

Libro de resúmenes de las V Jornadas de Fundamentos de Química 2024

V Jornadas de Fundamentos de Química

4 y 9 de octubre 2024
en modalidad de videoconferencia



MODELAR



Informes:



<http://www.filoexactas.exactas.uba.ar/jfq2024>

Organizadas en la Universidad Nacional de Córdoba por:
Silvia Polzella, Penélope Lodeyro, Martín Labarca y Sebastian Fortin



Polzella, Silvia; Lodeyro, Penélope; Labarca, Martín; Fortin, Sebastian
Libro de resúmenes de las V Jornadas de Fundamentos de Química / Polzella,
Silvia; Lodeyro, Penélope; Labarca, Martín; Fortin, Sebastian (Editores). 1° edición
electrónica, Grupo de Filosofía de la Química de Buenos Aires, Buenos Aires,
Argentina, 2024.

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

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

Editores: Polzella, Silvia; Lodeyro, Penélope; Labarca, Martín; Fortin, Sebastian

Editorial: Grupo de Filosofía de la Química de Buenos Aires

Lugar: Buenos Aires, Argentina

Año: 2024

Diseño editorial: Sebastian Fortin

Diseño de portada: Polzella, Silvia; Lodeyro, Penélope

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
“A 10 años investigando sobre enseñanza de la química basada en modelos: ¿instrumentos mediadores o artilugios instruccionales?” - Cristian Merino	8
“Filosofia da química: uma perspectiva relacional” - Ronei Clécio Mocellin	9
“Elementos como nodos de relaciones: entre lo abstracto y lo empírico” - Alfio Zambon	10
“Caracterización de explicaciones sobre disolución de profesorado de ciencias en activo” - Mario Quintanilla-Gatica	12
“¿Qué ley sistematiza la tabla periódica?” - Hernan Accorinti y Juan Camilo Martínez González	13
“Cinco dimensiones para analizar instrumentos científicos. Una propuesta histórico-filosófica con fines formativos” - Alejandro Leal Castro	14
“Princípios da Didática e Teoria da História na construção de um curso de História da Química: reflexões iniciais” - Letícia Pereira	15
“Una lectura epistemológica del impacto del aprendizaje automático (Machine Learning [ML]) en la Química Cuántica Computacional a través de la Teoría del funcional de la densidad [DFT]” - M. Silvia Polzella y Penélope Lodeyro	16

“¿Es la densidad electrónica una magnitud química?” – Sebastian Fortin	17
“Identidad contextual de los nanomateriales. Un enfoque procesual para el mundo nano” – Mariana Córdoba, Fiorela Alassia y Alfio Zambon	18
“Revisitando el problema de la reducción en filosofía de la química” – Jesus Alberto Jaimes Arriaga	19
“Presentación del libro "Introducción a la Filosofía de la Química"” – Martin Labarca y Sebastian Fortin	20

Programa (Horario de Argentina UTC-3)

Viernes 4 de octubre

Bloque I

12:30 - 12:55 Ingreso al auditorio virtual

12:55 - 13:00 Apertura

13:00 - 13:30 "A 10 años investigando sobre enseñanza de la química basada en modelos: ¿instrumentos mediadores o artilugios instruccionales?"
Cristian Merino
Instituto de Química. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile

13:30 - 14:00 "Filosofia da química: uma perspectiva relacional"
Ronei Clécio Mocellin
Universidade Federal do Paraná, Brasil

14:00 - 14:30 "Elementos como nodos de relaciones: entre lo abstracto y lo empírico"
Alfio Zambon
Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina

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

Bloque II

15:30 - 16:00 "Caracterización de explicaciones sobre disolución de profesorado de ciencias en activo"
Mario Quintanilla-Gatica
Universidad Católica de Chile, Chile

16:00 - 16:30 "¿Qué ley sistematiza la tabla periódica?"
Hernan Accorinti y Juan Camilo Martínez González
CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina

16:30 - 17:00 "Cinco dimensiones para analizar instrumentos científicos. Una propuesta histórico-filosófica con fines formativos"
Alejandro Leal Castro
Universidad del Tolima, Colombia

Miércoles 9 de octubre

Bloque III

12:30 - 13:00 Ingreso al auditorio virtual

13:00 - 13:30 "Princípios da Didática e Teoria da História na construção de um curso de História da Química: reflexões iniciais" Letícia Pereira
Universidade Federal da Bahia, Brasil

13:30 - 14:00 "Una lectura epistemológica del impacto del aprendizaje automático (Machine Learning [ML]) en la Química Cuántica Computacional a través de la Teoría del funcional de la densidad [DFT]" M. Silvia Polzella y Penélope Lodeyro
CIFYH; UNC, Argentina

14:00 - 14:30 "¿Es la densidad electrónica una magnitud química?" Sebastian Fortin
CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina

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

Bloque IV

15:30 - 16:00 "Identidad contextual de los nanomateriales. Un enfoque procesual para el mundo nano" Mariana Córdoba^a, Fiorela Alassia^b y Alfio Zambon^c
^a CONICET-UBA, Argentina
^b UNPSJB, CONICET, Argentina
^c UNPSJB, Argentina

16:00 - 16:30 "Revisitando el problema de la reducción en filosofía de la química" Jesus Alberto Jaimes Arriaga
Grupo de filosofía de la Ciencia de Buenos Aires, Argentina

16:30 - 17:00 "Problemas Inversos: matemática para obtención de parámetros fisicoquímicos" Leandro Andrini
Departamento de Matemática - Centro de Matemática de La Plata; Fac. de Ciencias Exactas - UNLP, Argentina

17:00 - 17:15 Presentación del libro "Introducción a la Filosofía de la Química" Martin Labarca y Sebastian Fortin

17:15 - 17:45

Cierre

Enseñanza de la química basada en modelos con inclusión con tecnologías inmersivas: ¿instrumentos mediadores o artilugios instruccionales?

Cristian Merino

Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile

La investigación sobre la enseñanza de la química mediante tecnología inmersiva ha explorado herramientas como la realidad aumentada y los entornos virtuales mejoran la comprensión de conceptos abstractos en química. Estas tecnologías permiten la visualización tridimensional de modelos, facilitando un aprendizaje más profundo y contextualizado. Los ambientes virtuales también promueven la inclusividad, la personalización del aprendizaje y la gamificación, lo que mejora significativamente la motivación y el compromiso de los estudiantes. En la presente exposición se presentarán resultados del diseño de recursos para promover capacidad de visualización.

Filosofia da química: uma perspectiva relacional

Ronei Clécio Mocellin

Departamento de Filosofia

Universidade Federal do Paraná, Brasil

Do ponto de vista epistêmico, o conhecimento químico tem uma dualidade intrínseca, pois encontra-se entre os âmbitos do teórico e prático, do abstrato e concreto. Ao lidar com a materialidade, os químicos partilharam historicamente tanto um lugar específico de trabalho, o laboratório, quanto a necessidade de postular entidades inobserváveis a fim de explicar fenômenos observáveis. Também se defrontaram com a necessidade de representar essas entidades, cujos símbolos e imagens, além de denotá-las, também deveriam servir como guia de possíveis relações/combinções materiais. Assim, fica estabelecida a necessidade de analisar as substâncias químicas em diferentes ecossistemas, uma vez que seu caráter relacional, situado em contextos específicos, produz efeitos distintos e muitas vezes imprevisíveis. O propósito desta comunicação é o de apresentar uma perspectiva relacional da filosofia da química capaz de abranger diversos tipos de relações estabelecidas pelos produtos da ciência e da indústria química com a sociedade, o meio ambiente e as temporalidades de diversos modos de existência das entidades químicas. Como estudo de caso, propomos uma análise das consequências sociais e ambientais derivadas da associação entre a ciência química e a indústria do frio.

Palavras-chave: filosofia relacional, entidades químicas, representação molecular, modos de existência, indústria do frio.

Elementos como nodos de relaciones: entre lo abstracto y lo empírico

Alfio Zambon

Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina

alfiozambon@gmail.com

Uno de los desafíos de la epistemología de la química es la coexistencia de diferentes enfoques para comprender la materia: el macroscópico, centrado en las propiedades observables, y el microscópico, que aborda la materialidad mediante átomos y moléculas. La distinción de Paneth entre sustancia simple y sustancia básica pone de manifiesto esta doble perspectiva. Desde la visión de los elementos como “sustancias simples”, los elementos se identifican por sus propiedades macroscópicas observables. Los elementos entendidos como “sustancias básica” poseen una única propiedad esencial, su número atómico. No obstante, en ambos casos los elementos químicos son concebidos como objetos en un sentido filosófico: ítems son asiento de propiedades y relaciones y que cuentan con prioridad ontológica respecto de ellas.

Durante las últimas décadas, James Ladyman (1998) y Steven French (2006) han presentado y desarrollado el llamado Realismo Estructural Ontico (REO), que adopta una postura eliminativista respecto de los objetos. El REO propone, pues, una reconceptualización de la ontología en el nivel metafísico más básico, que conduce a un desplazamiento de los objetos a las estructuras. Este tipo de realismo sigue a Ernst Cassirer (1938) en la afirmación de que las partículas no son objetos, sino «puntos de intersección» de ciertas relaciones: los objetos físicos «se reducen a meros “nodos” de la estructura, o “intersecciones” de las relaciones relevantes» (French 2006: 173).

El REO brinda una nueva perspectiva para concebir los elementos químicos. En lugar de ser conceptualizados bajo la categoría ontológica de objeto, cada elemento resulta ser un nodo en la red de relaciones y propiedades que constituyen la estructura de la ontología de la química (ver Zambon 2018, 2019, 2022). Entre las propiedades se cuentan tanto las macroscópicas observables (e.g., punto de fusión) como las microscópicas inobservables (e.g. número atómico). Pero lo que brinda cohesión a la estructura es el sistema de relaciones que vinculan a los elementos químicos: dichas relaciones se manifiestan en los tipos de interacción que los elementos mantienen entre sí. Esta visión estructuralista óntica de los elementos químicos los desustancializa para convertirlos en haces de propiedades y relaciones en las cuales se agota su esencia.

Entre las ventajas de este enfoque está la posibilidad de articular un argumento que defienda la independencia epistemológica y ontológica de la química frente a la física, al

ofrecer una estructura relacional no limitada por consideraciones cuánticas. Además, la combinación de lo empírico y lo abstracto presenta una visión integradora que unifica ambos niveles de realidad.

Referencias

Cassirer, E. (1938) [1944]. “Le concept de groupe et la théorie de la perception”, *Journal de Psychologie Normale et Pathologique*, 1938(Juillet-Décembre): 368-414. Translated in 1944 as “The concept of group and the theory of perception”, *Philosophy and Phenomenological Research*, 5: 1-36.

French, S. (2006). “Structure as a weapon of the realist”, *Proceedings of the Aristotelian Society*, 106: 167-185.

Ladyman, J. (1998). “What is structural realism?”, *Studies in History and Philosophy of Science*, 29: 409-424.

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

Ladyman, J. (1998). “What is structural realism?”, *Studies in History and Philosophy of Science*, 29: 409-424.

Zambon, A. (2018). “A representation of the periodic system based on atomic-number triads”, *Foundations of Chemistry*. 20: 51-74.

Zambon, A. (2019). “Periodicity trees in a secondary criterion of periodic classification: Its implications for science teaching and communication”, *Substantia*, 3: 101-114.

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

Caracterización de explicaciones sobre disolución de profesorado de ciencias en activo

Mario Quintanilla-Gatica

Universidad Católica de Chile, Chile

En este trabajo presentamos y discutimos las directrices teóricas y metodológicas de una experiencia experimental con profesorado de ciencias en ejercicio de diferentes establecimientos educacionales de Chile, que tuvo por finalidad identificar y caracterizar las explicaciones sobre el modelo de disolución a partir de la elaboración de narrativas personales. Ello durante un curso de desarrollo profesional docente en el que se propició la reflexión sobre la relevancia del lenguaje en la interpretación de los fenómenos experimentales. Los resultados dejan en evidencia la coexistencia de tipologías diversas de explicación científica en tres niveles: el microscópico, el macroscópico y el simbólico, que se expresa en la emergencia de cuatro perfiles explicativos sobre el fenómeno de la disolución., lo que se debería en parte a la diversidad del profesorado que participó en el estudio, conocimiento restringido de la relevancia del lenguaje para comunicar ideas científicas y un acentuado énfasis en los procesos descriptivos y microscópicos acerca de las disoluciones.

¿Qué ley sistematiza la tabla periódica?

Hernan Lucas Accorinti – Juan Camilo Martínez González

Universidad de Buenos Aires – CONICET, Argentina

En este trabajo intentaremos analizar el problema de las leyes en química, en particular el problema de la ley periódica. Es sabido que la tabla periódica presenta un sinnúmero de excepciones. Dado este estado de cosas la legitimidad de la ley periódica y con ello la fundamentalidad de la química como disciplina madura ha sido puesto en cuestión. En este contexto diversas estrategias se han esgrimido para poner en pie de igualdad la química con la física. En este trabajo analizaremos críticamente aquellas posturas que intentan solventar este problema identificando enunciados legaliformes como ser “todos los metales son conductores de electricidad”, como así también aquellos que pretenden instituir la Regla de Madelung como la ley periódica por antonomasia. Propondremos en primer lugar una distinción entre tabla periódica, sistema periódico y ley periódica. En segundo lugar que la ley periódica que le brinda el carácter sistemático a la tabla periódica no es más que la configuración electrónica. Sin embargo, este análisis no es suficiente pues aun con estos considerandos la tabla periódica presenta un complejidad difícil de articular exclusivamente mediante la mentada configuración electrónica. La clave será entonces conceptualizar la tabla periódica en función a los desarrollos teóricos devenidos a partir de la denominada concepción modelística. Solo desde esta perspectiva, interpretando a la tabla periódica como un modelo científico que, como todo modelo, se configura como un espacio donde confluyen aspectos teóricos, metodológicos, insumos devenidos del campo experimental y un conjunto de aproximaciones con el objeto de potenciar la capacidad informativa y predictiva, es que podremos demostrar que no existe nada excepcional en la tabla periódica.

Cinco dimensiones para analizar instrumentos científicos. Una propuesta histórico-filosófica con fines formativo

Alejandro Leal Castro

Universidad del Tolima, Colombia

Esta ponencia realiza una propuesta metodológica fundamentada en la historia y la filosofía de las ciencias para analizar los instrumentos científicos, por medio de cinco dimensiones: identificación, aspectos físicos, funciones, conceptos y procedimientos experimentales.

A partir esto, se plantean implicaciones didácticas, en aras de destacar el papel de los instrumentos científicos para potenciar aspectos de tipo teórico y metateórico en la enseñanza de las ciencias. Lo anterior se ejemplifica a través de la placa fotográfica, un instrumento científico clave para el estudio de la radioactividad natural.

Palabras clave: Filosofía, Historia y Enseñanza de las Ciencias, instrumentos científicos, placa fotográfica.

Princípios da Didática e Teoria da História na construção de um curso de História da Química: reflexões iniciais

Leticia Pereira

Universidade Federal da Bahia, Brasil

¿Cómo se ha abordado el conocimiento histórico sobre la ciencia en los cursos de formación de profesores de ciencias y matemáticas? En las discusiones surgidas desde el campo de la Enseñanza de las Ciencias se percibe una concepción instrumental y reduccionista del conocimiento histórico, desconociendo el valor inherente de la Historia como forma de comprender la realidad. A partir de esta interrogante, se presentan algunos acercamientos iniciales entre el campo de investigación conocido como Didáctica de la Historia y la Historia de la Ciencia con el objetivo de ayudar a los formadores de docentes a reflexionar sobre el papel de esta disciplina en los cursos de pregrado en el área de las ciencias. y ciencia. De este primer contacto destacan tres principios básicos para la planificación de cursos de Historia de la Ciencia dirigidos a la formación del profesorado: el desarrollo de la empatía histórica; crítica de concepciones y estereotipos anacrónicos; y la importancia de las fuentes para la construcción del conocimiento histórico. Se pretende que este primer acercamiento dé lugar a otros trabajos sobre la enseñanza de la Historia de la Ciencia a la luz de la investigación en Didáctica de la Historia.

Una lectura epistemológica del impacto del aprendizaje automático (Machine Learning [ML]) en la Química Cuántica Computacional a través de la Teoría del funcional de la densidad [DFT]

Ma. Silvia Polzella – Penélope Lodeyro

CIFYH – Universidad Nacional de Córdoba, Argentina

En el ámbito de la biología molecular y la química biológica, por el gran número de átomos que contienen aún sus sistemas moleculares más simples hace que para estudiarlos sea imprescindible el uso de simulaciones computacionales.

En los años 90 en química cuántica y física de la materia condensada, se difundió masivamente la aplicación de la Teoría del funcional de la densidad (DFT) en la construcción de simulaciones computacionales como un enfoque alternativo a la función de onda de Schrödinger.

DFT, surgida como una teoría exacta de la estructura electrónica, en la práctica, tuvo que apelar a aproximaciones. Desde el origen de la mecánica cuántica por la complejidad de las ecuaciones se recurre al uso de aproximaciones matemáticas para posibilitar el cálculo de las estructuras electrónicas, lo que genera problemas en la precisión de los resultados.

Las avanzadas técnicas de inteligencia artificial en los último años se aplicaron en el ámbito de la química computacional dentro del enfoque DFT con el propósito de resolver diversos problemas. En particular, el aprendizaje profundo, o Deep Learning (DL), proporcionó soluciones significativas, aunque también trajo aparejado nuevos problemas.

En este trabajo ponemos de relieve el rol protagónico de Teoría del funcional de la densidad [DFT] en química cuántica computacional resaltando las bondades de la teoría para la determinación de estructuras moleculares. De allí analizamos un ejemplo del impacto de la introducción de Deep Learning (DL) en los métodos basados en DFT. Asimismo, mostramos que la introducción de DL en DFT plantea un nuevo problema a la tradicional distinción ab initio y semi-empírico.

¿Es la densidad electrónica una magnitud química?

Sebastian Fortin

CONICET - Universidad de Buenos Aires, Argentina

En esta charla se analizará el problema de las relaciones interteóricas especializado en el caso de la relación entre química y física. Luego de explorar las distintas opciones, se centrará la atención en el caso de la reducción y las dificultades técnicas que aparecen el proceso reductivo. En particular se examinarán los detalles asociados a la interpretación de la densidad electrónica desde la perspectiva química y física. 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.

Identidad contextual de los nanomateriales. Un enfoque procesual para el mundo nano

Mariana Córdoba (1), Fiorela Alassia (2)*, Alfio Zambon (3)

(1) CONICET - UBA; (2) CONICET - UNPSJB; (3) UNPSJB

* *fiorela.alassia@gmail.com*

En este trabajo argumentaremos que la identidad de las entidades que habitan el mundo nano es una identidad contextual (cf. Ladyman 2007). Para defender nuestra posición, analizaremos la denominada identidad “biológica” y la identidad “sintética” de los nanomateriales. A partir de este análisis, afirmaremos que los nanoindividuos (entidades que muestran una naturaleza intermedia entre los individuos y las cosas; cf. Córdoba y Zambon 2017), pueden ser comprendidos adecuadamente desde la perspectiva de una ontología procesual (cf. Córdoba, Alassia y Zambon 2024).

Referencias

Córdoba, M., Zambon, A. (2017). How to handle nanomaterials? The re-entry of individuals into the philosophy of chemistry. *Foundations of Chemistry* 19, 185–196. <https://doi.org/10.1007/s10698-017-9283-6>

Córdoba, M., Alassia, F., Zambon, A. (2024). Identity in the nanoworld: processes and contextuality. *Foundations of Chemistry*. <https://doi.org/10.1007/s10698-024-09519-9>

Ladyman, J. (2007). On the identity and diversity of objects in a structure. *Proceedings of the Aristotelian Society, Supplementary Volume* 81, 23–43.

Reconsiderando el problema de la reducción en filosofía de la química

Jesus Alberto Jaimes Arriaga

jalbertojarriaga@gmail.com

Este trabajo está destinado a ofrecer un análisis del rol intermediario que juega la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas, TCAEM, en el contexto del problema de la reducción en filosofía de la química. En este contexto, se llevará a cabo un análisis del proceso matemático mediante el cual se deriva la estructura formal de la TCAEM y este análisis llevará a argumentar que la condición de contorno conocida como Superficie de Flujo Cero, SFC, empleada para definir un átomo en una molécula, un AEM, juega un rol central en la estructura formal de la TCAEM. Y este rol puede ser entendido como una manifestación de la forma causal química entendida como un tipo de causación descendente.

Presentación del libro

“Introducción a la Filosofía de la Química”

Martín Labarca – Sebastian Fortin

CONICET – Universidad de Buenos Aires, Argentina

En la filosofía contemporánea de las ciencias, una de las disciplinas de mayor crecimiento en las últimas décadas ha sido a la filosofía de la química, cuyo origen se remonta a mediados de la década de 1990. El gran interés que ha despertado la disciplina en América Latina ha sido muy significativo para el campo. Éste libro pretende llenar un vacío en el ámbito latinoamericano, colocando en primer plano las perspectivas que emergen de diferentes enfoques disciplinarios. El volumen incluye colaboraciones de investigadores de Chile, Brasil y Argentina. Los 13 capítulos se proponen reflejar el estado del arte de cada uno de los tópicos tratados, mostrando aspectos de la ciencia química desde diferentes perspectivas de análisis. El propósito general es introducir a educadores y estudiantes de química, así también como a químicos, historiadores y filósofos de la ciencia en los debates actuales más relevantes en el ámbito de la filosofía contemporánea de la química.