico más riguroso como la existencia de un camino de enlace a la Bader [6,7], surge de los cálculos cuánticos hechos en una geometría optimizada. No se puede decir que el enlace químico existe primero y luego la energía o viceversa. Ambos fenómenos son como diferentes facetas de un mismo cristal, es decir, coexisten pero no causan ni resultan de uno del otro.

Cerramos con una última cuestión que me parece abierta todavía. Como prelude a esta cuestión, es importante recordar que el primer teorema de Hohenberg-Kohn (HK-1) [8] ha sido generalizado en el sentido siguiente: no solo la totalidad del campo de densidad electrónica determina de manera única el estado electrónico fundamental, sino que, de hecho, todo volumen parcial arbitrario de esta densidad está mapeado de manera única al estado fundamental [9-11]. Dado que la Teoría Cuántica de Átomos-en-Moléculas de Bader (conocida como "QTAIM") entrega simultáneamente regiones limitadas del espacio identificadas como átomos [12] y los enlaces entre ellos identificados como caminos de enlace [6,7] nos preguntamos si la estructura del conjunto de todos los caminos de enlace que definen la estructura molecular (que podemos llamar "topología aumentada" porque es más que únicamente una definición de conectividad ya que las líneas que definen los caminos de enlace tienen densidades de propiedades locales, curvaturas, longitudes integradas, etc.) lleva el teorema extendido de HK-1 a su límite. Es decir, ¿es la topología aumentada suficiente para mapear el campo de la densidad electrónica en su totalidad? Por supuesto, el "gráfico aumentado" se puede "reducir" al simple gráfico de conectividad perdiendo / descartando el exceso de información inscrita en cada camino de enlace, lo que, para el presentador, sigue siendo una interesante pregunta abierta.

Agradecimientos

Me gustaría agradecer a los siguientes colegas por las útiles discusiones: Profesora Olimpia Lombardi, Profesor Lou Massa, Profesora Tina Harriott, Doctorando Lázaro A. M. Castanedo, y Doctorando Peyman Fahimi.

Referencias

[1] Blalock, H. M. Jr. Causal Inferences in Nonexperimental Research; The University of North Carolina Press: Chapel Hill, 1964. [2] Bohm, D. The Special Theory of Relativity; Routledge: New York, 2006. [3] Rucker, R. v. B. Geometry, Relativity, and the Fourth Dimensions; Dover Publications, Inc.: New York, 1977. [4] Prigogine, I. El nacimiento del tiempo (Traducción Española); Fábula Tusquets Editores: Barcelona, 2012. [5] Tarasov, L. V. Basic Concepts of Quantum Mechanics, (Traducción en inglés); Mir Publishers: Moscow, 1980. [6] Bader, R. F. W. Atoms in Molecules: A Quantum Theory; Oxford University Press: Oxford, U.K., 1990. [7] Matta, C. F. An. Quím. 2017, 116, 36-39. [8] Hohenberg, P.; Kohn, W. Phys. Rev. B 1964, 136, 864-871. [9] Riess, I.; Münch, W. Theor. Chim. Acta. 1981, 58, 295-300. [10] Bader, R. F. W.; Becker, P. Chem. Phys. Lett. 1988, 148, 452-458. [11] Mezey, P. G. Mol. Phys. 1999, 96, 169-178. [12] Bader, R. F. W.; Matta, C. F. Found. Chem. 2013, 15, 253-276.