

QUÍMICA COMPUTACIONAL. UNA REVISIÓN HISTÓRICA

ELIANA MARTÍNEZ ROJAS
JESÚS BERNARDO SAAVEDRA AMÓRTEGUI

UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL
FACULTAD CIENCIA Y TECNOLOGÍA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
LICENCIATURA EN QUÍMICA
BOGOTÁ D.C
2017

QUÍMICA COMPUTACIONAL. UNA REVISIÓN HISTÓRICA

ELIANA MARTÍNEZ ROJAS
JESÚS BERNARDO SAAVEDRA AMÓRTEGUI

Trabajo de grado presentado como requisito
para optar al título de Licenciado en Química

Director:
Royman Pérez Miranda
Magister en Docencia de la Química

UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL
FACULTAD CIENCIA Y TECNOLOGÍA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
LICENCIATURA EN QUÍMICA
BOGOTÁ D.C
2017

Nota de aceptación:

ROYMAN PEREZ MIRANDA
Director

MARTHA VILLARREAL
Evaluador

NOHORA MARLEN ARIAS
Evaluador

Bogotá, D.C., 25 de agosto de 2017

AGRADECIMIENTOS

En un sin número de azares, nos enfrentamos continuamente a retos que llevan cada uno a una superación continua. La vida nos ha dado oportunidades y cada oportunidad nos ha brindado gente dispuesta a ayudarnos. Agradecemos al profesor Royman por su incansable paciencia y dedicación, al maestro y amigo Luis Iván Rincón (Q.E.P.D.) quien en muchos capítulos de nuestras vidas nos dio la fuerza para seguir adelante en este camino.

Agradecemos infinitamente, a nuestro hijo Julián Esteban, quien ha dirigido nuestro rumbo y nuestro remar, y quien ha sido compañero silencioso de esta aventura.

ELIANA MARTÍNEZ ROJAS

A mi July por todo su amor y sus palabras de aliento, y a mis padres por su apoyo y a mis hermanos por la ayuda.

JESÚS BERNARDO SAAVEDRA AMÓRTEGUI

A nuestro hijo, Julián, por toda su paciencia y su energía, a mis padres por su apoyo incondicional.

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <i>Revolution in Education</i>	FORMATO	
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE	
Código: FOR020GIB	Versión: 01	
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 1 de 8	

1. Información General	
Tipo de documento	Tesis de Grado
Acceso al documento	Universidad Pedagógica Nacional. Biblioteca Central
Título del documento	Química computacional. Una revisión histórica
Autor(es)	Martínez Rojas, Eliana; Saavedra Amórtegui, Jesús Bernardo
Director	Royman Pérez Miranda
Publicación	Bogotá. Universidad Pedagógica Nacional, 2017. 74 p
Unidad Patrocinante	Universidad Pedagógica Nacional
Palabras Claves	QUÍMICA COMPUTACIONAL, HISTORIA, DIDÁCTICA DE LAS CIENCIAS.

2. Descripción
Memoria de tesis de grado centrada en una investigación documental de carácter histórico, con el fin de contribuir a la construcción del discurso acerca de los fundamentos históricos de la química computacional. Se procedió, primero, con la identificación y caracterización del discurso de la signatura que con esa designación forma parte de la malla de proyecto curricular de licenciatura en química de la Universidad Pedagógica Nacional, que propició el establecimiento de categorías y criterios de análisis de la información obtenida en fuentes primarias y secundarias que pudieran proporcionar alguna aproximación a los orígenes de esta disciplina, en la historia de las ciencias en general y de la química en particular, así como en la de la tecnología, específicamente, la computacional. La ruta en este ejercicio investigativo se cumplió en varias etapas: a) Recolección de información y organización; b) Análisis e Interpretación; c) Levantamiento de tablas de información; d)

Tratamiento y análisis de resultados; e) elaboración del informe final.

3.Fuentes

Se relacionan algunas que se consideran fundamentales. El proceso demandó una mucho mas amplia.

Adúriz-Bravo, A. e Izquierdo, M. (2002). Acerca de la didáctica de las ciencias como disciplina autónoma. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, 1(3),130 –140. Recuperado de <http://reec.uvigo.es>

Ander-Egg, E. (1998). *Técnicas de investigación social*. México: El Ateneo.

Berrocso, J., Fernández, M. y Garrido, M. (2015). El pensamiento computacional y las nuevas ecologías del aprendizaje. *Revista de Educación a Distancia*, 45. 1-18.

Bolcer, J. y Hermann, R. (1994). The development of computational chemistry in the United States. *Reviews in computational chemistry*, 5.

Bohr, N. (1913). On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine, Series 6*, 26, 1 – 25.

Castro, S., Guzmán, B. y Casado, D. (2007). Las TIC en los procesos de enseñanza y aprendizaje. *Laurus, Revista de Educación*. 13(23). 213 – 234.

Chigo, E. (2004). La Simulación computacional en química y física. *E-Gnosis*, 2(15). Recuperado de <http://www.redalyc.org>

Cjunto, J. y Arroyo, J. (2003). La química teórica y la química cuántica computacional. *Boletín CSI*, 48, 16 – 19. Recuperado de <http://sisbib.unmsm.edu.pe/BibVirtual/Publicaciones/consejo/rconsejo.htm>

Clementi, E. (2005). Computational chemistry: attempting to simulate large molecular systems. *Theory and applications of computational chemistry: The first forty years*, 6. 111 – 114.

Contreras, C., Chávez, M., Fuentes, M., Olivas, R., Rodríguez, L. y Valdez, A. (2008). De la alquimia computacional a la química computacional. *Synthesis*, 45, 1-7. Recuperado de http://www.uach.mx/extension_y_difusion/synthesis/

Cuevas, G. (2005). Química computacional. *Revista Ciencia*, 56, 2, 33 – 42. Recuperado de <http://revistaciencia.amc.edu.mx/index.php/ediciones-antiores?id=61>

- Einstein, A. (1911). Contribution to the 1911 Solvay Conference, *The collected papers of A. Einstein*, 3(26).
- Foresman, J. y Frisch, A. (1995). *Exploring chemistry with electronic structure methods*. Pittsburgh, United States: Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA
- Gallego, R., Gallego, A., y Pérez, R. (2002). Historia de la didáctica de las ciencias: un campo de investigación. *Tecné, episteme y didaxis: Revista de la Facultad de Ciencia y Tecnología*, 12, 125 – 133. Recuperado de <http://revistas.pedagogica.edu.co/index.php/TED/index>
- Giordan, M. y Gois, J. (2009). Entornos virtuales de aprendizaje en química: una revisión de la literatura. *Educación química*, Julio. 301 – 313.
- Grisolía, M. y Grisolía, C. (2009). Integración de elementos didácticos y del diseño en el software educativo hipermedial “Estequimetría. Contando masas, moles y partículas”. *Revista electrónica de enseñanza de las ciencias*, 8(2). 440-465.
- Ferreira, V. (1998). As Tecnologias interativas no ensino. *Química Nova*, 21(6), 780-786.
- Heisenberg, W. (1925). Über quantentheoretische umdeutung kinematischer und mechanischer beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, 33, 879-893. English translation in: B. L. van der Waerden, editor, *Sources of Quantum Mechanics* (Dover Publications, 1968) (English title: "Quantum-Theoretical Re-interpretation of Kinematic and Mechanical Relations").
- Hopfinger, A. (1985). Computer-assisted drug design. *Journal of medical chemistry*. 28(9). 1133-9
- Jensen, F. (2007). *Introduction to computational chemistry*. West Sussex, England: John Wiley & Sons Ltd.
- Kuhn, T. (1972). *The structure of scientific*. United States of America: University of Chicago Press.
- Leiva, E. y Estrín, D. (2011). Química computacional. Simulaciones matemáticas del comportamiento de átomos y moléculas. *Ciencia hoy*, 21(124). 46-50.
- Lipkowitz, K, y Boyd, D, (1990). *Reviews in computational chemistry*. New York, United State: Wiley-vch.
- López, T. (2017) La química computacional, en apoyo de las energías limpias. *Academia, Gaceta UNAM*, Mayo. 6
- Mó, O y Yáñez, M. (2011). La química computacional en la nueva frontera.

ARBOR Ciencia, pensamiento y cultura, 187. 143 – 155.

Papert, S. (1981). *Desafío a la mente. Computadoras y educación*. Buenos Aires, Argentina: Fernández Long y Regini S.A.

Pauli, W. (1925). On the conexión between the completion of electron groups in an atom with the complex structure of spectra. *Z. Physik*, 31. 765

Planck, M, (1914). *Vorlesungen über die Theorie der Wärmestrahlung*. Leipzig, German: J. A. Barth.

Pople, J. (1998). Quantum chemical models. *Nobel lectura*.

Reggini, H. (1988). *Computadoras: ¿Creatividad o automatismo?*. Buenos Aires, Argentina: Ediciones Galápagos.

Ribeiro, A. y Greca, I. (2003). Simulações computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma revisão de literatura publicada. *Química Nova*, 26 (4), 542-549. Recuperado de <http://quimicanova.sbq.org.br>

Rodríguez, M. (2013). *Acerca de la investigación bibliográfica y documental*. Recuperado de <https://guiadetesis.wordpress.com>

Rutherford, E. (1914). The structure of the atom. *Philosophical Magazine, Series 6*, 27, 488-498.

Schrödinger, E. (1926). An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *The physical review*, 28(6), 1049-1070.

Schreiner, P, (1998). The concept. *Encyclopedia of computational chemistry*, 1.

Thomson, J. (1904). On the structure of the atom. *Philosophical Magazine, Series 6*, 7(39), 237 – 265.

Uhlenbeck, G. y Goudsmit, S. (1925). *Naturwissenschaften*, 13. 953.

Valles-Sánchez, A., Rosales-Marines, L. Serrato-Villegar, L. y Farías-Cepeda, L. (2014). Métodos y usos de la química computacional. *Revista científica de la Universidad Autónoma de Coahuila*, 6(11). 16 – 21. Recuperado de <http://www.posgradoeinvestigacion.uadec.mx/>

Young, D. (2001). *Computational chemistry. A practical guide for applying techniques to real-world problems*. New York, United States: John Wiley & Sons, Inc.

4. Contenidos

Una mirada sobre trabajos investigativos relacionados con la construcción histórica de la química computacional, obliga una lectura desde distintas perspectivas: una, desde la mecánica cuántica como parte de la investigación y producción de conocimiento con el computador como articulador central de los procesos y tratamiento de la información en ese campo y, dos, desde la didáctica de las ciencias en las líneas de investigación que incorporan las tecnologías de la información y la comunicación, en el diseño y desarrollo de modelos para la comprensión de principios teóricos de la química teórica, en los procesos de formación científica en esta ciencia, en el aula.

La química computacional está asociada a la estructuración y desarrollo de la química cuántica (Mó y Yáñez, 2011), constituye un segmento de la química teórica que trabaja sobre las propiedades de las moléculas, sus interacciones y demás relaciones mediante el empleo de programas computacionales y, para comprenderlas, es necesario tener en cuenta que los modelos formulados sobre ellas se fundamentan en varias áreas del conocimiento científico, no solamente en química (Contreras et al 2008). Se relaciona con métodos matemáticos suficientemente desarrollados automatizados por computador (Young, 2001). Constituye un vasto campo que se ocupa de sistemas atómicos y moleculares, con diferentes niveles de complejidad que se trabajan como sistemas cuánticos discretos o como conjuntos estadísticos (Clementi, 2005). En ella se apela a física, química, matemáticas y ciencias de la computación, para explorar, con los métodos de estas ciencias, procesos que ocurren en un laboratorio, que no se pueden comprender con los instrumentos disponibles, por más sofisticados que sean (López, 2017). Ha evolucionado de la química teórica, desde sus métodos de cálculo para resolver ecuaciones y analizar propiedades a nivel molecular, mediante el uso de computadores y software (Valles, Rosales, Serrato y Farías, 2014). En didáctica de las ciencias las investigaciones realizadas han sido desarrolladas sobre la base de aplicaciones computacionales (software) para el tratamiento de conceptos como representaciones didácticas (Sánchez, 2014; Penagos, 2009).

La historia de las ciencias trata sobre la interacción de los postulados científicos, su entorno y su desarrollo en el transcurso del tiempo y como parte del conocimiento de las mismas se ha de tener en cuenta el enfoque con el cual se abordan. Así, la probabilidad de cualquier ley debe ser igual a cero, desde que no se demuestre lo contrario (Popper, 1962) y las teorías relacionadas entre sí, unas origen de otras, conforman núcleo firme de los programas de investigación científica fundamento de la ciencia en estudio (Lakatos (1983). Un modelo didáctico es un discurso en el que se enlazan estructuras conceptuales y metodológicas relacionadas de manera inferencial, conocimiento que se deduce a partir de las abstracciones de los campos o modelos relacionados en este (Gallego Badillo, 2004). El discurso puede o no ser admitido, mientras que los campos que se opten, generen variaciones admisibles. El discurso planteado por

la química computacional, teniendo en cuenta una visión de modelo, sustenta las interacciones moleculares e intramoleculares, posibilita la abstracción de respuestas y conceptos y demuestra un planteamiento diferente de los datos mediante un análisis inferencial, como lo expresan las probabilidades a partir de las ecuaciones y modelos teóricos aplicados en la misma.

Así, la didáctica de las ciencias como una disciplina autónoma, se centra en los contenidos de las ciencias desde el punto de vista de su enseñanza y aprendizaje, lo que le da el carácter histórico y epistemológico (Adúriz-Bravo e Izquierdo, 2002), que emerge de la investigación específicamente centrada en los problemas de enseñanza y aprendizaje de las ciencias (Gil, Carrascosa y Martínez, 1999), con carácter metodológico que, dentro de todas las prácticas profesionales de enseñanza, su naturaleza es hipotético-deductiva, lo que obliga a tener un proceso dinámico y complejo, en el que cuenta el carácter de enseñabilidad, determinado por la intencionalidad curricular (Gallego Badillo y Pérez Miranda, 2002).

La química computacional (Cuevas, 2005; Hopfinger, 1985; Shreiner, 1998; Pople, 1998; Foresman y Frisch, 1995), se asume como una disciplina científica centrada en un conocimiento emergente que, para su desarrollo, es necesario dos disposiciones: los individuos han de estar preparados para este campo y a su vez generar conocimiento. Y esta preparación se relaciona con la aplicación de algoritmos computarizados de la teoría cuántica, conocimientos de mecánica molecular, computación gráfica, modelado molecular y diseño molecular asistido por computador entre otros (Lipkowitz y Boyd, 1990). La química computacional, por otro lado, permite el estudio de propiedades y reacciones de átomos y moléculas, observaciones estas que no son posibles de realizar a simple vista en el laboratorio, además, las condiciones necesarias para desarrollar estos experimentos son extremas y los costos para tan solo una investigación, son bastante altos (Valles-Sánchez, 2014).

La sociedad está inmersa en una “cultura computacional” en la que se desarrollan formas de pensar espontáneamente, sin una enseñanza deliberada (Papert, 1980), y conocimientos en sistemas computacionales, debido al manejo de las nuevas tecnologías y su constante interacción con las mismas. Hombres de ciencia han creado y validado herramientas de investigación a través del software, que han llegado a beneficiar la visualización molecular, aplicada a la química, la bioquímica, la biología molecular (Giordan y Gois, 2009) que obliga una revisión tecnológica en cuanto a su fundamentación, por cuanto, esta disciplina, la química computacional, permite que con un modelo, se logre abstraer ideas y conceptos, en temas que, con lápiz y papel, sería difícil involucrar como forma de pensar y analizar los fenómenos de nivel atómico. Este modelado, permite reproducir la realidad, de manera precisa, en cuanto a los resultados teóricos (Chigo, 2004).

5. Metodología

El desarrollo del proyecto se centró en una investigación documental (Ander-Egg, E., 2011) de carácter histórico. Se procedió, primero, con la determinación de las fuentes primarias de información que pudieran proporcionar alguna aproximación a los orígenes de esta disciplina, en la historia de las ciencias en general y de la química en particular, así como en la de la tecnología, específicamente, la computacional. La ruta en este ejercicio investigativo se cumplió en varias etapas: a) Recolección de información y organización: Se rastreó la información válida y disponible sobre los acontecimientos que se consideraron pertinentes en la historia de la química y con alguna relación con la química computacional: la emergencia de la tecnología computacional, su desarrollo y su introducción en el estudio y reestructuración de la química. Se diseñaron fichas bibliográficas que documentan lo pertinente a la información requerida. b) Análisis e Interpretación: Para la indagación de la información, selección y organización, se elaboró una matriz de análisis con las categorías y criterios de análisis, y orientar la indagación a lo estructural de la construcción y reconstrucción de los fundamentos históricos del desarrollo de la disciplina en consideración; c) Levantamiento de tablas de información: con apoyo en la tabla elaborada se procedió a inventariar autor(es) o científico(s), teorías, ley o producto con los que se consideró aportaron en esa dirección, época de desarrollo de las ciencias y de la tecnología en los que se produjo y la ficha bibliografía correspondiente. d) Tratamiento y análisis de resultados: con la información trabajada con base en la matriz elaborada y validada, se procedió a la estructuración del documento que, con los resultados obtenidos, constituiría una contribución a la revisión histórica de los fundamentos de la disciplina química computacional. Este documento fue sometido a su revisión estructural, redacción y consistencia argumentativa. Con ello se intentó dar respuesta a la pregunta ¿Qué fundamentos históricos conforman la estructura de la química computacional?, que centró todo el proyecto propuesto.

Los instrumentos utilizados en este trabajo fueron: la ficha bibliográfica, con la cual se identificó cada texto trabajado; matriz de análisis, con el fin de orientar la lectura de los documentos que, de alguna forma, los autores aportaron a la construcción de la química computacional y destacar aquellos párrafos que constituyeron lo central del aporte o, que fundamentan una síntesis de ese factor en el documento para lo cual se formularon tres categorías: a) Fundamentos de química computacional b) Fundamentos didácticos de química computacional c) Fundamentos de otros ámbitos. Para estas categorías se consideró, como criterio de análisis, su selección, si el documento mostraba una o varias de estas características y coleccionar los párrafos correspondientes para la construcción del discurso en referencia, en la tabla levantada. Además, se consideró, en función de la organización de la estructura del discurso, los siguientes criterios de carácter histórico: publicado antes de 1980; publicado entre 1980 y 2000; publicado después de 2000. Esta matriz fue sometida a validación por expertos

(3) y a discusión en el grupo de investigación del cual lo autores forman parte, cuyas observaciones, acogidas críticamente, permitieron estructurarla tal como se utilizó en el trabajo; y la tabla de resultados, con la que sistematizó la información y base de la construcción del discurso que se consideró como producto final de la investigación.

6.Conclusiones

Apoyados en los resultados de la revisión documental realizada, se puede sostener que:

- Los fundamentos históricos que conforman la estructura discursiva de la química computacional como disciplina, surgen de los análisis de las publicaciones realizadas por científicos que sometieron a consideración sus tesis que pretendían dar cuenta de la estructura submicroscópica de los materiales de la naturaleza, punto de partida de las llamadas química y física teóricas.
- La información concerniente a la química computacional, reportada en los documentos trabajados es específica de la física, de la química y de aplicaciones de software
- La información histórica relacionada con la química computacional posibilita su análisis si para ello se tiene en cuenta categorías como las propuestas en este trabajo: las propias surgidas de la química, la física y otras ciencias relacionadas con estos intereses, la relacionada con los desarrollos de la tecnología computacional y de los traslapes entre ambos campos de conocimiento a que se vieron enfrentados los científicos para desarrollo de su actividad investigativa y propuestas de solución a los problemas que tuvieron que enfrentar.
- Los libros introductorios y básicos de química computacional, establecen las bases que son necesarias para incursionar en esta disciplina y obligan a su estudio por parte que quienes se interesan por estos conocimientos sobre la estructura íntima de los materiales de la naturaleza.
- Se logró establecer hechos trascendentes que aportan al carácter histórico, a la emergencia de la química computacional, y constituir un punto de partida hacia la construcción de un discurso en esta disciplina.
- El documento elaborado, como producto de la investigación, da cuenta de los aportes que dan origen a la química computacional.
- La química computacional, como asignatura componente del currículo de formación en química o campos relacionados con esta ciencia demanda, como requisito, un fundamento teórico sobre mecánica cuántica, para que desde y con el computador se exploren sus modelos teóricos y su relación con química y con didáctica de las ciencias en la incorporación de las tecnologías en el desarrollo de modelos para la comprensión esos

principios teóricos.

Elaborado por:	Eliana Martínez Rojas Jesús Bernardo Saavedra Amórtegui
Revisado por:	Royman Pérez Miranda

Fecha de elaboración del Resumen:	25	08	2017
--	----	----	------

CONTENIDO

1. INTRODUCCIÓN.....	18
2. JUSTIFICACIÓN.....	20
3. OBJETIVOS.....	23
3.1. Generales.....	23
3.2. Específicos	23
4. MARCO TEORICO	24
4.1. Antecedentes.	24
4.2. Acerca de lo histórico.	26
4.3. En cuanto a lo didáctico	27
4.4. Sobre la química computacional	28
- Química computacional y la formación en química.....	32
- Química computacional y la didáctica de las ciencias	32
4.5. De la investigación documental.....	33
5. METODOLOGÍA.....	35
5.1. Del problema.	35
5.2. Sobre la investigación.	36
- Recolección de información y organización.....	36
- Análisis e Interpretación.....	36
- Levantamiento de tablas de información.	36
- Tratamiento y análisis de resultados.....	36
5.3. Fuentes de información.	36
5.4. Instrumentos.....	39
5.4.1. Ficha bibliográfica	39
5.4.2. Matriz de análisis	39
Autoría propia	40
6. RESULTADOS Y ANÁLISIS.....	41
7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	52

8. BIBLIOGRAFÍA.....	53
9. ANEXOS.....	58
Anexo 1. Fichas bibliográficas.....	58
Anexo 2. Documento producto de la investigación.....	69

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Ficha bibliográfica	39
Figura 2. Matriz de análisis	40

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Matriz de análisis	41
Tabla 2. Tabla de aportes científicos	43

1. INTRODUCCIÓN

Con el transcurrir del tiempo, la tecnología ha permitido que el ser humano evolucione con su entorno y que se faciliten procesos en diferentes actividades como, por ejemplo, en transporte, en comunicaciones, en electrónica; en áreas del conocimiento como en ciencias, tecnología, artes; casos en los que soluciona, facilita o mejora situaciones de vida. En ciencias, ha llevado a minimizar los riesgos de accidentes y a la optimización de los recursos al ofrecer alternativas de diseño y ejecución de experimentos y contrastación de modelos.

Uno de los avances tecnológicos más recurridos en la actualidad es el computador. Este dispositivo electrónico nace de la necesidad de realizar cálculos con mayor rapidez, de sistematizar y de guardar información. El computador, tiene presencia en múltiples ámbitos como en el hogar, en la oficina, en la educación, en el estudio de las ciencias para facilitar, mejorar y agilizar procesos en su comprensión. En química, el computador se utiliza para determinar comportamientos, propiedades, probabilidades y demás datos necesarios para las modelaciones teóricas de moléculas. La importancia de su uso en química, radica en el trasfondo teórico que le proporciona, por ejemplo, a la química teórica, al análisis de datos que arrojan los programas computacionales diseñados para esta actividad científica. Es de resaltar lo innumerable de las interacciones que se generan con su utilización en el trabajo en química, y el análisis de ellas se hace posible mediante este mismo dispositivo.

Con el uso de los computadores, se ha apoyado el estudio de teorías y modelos químicos en cuanto a las interacciones entre átomos, moléculas y demás partículas. Para desarrollar sus representaciones y procesos internos derivados por métodos tradicionales, demandaría excesivo tiempo su resolución. El computador, facilita, agiliza y economiza todo lo que tiene que ver con cálculos en química teórica, así como en química experimental, con ahorro de costos y espacios en ensayos de esta categoría, o pruebas lógico matemáticas de los modelos diseñados. La química computacional, a la que se le ha llamado así por apoyarse en los procesos propios de este dispositivo tecnológico, más que una relación con los cálculos de resultados, constituye parte central de la demostración, de manera “tangible”, de las diferentes interacciones y relaciones derivadas de teorías y modelos con los que se intentan explicar fenómenos de la naturaleza, en este caso, desde la perspectiva química.

Toda disciplina, y entre ellas la química computacional, se fundamenta en un discurso, que se construye desde lo histórico. Con este proyecto se intentó abordar este componente estructural de la química computacional mediante un análisis documental, en la configuración de una base histórica, como punto de partida para la comprensión del estudio de dicho campo. Es menester del ejercicio docente, y en la investigación, indagar sobre los cambios de paradigmas (Gallego

Badillo, 2002), delimitar los periodos y momentos históricos para generar una base discursiva que posibilite la comprensión de la química computacional. Se espera que esta elaboración contribuya a esos propósitos.

2. JUSTIFICACIÓN

La propuesta y desarrollo de este trabajo se justificó en las siguientes razones:

- El progreso y avances de la producción de conocimientos químicos logrados con los apoyos tecnológicos, tanto instrumental como de procesamiento de información, han introducido otras miradas sobre el significado de esta ciencia y su proyección (Contreras-Vega y otros, 2008), tanto en su estructura conceptual y en su industria como en su didáctica. La química computacional, es una muestra de ello, ya que el computador ayuda a trabajar de una manera más “cercana” el comportamiento de moléculas y la interacción de ellas en una reacción.
- Los grupos de investigación y sus publicaciones en ese campo son numerosos, como lo expresan Cuevas (2005) y Bolcer y Hermann (1994), lo que demuestra la importancia del desarrollo de la química computacional en el presente y futuro inmediato.
- Son muchos los países que han realizado aportes en este campo de la química: Estados Unidos, Alemania, Holanda, Reino Unido, España, México, Brasil y Argentina dentro de los principales. En Colombia, existen seis grupos de investigación en química computacional: *Química Ambiental y Computacional* de la Universidad de Cartagena, *Electroquímica y termodinámica computacional* y *Quantum and Computational Chemistry Group*, Q.C.C de la Universidad Nacional de Colombia; *Química computacional*, de la Universidad de Córdoba; *Química-física molecular y modelamiento computacional*, QUIMOL de la Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia y, *Estrategias Computacionales en Química* de la Universidad de la Amazonía. Estos grupos de investigación, se encuentran avalados por Colciencias, y han publicado sus producciones en revistas internacionales. Otro grupo que se encuentra buscando su acreditación ante Colciencias es el grupo de Investigación en Química Teórica y Computacional SiquUTeCo, de la Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales (UDCA). Este breve inventario muestra la importancia de la temática en el ámbito académico y su aporte en la formación de los profesores de química.
- En la visión y misión del Departamento de Química, en uno de sus apartes, se alude a la incorporación de las tecnologías de la información y comunicación y tecnología de la química (UPN, DQU, 2000), como parte fundamental para el desarrollo del ejercicio docente.
- El currículo de formación de licenciados en química, del Departamento de Química de la Universidad Pedagógica Nacional, no ha sido ajeno a este desarrollo y se ha introducido un espacio académico en el ciclo de profundización, en el ambiente de formación comunicativa y deontológica. Esta unidad académica asume el ciclo de profundización como el conjunto

de actividades académicas, desarrolladas alrededor de un énfasis particular de la química, las tecnologías o las artes. Se adelanta principalmente el estudio de producciones de frontera, la reflexión alrededor de su enseñanza y su aprendizaje. Sin detrimento de continuar la construcción de competencias básicas y procedimentales, las actividades programadas en este ciclo hacen énfasis en el desarrollo de competencias investigativas, lo que implica el dominio de saberes específicos y de procedimientos científicos, así como el desarrollo de pensamiento crítico y de razonamiento complejo: la resolución de problemas. (UPN, DQU, 2000). La química computacional se ajusta íntegramente a esta perspectiva de formación y demanda su estructuración, en cuanto a su fundamentación histórica y su enseñanza y aprendizaje.

- Así mismo, el perfil del estudiante de Licenciatura en Química, en la Universidad Pedagógica Nacional, que se encuentra escrito en el proyecto curricular experimental para la formación de licenciados en Química (2000), está dividido en: a) lo científico, la necesidad de realizar investigación para contribuir al desarrollo de la ciencia, b) lo pedagógico, reconstruir la cultura científica aproximándose a teorías, conceptos y procedimientos de la comunidad científica nacional e internacional, c) lo didáctico, continuar en la construcción y desarrollo de la didáctica de la química y, d) lo social y político, la educación en ciencias y la sociedad para generar espacios que posibiliten el desarrollo integral del ciudadano. En todos estos ámbitos es fundamental la formación en química computacional que se ha de incorporar a la formación de licenciados para el futuro.
- Por otro lado, el pensamiento en el ámbito científico, también destaca el hecho que la química computacional tiene un carácter fundamental en la actualidad, así, la Academia de Ciencias Sueca al otorgar el Premio Nobel en Química en 1998 a W. Kohn y J. A. Pople, expresó, «la Química ha dejado de ser una ciencia puramente experimental». Por ello, un químico que no domine los aspectos computacionales de la Química no responderá al perfil de un químico del siglo XXI (Cjuno y Arroyo, 2003).

Se hace indispensable entonces, trabajar en la formación de los licenciados la Química Computacional y, para su comprensión, identificar y caracterizar los aportes que han llevado a esta disciplina de la química hasta donde ha llegado en un recorrido histórico, en su relación con los desarrollos tecnológicos y concepciones que han posibilitado este proceso. Los resultados del proyecto, Química Computacional, una revisión histórica, propone una aproximación a la construcción histórica de esta disciplina, su génesis y su desarrollo, teniendo en cuenta que todo, como parte de la historia, va ligado a muchos otros sucesos de gran valor e importancia, por cuanto cada hecho histórico, se enmarca en una época y con un discurso científico diferente al actual, debido a los diversos paradigmas que han direccionado la conformación y desarrollo de las ciencias. Los resultados que aquí se presentan aportan a la construcción

de esa base discursiva, de la química computacional, que posibilite su comprensión por parte de quienes se aventuran en esta disciplina.

3. OBJETIVOS

El proyecto de investigación tuvo como objetivos, los siguientes:

3.1. Generales

- Contribuir a una construcción histórica del discurso teórico que fundamente la química computacional.
- Identificar y caracterizar la información histórica relacionada con química computacional.

3.2. Específicos

- Indagar acerca de las publicaciones relacionadas con química computacional o afines para efecto del trabajo.
- Seleccionar y clasificar estas publicaciones en el marco del tiempo, espacio y perspectiva teórica producidos en función de la constitución del discurso histórico químico computacional.
- Elaborar una matriz de análisis documental con las categorías y criterios que permita la revisión documental propuesta sobre la construcción del discurso en referencia.
- Elaborar un documento que recoja la indagación realizada como producto del trabajo investigativo formulado, como una contribución a la construcción histórica de la fundamentación teórica de química computacional.

4. MARCO TEORICO

Los referentes teóricos que fundamentaron este trabajo de investigación se sintetizan en los siguientes apartados.

4.1. Antecedentes.

Una mirada sobre trabajos investigativos relacionados con la construcción histórica de química computacional, obliga una lectura desde distintas perspectivas: una, desde la mecánica cuántica como parte de la investigación y producción de conocimiento con el computador como articulador central de los procesos y tratamiento de la información en ese campo y, dos, desde la didáctica de las ciencias en las líneas de investigación que incorporan las tecnologías de la información y la comunicación, en el diseño y desarrollo de modelos, para la comprensión de principios teóricos de la química teórica, en los procesos de formación científica en esta ciencia, en el aula.

Sobre la primera, Mó y Yáñez (2011) sostienen que la química computacional está asociada a la estructuración y desarrollo de la química cuántica. Por su parte, Contreras y otros (2008) afirman que constituye un segmento de la química teórica que trabaja sobre las propiedades de las moléculas, sus interacciones y demás relaciones mediante el empleo de programas computacionales y, para comprenderlas, es necesario tener en cuenta que los modelos formulados sobre ellas se fundamentan en varias áreas del conocimiento científico, no solamente en química. Young (2001), afirma que cuando se usa el término de química computacional, es generalmente cuando un método matemático está lo suficientemente bien desarrollado (métodos cuánticos que no es posible realizar a lápiz y papel), y puede ser automatizado en un computador. Por otro lado, Clementi (2005) en unos de sus trabajos, afirma que la química computacional, es un campo muy vasto que se ocupa de sistemas atómicos y moleculares, con diferentes niveles de complejidad, y que se pueden tratar sistemas cuánticos discretos o como conjuntos estadísticos. López, 2017, apoyado en las ideas de Muñiz, piensa que la química computacional mezcla la física, química, matemáticas y ciencias de la computación, y la idea de esta es explorar, con los métodos de estas ciencias, procesos que ocurren en un laboratorio, y que no se pueden comprender con los instrumentos que hay, por más sofisticados que sean. En el trabajo respecto a los métodos y usos de la química computacional, Valles, A., Rosales, L., Serrato, L. y Farías, L. (2014) argumentan que la química computacional es la evolución de la química teórica, ya que aplica métodos de cálculo para resolver ecuaciones y calcular propiedades a nivel molecular, mediante el uso de un ordenador y un software.

Y, sobre la segunda, las investigaciones realizadas han sido desarrolladas sobre la base de aplicaciones de software en la enseñanza de la química, sobre los

aportes que brindan las aplicaciones computacionales (software) en química para el tratamiento de conceptos como representaciones didácticas. Así, Sánchez (2014), discute el concepto de reacción química desde la química computacional y el realismo instrumental de I. Hacking (1996), con el propósito establecer las bases teóricas en la construcción de un modelo semántico predictivo, que permita establecer un marco explicativo que dé cuenta de una reacción de esterificación, modelada a partir del uso de programas computacionales a nivel de química y, Penagos (2009), plantea la posibilidad de diseñar y utilizar herramientas didácticas computacionales para dinamizar los procesos de enseñanza y promover el estudio de las ciencias en el momento de aplicar evaluaciones.

En esta misma perspectiva, Escobar (2011), somete a discusión una propuesta de tipo descriptivo, en la que incorpora el diseño y validación de un Material Educativo Computacional (MEC) derivado de la Síntesis del Material Mesoporoso SBA-15, bajo el modelo de enseñanza y aprendizaje por investigación, como herramienta didáctica en el aprendizaje de los fenómenos de adsorción por parte de profesores de química en formación inicial y, Palomares (2009), propone el diseño de una estrategia didáctica que maneja, como herramienta central, un material educativo computacional (software), diseñado y desarrollado en el marco de la resolución de problemas, dirigido al avance y potencialización de las competencias para interpretar situaciones, establecer condiciones y formular hipótesis y regularidades, para el grado undécimo de educación media sobre proteínas y enfermedades, en un contexto clínico.

Dentro de la revisión de la literatura, realizada en el trabajo de las simulaciones en computador y las herramientas de modelación en educación en química, que realizan de Ribeiro y Greca (2003), abordan las ventajas del uso de simulaciones conceptuales para la Educación Química, y dejan ver que por tratarse de una ciencia que se fundamenta en realidades invisibles, y dado que trabaja básicamente con el comportamiento de las partículas, el uso de los recursos tecnológicos, en este caso el computador y los programas computacionales, puede ser de gran importancia para el desarrollo de modelos conceptuales y, de alguna forma, ayudar en el desarrollo de la competencia representativa.

Las tesis realizadas por estudiantes del Departamento de Química, de la Universidad Pedagógica Nacional, que hacen referencia a software y tecnologías de la información en la educación, disertan sobre la elaboración e implementación de software, como instrumento de evaluación, como herramienta didáctica dentro de la construcción de conceptos, o como ayuda tecnológica dentro del proceso de enseñanza aprendizaje, sin embargo, los programas son aplicaciones que arrojan datos acorde a los conceptos requeridos, Sanabria y Moreno (2005), centran su trabajo en un software educativo y lo utilizan como estrategia para el aprendizaje significativo de los conceptos ácido y base; Arévalo (1988), diseñó, desarrolló y aplicó un software en el grado décimo, con el fin de apoyarse en una ayuda tecnológica, en la enseñanza de una unidad didáctica sobre el tema de enlace

químico; Beltrán (1989), diseña un software que le permite a los estudiantes de décimo grado, practicar el balance de reacciones químicas a partir del método de óxido reducción estos software diseñados y aplicados en estos trabajos, no se fundamentan en modelos de la química teórica, aunque dan cuenta de la inclusión de las nuevas tecnologías en la enseñanza de las ciencias, como lo manifiesta Angarita y Arias (2008), en su trabajo de grado, la educación es uno de los ámbitos influenciados por el nuevo paradigma tecnológico, y se hace necesario un contexto educativo que enfrente los cambios de la sociedad respecto al conocimiento y su entorno.

Estas investigaciones que se relacionan, muestran el panorama del estado de la cuestión al formular este proyecto y dar inició a su desarrollo. Se asumió como punto teórico de partida. Cabe resaltar que este trabajo no se fundamentó en el uso de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC). La química computacional va más allá del uso del computador, se relaciona con los fundamentos teóricos y lo histórico, que le da la importancia en los procesos de su enseñanza y aprendizaje. Las TIC, como lo exponen Castro, Guzmán y Casado (2007), de acuerdo con los autores más relevantes en este ámbito, son las herramientas, los medios o el ambiente que se presta para desarrollar el acto educativo, con el cual se puede hacer un tratamiento de la información; por lo tanto, si se hace énfasis en los recursos tecnológicos en química computacional, dicha disciplina, no tendría un sustento químico, sino sería una herramienta más para abordar conceptos químicos en el trabajo en el aula.

4.2. Acerca de lo histórico.

La historia de las ciencias trata sobre la interacción de los postulados científicos, su entorno y su desarrollo en el transcurso del tiempo, como parte del conocimiento de las mismas y necesario tener en cuenta el enfoque con el cual se abordan. Algunos filósofos de las ciencias (Popper, 1962; Lakatos, 1983; Kuhn, 1972), expresan sus perspectivas respecto a cómo se pueden abordar las ciencias y cuál es la filosofía de las mismas. K. Popper (1962), se fundamenta en lo deductivo, en el que la probabilidad de cualquier ley debe ser igual a cero, desde que no se demuestre lo contrario, como lo expone Redman (1995). Por otro lado, I. Lakatos (1983), plantea los programas de investigación científica, que son estructuras constituidas por teorías relacionadas entre sí, siendo unas origen de otras; teorías que conforman un núcleo firme de los programas de investigación científica fundamento de la ciencia en estudio.

Por su parte, T. S. Kuhn (1972), establece que dentro del progreso científico existe un carácter revolucionario, ya que supone el abandono de una estructura teórica y la adopción de otra, lo cual se establece como un cambio de paradigma, el cual está definido por los supuestos teóricos generales, las leyes y las técnicas para su aplicación, aceptadas por los miembros de una determinada comunidad científica.

Sin embargo, la fundamentación que dan cuenta estas tres teorías no soportan el carácter histórico de la química computacional. La visión de Popper, lo deductivo, no sustenta la aplicación de la química teórica, ya que dentro del análisis y los resultados de la química computacional, las probabilidades son parte de las respuestas, y dentro de la probabilidad el porcentaje asumido como improbable, hace parte del componente teórico de la misma. En cuanto al planteamiento de Lakatos, no se aplica en la historia de la química computacional, por cuanto no son programas de investigación los que han permitido el desarrollo de dicho campo de la ciencia, es la unión de diversas variables que han permitido el desarrollo de esta disciplina. La versión paradigmática de Kuhn, no es acogida en este trabajo, ya que si se habla de paradigma, se parte de unas teorías iniciales que no dan respuesta y que para ello se acude a uno nuevo, pero en esta disciplina, lo que se aborda, son teorías pero de una manera más compleja, teorías que con los recursos tecnológicos suficientes, se pueden desarrollar y puede llegar a supuestos probables.

Gallego Badillo (2004), conceptualiza modelo didáctico, como un discurso didáctico, en el que se enlazan estructuras conceptuales y metodológicas relacionadas de manera inferencial, es decir, ese conocimiento se deduce a partir de las abstracciones de los campos o modelos relacionados en este. Así, el discurso puede o no ser admitido, mientras que los campos que se opten, generen variaciones admisibles en el discurso. El discurso planteado por la química computacional, teniendo en cuenta una visión de modelo, sustenta las interacciones moleculares e intramoleculares, posibilita la abstracción de respuestas y conceptos y demuestra un planteamiento diferente de los datos y un análisis inferencial, como lo expresan las probabilidades a partir de las ecuaciones y modelos teóricos aplicados en la misma.

4.3. En cuanto a lo didáctico

Más allá de los contenidos, es importante analizar el qué se enseña, por qué se enseña, cómo se enseña y, si es posible hablar de un aprendizaje en los estudiantes. La didáctica implica toda una interacción de los procesos de enseñanza y aprendizaje, por tal razón, es necesario hacer un breve recorrido de la didáctica a través de la historia. Adúriz-Bravo e Izquierdo (2002), proponen cinco etapas en el desarrollo de la didáctica de las ciencias, primero, una *etapa a disciplinar* (fin siglo XIX a mediados de la década de los 50), en la cual las producciones de los diferentes autores presentan disparidad, y esa falta de conexión entre los textos, impide suponer que exista la didáctica de las ciencias.

Segundo, la *etapa tecnológica*, entre las décadas de los 50 y 60, denominada así por cuanto los programas e investigaciones realizadas, se apoyaron en recomendaciones, recursos y técnicas de corte metodológico, sin ocuparse del desarrollo del conocimiento básico, éste surgió como respuesta al cambio de currículos de ciencias.

En cuanto a la tercera, es la *etapa protodisciplinar*, la cual se ubica a mediados de la década de los 70, los investigadores en didáctica de las ciencias, se consideran miembros de una misma comunidad, que se está independizando. Sus investigaciones abordan problemas ligados al aprendizaje de contenidos en ciencias, dejando a un lado la visión psicológica, las diferentes escuelas (que más adelante serán las líneas de la didáctica) luchan por ser la base teórica que sustente la didáctica.

Como cuarto, está la etapa de la *disciplina emergente*, de la década de los 80, un conjunto de personas guiadas con la misma problemática, considera un análisis más riguroso en cuanto a los marcos conceptuales y metodológicos. La auto revisión conceptual, la que soporta al constructivismo, es la base teórica de la mayoría de los estudios de la época.

La quinta etapa es la *disciplina consolidada*, pues se afirma que la didáctica ya tiene cuerpo teórico y una comunidad académica que la sustenta, además es una disciplina que ha madurado de tal forma, que se puede enseñar. En la actualidad, la didáctica de las ciencias es una disciplina autónoma, centrada en los contenidos de las ciencias desde el punto de vista de su enseñanza y aprendizaje, lo que le da el carácter histórico y epistemológico (Adúriz-Bravo e Izquierdo, 2002), y sobre lo cual Gil, Carrascosa y Martínez (1999) argumentan que la didáctica de las ciencias, emerge de la investigación específicamente centrada en los problemas de enseñanza y aprendizaje de las ciencias. Así mismo, Gallego, Pérez y otros (2004) plantean que la didáctica de las ciencias como disciplina, posee un carácter metodológico, que dentro de todas las prácticas profesionales de enseñanza, su naturaleza es hipotético-deductiva, lo que obliga a tener un proceso de enseñanza dinámico y complejo, teniendo en cuenta el carácter de enseñabilidad, determinado por la intencionalidad curricular.

En esta perspectiva, en Química computacional, una revisión histórica, reclama el carácter epistemológico que permite, examinar los documentos que dan cuenta de su desarrollo y evolución de su estructura como disciplina. Desde la didáctica de las ciencias, es necesario hacer esta revisión histórica para dar soporte a los contenidos, concepciones y orígenes de la química computacional como parte de la ciencia en pro de su estudio y comprensión. Esto permite a su vez, dar soporte a una disciplina que debe ser enseñada, además, la comunidad académica que se encuentra realizando trabajos en esta área, también soporta el hecho de que ya es un área de la química y que como tal, se debe tener en cuenta el proceso de enseñanza y el carácter de enseñabilidad de la misma.

4.4. Sobre la química computacional

Cuevas (2005), sostiene que la química computacional brinda las técnicas operacionales que, para este caso las constituye el software computacional, para resolver modelos teóricos y probar su validez, mediante la comparación simultánea con los datos experimentales. Hopfinger (1985), argumenta sobre la

química computacional como la modelación cuantitativa de los comportamientos químicos a partir del uso del computador fundamentado en la química teórica. Shreiner (1998), la enmarca como el modelado de los aspectos de la química con el empleo de cálculos en lugar de experimentos. Pople (1998), en su discurso al recibir el premio nobel, manifestó que la química computacional hace parte de la aplicación de los computadores y de conceptos básicos de mecánica cuántica para comprender el comportamiento de los sistemas moleculares complejos. Foresman y Frisch, (1995) afirman que la finalidad de la química computacional es la simulación a partir de los cálculos numéricos, estructuras químicas y reacciones, fundamentados total o parcialmente en las leyes de la física.

La química computacional se asume como una nueva área de conocimiento (Cuevas, 2005), y para su desarrollo es necesario dos disposiciones: los individuos deben estar preparados para este campo y a su vez deben generar conocimiento. Esto último se hace patente en los diferentes medios de divulgación como revistas impresas y electrónicas. Y esta preparación de la cual se habla, tiene que ver con la aplicación de algoritmos computarizados de la teoría cuántica, conocimientos de mecánica molecular, computación gráfica, modelado molecular y diseño molecular asistido por computador entre otros (Lipkowitz y Boyd, 1990). La química computacional, por otro lado, permite el estudio de propiedades y reacciones de átomos y moléculas, observaciones estas que no son posibles de realizar, a simple vista, en el laboratorio, además, las condiciones necesarias para desarrollar estos experimentos son extremas y los costos para tan solo una investigación, son bastante altos (Valles-Sánchez, 2014).

Esta disciplina, ha permitido la aplicación y desarrollo de diferentes modelos teóricos que dan explicación a algunos comportamientos y fenómenos en química, gracias a esta estructura conceptual, que al pasar del tiempo se ha ido desarrollando. Con este trabajo se realiza una revisión histórica, que pretende contribuir a una construcción histórica en cuanto al discurso teórico que fundamenta la química computacional. Esta revisión, tiene dos componentes, con el fin de que se considere los más relevantes en química computacional, uno referido a lo teórico y el otro a lo tecnológico, en cuanto a la necesidad del uso de los ordenadores, debido a la complejidad que la parte teórica iba desarrollando.

El componente teórico lo constituyen los contenidos formulados en su desarrollo y proyección: la mecánica molecular, la química cuántica, la química teórica y los saberes computacionales y habilidad para programar en lenguaje de computación. Por otro lado, la química computacional brinda otros componentes dentro de la enseñanza y aprendizaje, ya que pone a disposición modelos y dispositivos que permiten de una u otra manera, dar forma a la química, simular los fenómenos que no se pueden observar directamente, relativos a la química intramolecular. Se hace posible en este punto, una aproximación a la comprensión de temas en los cuales las interacciones, propiedades y experiencias, son difíciles de demostrar y de comprender.

El tratamiento teórico en química computacional se fundamenta en modelos matemáticos y estadística con fundamentos físicos y químicos, desde los que se intenta dar cuenta del comportamiento de átomos, moléculas, partículas en general y de la energía que intervienen en las interacciones entre ellas.

Cada una de las teorías que hasta la actualidad se han propuesto, han sido elaboradas como respuesta a los diferentes fenómenos que en el transcurso de la historia de las ciencias, no ha sido posible explicar con el paradigma adoptado en su momento (Kuhn, 1972), gracias a que los científicos no se han conformado con una explicación y han buscado otras perspectivas, que les ha permitido formular modelos que satisfagan sus cuestionamientos, cambiando de modelos y dando respuesta a las preguntas que estaban pendientes por resolver.

En la química computacional, la mecánica molecular, acude a las leyes de la física clásica para explicar las interacciones de los núcleos de los átomos que intervienen en la molécula, sin tener en cuenta los electrones. Dalton propone una partícula indivisible que compone la materia y a la que denominaron átomo, luego Thomson (1904), a partir de los experimentos de cargas eléctricas, propone el modelo del pudín de pasas en el que las cargas negativas están incrustadas en una masa positiva siendo su carga total neutra, más tarde, Rutherford (1914), gracias a las partículas alfa dirigidas sobre la lámina de oro y su comportamiento, argumenta que los átomos tienen un espacio y que los electrones o cargas negativas se encuentran alrededor del núcleo, el cual se consideraba de carga positiva, denominando a esta modelo atómico planetario, Bohr (1913), plantea un modelo más elaborado, como introducción a la cuántica, en el que los electrones se encuentran en diferentes niveles energéticos u orbitales, luego Schrödinger (1926) y otros científicos, desde la lectura cuántica, determinan la probabilidad de encontrar electrones en determinadas regiones, su comportamiento magnético y su dirección.

Se acepta entonces que el inicio de la mecánica cuántica, se debe a Max Planck (1914), quien formuló la ecuación de la energía para la longitud de onda de la radiación emitida por un cuerpo negro caliente, en donde la interacción de la radiación con la materia ocurre paquetes de energía a los que se denominó "cuantum". A partir de una constante determinada por Planck, Niels Bohr (1913) propuso el modelo de orbitales estables del hidrógeno y Einstein (1911) postuló el comportamiento dual de los fotones. El espín, presentado por George Uhlenbeck y Samuel Goudsmit (1925), y el principio de exclusión (Pauli, 1925), fundamentaron un modelo de determinación de la estructura química, Werner Heisenberg (1925) vinculó la mecánica de matrices al proceso y finalmente Erwin Schrödinger (1926) sienta las bases de la mecánica cuántica con la ecuación, conocida con su nombre, la cual se fundamenta en una derivada de la función de onda con respecto al tiempo que permite calcular la función de onda futura en cualquier momento (Levine, 2001).

Son muchas más las teorías con las que se intenta dar cuenta de las interacciones entre estas partículas, sobre los enlaces, del comportamiento de los electrones demás partículas subatómicas. La química computacional se destaca por sus aportes en estos fundamentos teóricos matemáticos, físicos y químicos.

Sobre lo tecnológico, en la química computacional, es fundamental y vertebral el hecho del uso de los ordenadores, por cuanto permiten un tratamiento teórico más versátil y una modelación con argumentos, a partir de la simulación y modelado. Los avances en computación, facilitan, agilizan y modelan, diferentes situaciones en las que, con lo experimental en química, faltan argumentos para formular una explicación “con la que se pueda demostrar” acerca del fenómeno que se aborda a ese nivel subatómico, por ejemplo, la interacción de átomos, moléculas y demás partículas que conforman los materiales de la naturaleza. Con la introducción de tratamientos computacionales, se logran contrastar modelos teóricos, que sustentan teorías tales que, desde su perspectiva, se infieren explicaciones aceptables.

Los computadores se han constituido en una herramienta indispensable para el estudio de los fenómenos químicos y de su proyección en la industria, con el desarrollo de modelos matemáticos que a lápiz y papel no sería posible por lo complejo de su naturaleza. Además, el computador, permite que experimentos de laboratorio con condiciones extremas impracticables, sean posibles de abordar con simulaciones y cálculos de probabilidad de sus resultados, con ahorro de tiempo y costos y, no solo en lo práctico, sino fundamentalmente en lo teórico. Científicos y especialistas de diferentes áreas la utilizan para predecir las propiedades moleculares de sistemas químicos, con el empleo de variedad de técnicas en constante desarrollo (Valles-Sánchez, 2014).

Cabe anotar, que los computadores, no reemplazan, en este caso a los científicos, sino que proveen de herramientas a los usuarios interesados en la química, para profundizar, desde otro punto de vista y con otros argumentos, en aproximaciones y desarrollo de modelos químicos que desde una perspectiva teórica de la mecánica molecular o de la química cuántica, se hace aceptable para la comunidad científica.

En este componente tecnológico, se considera lo relacionado con la utilización de computadores en educación. Como lo sostiene Reggini, (1988), los computadores no son por sí solos educativos. Su beneficio depende de la manera en que se le presenta al estudiante. El beneficio que en química computacional tiene el computador, es la capacidad para modelar virtualmente, sin dejar de lado la capacidad imaginativa y creativa del ser humano, las interacciones atómicas o moleculares, y qué determina las propiedades de los átomos y de los elementos, construcciones que no se podrían llevar a cabo con solo datos de laboratorio o en el trabajo de formación científica de las nuevas generaciones en el aula.

- Química computacional y la formación en química

Desde décadas anteriores, la sociedad está inmersa en una “cultura computacional” en la que se desarrolla formas de pensar espontáneamente, sin una enseñanza deliberada (Papert, 1980), conocimiento en sistemas computacionales, debido al manejo de las nuevas tecnologías y su constante interacción con las mismas. Hombres de ciencia han creado y validado herramientas de investigación a través del software, que han llegado a beneficiar la visualización molecular, aplicada a la química, la bioquímica, la biología molecular (Giordan y Gois, 2009).

Esta disciplina, desde la formación en química, no se fundamenta en los aparatos tecnológicos, sino en las condiciones creadas, a través de la articulación de herramientas tecnológicas (Giordan, 2008), que contribuyan al proceso de enseñanza y aprendizaje. La ayuda que brinda el computador en la formación en ciencias, y en este caso en química, radica en la versatilidad del computador en el cálculo, demostración, modelación, visualización y demás actividades en química, que permite aproximar desde lo virtual, al estudiante, a la comprensión de las propiedades atómicas y moleculares de las sustancias. Por otro lado, Grisolia y Grisolia (2009), reseñan que el uso de tecnologías educativas facilita la concretización de conceptos abstractos y la visualización de procesos.

Los docentes en formación, por lo tanto, están en la obligación de hacer una revisión tecnológica en cuanto a su fundamentación docente, por cuanto, estas condiciones, en especial esta disciplina, la química computacional, permite como se sustentó anteriormente, que un modelo, logre abstraer ideas y conceptos, ahondando en temas que, en lápiz y papel, sería más difícil de lograr involucrar en el pensamiento. Por otro lado, este modelado, permite reproducir la *realidad*, de manera precisa, en cuanto a los resultados teóricos, según lo demuestra Chigo (2004).

- Química computacional y la didáctica de las ciencias

La química computacional hace parte de un contexto tecnológico, con la vinculación del computador, al tratamiento de las teorías mecánicas y cuánticas en el aula de manera eficaz, modelos que permiten elaborar una explicación sobre las propiedades y comportamientos, tanto atómico como molecular, de los materiales de la naturaleza y de los fenómenos químicos en los que toman parte. Esta perspectiva ha permitido avances significativos en diferentes ámbitos de las ciencias, en salud, biotecnología, biología y demás campos que se apoyan en los principios computacionales. Desde la didáctica de las ciencias, la tecnología constituye un factor importante en la educación. Gil, Carrascosa y Martínez (1999, p.35), afirman que la utilización de las nuevas tecnologías en la enseñanza está plenamente justificada si se tiene en cuenta que uno de los objetivos básicos de la educación ha de ser la preparación de los adolescentes para ser ciudadanos de una sociedad plural, democrática y tecnológicamente avanzada.

En la enseñanza de las ciencias, los aportes de la tecnología, como en este caso los computadores, permiten realizar diferentes tipos de intervención, tanto por parte de los profesores como de los estudiantes, mediante aplicaciones disponibles como medio para la comprensión de conceptos y del conocimiento químico en general. En el uso de los programas computacionales en química computacional, no solo se tiene en cuenta los resultados obtenidos con la aplicación, sino que son centrales en el proceso de comprensión, el contexto y los principios químicos que se abordan. Por ejemplo, al predecir la síntesis de un compuesto es fundamental todo el proceso que hay detrás del resultado y hacen posible esa síntesis. En los procesos de enseñanza aprendizaje, igualmente, son fundamentales todas las componentes que permiten su uso y razones del mismo.

Sin embargo, al incluir esta disciplina, en los contenidos curriculares, el docente ya sea en formación o profesional, ha de contar con fundamentos y conocimientos en informática, pues al hacer uso de estas tecnologías cabe la posibilidad de caer en el simplismo de reproducir, con base en estos recursos, lo que se desea enseñar, pues el proceso de enseñanza aprendizaje quedaría sesgado y pasaría a una mera transmisión (Giordan y Gois, 2009). El currículo, ha de permitir, el desarrollo del docente frente a las nuevas tecnologías, y la vinculación de la misma a su área de trabajo, dentro de la misma didáctica de la química (Ferreira, 1998).

No obstante, algo relevante, es el tener un pensamiento computacional, que no se limita a la capacidad de programar, sino que recurre a la habilidad de resolver problemas de manera inteligente e imaginativa, y permite el desarrollo de nuevas formas de pensar. Este pensamiento computacional, como competencia, es una necesidad propia de la sociedad actual (Berrocoso, Fernández y Garrido, 2015). Involucrar entonces la química computacional dentro de un currículo, pretende promover ese pensamiento computacional. En sus orígenes, “Logo” fue el primer lenguaje de programación basado en un enfoque pedagógico, el cual permitió un aprendizaje de las matemáticas, cibernética y ciencias de una forma diferente. Logo permitía, a partir del juego con un objeto, construir conocimiento mediante la apropiación de los resultados, que, aunque se sabía a donde se podría llegar, el individuo los hacía propios, por cuanto él era quien realizaba toda la construcción cognitiva (Papert, 1981).

Si bien se está en el siglo XXI, se debe formar profesionales en docencia que formen para este siglo, docentes con capacidad de producir conocimiento, y no de repetir y transmitir, esto denota una responsabilidad no solamente con la profesión sino con la labor y la responsabilidad que demanda. En manos de los docentes está la posibilidad de generar conocimiento por parte de cada estudiante, pero para esto se necesita que en la actualidad, la escuela le provea a los docentes en formación, las condiciones para un desarrollo exitoso del mismo, no solo en los instrumental sino, y fundamentalmente, en lo conceptual.

4.5. De la investigación documental

Según Ander-Egg (2011), “*investigación*” proviene del latín *in* (en) y *vestigare* (hallar, inquirir, indagar), ‘en pos de la huella’, en busca de una pista para encontrar algo. De ahí el uso más frecuente del término en el sentido de ‘averiguar o descubrir algo que se desconoce’. Se trata de un término ligado a la idea de indagar, inquirir, averiguar, buscar, escudriñar, para saber acerca de una “cosa”. A partir de esto, y aplicando este término a la ciencia, se afirma que “alude al procedimiento reflexivo, sistemático, controlado y crítico que tiene como finalidad descubrir, describir, explicar o interpretar los hechos, fenómenos, procesos, relaciones y constantes o generalizaciones que se dan en un determinado ámbito de la realidad. (Ander-Egg, 2011). Por lo que este trabajo se fundamentó en una investigación, para este caso de tipo documental, de tal forma que las diferentes fuentes sobre las que se indagó, brindaran información para estructurar un discurso de carácter histórico sobre la construcción de la química computacional.

La investigación documental, puede definirse como una estrategia en la que se observa y reflexiona sistemáticamente sobre realidades teóricas y empíricas usando para ello diferentes tipos de documentos donde se indaga, interpreta, presenta datos e información sobre un tema determinado de cualquier ciencia, utilizando para ello, métodos e instrumentos que tiene como finalidad obtener resultados que pueden constituir una base para el desarrollo de la creación científica (Rodríguez, 2013). En concreto, la investigación documental constituye una técnica que permite obtener documentos nuevos en los que es posible describir, explicar, analizar, comparar, criticar, entre otras actividades intelectuales, un tema mediante el estudio en fuentes de información o documentos (Ávila, 2006).

Un documento, es todo registro de hechos o rastros de algo que ha pasado, como testimonio que proporciona información, datos o cifras. Constituye un tipo de material muy útil. Ha de estar sobre un soporte (papel, medio electrónico, magnético, u otra forma de almacenamiento), cualquiera que éste sea. Se asumen como documentos los libros, revistas, investigaciones, informes, documentos escritos, mapas, periódicos, obras literarias, audios, videos y similares, elaborados por una persona o un grupo de personas, organizaciones e instituciones (Ander-Egg, 1998).

En investigación documental, se siguen cuatro etapas:

- Selección del tema
- Recolección de Información y organización
- Análisis e Interpretación
- Presentación de resultados

5. METODOLOGÍA

El proceso seguido en el trabajo investigativo, tuvo como trasfondo de acción y validez, los siguientes argumentos:

5.1. Del problema.

La química computacional, según Jensen (2007) es considerada como un campo de la química, en donde el computador es una herramienta “experimental”, y se dedica a la solución de los problemas químicos en cuanto a reacciones, comportamiento de la molécula y demás posibles análisis y resultados que se puedan obtener a partir de los modelos matemáticos que hacen parte de la química teórica. Por otro lado, Contreras y otros (2008) exponen que se puede hacer docencia e investigación en química computacional, sin sustituir la forma de enseñar e investigar la química como tradicionalmente se está haciendo (utilizando las aulas de clase y el laboratorio), sino haciendo uso de los recursos y conocimientos que implican la química computacional, ya sea como complemento, por ahorro de tiempo y dinero debido a los costos en materiales y el tiempo en los laboratorios. Sin embargo, para poder hacer uso de ésta, es necesario conocer desde donde parte, cuales son los conceptos que han cambiado a través de la historia, que modelos han sido parte de la revolución en la ciencia de estudio, cuales son las concepciones que se deben adquirir para hablar de química computacional.

La química computacional, afirman Leiva y Estrín (2011), ha ganado terreno en el campo científico, se puede vislumbrar en la salud, nanotecnología, electrónica molecular, biología molecular y otras ramas que necesitan de las explicaciones que posiblemente la química computacional pueda generar a partir de sus fundamentos. En la actualidad, esta disciplina juega un papel importante en las áreas de aprendizaje e investigación porque permite hacer un análisis de los diferentes sistemas a condiciones específicas, sostienen Valles, Rosales, Serrato y Farías (2014).

El Departamento de Química de la Universidad Pedagógica Nacional, como ente rector en la formación de docentes en el área de la Química, tiene dentro de su currículo la asignatura de Química Computacional, la cual se encuentra en un ciclo de profundización, en el ambiente de formación comunicativa y deontológica, con énfasis particular de la química, las tecnologías o las artes. Se consideran suficientes estas razones para su incorporación en la malla curricular de formación de profesores de química. A su vez, convoca inquietudes como el interrogante que centró este trabajo de investigación: ¿Qué fundamentos históricos conforman la estructura de la química computacional? Este interrogante hace necesario, se realice una revisión en esta rama, que posibilite una construcción de un discurso

histórico sobre esta disciplina y constituya un punto de partida para su comprensión.

5.2. Sobre la investigación.

El proyecto fue desarrollado con base en una investigación documental (Ander-Egg, E., 2011) de carácter histórico. Ésta permitió dar cuenta de lo que hoy constituye la química computacional, en el marco de la historia de las ciencias. Se procedió, primero, con la determinación de las fuentes primarias de información que pudieran proporcionar alguna aproximación a los orígenes de esta disciplina. Y se acudió a este tipo de investigación, dado que la información sobre este tema no es explícita. Se hizo necesario indagar en la historia de la química y, en general, en la de las ciencias. La ruta en este ejercicio investigativo se cumplió en varias etapas, así:

- **Recolección de información y organización.** Se rastreó la información válida y disponible sobre los acontecimientos que se consideraron pertinentes en la historia de la química y con alguna relación con la química computacional: la emergencia de la tecnología computacional, su desarrollo y su introducción en el estudio y reestructuración de la química. Se diseñaron fichas bibliográficas que documentaran lo pertinente a la información requerida.
- **Análisis e Interpretación.** Para la indagación de la información, selección y organización, se elaboró una matriz de análisis con las categorías y criterios de análisis para orientar la indagación a lo estructural de la construcción y reconstrucción de los fundamentos históricos del desarrollo de la disciplina en consideración.
- **Levantamiento de tablas de información.** Con apoyo en la tabla elaborada se procedió a inventariar autor(es) o científico(s), teorías, ley o aporte con lo que consideró aportó en esa dirección, época de desarrollo de las ciencias y de la tecnología en los que se produjo y la ficha bibliografía correspondiente.
- **Tratamiento y análisis de resultados.** Con la información trabajada con base en la matriz elaborada y validada, se procedió a la estructuración del documento que, con los resultados obtenidos, constituiría una contribución a la revisión histórica de los fundamentos de la disciplina química computacional. Este documento fue sometido a su revisión estructural, redacción y consistencia argumentativa.

5.3. Fuentes de información.

La siguiente relación de la literatura revisada, comprende primero el ámbito internacional, luego lo nacional, luego lo local y por último lo Institucional. Esto permite tener información para trabajos posteriores sobre la misma temática.

Literatura internacional:

- Anales del Real Laboratorio de química de Segovia, o Colección de memorias sobre las artes, la artillería, la historia natural de España y Américas, la docimástica de sus minas, &c. Tomo I (1791) y II (1795). Proust, J. (1795) .
- A new system of philosophy chemistry. Dalton, J. (1808).
- A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field. A Royal Society Transactions, Vol.CLV. The scientific papers of James Clerk Maxwell. Vol 1. Niven, W. (1965).
- Molecule. Nature, Vol. 8. The scientific papers of James Clerk Maxwell. Vol 2. Niven, W. (1965).
- Principio de Boltzmann y primeras ideas cuánticas de Einstein. Navarro, L. y Pérez, E. (2002).
- Física cuántica. Piriš, M. (1999).
- Multielement detection systems for spectrochemical analysis. Busch, K. y Busch, M. (1990).
- The origin and development of the quantum theory. Planck, M. (1922).
- On the Law of Distribution of Energy in the Normal Spectrum. Annalen der Physik, 4. Planck, M. (1901).
- Where is science going?. Planck, M. (1932).
- Concerning an heuristic point of view toward the emission and transformation of light. Annales der Physik. Einstein, A. (1905).
- The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom. Philosophical Magazine. Rutherford, E. (1914).
- The structure of the atom. Philosophical Magazine. Rutherford, E. (1914).
- Theory of the Energy Distribution of Photoelectrons. Physical Review. DuBridge, L. (1933).
- On the Constitution of Atoms and Molecules. Philosophical Magazine. Bohr, N. (1913).
- On the elementary electrical charge and the Avogadro constant. The Physical review. Millikan, R. (1913).
- Recherches sur la Theorie des quanta. Annales der Physik. De Broglie, L. (1925).
- Quantum-theoretical re-interpretation of kinematic and mechanical relations. (A translation of: Anonymous). Zeitschrift für Physik. Heisenberg, W. (1925).
- Cuántica y Relatividad. Teorías del todo. Lopez, L., Porro, J. Torrónategui, E. y García, M. (2004).
- The Actual content of quantum theoretical kinematics and mechanics. (A translation of: NASA). Zeitschrift für Physik. Heisenberg, W. (1927).
- Interaction between neutral atoms and homopolar binding according to quantum mechanics. Zeitschrift für Physik. Heitler, W. y Londons, F. (1927).

- On the Quantum Theory of Molecules. *Annalen der Physik*. Born, M. y Oppenheimer, F. (1927).
- Improved wuantum theory of many-electron systems. *Physical review*. Doddard, W. III. (1967).
- The principles of quantum mechanics. Oxford, Great Britain. Dirac, P. (1930).
- Erich Hückel (1896-1980), From physics to quantum chemistry. Karachalios, A. (2010).
- Molecular energy levels and valence bonds. *Physical review*. Slater, J. (1931).
- Nobel lecture: Spectroscopi, molecular orbitals, and chemical bonding. Nobel lectures, Chemistry 1963 – 1970. Mulliken, R. (1966).
- Premios nobel 2013. Comentarios a sus actividades y descubrimientos. Mayor, F. y Cascales, M. (2013).
- My Life as a Physicist : Memories and Perspectives. *Journal of Molecular Spectroscopy*. Roothaan, C. (1991).
- The structure of some simple molecules with lone pair electrons. *Transactions of the Faraday Society*. Duncan A. y Pople, J. (1952).
- The conservation of orbital symmetry. Hoffmann R. y Woodward, R. (1968).
- La química computacional en la nueva frontera. *Arbor, Ciencia, Pensamiento y Cultura*. Mó, O y Yáñez, M. (2011).
- Premios nobel 2013. Comentarios a sus actividades y descubrimientos. Mayor, F. y Cascales, M. (2013).
- The development of computational chemistry in the United States. *Reviews in computational chemistry*. Bolcer, J. y Hermann, R. (1994).
- La química teórica y la química cuántica computacional. *Boletín CSI*. Cjunto, J. y Arroyo, J. (2003).
- Computational chemistry: attempting to simulate large molecular systems. *Theory and applications of computational chemistry: The first forty years*. Clementi, E. (2005).
-

Literatura nacional e institucional

- *Diseño e implementación de un software de práctica sobre estequiometria para estudiantes de educación media vocacional*. (Tesis de especialización). Universidad Antonio Nariño, Bogotá, Colombia. Díaz, L. y Pérez, R. (1988)

Literatura institucional

No se encuentran documentos en cuanto a química computacional, los hallados son artículos que corresponden a la aplicación de software en el ámbito educativo, sin ahondar en la disciplina en cuestión y los artículos científicos que dan cuenta del uso de la química computacional pero no en la educación.

- *Desarrollo de competencias científicas, mediante el diseño e implementación de material educativo computacional (MEC) de corte heurístico, enmarcado en una estrategia de aprendizaje por resolución de problemas* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia. Palomares, A. (2009).

5.4. Instrumentos.

Los instrumentos utilizados en este trabajo fueron la ficha bibliográfica, matriz de análisis y la tabla de resultados.

5.4.1. Ficha bibliográfica

Figura 1. Ficha bibliográfica.

CÓDIGO	QC-#
AUTOR O AUTORES	
AÑO	
OBRA	
APORTE	
BIBLIOGRAFÍA	

Autoría propia

En esta ficha se relaciona el código **QC-#** con el cual se identificará el texto trabajado, donde aparece **Bibliografía**, algunas veces no se hallaron los documentos originales que soportaban dichas conjeturas, y se remite a otro autor que lo cita. Ver Anexo 1.

5.4.2. Matriz de análisis

Con base en los fundamentos teóricos, se diseñó una matriz con el fin de orientar la lectura de los documentos que, de alguna forma, los autores aportaron a la construcción de la química computacional y destacar aquellos párrafos que constituyeron lo central del aporte o, que fundamentan una síntesis de ese factor en el documento. Así, se formularon tres categorías:

- Fundamentos de química computacional**, con las siguientes características: a₁: El documento muestra hechos históricos que constituyen hitos relacionados con el progreso de las ciencias en general y de la química en especial, teniendo en cuenta el sustento teórico en química computacional y sus bases (química teórica); a₂: Detalla problemas de las ciencias (química) que demandan un tratamiento científico diferente y una nueva tecnología para su solución; a₃: destaca la integración entre las ciencias (en especial la química) y la tecnología de la computación.

- b) **Fundamentos didácticos de química computacional**, con las siguientes características: b₁: El documento muestra hechos históricos que constituyen hitos sobre la incorporación de esta tecnología a otras relacionadas con la didáctica en general y de la química computacional en particular; b₂: Detalla problemas de la química computacional que demandan versiones tecnológicas computacionales para su solución; b₃: destaca la integración entre la química computacional y la didáctica de la química.
- c) **Fundamentos de otros ámbitos**, con las siguientes características: c₁: El documento muestra hechos históricos que constituyen hitos sobre la incorporación de lo que el profesor de ciencias en general y de química en especial debe saber para su desarrollo y aplicación en química computacional; c₂: El documento muestra hechos históricos que constituyen hitos sobre la incorporación de esta tecnología al aprendizaje de las ciencias en general y de química en especial; c₃: destaca el carácter interdisciplinar de la química computacional.

Para estas categorías se consideró, como criterio de análisis, su selección, si el documento mostraba una o varias de estas características y coleccionar los párrafos correspondientes para la construcción del discurso en referencia, en la tabla levantada. Además, se consideró, en función de la organización de la estructura del discurso, los siguientes criterios de carácter histórico: publicado antes de 1980; publicado entre 1980 y 2000; publicado después de 2000. Esta matriz fue sometida a validación por expertos (3) y en discusión del grupo de investigación y cuyas observaciones, acogidas críticamente, permitieron estructurarla tal como se utilizó en el trabajo.

Figura 2. Matriz de análisis.

Categorías	Características	Criterios		
		Antes de 1980	1980 a 2000	Después de 2000
Fundamentos de química computacional	a₁			
	a₂			
	a₃			
Fundamentos didácticos de química computacional	b₁			
	b₂			
	b₃			
Fundamentos de otros ámbitos	c₁			
	c₂			
	c₃			

Autoría propia

6. RESULTADOS Y ANÁLISIS.

A continuación se muestra la Tabla 1, y se hace una breve descripción de los resultados arrojados a partir de la matriz de análisis.

Tabla 1. Matriz de análisis

Categorías	Características	Criterios		
		Antes de 1980	1980 a 2000	Después de 2000
Fundamentos de química computacional	a ₁	QC-10,-11, -16, -19, -20, -21, -22, -26, -30, -32, -34, -35	QC-37	QC-39
	a ₂	QC-5, -6, -14, -15, -17- 24, -25, -27, -29		
	a ₃	QC-3, -4, -23, -27, -31, -36		QC-38, -40
Fundamentos didácticos de química computacional	b ₁	QC-20, -21, -22, -26		
	b ₂	QC-24, -25, -27		
	b ₃			
Fundamentos de otros ámbitos	c ₁	QC-13, -19, -21, -22, -24		QC-39
	c ₂	QC-2	QC-41	QC-42
	c ₃	QC-1, -8, -9, -18, -27, -28, -30		QC-40

La gran mayoría de textos consultados fueron publicados antes del año 1980, en cuanto a los fundamentos de química computacional. Doce documentos muestran hechos históricos relacionados con el progreso de las ciencias, fundamentan, de

una u otra forma, la química computacional y la química teórica. Nueve textos permiten detallar problemas de las ciencias que demandan un tratamiento científico diferente o una nueva tecnología para su solución. Seis de los textos consultados, destacan la integración entre las ciencias y la tecnología de la computación. En cuanto a los fundamentos de química computacional entre 1980 y 2000, un documento muestra hechos históricos relacionados con el progreso de las ciencias, en especial de la química, teniendo en cuenta el sustento teórico en química computacional y teórica. En cuanto a los documentos luego del 2000 hay un documento que muestra hechos históricos relacionados con química computacional.

Sobre los fundamentos didácticos de química computacional, cuatro textos antes de 1980 muestran hechos históricos acerca de la incorporación de esta tecnología relacionadas con la didáctica en general y de la química computacional en particular y tres documentos evidencian el uso de la química computacional para la solución de problemas.

En cuanto a los fundamentos de otros ámbitos antes de 1980, cinco documentos muestran hechos históricos que constituyen hitos sobre la incorporación de lo que el profesor de ciencias en general y de química en especial debe saber para su desarrollo y aplicación en química computacional, un documento muestra hechos históricos que constituyen hitos sobre la incorporación de esta tecnología al aprendizaje de las ciencias en general y de química en especial y siete documentos destacan el carácter interdisciplinar de la química computacional. Entre 1980 y 2000 un documento muestra hechos que constituyen eventos sobre la incorporación de esta tecnología al aprendizaje de las ciencias, y luego del año 2000, un documento muestra hechos históricos que constituyen hitos sobre la incorporación de lo que el profesor de ciencias en general y de química en especial debe saber para su desarrollo y aplicación en química computacional, un documento muestra hechos históricos de relevancia sobre la incorporación de esta tecnología al aprendizaje de las ciencias en general y de química en especial y un documento destaca el carácter interdisciplinar de la química computacional.

Solo hubo una característica, los fundamentos didácticos de la química computacional, en la cual ningún texto se le ubicó. Los documentos destacan la integración entre la química computacional y la didáctica de la química, punto en el que hay que hacer énfasis. Los textos que se consultaron, dado que se podían vincular con la didáctica, no formaban parte de la estructura de la química computacional. Dos tesis que formaron parte de los textos consultados, aunque hacen parte de la didáctica en química, no tienen fundamento relacionado con química computacional. Cabe resaltar que en las revisiones que se hicieron de textos de la universidad Pedagógica Nacional, ninguno se fundamenta en la química computacional, tratan sobre aplicaciones de software en grupos de estudiantes, con el fin de evaluar, o como estrategia didáctica o herramienta de ayuda. Por tal motivo no fueron tenidos en cuenta para este trabajo.

Por otro lado, luego de hacer la revisión de los textos, se elaboró una tabla con los aportes más relevantes y que pudieran servir como punto de partida para la creación del documento final, producto del trabajo investigativo, y como una contribución a la construcción histórico del discurso teórico la química computacional.

Tabla 2. Tabla de aportes científicos

CÓDIGO	AÑO	AUTOR	APORTE
QC-1	1794	JOSEPH LOUIS PROUST	Postula experimentalmente, la ley de las proporciones definidas.
QC-2	1808	JOHN DALTON	Determina que la materia está conformada por partículas indivisibles llamada átomo, a partir de comparaciones matemáticas de unión de sustancias. En este momento establece la Ley de las proporciones definidas.
QC-3	1864	JAMES CLERK MAXWELL	Cambia la concepción determinística de la física por estadística y probabilidad.
QC-4	1873	JAMES CLERK MAXWELL	apoya el hecho de que la materia es un objeto de estudio, del cual hay mucho por descubrir.
QC-5	1877	LW DUING BOLTZMANN	Planck incluye otras reflexiones acerca del principio de Boltzmann, en 1901: «En mi opinión esta estipulación [principio de Boltzmann] en el fondo viene a ser lo mismo que una definición de la probabilidad, denominada W; no poseemos en los supuestos en que se fundamenta la teoría electromagnética de la radiación ningún indicio para hablar de semejante probabilidad en un sentido determinado» Sobre la ley de distribución de energía en el espectro normal. Annalen der Physik. 1901. 4, 553-563
QC-6	1887	HEINRICH HERTZ	No sustenta la teoría cuántica pero da origen a las demás observaciones y experimentos, que a partir de la comprobación de la teoría de Maxwell se comprueba.
QC-7	1888	WILHELM HALLWACHS	No da explicación al efecto fotoeléctrico pero da la descripción correcta como la emisión de carga eléctrica de un cuerpo metálico cargado negativamente cuando incide una radiación electromagnética.

QC-8	1893	WILHELM WIEN	Explica la radiación de un cuerpo negro a frecuencias altas.
QC-9	1899	LORD RAYLEIGH Y JAMES JEANS	Explica la radiación de un cuerpo negro a frecuencias bajas.
QC-10	1900	MAX PLANCK	En 1900, el físico alemán Max Planck calculó la distribución observada de la energía de radiación en los cuerpos negros basada en la suposición de que los átomos oscilantes en las paredes del cuerpo negro no emiten radiación a todas las energías, sólo a valores altamente prescritos. Esta suposición conduce a una expresión muy diferente y correcta para la distribución de la energía de radiación en un cuerpo negro. La suposición de Planck se basaba en una teoría sobre las propiedades de las oscilaciones atómicas, no sobre la verdadera naturaleza de la luz. Al resolver otro rompecabezas sobre la radiación electromagnética, Einstein se dio cuenta de que la luz misma estaba cuantizada.
QC-11	1922	MAX PLANCK	El primer avance en este campo fue hecho por Einstein, quien por un lado señaló que la introducción de los cuantos de energía asociados con el cuanto de las acciones parecía capaz de explicar fácilmente una serie de propiedades notables de la acción de la luz descubiertas experimentalmente, La regla de Stoke es la emisión de electrones y la ionización de los gases y, por otra parte, por la identificación de la expresión de la energía de un sistema de resonadores con la energía de un cuerpo sólido, derivó una fórmula para el calor específico de cuerpos sólidos que, en general, lo representaban correctamente como función de la temperatura, y más especialmente exhibían su defunción con la caída de la temperatura. Por lo tanto, una serie de preguntas se lanzaron en diferentes direcciones, de las cuales las investigaciones precisas y multifacéticas produjeron a lo largo del tiempo mucho

			material valioso. Hoy no es mi intención dar un informe casi completo sobre el éxito del trabajo realizado en este campo; Basta con dar la más importante y característica fase del progreso de la nueva doctrina.
QC-12	1932	MAX PLANCK	"La ciencia exige también el espíritu creyente. Cualquiera que haya estado seriamente comprometido en trabajos científicos de cualquier tipo se da cuenta de que sobre la entrada a las puertas del templo de la ciencia están escritas las palabras: debes tener fe. Es una cualidad que los científicos no pueden prescindir."
QC-13	1905	ALBERT EINSTEIN	Si la energía está cuantificada, los niveles de energía permitidos se llaman estados cuánticos y el numero entero n se denomina número cuántico. Einstein mostró que las propiedades del efecto fotoeléctrico sólo podían explicarse si la luz se comportaba en él como un enjambre de partículas, con propiedades de energía idénticas a las imaginadas por Planck en su explicación de la radiación del cuerpo negro cinco años antes.
QC-14	1911	ERNEST RUTHERFORD	A partir del experimento de bombardear la lámina de oro con partículas alfa (núcleos de helio), propone que la carga positiva del átomo concentrada en el núcleo, una corteza negativa donde se encuentran los electrones rondando alrededor del núcleo y un espacio vacío.
QC-15	1914	ERNEST RUTHERFORD	Éste modelo atómico no se puede explicar a partir de la física clásica, por lo tanto en su momento fue sin fundamento, aunque es el inicio del modelo atómico de Bohr, debido a su estructura.
QC-16	1912	L. HUGUES, O. W. RICHARDSON y K. T. COMPTON	Aportan y sustentan más la ecuación fotoeléctrica de Einstein.

QC-17	1913	NIELS BOHR	El radio de los orbitales de energía nace a partir de esta teoría atómica, se puede inferir que n, como número cuántico, soportará parte de lo que se denominará densidad electrónica y los orbitales tanto atómicos como moleculares. Con el fin de explicar los resultados de los experimentos sobre la dispersión de los rayos por materia, el Prof. Rutherford ha dado una teoría de la estructura de los átomos. De acuerdo con esta teoría, los átomos consisten en un núcleo cargado positivamente rodeado por un sistema de electrones mantenidos juntos por fuerzas atractivas del núcleo; La carga negativa total de los electrones es igual a la carga positiva del núcleo. Además, se supone que el núcleo es el asiento de la parte esencial de la masa del átomo y que tiene dimensiones lineales extremadamente pequeñas en comparación con las dimensiones lineales de todo el átomo. El número de electrones en un átomo se deduce para ser aproximadamente igual a la mitad del peso atómico. Se debe atribuir gran interés a este modelo atómico; Pues, como lo ha demostrado Rutherford, la asunción de la existencia de núcleos, como los en cuestión, parece ser necesaria para dar cuenta de los resultados de los experimentos sobre la dispersión de ángulos grandes de los rayos alfa. Vemos que la única diferencia en la fórmula y aquellos que sostienen el movimiento de un solo electrón en una órbita circular alrededor de un núcleo es el intercambio de E por $E - E_{sn}$. También se ve inmediatamente que, correspondiente al movimiento de un electrón en una órbita elíptica alrededor de un núcleo, habrá un movimiento de los n electrones en los que cada uno gira en una órbita elíptica con el núcleo en el foco y los n electrones en
-------	------	------------	---

			cualquier momento están situados a intervalos angulares iguales en un círculo con el núcleo como centro.
QC-18	1916	ROBERT ANDREWS MILLIKAN	Millikan demostró que hay una cantidad de carga eléctrica que es la más pequeña posible. Ello indica que la carga eléctrica no es continua sino que está constituida por partículas -las partículas que hoy se conocen como electrones- que portan, todas ellas, la misma carga.
QC-19	1924	LOUIS DE BROGLIE	En su trabajo, "Investigaciones sobre la teoría cuántica", Broglie trabaja con el electrón como si fuera onda, lo cual demostró por primera vez la dualidad onda corpúsculo, característico de la mecánica cuántica.
QC-20	1925	WERNER KARL HEISENBERG	Esto permitió más adelante la facilidad en el cálculo computacional.
QC-21	1926	ERWIN SCHRÖDINGER	Introduce el concepto de área de probabilidad como orbital atómico; la ecuación de Schrödinger permite el tratamiento matemático y probabilístico dentro de la mecánica cuántica.
QC-22	1927	WERNER KARL HEISENBERG	El principio de incertidumbre propuesto por Heisenberg en 1927 reveló que no podemos determinar tanto la posición como el momento de una partícula simultáneamente en escala microscópica al afirmar que "cuanto más precisamente se determine la posición, menos se conoce el momento, y había anulado la visión mundial determinista basada en la mecánica newtoniana. Usando el famoso experimento de pensamiento del microscopio de rayos- γ Heisenberg derivó la relación.
QC-23	1927	WALTER HEITLER Y FRITZ LONDON	Generan y desarrollan la teoría general del enlace valencia, en donde los enlaces son localizados y los electrones más lejanos son los enlazantes.

QC-24	1927	MAX BORN Y ROBERT OPPENHEIMER	Al ser la masa del núcleo mucho mayor que la de los electrones, su velocidad es correspondientemente pequeña. De esta forma, el núcleo experimenta a los electrones como si estos fueran una nube de carga, mientras que los electrones sienten a los núcleos como si estos estuvieran estáticos. De esta forma, los electrones se adaptan 'instantáneamente' a cualquier posición de los núcleos. Sin este desacoplamiento, resulta prácticamente imposible el trabajo en física molecular o física del estado sólido, por ser irresolubles problemas de más de dos cuerpos.
QC-25	1927 -1930	D.R. HARTREE, V.A. FOCK y J.C. SLATER	La teoría de Hartree-Fock fue desarrollada para resolver la ecuación electrónica de Schrodinger que resulta de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo después de invocar la aproximación de Born-Oppenheimer.
QC-26	1928	DIRAC	La electrodinámica cuántica fue a la larga tremendamente exitosa, por la capacidad predictiva que demostró en cuanto a fenómenos que fueron observados y medidos experimentalmente con un asombroso acuerdo con la teoría. A partir de cálculos matemáticos exhaustivos.
QC-27	1931	ERICH HÜCKEL	Permite ilustrar orden de enlace, densidades electrónicas y energía de orbitales, y luego se evalúa los parámetros vía experimental, por tal motivo es un método semiempírico.
QC-28	1930- 1932	JOHN CLARKE SLATER y LINUS PAULING	Hicieron una aplicación matemática para determinar los tipos de orbitales, sp, sp ² , sp ³ , dsp ² y d ² sp ³ , para demostrar que un átomo forma enlaces por solapamiento de orbitales atómicos híbridos, como combinación lineal de los orbitales atómicos.

QC-29	1929 - 1932	FRIEDRICH HUND, ROBERT MULLIKEN y HERZBERG	Aplicación de la función de Schrödinger, para determinar los orbitales moleculares. Aunque no era fácil, a nivel de computadores, tener alguna representación visual de los mismos. A partir de este se pueden hacer cálculos ab initio
QC-30	1946	ALLINGER	Allinger desarrolló un código informático y utilizó ordenadores para optimizar la estructura de moléculas, mediante el uso de potenciales empíricos clásicos, en una serie de métodos de mecánica molecular denominados MM1, MM2, etc.
QC-31	1951	CLEMENS C.J. ROOTHAAN	Estos cálculos se realizaron con la ayuda de tablas de integrales que se calculaban con los ordenadores más avanzados de la época. Los posteriores avances de la informática facilitarían la resolución y representación de las complicadas ecuaciones de onda resultantes.
QC-32	1953- 1965	ROBERT PARR DUPONT RUDOLPH PARISER JHON POPL	Este enfoque fue desarrollado en la década de 1950 por Rudolph Pariser con Robert Parr y co-desarrollado por John Pople. Es esencialmente un método más eficiente para encontrar aproximaciones razonables de los orbitales moleculares, útil para predecir la naturaleza física y química de la molécula en estudio, ya que las características orbitales moleculares tienen implicaciones con respecto, tanto a la estructura básica como a la reactividad de una molécula.
QC-33	1965	ROBERT BURNS WOODWARD Y ROALD HOFFMANN	Aportan nuevas reglas para aplicar en los diferentes modelos moleculares.
QC-34	1960- 1961	FOSTER Y BOYS HERZBERG	Da inicio a los cálculos ab initio.

QC-35	1968	WALTER KOHN	Kohn ha demostrado que no es necesario considerar el movimiento individual de cada electrón y que es suficiente conocer el porcentaje de electrones localizados en un punto del espacio. Esto ha conducido a un método computacional más simple: La teoría de la función densidad, la cual ha hecho posible el estudio de grandes moléculas y ha servido, por ejemplo, para explicar cómo transcurren las reacciones enzimáticas.
QC-36	1970	JHON POPL	JHON POPL Desarrolló el primer programa de cálculo llamado Gaussian-70, y estuvo a disposición de la comunidad científica los primeros años de la década de los 70.
QC-37	1973-2013	MARTIN KARPLUS, MICHAEL LEVITT Y ARIEH WARSHEL	Se basaron en: Planck en 1918, Bohr en 1922, Prince de Broglie en 1929, Heisenberg en 1932, y Schrödinger y Dirac en 1933, para desarrollar modelos multiescala de sistemas químicos complejos en ordenadores.
QC-38	1994	BOLCER, J. y HERMANN, R.	En la década de los 50, se comienza a utilizar los computadores para la realización de cálculos matemáticos de mayor complejidad.
QC-39	2003	CJUNTO, J. y ARROYO, J,	La química teórica es parte primordial de la estructura de la química computacional, los cálculos que demandan tratamientos más complejos, se realizan por medio de los computadores, y los programas permiten manipular, las variables y factores dentro de las diferentes interacciones moleculares.
QC-40	2005	CLEMENTI, E.	El uso de los computadores en la educación, permiten que los estudiantes se acerquen de otra forma a las ciencias, utilizando las nuevas tecnologías de la información. Es necesario hacer un trabajo elaborado, bajo determinados parámetros, para poder potenciar el uso de esas nuevas tecnologías en la enseñanza y aprendizaje de las ciencias, no simplemente el uso por la respuesta que pueda generar. En este caso, para la química computacional, no es simplemente los resultados que arrojen un programa, sino el trasfondo que conlleva a

			esos resultados, cuál es la teoría que sustenta el hecho que de uno u otro resultado, en la simulación o modelaje, por qué puede o no dar una molécula, cuáles pueden ser las causas de su interacción, etc.
QC-41	1988	DÍAZ, L. y PÉREZ, R.	En este trabajo se diseña e implementa un software para realizar prácticas de estequiometría, lo que permite que el estudiante dentro de su proceso de aprendizaje, y debido a la interacción con el software, comprenda y relacione, por medio de esta herramienta, lo que aprende en cuanto a estequiometría.
QC-42	2009	PALOMARES, A.	El diseño y la implementación de programas por resolución de problemas, le permite al estudiante, la selección de posibles respuestas. Aunque el uso del computador como herramienta, genere otro ambiente educativo, se hace necesario que la ciencia, en este caso la química, forme parte de la estructura conceptual del programa, más que una simple selección de respuestas.

Estos fueron los aportes relevantes dentro de los textos tenidos en cuenta en la investigación documental, y luego de un análisis exhaustivo, se elaboró el documento final que da cuenta sustenta la finalidad de este trabajo (Anexo 2).

7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Apoyados en los resultados de la revisión documental realizada, se puede sostener que:

- Los fundamentos históricos que conforman la estructura discursiva de la química computacional como disciplina, surgen de los análisis de las publicaciones realizadas por científicos que sometieron a consideración sus tesis que pretendían dar cuenta de la estructura submicroscópica de los materiales de la naturaleza, punto de partida de las llamadas química y física teóricas.
- La información concerniente a la química computacional, reportada en los documentos trabajados, es específica de la física o la química, y de aplicaciones de software.
- La información histórico relacionada con la química computacional se posibilita su análisis si para ello se tiene en cuenta categorías como las propuestas en este trabajo: las propias surgidas de la química, la física y otras ciencias relacionadas con estos intereses, la relacionada con los desarrollos de la tecnología computacional y de los traslapes entre ambos campos de conocimiento a que se vieron enfrentados los científicos para desarrollo de su actividad investigativa y propuestas de solución a los problemas que tuvieron que enfrentar.
- Los libros introductorios y básicos de química computacional, establecen las bases que son necesarias para profundizar en esta disciplina y obligan a su estudio por parte de quienes se interesan por estos conocimientos de la estructura íntima de los materiales de la naturaleza.
- Se logró establecer hechos trascendentes que aportan lo histórico, a la emergencia de la de la química computacional y constituir un punto de partida hacia la construcción de un discurso en esta disciplina.
- El documento elaborado, da cuenta de los aportes que dan origen a la química computacional,
- La química computacional, como asignatura, dentro del currículo del Departamento de Química, de la Universidad Pedagógica Nacional, debe tener como requisito un fundamento teórico en cuanto a la mecánica cuántica, para que desde y con el computador se realicen sustentos teóricos en química y otro desde la didáctica de las ciencias que incorpore las tecnologías en el desarrollo de modelos para la comprensión de principios teóricos.

8. BIBLIOGRAFÍA

- Adúriz-Bravo, A. e Izquierdo, M. (2002). Acerca de la didáctica de las ciencias como disciplina autónoma. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, 1(3),130 –140. Recuperado de <http://reec.uvigo.es>
- Ander-Egg, E. (1998). *Técnicas de investigación social*. México: El Ateneo.
- Ander-Egg, E. (2011). Aprender a Investigar. Nociones básicas para la investigación social. Córdoba, Argentina: Editorial Brujas.
- Arévalo, N. (1988). *Diseño, desarrollo y aplicación de un software educativo, para la enseñanza de la unidad enlace químico en el grado décimo de educación media vocacional* (tesis de grado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
- Avila, H. (2006). *Introducción a la metodología de la investigación*. Edición electrónica. Recuperado de <http://www.eumed.net/libros-gratis/2006c/203/#indice>
- Beltrán, L. (1989). *Software de ejercitación y práctica para balancear reacciones químicas de óxido-reducción por el método de cambio en el número de oxidación para décimo grado de educación media vocacional* (tesis de grado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
- Berrocoso, J., Fernández, M. y Garrido, M. (2015). El pensamiento computacional y las nuevas ecologías del aprendizaje. *Revista de Educación a Distancia*, 45. 1-18.
- Bolcer, J. y Hermann, R. (1994). The development of computational chemistry in the United States. *Reviews in computational chemistry*, 5.
- Bohr, N. (1913). On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine, Series 6*, 26, 1 – 25.
- Castro, S., Guzmán, B. y Casado, D. (2007). Las TIC en los procesos de enseñanza y aprendizaje. *Laurus, Revista de Educación*. 13(23). 213 – 234.
- Chigo, E. (2004). La Simulación computacional en química y física. *E-Gnosis*, 2(15). Recuperado de <http://www.redalyc.org>
- Cjunto, J. y Arroyo, J. (2003). La química teórica y la química cuántica computacional. *Boletín CSI*, 48, 16 – 19. Recuperado de <http://sisbib.unmsm.edu.pe/BibVirtual/Publicaciones/consejo/rconsejo.htm>

- Clementi, E. (2005). Computational chemistry: attempting to simulate large molecular systems. *Theory and applications of computational chemistry: The first forty years*, 6. 111 – 114.
- Contreras, C., Chávez, M., Fuentes, M., Olivas, R., Rodríguez, L. y Valdez, A. (2008). De la alquimia computacional a la química computacional. *Synthesis*, 45, 1-7. Recuperado de http://www.uach.mx/extension_y_difusion/synthesis/
- Cuevas, G. (2005). Química computacional. *Revista Ciencia*, 56, 2, 33 – 42. Recuperado de <http://revistaciencia.amc.edu.mx/index.php/ediciones-antteriores?id=61>
- Einstein, A. (1911). Contribution to the 1911 Solvay Conference, *The collected papers of A. Einstein*, 3(26).
- Escobar, J. (2011). *Diseño de un material educativo computacional (MEC) para la enseñanza de los fenómenos de adsorción mediante la síntesis y caracterización del material mesoporoso SBA-15* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
- Ferreira, V. (1998). As Tecnologias interativas no ensino. *Química Nova*, 21(6), 780-786.
- Foresman, J. y Frisch, A. (1995). *Exploring chemistry with electronic structure methods*. Pittsburgh, United States: Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA
- Gallego, R., Gallego, A., y Pérez, R. (2002). Historia de la didáctica de las ciencias: un campo de investigación. *Tecné, episteme y didaxis: Revista de la Facultad de Ciencia y Tecnología*, 12, 125 – 133. Recuperado de <http://revistas.pedagogica.edu.co/index.php/TED/index>
- Gallego, R. (2004). Un concepto epistemológico de modelo para la didáctica de las ciencias experimentales. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, 3(3), 301 – 309. Recuperado de <http://reec.uvigo.es>
- Gil, D., Carrascosa, J. y Martínez, F. (1999). El surgimiento de la didáctica de las ciencias como campo específico de conocimientos. *Revista educación y pedagogía*, 11(25). 15-65.
- Giordan, M. y Gois, J. (2009). Entornos virtuales de aprendizaje en química: una revisión de la literatura. *Educación química*, Julio. 301 – 313.
- Grisolía, M. y Grisolía, C. (2009). Integración de elementos didácticos y del diseño en el software educativo hipermedial “Estequiometría. Contando masas, moles y partículas”. *Revista electrónica de enseñanza de las ciencias*, 8(2). 440-465.

- Hacking, I. (1996). *Representar e intervenir*. Ciudad Universitaria, México: Editorial Paidós Mexicana, S.A.
- Heisenberg, W. (1925). Über quantentheoretische umdeutung kinematischer und mechanischer beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, 33, 879-893. English translation in: B. L. van der Waerden, editor, *Sources of Quantum Mechanics* (Dover Publications, 1968) (English title: "Quantum-Theoretical Re-interpretation of Kinematic and Mechanical Relations").
- Hopfinger, A. (1985). Computer-assisted drug design. *Journal of medical chemistry*. 28(9). 1133-9
- Jensen, F. (2007). *Introduction to computational chemistry*. West Sussex, England: John Wiley & Sons Ltd.
- Kuhn, T. (1972). *The structure of scientific*. United States of America: University of Chicago Press.
- Lakatos, I. (1983). *La metodología de los programas de investigación científica*. Madrid, España: Editorial Alianza.
- Leiva, E. y Estrín, D. (2011). Química computacional. Simulaciones matemáticas del comportamiento de átomos y moléculas. *Ciencia hoy*, 21(124). 46-50.
- Levine, I. (2001). *Química cuántica. 5a Edición*. New York, United States: Prentice Hall.
- Lipkowitz, K, y Boyd, D, (1990). *Reviews in computational chemistry*. New York, United States: Wiley-vch.
- López, T. (2017) La química computacional, en apoyo de las energías limpias. *Academia, Gaceta UNAM, Mayo*. 6
- Mó, O y Yáñez, M. (2011). La química computacional en la nueva frontera. *ARBOR Ciencia, pensamiento y cultura*, 187. 143 – 155.
- Palomares, A. (2009). *Desarrollo de competencias científicas, mediante el diseño e implementación de material educativo computacional (MEC) de corte heurístico, enmarcado en una estrategia de aprendizaje por resolución de problemas* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
- Papert, S. (1981). *Desafío a la mente. Computadoras y educación*. Buenos Aires, Argentina: Fernández Long y Reggini S.A.
- Pauli, W. (1925). On the conexión between the completion of electron groups in an atom with the complex structure of spectra. *Z. Physik*, 31. 765

- Penagos, O. (2009). *Diseño y evaluación de un juego educativo computacional con aplicaciones múltiples para evaluar el aprendizaje de relaciones estequiométricas* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia. Recuperado de <http://www.fce.unal.edu.co/cuadernos>
- Planck, M, (1914). *Vorlesungen über die Theorie der Wärmestrahlung*. Leipzig, German: J. A. Barth.
- Popper, K. (1962). *La lógica de la investigación científica*. Madrid, España: Tecnos Editorial S.A.
- Pople, J. (1998). Quantum chemical models. *Nobel lectura*.
- Redman, D. (1995). La teoría de la ciencia de Karl Popper: Auge y caída de la ingeniería social. *Revista Cuadernos de Economía*. 14(23), 118 – 149.
- Reggini, H. (1988). *Computadoras: ¿Creatividad o automatismo?*. Buenos Aires, Argentina: Ediciones Galápagos.
- Ribeiro, A. y Greca, I. (2003). Simulações computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma revisão de literatura publicada. *Química Nova*, 26 (4), 542-549. Recuperado de <http://quimicanova.sbq.org.br>
- Rodríguez, M. (2013). *Acerca de la investigación bibliográfica y documental*. Recuperado de <https://guiadetesis.wordpress.com>
- Rutherford, E. (1914). The structure of the atom. *Philosophical Magazine, Series* 6, 27, 488-498.
- Sanabria, M. y Moreno, G (2005). *Una estrategia para el aprendizaje significativo de los conceptos ácidos base centrada en un software didáctico* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
- Sánchez, G. (2014). *La química computacional y la reacción química, un enfoque para la construcción de un modelo semántico predictivo* (tesis de postgrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
- Schrödinger, E. (1926). An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *The physical review*, 28(6), 1049-1070.
- Schreiner, P, (1998). The concept. *Encyclopedia of computational chemistry*, 1.
- Thomson, J. (1904). On the structure of the atom. *Philosophical Magazine, Series* 6, 7(39), 237 – 265.
- Uhlenbeck, G. y Goudsmit, S. (1925). *Naturwissenschaften*, 13. 953.

Valles-Sánchez, A., Rosales-Marines, L. Serrato-Villegar, L. y Farías-Cepeda, L. (2014). Métodos y usos de la química computacional. *Revista científica de la Universidad Autónoma de Coahuila*, 6(11). 16 – 21. Recuperado de <http://www.posgradoeinvestigacion.uadec.mx/>

Young, D. (2001). *Computational chemistry. A practical guide for applying techniques to real-world problems*. New York, United States: John Wiley & Sons, Inc.

9. ANEXOS

Anexo 1. Fichas bibliográficas

CÓDIGO	QC-1
AUTOR O AUTORES	JOSEPH LOUIS PROUST
AÑO	1794
OBRA	Investigaciones sobre el Azul de Prusia (1794-98)
APORTE	Postula experimentalmente, la ley de las proporciones definidas
BIBLIOGRAFÍA	Proust, J. (1795). Anales del Real Laboratorio de química de Segovia, o Colección de memorias sobre las artes, la artillería, la historia natural de España y Américas, la docimástica de sus minas, &c. Tomo I (1791) y II (1795). Segovia, España. En la oficina de Don Antonio Espinosa.
CÓDIGO	QC-2
AUTOR O AUTORES	JOHN DALTON
AÑO	1808
OBRA	A New System of Chemical Philosophy
APORTE	Determina que la materia está conformada por partículas indivisibles llamada átomo, a partir de comparaciones matemáticas de unión de sustancias. En este momento establece la Ley de las proporciones definidas.
BIBLIOGRAFÍA	Dalton, J. (1808). A new system of philosophy chemistry. Printed by S. Russell. London, England.
CÓDIGO	QC-3
AUTOR O AUTORES	JAMES CLERK MAXWELL
AÑO	1864
OBRA	A Dynamical Theory of electromagnetic field
APORTE	Cambia la concepción determinística de la física por estadística y probabilidad
BIBLIOGRAFÍA	Niven, W. (1965). A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field. A Royal Society Transactions, Vol.CLV. The scientific papers of James Clerk Maxwell. Vol 1. Dover Publications, Inc., New York. 1965
CÓDIGO	QC-4
AUTOR O AUTORES	JAMES CLERK MAXWELL
AÑO	1873
OBRA	Molecules. A Lecture delivered before the British Association at Bratford.
APORTE	apoya el hecho de que la materia es un objeto de estudio, del cual hay mucho por descubrir
BIBLIOGRAFÍA	Niven, W. (1965). Molecule. Nature, Vol. 8. The scientific papers of James Clerk Maxwell. Vol 2. Dover Publications, Inc., New York. 1965

CÓDIGO	QC-5
AUTOR O AUTORES	LWUING BOLTZMANN
AÑO	1877
OBRA	0
APORTE	Planck incluye otras reflexiones acerca del principio de Boltzmann, en 1901: «En mi opinión esta estipulación [principio de Boltzmann] en el fondo viene a ser lo mismo que una definición de la probabilidad, denominada W; no poseemos en los supuestos en que se fundamenta la teoría electromagnética de la radiación ningún indicio para hablar de semejante probabilidad en un sentido determinado» Sobre la ley de distribución de energía en el espectro normal. Annalen der Physik. 1901. 4, 553-563
BIBLIOGRAFÍA	Navarro, L. y Pérez, E. (2002). Principio de Boltzmann y primeras ideas cuánticas de Einstein. Dynamis: Acta Hispanica ad Medicinæ Scientiarumque Historiam Illustrandam, 22. 377 - 410.
CÓDIGO	QC-6
AUTOR O AUTORES	HEINRICH HERTZ
AÑO	1887
OBRA	0
APORTE	No sustenta la teoría cuántica pero da origen a las demás observaciones y experimentos, que a partir de la teoría de Maxwell se comprueba.
BIBLIOGRAFÍA	Piris, M. (1999). Física cuántica. La Habana, Cuba: Editorial ISCTN
CÓDIGO	QC-7
AUTOR O AUTORES	WILHELM HALLWACHS
AÑO	1888
OBRA	Multielement detection systems for spectrochemical analysis
APORTE	No da explicación al efecto fotoeléctrico pero da la descripción correcta como la emisión de carga eléctrica de un cuerpo metálico cargado negativamente cuando incide una radiación electromagnética.
BIBLIOGRAFÍA	Busch, K. y Busch, M. (1990). Multielement detection systems for spectrochemical analysis. New York, United States: Wiley.
CÓDIGO	QC-8
AUTOR O AUTORES	WILHELM WIEN
AÑO	1893
OBRA	0
APORTE	Explica la radiación de un cuerpo negro a frecuencias altas.
BIBLIOGRAFÍA	Planck, M. (1922). The origin and development of the quantum theory. United States: Oxford University Press.
CÓDIGO	QC-9
AUTOR O AUTORES	LORD RAYLEIGH Y JAMES JEANS
AÑO	1899

OBRA	0
APORTE	Explica el la radiación de un cuerpo negro a frecuencias bajas.
BIBLIOGRAFÍA	Planck, M. (1922). The origin and development of the quantum theory. United States: Oxford University Press.
CÓDIGO	QC-10
AUTOR O AUTORES	MAX PLANCK
AÑO	1900
OBRA	Sobre la ley de distribución de la energía en el espectro normal
APORTE	En 1900, el físico alemán Max Planck calculó la distribución observada de la energía de radiación en los cuerpos negros basada en la suposición de que los átomos oscilantes en las paredes del cuerpo negro no emiten radiación a todas las energías, sólo a valores altamente prescritos. Esta suposición conduce a una expresión muy diferente y correcta para la distribución de la energía de radiación en un cuerpo negro. La suposición de Planck se basaba en una teoría sobre las propiedades de las oscilaciones atómicas, no sobre la verdadera naturaleza de la luz. Al resolver otro rompecabezas sobre la radiación electromagnética, Einstein se dio cuenta de que la luz misma estaba cuantizada.
BIBLIOGRAFÍA	Planck, M. (1901). On the Law of Distribution of Energy in the Normal Spectrum. Annalen der Physik, 4.
CÓDIGO	QC-11
AUTOR O AUTORES	MAX PLANCK
AÑO	1922
OBRA	The Origin and Development of the Quantum Theory
APORTE	El primer avance en este campo fue hecho por Einstein, quien por un lado señaló que la introducción de los cuantos de energía asociados con el cuánto de las acciones parecía capaz de explicar fácilmente una serie de propiedades notables de la acción de la luz descubiertas experimentalmente, La regla de Stoke es la emisión de electrones y la ionización de los gases y, por otra parte, por la identificación de la expresión de la energía de un sistema de resonadores con la energía de un cuerpo sólido, derivó una fórmula para el calor específico de cuerpos sólidos que, en general, lo representaban correctamente como función de la temperatura, y más especialmente exhibían su defunción con la caída de la temperatura. Por lo tanto, una serie de preguntas se lanzaron en diferentes direcciones, de las cuales las investigaciones precisas y multifacéticas produjeron a lo largo del tiempo mucho material valioso.
BIBLIOGRAFÍA	Planck, M. (1922). The origin and development of the quantum theory. United States: Oxford University Press.
CÓDIGO	QC-12
AUTOR O AUTORES	MAX PLANCK
AÑO	1932
OBRA	Where is science going?
APORTE	"la ciencia exige también el espíritu creyente. Cualquiera que haya estado seriamente comprometido en trabajos científicos de cualquier

	tipo se da cuenta de que sobre la entrada a las puertas del templo de la ciencia están escritas las palabras: debes tener fe. Es una cualidad que los científicos no pueden prescindir."
BIBLIOGRAFÍA	Planck, M. (1932). Where is science going?. New York, United States: Norton & Company, Inc. Publishers.
CÓDIGO	QC-13
AUTOR O AUTORES	ALBERT EINSTEIN
AÑO	1905
OBRA	Concerning an heuristic point of view toward the emission and transformation of light
APORTE	Si la energía está cuantificada, los niveles de energía permitidos se llaman estados cuánticos y el numero entero n se denomina número cuántico. Einstein mostró que las propiedades del efecto fotoeléctrico sólo podían explicarse si la luz se comportaba en él como un enjambre de partículas, con propiedades de energía idénticas a las imaginadas por Planck en su explicación de la radiación del cuerpo negro cinco años antes
BIBLIOGRAFÍA	Einstein, A. (1905). Concerning an heuristic point of view toward the emission and transformation of light. Annales der Physik, 17. 132 - 148
CÓDIGO	QC-14
AUTOR O AUTORES	ERNEST RUTHERFORD
AÑO	1911
OBRA	The scattering of A and B particles by matter and the structure of the atom.
APORTE	Éste modelo atómico no se puede explicar a partir de la física clásica, por lo tanto en su momento fue sin fundamento, aunque es el inicio del modelo atómico de Bohr, debido a su estructura.
BIBLIOGRAFÍA	Einstein, A. (1905). Concerning an heuristic point of view toward the emission and transformation of light. Annales der Physik, 17. 132 - 148
CÓDIGO	QC-15
AUTOR O AUTORES	ERNEST RUTHERFORD
AÑO	1914
OBRA	The structure of the atom
APORTE	Éste modelo atómico no se puede explicar a partir de la física clásica, por lo tanto en su momento fue sin fundamento, aunque es el inicio del modelo atómico de Bohr, debido a su estructura.
BIBLIOGRAFÍA	Rutherford, E. (1914). The structure of the atom. Philosophical Magazine, 6(27). 488 - 498.
CÓDIGO	QC-16
AUTOR O AUTORES	L. HUGUES, O. W. RICHARDSON y K. T. COMPTON
AÑO	1912
OBRA	0

APORTE	Aportan y sustentan mas la ecuación fotoeléctrica de Einstein.
BIBLIOGRAFÍA	DuBridge, L. (1933). Theory of the Energy Distribution of Photoelectrons. Physical Review, 43. 727 - 741
CÓDIGO	QC-17
AUTOR O AUTORES	NIELS BOHR
AÑO	1913
OBRA	On the constitution of atoms and molecules
APORTE	El radio de los orbitales de energía nace a partir de esta teoría atómica, se puede inferir que n, como número cuántico, soportará parte de lo que se denominará densidad electrónica y los orbitales tanto atómicos como moleculares.
BIBLIOGRAFÍA	Bohr, N. (1913). On the Constitution of Atoms and Molecules. Philosophical Magazine, 6(26). 1 - 25.
CÓDIGO	QC-18
AUTOR O AUTORES	ROBERT ANDREWS MILLIKAN
AÑO	1913
OBRA	On the elementary electrical charge and the Avogadro constant
APORTE	Millikan demostró que hay una cantidad de carga eléctrica que es la más pequeña posible. Ello indica que la carga eléctrica no es continua sino que está constituida por partículas -las partículas que hoy se conocen como electrones- que portan, todas ellas, la misma carga.
BIBLIOGRAFÍA	Millikan, R. (1913). On the elementary electrical charge and the Avogadro constant. The Physical review. 2,(2). 109 - 143.
CÓDIGO	QC-19
AUTOR O AUTORES	LOUIS DE BROGLIE
AÑO	1924
OBRA	Recherches sur la Theorie des quanta
APORTE	En su trabajo, "investigaciones sobre la teoría cuántica", Broglie trabaja con el electrón como si fuera onda, lo cual demostró por primera vez la dualidad onda corpúsculo, característico de la mecánica cuántica.
BIBLIOGRAFÍA	De Broglie, L. (1925). Recherches sur la Theorie des quanta. Annales der Physik, 10(III).
CÓDIGO	QC-20
AUTOR O AUTORES	WERNER KARL HEISENBERG
AÑO	1925
OBRA	Quantum-theoretical re-interpretation of kinematic and mechanical relations
APORTE	Esto permitió más adelante la facilidad en el cálculo computacional. Mecánica matricial.
BIBLIOGRAFÍA	Heisenberg, W. (1925). Quantum-theoretical re-interpretation of kinematic and mechanical relations. (A translation of: Anonymous). Zeitschrift für Physik, 33. 879–893

CÓDIGO	QC-21
AUTOR O AUTORES	ERWIN SCHRÖDINGER
AÑO	1926
OBRA	0
APORTE	Introduce el concepto de área de probabilidad como orbital atómico; la ecuación de Schrödinger permite el tratamiento matemático y probabilístico dentro de la mecánica cuántica.
BIBLIOGRAFÍA	Lopez, L., Porro, J. Torrónategui, E. y García, M. (2004). Cuántica y Relatividad. Teorías del todo. Leioa, España
CÓDIGO	QC-22
AUTOR O AUTORES	WERNER KARL HEISENBERG
AÑO	1927
OBRA	The actual content of wuantum theoretical kinematics and mechanics
APORTE	El principio de incertidumbre propuesto por Heisenberg en 1927 reveló que no podemos determinar tanto la posición como el momento de una partícula simultáneamente en escala microscópica al afirmar que "cuanto más precisamente se determine la posición, menos se conoce el momento y, y había anulado la visión mundial determinista basada en la mecánica newtoniana. Usando el famoso experimento de pensamiento del microscopio de rayos- γ Heisenberg derivó la relación
BIBLIOGRAFÍA	Heisenberg, W. (1927). The Actual content of wuantum theoretical kinematics and mechanics. (A translation of: NASA). Zeitschrift für Physik, 43(3-4). 172-198.
CÓDIGO	QC-23
AUTOR O AUTORES	WALTER HEITLER Y FRITZ LONDON
AÑO	1927
OBRA	Interaction between neutral atoms and homopolar binding according to quantum mechanics.
APORTE	Generan y desarrollan la teoría general del enlace valencia, en donde los enlaces son localizados y los electrones más lejanos son los enlazantes.
BIBLIOGRAFÍA	Heitler, W. y Londons, F. (1927). Interaction between neutral atoms and homopolar binding according to quantum mechanics. Zeitschrift für Physik, 44. 455—472
CÓDIGO	QC-24
AUTOR O AUTORES	MAX BORN Y ROBERT OPPENHEIMER
AÑO	1927
OBRA	On the Quantum Theory of Molecules

APORTE	Al ser la masa del núcleo mucho mayor que la de los electrones, su velocidad es correspondientemente pequeña. De esta forma, el núcleo experimenta a los electrones como si estos fueran una nube de carga, mientras que los electrones sienten a los núcleos como si estos estuvieran estáticos. De esta forma, los electrones se adaptan 'instantáneamente' a cualquier posición de los núcleos. Sin este desacoplamiento, resulta prácticamente imposible el trabajo en física molecular o física del estado sólido, por ser irresolubles problemas de más de dos cuerpos.
BIBLIOGRAFÍA	Born, M. y Oppenheimer, F. (1927). On the Quantum Theory of Molecules. Annalen der Physik, 84.
CÓDIGO	QC-25
AUTOR O AUTORES	D.R. HARTREE, V.A. FOCK y J.C. SLATER
AÑO	1927 -1930
OBRA	0
APORTE	La teoría de Hartree-Fock fue desarrollada para resolver la ecuación electrónica de Schrodinger que resulta hacer independiente el tiempo después de invocar la aproximación de Born-Oppenheimer.
BIBLIOGRAFÍA	Doddard, W. III. (1967). Improved wuantum theory of many-electron systems. Physical review, 157(1). 81 - 93.
CÓDIGO	QC-26
AUTOR O AUTORES	DIRAC
AÑO	1928
OBRA	The principles of quantum mechanics
APORTE	La electrodinámica cuántica fue a la larga tremendamente exitosa, por la capacidad predictiva que demostró en cuanto a fenómenos que fueron observados y medidos experimentalmente con un asombroso acuerdo con la teoría. A partir de cálculos matemáticos exhaustivos.
BIBLIOGRAFÍA	Dirac, P. (1930). The principles of quantum mechanics. Oxford, Great Britain.
CÓDIGO	QC-27
AUTOR O AUTORES	ERICH HÜCKEL
AÑO	1931
OBRA	0
APORTE	Permite ilustrar el orden de enlace, densidades electrónicas y energía de orbitales, y luego se evalúa los parámetros vía experimental, por tal motivo es un método semiempírico.
BIBLIOGRAFÍA	Karachalios, A. (2010). Erich Hückel (1896-1980), From physics to quantum chemistry. Boston Studies in the Philosophy of science, 283.
CÓDIGO	QC-28

AUTOR O AUTORES	JOHN CLARKE SLATER y LINUS PAULING
AÑO	1930-1932
OBRA	Molecular energy levels and valence bonds
APORTE	Aplicación matemática para determinar los tipos de orbitales, sp, sp ² , sp ³ , dsp ² y d ² sp ³ , para demostrar que un átomo forma enlaces por solapamiento de orbitales atómicos híbridos, como combinación lineal de los orbitales atómicos.
BIBLIOGRAFÍA	Slater, J. (1931). Molecular energy levels and valence bonds. Physical review. Vol 38. 1893-1969
CÓDIGO	QC-29
AUTOR O AUTORES	FRIEDRICH HUND, ROBERT MULLIKEN y HERZBERG
AÑO	1929 - 1932
OBRA	Nobel lecture: Spectroscopi, molecular orbitals, and chemical bonding
APORTE	Aplicación de función de Schrödinger, para determinar los orbitales moleculares. Aunque no era fácil, a nivel de computadores, tener alguna representación visual de los mismos. A partir de este se pueden hacer cálculos ab initio
BIBLIOGRAFÍA	Mulliken, R. (1966). Nobel lecture: Spectroscopi, molecular orbitals, and chemical bonding. Nobel lectures, Chemistry 1963 - 1970, Elsevier publishing Company, Amsterdam. 131-160
CÓDIGO	QC-30
AUTOR O AUTORES	ALLINGER
AÑO	1946
OBRA	0
APORTE	Allinger desarrolló un código informático y utilizó ordenadores para optimizar la estructura de moléculas, mediante el uso de potenciales empíricos clásicos, en una serie de métodos de mecánica molecular denominados MM1, MM2, etc.
BIBLIOGRAFÍA	Mayor, F. y Cascales, M. (2013). Premios nobel 2013. Comentarios a sus actividades y descubrimientos. Madrid, España: Anerbri, S.A.
CÓDIGO	QC-31
AUTOR O AUTORES	CLEMENS C.J. ROTHAAAN
AÑO	1951
OBRA	My Life as a Physicist : Memories and Perspectives
APORTE	Estos cálculos se realizaron con la ayuda de tablas de integrales que se calculaban con los ordenadores más avanzados de la época. Los posteriores avances de la informática facilitarían la resolución y representación de las complicadas ecuaciones de onda resultantes.
BIBLIOGRAFÍA	Roothaan, C. (1991). My Life as a Physicist: Memories and Perspectives. Journal of Molecular Spectroscopy, 234. 1-12.
CÓDIGO	QC-32
AUTOR O AUTORES	ROBERT PARR

	DUPONT RUDOLPH PARISER Y JHON POPLER
AÑO	1953-1965
OBRA	0
APORTE	Este enfoque fue desarrollado en la década de 1950 por Rudolph Pariser con Robert Parr y co-desarrollado por John Pople. Es esencialmente un método más eficiente para encontrar aproximaciones razonables de los orbitales moleculares, útil para predecir la naturaleza física y química de la molécula en estudio, ya que las características orbitales moleculares tienen implicaciones con respecto tanto a la estructura básica como a la reactividad de un molécula.
BIBLIOGRAFÍA	Duncan A. y Pople, J. (1952). The structure of some simple molecules with lone pair electrons. Transactions of the Faraday Society, 49.
CÓDIGO	QC-33
AUTOR O AUTORES	ROBERT BURNS WOODWARD Y ROALD HOFFMANN
AÑO	1965
OBRA	The conservation of orbital symmetry.
APORTE	Aportan nuevas reglas para aplicar en los diferentes modelos moleculares.
BIBLIOGRAFÍA	Hoffmann R. y Woodward, R. (1968). The conservation of orbital symmetry. Cambridge, Massachusetts: United States.
CÓDIGO	QC-34
AUTOR O AUTORES	FOSTER Y BOYS HERZBERG
AÑO	1960-1961
OBRA	0
APORTE	Da inicio a los cálculos ab initio.
BIBLIOGRAFÍA	Mó, O y Yáñez, M. (2011). La química computacional en la nueva frontera. Arbor, Ciencia, Pensamiento y Cultura, 187.
CÓDIGO	QC-35
AUTOR O AUTORES	WALTER KOHN
AÑO	1968
OBRA	0
APORTE	Kohn ha demostrado que no es necesario considerar el movimiento individual de cada electrón y que es suficiente conocer el porcentaje de electrones localizados en un punto del espacio. Esto ha conducido a un método computacional más simple: La teoría de la función densidad, la cual ha hecho posible el estudio de grandes moléculas y ha servido, por ejemplo, para explicar cómo transcurren las reacciones enzimáticas.
BIBLIOGRAFÍA	Mayor, F. y Cascales, M. (2013). Premios nobel 2013. Comentarios a sus actividades y descubrimientos. Madrid, España: Anerbri, S.A.

CÓDIGO	QC-36
AUTOR O AUTORES	JHON POPLE
AÑO	1970
OBRA	0
APORTE	JHON POPLE Desarrolló el primer programa de cálculo llamado Gaussian-70, y estuvo a disposición de la comunidad científica los primeros años de la década de los 70.
BIBLIOGRAFÍA	Mayor, F. y Cascales, M. (2013). Premios nobel 2013. Comentarios a sus actividades y descubrimientos. Madrid, España: Anerbri, S.A.
CÓDIGO	QC-37
AUTOR O AUTORES	MARTIN KARPLUS, MICHAEL LEVITT Y ARIEH WARSHAW
AÑO	1973-2013
OBRA	0
APORTE	Se basaron en :Planck en 1918, Bohr en 1922, Prince de Broglie en 1929, Heisenberg en 1932, y Schrödinger y Dirac en 1933
BIBLIOGRAFÍA	Mayor, F. y Cascales, M. (2013). Premios nobel 2013. Comentarios a sus actividades y descubrimientos. Madrid, España: Anerbri, S.A.
CÓDIGO	QC-38
AUTOR O AUTORES	BOLCER, J. y HERMANN, R.
AÑO	1994
OBRA	The development of computational chemistry in the United States.
APORTE	En la década de los 50, se comienza a utilizar los computadores para la realización de cálculos matemáticos de mayor complejidad.
BIBLIOGRAFÍA	Bolcer, J. y Hermann, R. (1994). The development of computational chemistry in the United States. Reviews in computational chemistry.
CÓDIGO	QC-39
AUTOR O AUTORES	CJUNTO, J. y ARROYO, J,
AÑO	2003
OBRA	La química teórica y la química cuántica computacional
APORTE	La química teórica es parte primordial de la estructura de la química computacional, los cálculos que demandan tratamientos más complejos, se realizan por medio de los computadores, y los programas permiten manipular, las variables y factores dentro de las diferentes interacciones moleculares.
BIBLIOGRAFÍA	Cjunto, J. y Arroyo, J. (2003). La química teórica y la química cuántica computacional. Boletín CSI.
CÓDIGO	QC-40
AUTOR O AUTORES	CLEMENTI, E.
AÑO	2005
OBRA	Computational chemistry: attempting to simulate large molecular

	systems. Theory and applications of computational chemistry: The first forty years.
APORTE	El uso de los computadores en la educación, permiten que los estudiantes se acerquen de otra forma a las ciencias, utilizando las nuevas tecnologías de la información. Es necesario hacer un trabajo elaborado, bajo determinados parámetros, para poder potenciar el uso de esas nuevas tecnologías en la enseñanza y aprendizaje de las ciencias, no simplemente el uso por la respuesta que pueda generar. En este caso, para la química computacional, no es simplemente los resultados que arrojen un programa, sino el trasfondo que conlleva a esos resultados, cuál es la teoría que sustenta el hecho que de uno u otro resultado, en la simulación o modelaje, por qué puede o no dar una molécula, cuáles pueden ser las causas de su interacción, etc.
BIBLIOGRAFÍA	Clementi, E. (2005). Computational chemistry: attempting to simulate large molecular systems. Theory and applications of computational chemistry: The first forty years.
CÓDIGO	QC-41
AUTOR O AUTORES	DÍAZ, L. y PÉREZ, R.
AÑO	1988
OBRA	Diseño e implementación de un software de práctica sobre estequiometria para estudiantes de educación media vocacional. (Tesis de especialización)
APORTE	En este trabajo se diseña e implementa un software para realizar prácticas de estequiometria, lo que permite que el estudiante dentro de su proceso de aprendizaje, y debido a la interacción con el software, comprenda y relacione, por medio de esta herramienta, lo que aprende en cuanto a estequiometria.
BIBLIOGRAFÍA	Díaz, L. y Pérez, R. (1988). Diseño e implementación de un software de práctica sobre estequiometria para estudiantes de educación media vocacional. (Tesis de especialización). Universidad Antonio Nariño, Bogotá, Colombia.
CÓDIGO	QC-42
AUTOR O AUTORES	PALOMARES, A.
AÑO	2009
OBRA	Desarrollo de competencias científicas, mediante el diseño e implementación de material educativo computacional (MEC) de corte heurístico, enmarcado en una estrategia de aprendizaje por resolución de problemas (tesis de pregrado).
APORTE	El diseño y la implementación de programas por resolución de problemas, le permite al estudiante, la selección de posibles respuestas. Aunque el uso del computador como herramienta, genere otro ambiente educativo, se hace necesario que la ciencia, en este caso la química, forme parte de la estructura conceptual del programa, más que una simple selección de respuestas.
BIBLIOGRAFÍA	Palomares, A. (2009). Desarrollo de competencias científicas, mediante el diseño e implementación de material educativo computacional (MEC) de corte heurístico, enmarcado en una estrategia de aprendizaje por resolución de problemas (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.

Anexo 2. Documento producto de la investigación

UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA DEPARTAMENTO DE QUÍMICA LICENCIATURA EN QUÍMICA

QUIMICA COMPUTACIONAL: FUNDAMENTOS HISTÓRICOS. Una contribución a su estructuración discursiva.

Eliana Martínez Rojas¹

Jesús Bernardo Saavedra Amórtegui²

“La ciencia exige un espíritu creyente.

Cualquiera que haya estado seriamente comprometido en trabajos científicos de cualquier tipo se da cuenta de que sobre la entrada a las puertas del templo de la ciencia están escritas las palabras: debes tener fe. Es una cualidad que los científicos no pueden prescindir.”

Planck, (1932).

INTRODUCCIÓN

En el prólogo de su texto de enseñanza “Química General” de la segunda edición en 1953, Linus Pauling sostenía que aproximar a los estudiantes a la química es muy difícil debido al incremento experimentado en su conocimiento durante los últimos cincuenta años. No solo le exige conocer sobre Química General, Análisis cualitativo y cuantitativo, Química física y Química Orgánica sino también temas de matemáticas, Física (incluyendo Física atómica), Química coloidal, Análisis instrumental, Bioquímica, Química estructural (estructura cristalina, molecular y demás), Mecánica estadística y otras. Y continúa con que los profesores universitarios y de enseñanza media de Química se enfrentan con la difícil situación creada por el progreso científico. Sentenciaba, con previsión profética, que se precisa adoptar decisiones encaminadas a resolver este problema (Pauling, 1961). Problema analizado antes por Louis De Broglie (1951) al destacar la oposición formal entre el estudio de los fenómenos en gran escala, en donde las concepciones clásicas de localización en el espacio y el tiempo, es decir el determinismo, son aceptadas plenamente, y a escala atómica y corpuscular subatómica, que a

¹ Estudiante de último grado optando por el título de Licenciatura en Química

² Estudiante de último grado optando por el título de Licenciatura en Química

partir del quantum de acción, sostiene que, aquellas demandan revisión, dado que las imágenes utilizadas en lo macroscópico para la descripción de fenómenos directamente perceptibles por los sentidos constituyen un aspecto estadístico de un inmenso número de procesos elementales, para los cuales, esas imágenes no son válidas. Para la comprensión del mundo microscópico se requiere esfuerzo intelectual que exige un vocabulario nuevo y extenso y de un simbolismo determinado (Hanna, 1981) que introducen cambios en la naturaleza del conocimiento científico y de sus límites. Sostiene que debido al nuevo lenguaje y al nuevo simbolismo, la mecánica cuántica, la espectroscopia y la estructura electrónica demanda un dominio de una amplia gama de conocimientos matemáticos.

Estos autores denuncian en sus preocupaciones, las condiciones iniciales que han de satisfacer los estudiantes que se enfrentan a estas temáticas que, por los cambios en la concepción epistemológica que demandan las propuestas para explicar el mundo sub atómico, se han de proponer alternativas que propicien esa aproximación de los estudiantes a ese campo y le hagan posible su comprensión. Uno de esos intentos lo constituye la incorporación de la “Química Computacional” al currículo de formación profesional en campos que se relacionan con química. Esta cobra mayor importancia si se trata de formación de profesores en esta ciencia.

En química, el computador se utiliza para determinar comportamientos, propiedades, probabilidades y demás datos necesarios para las modelaciones teóricas de moléculas. La importancia de su uso en química, radica en el trasfondo teórico que le proporciona, por ejemplo, a la química teórica, el análisis de datos que arrojan los programas computacionales diseñados para esta actividad científica. Es de resaltar lo innumerable de las interacciones que se generan con su utilización en el trabajo en química y el análisis que de ellas se hace posible mediante este mismo dispositivo.

Con el uso de los computadores, se ha apoyado el estudio de teorías y modelos químicos en cuanto a las interacciones entre átomos, moléculas y demás partículas. Para desarrollar representaciones y sus procesos internos derivados por métodos tradicionales, demandaría excesivo tiempo su resolución. El computador, facilita, agiliza y economiza todo lo que tiene que ver con cálculos en química teórica, así como en la química experimental, con el ahorro de costos y espacios en ensayos de esta categoría, o pruebas lógico matemáticas de los modelos diseñados. La química computacional, a la que se le ha llamado así por apoyarse en los procesos propios de este dispositivo tecnológico, más que una relación con los cálculos de resultados, constituye parte central de la demostración, de manera “tangible”, de las diferentes interacciones y relaciones derivadas de teorías y modelos con los que se

intentan explicar fenómenos de la naturaleza, en este caso, desde la perspectiva química.

Visto lo anterior, se pretende presentar un panorama histórico de esta disciplina para que, en su desarrollo, se tenga la información de su origen, estructura y alcances en el estudio de los modelos del mundo subatómico desde esta ciencia para una comprensión de los mismos.

Antecedentes

Una mirada sobre trabajos investigativos relacionados con la construcción histórica de química computacional, obliga una lectura desde distintas perspectivas: una, desde la mecánica cuántica como parte de la investigación y producción de conocimiento con el computador como articulador central de los procesos y tratamiento de la información en ese campo y, dos, desde la didáctica de las ciencias en las líneas de investigación que incorporan las tecnologías de la información y la comunicación, en el diseño y desarrollo de modelos, para la comprensión de principios teóricos de la química teórica, en los procesos de formación científica en esta ciencia, en el aula.

Sobre la primera, Mó y Yáñez (2011) sostienen que la química computacional está asociada a la estructuración y desarrollo de la química cuántica. Por su parte, Contreras y otros (2008) afirman que constituye un segmento de la química teórica que trabaja sobre las propiedades de las moléculas, sus interacciones y demás relaciones mediante el empleo de programas computacionales y, para comprenderlas, es necesario tener en cuenta que los modelos formulados sobre ellas se fundamentan en varias áreas del conocimiento científico, no solamente en química. Young (2001), afirma que cuando se usa el término de química computacional, es generalmente cuando un método matemático está lo suficientemente bien desarrollado (métodos cuánticos que no es posible realizar a lápiz y papel), y puede ser automatizado en un computador. Por otro lado, Clementi (2005) en unos de sus trabajos, afirma que la química computacional, es un campo muy vasto que se ocupa de sistemas atómicos y moleculares, con diferentes niveles de complejidad, y que se pueden tratar sistemas cuánticos discretos o como conjuntos estadísticos. Muñiz (cómo se citó en López, 2017) piensa que la química computacional mezcla la física, química, matemáticas y ciencias de la computación, y la idea de esta es explorar, con los métodos de estas ciencias, procesos que ocurren en un laboratorio, y que no se pueden comprender con los instrumentos que hay, por más sofisticados que sean. En el trabajo respecto a los métodos y usos de la química computacional, Valles, A., Rosales, L., Serrato, L. y Farías, L. (2014) argumentan que la química computacional es la evolución de la

química teórica, ya que aplica métodos de cálculo para resolver ecuaciones y calcular propiedades a nivel molecular, mediante el uso de un ordenador y un software.

Y, sobre la segunda, las investigaciones realizadas han sido desarrolladas sobre la base de aplicaciones de software en la enseñanza de la química, sobre los aportes que brindan las aplicaciones computacionales (software) en química para el tratamiento de conceptos como representaciones didácticas. Así, Sánchez (2014), discute el concepto de reacción química desde la química computacional y el realismo instrumental de I. Hacking (1996), con el propósito establecer las bases teóricas en la construcción de un modelo semántico predictivo, que permita establecer un marco explicativo que dé cuenta de una reacción de esterificación, modelada a partir del uso de programas computacionales a nivel de química y, Penagos (2009), plantea la posibilidad de diseñar y utilizar herramientas didácticas computacionales para dinamizar los procesos de enseñanza y promover el estudio de las ciencias en el momento de aplicar evaluaciones.

En esta misma perspectiva, Escobar (2011), somete a discusión una propuesta de tipo descriptivo, en la que incorpora el diseño y validación de un Material Educativo Computacional (MEC) derivado de la Síntesis del Material Mesoporoso SBA-15, bajo el modelo de enseñanza y aprendizaje por investigación, como herramienta didáctica en el aprendizaje de los fenómenos de adsorción por parte de profesores de química en formación inicial y, Palomares (2009), propone el diseño de una estrategia didáctica que maneja, como herramienta central, un material educativo computacional (software), diseñado y desarrollado en el marco de la resolución de problemas, dirigido al avance y potencialización de las competencias para interpretar situaciones, establecer condiciones y formular hipótesis y regularidades, para el grado undécimo de educación media sobre proteínas y enfermedades, en un contexto clínico.

Dentro de la revisión de literatura, acerca de las simulaciones en computador y las herramientas de modelación en educación en química, que realizan de Ribeiro y Greca (2003), abordan las ventajas del uso de simulaciones conceptuales para la Educación Química, y dejan ver que por tratarse de una ciencia que se fundamenta en realidades invisibles, ya que trabaja básicamente con el comportamiento de las partículas, el uso de los recursos tecnológicos, en este caso el computador y los programas computacionales, puede ser de gran importancia para el desarrollo de modelos conceptuales y, de alguna forma, ayudar en el desarrollo de la competencia representativa.

Las tesis realizadas por estudiantes del Departamento de Química, de la Universidad Pedagógica Nacional, que hacen referencia a software y

tecnologías de la información en la educación, disertan sobre la elaboración e implementación de software, como instrumento de evaluación, como herramienta didáctica dentro de la construcción de conceptos, o como ayuda tecnológica dentro del proceso de enseñanza aprendizaje, sin embargo, los programas son aplicaciones que arrojan datos acorde a los conceptos requeridos, Sanabria y Moreno (2005), centran su trabajo en un software educativo, y lo utilizan como estrategia para el aprendizaje significativo de los conceptos ácido y base, Arévalo (1988), diseñó, desarrolló y aplicó un software en el grado décimo, con el fin de apoyarse en una ayuda tecnológica, en la enseñanza de una unidad didáctica sobre el tema de enlace químico, Beltrán (1989), diseña un software que le permite a los estudiantes de décimo grado, practicar el balance de reacciones químicas a partir del método de oxido reducción, estos software diseñados y aplicados en estos trabajos, no se fundamentan en modelos de la química teórica, aunque dan cuenta de la inclusión de las nuevas tecnologías en la enseñanza de las ciencias, como lo manifiesta Angarita y Arias (2008), en su trabajo de grado, la educación es uno de los ámbitos influenciados por el nuevo paradigma tecnológico, y se hace necesario un contexto educativo que enfrente los cambios de la sociedad respecto al conocimiento y su entorno. Cabe resaltar que estos trabajos se fundamentan en el uso de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC), más que en el fundamento de la química computacional, las TIC, como lo exponen Castro, Guzmán y Casado (2007), según los autores más relevantes en este ámbito, son las herramientas, los medios o el ambiente que se presta para desarrollar el acto educativo, con el cual se puede hacer un tratamiento de la información, lo cual sustentan las diferentes tesis arriba mencionadas; por lo que en este documento, se hace énfasis en que los recursos tecnológicos, utilizados en química computacional, tienen una fundamentación teórica e histórica, que da la importancia dentro de esa didáctica en los procesos de enseñanza y aprendizaje

Acerca de lo histórico

La historia de las ciencias trata sobre la interacción de los postulados científicos, su entorno y su desarrollo en el transcurso del tiempo, como parte del conocimiento de las mismas; es necesario tener en cuenta el enfoque con el cual se abordan. Algunos filósofos de las ciencias (Popper, 1962; Lakatos, 1983; Kuhn, 1972), expresan sus perspectivas respecto a cómo se pueden abordar las ciencias y cuál es la filosofía de las mismas. K. Popper (1962), se fundamenta en lo deductivo, en el que la probabilidad de cualquier ley debe ser igual a cero, desde que no se demuestre lo contrario, como lo expone Redman (1995). Por otro lado, I. Lakatos (1983), plantea los programas de investigación científica, que son estructuras constituidas por teorías

relacionadas entre sí, siendo unas origen de otras; teorías que conforman un núcleo firme de los programas de investigación científica fundamento de la ciencia en estudio.

Por su parte, T. S. Kuhn (1972), establece que dentro del progreso científico existe un carácter revolucionario, ya que supone el abandono de una estructura teórica y la adopción de otra, lo cual se establece como un cambio de paradigma, el cual está definido por los supuestos teóricos generales, las leyes y las técnicas para su aplicación, aceptadas por los miembros de una determinada comunidad científica.

Sin embargo, la fundamentación que dan cuenta estas tres teorías no soportan el carácter epistemológico de la química computacional, en cuanto la visión de Popper, lo deductivo no sustenta la aplicación de la química teórica, ya que dentro del análisis y los resultados de la química computacional, las probabilidades son parte de las respuestas, y dentro de la probabilidad el porcentaje asumido como improbable, hace parte del componente teórico de la misma, por otro lado, el planteamiento de Lakatos, no aplica en la historia de la química computacional, por cuanto no son programas de investigación los que han permitido el desarrollo de dicho campo de la ciencia, es la unión de diversas variables que han permitido el desarrollo de esta disciplina. Por otro lado, el planteamiento paradigmático de Kuhn, no es acogido en este trabajo, ya que si hablamos de paradigma, estamos partiendo de unas teorías iniciales que no dan respuesta y que para eso parte de uno nuevo, pero en esta disciplina, lo que se aborda, son teorías pero de una manera más compleja, teorías que con los recursos tecnológicos suficientes, se pueden desarrollar y se puede llegar a supuestos más probables.

En el trabajo de Gallego (2004), conceptualiza modelo didáctico, lo cual es un discurso didáctico, en el que se enlazan estructuras conceptuales y metodológicas relacionadas de manera inferencial, es decir, ese conocimiento se deduce a partir de las abstracciones de los campos o modelos relacionados en este. Ahora, el discurso puede o no ser admitido, mientras que los campos que se opten, generen variaciones admisibles en el discurso. El discurso planteado por la química computacional, teniendo en cuenta una visión de modelo, sustenta las interacciones moleculares e intramoleculares, posibilita la abstracción de respuestas y conceptos, y demuestra un planteamiento diferente de los datos y un análisis inferencial, como lo expresan las probabilidades a partir de las ecuaciones y modelos teóricos aplicados en la misma.

Sobre la química computacional

Cuevas (2005), sostiene que la química computacional brinda las técnicas operacionales, que para este caso las constituye el software computacional, para resolver modelos teóricos y probar su validez, mediante la comparación simultánea con los datos experimentales. Hopfinger (1985), argumenta sobre la química computacional como la modelación cuantitativa de los comportamientos químicos a partir del uso del computador fundamentado en la química teórica. Shreiner (1998), la enmarca como el modelado de los aspectos de la química con el empleo de cálculos en lugar de experimentos. Pople (1998), en su lectura cuando recibió el nobel, manifestó que la química computacional hace parte de la aplicación de los computadores y de conceptos básicos de mecánica cuántica para comprender el comportamiento de los sistemas moleculares complejos. Foresman y Frisch, (1995) afirman que la finalidad de la química computacional es la simulación a partir de los cálculos numéricos, estructuras químicas y reacciones, fundamentados total o parcialmente en las leyes de la física.

La química computacional se asume como una nueva área de conocimiento (Cuevas, 2005), y para su desarrollo es necesario dos disposiciones: que los individuos estén preparados para este campo y que genere conocimiento. Esto último se hace patente en los diferentes medios de divulgación como revistas impresas y electrónicas. Y esta preparación de la cual se habla, tiene que ver con la aplicación de algoritmos computarizados de la teoría cuántica, conocimientos de mecánica molecular, computación gráfica, modelado molecular y diseño molecular asistido por computador entre otros (Lipkowitz y Boyd, 1990). La química computacional, por otro lado, permite el estudio de propiedades y reacciones de átomos y moléculas, observaciones estas que no son posibles de realizar, a simple vista, en el laboratorio, además, las condiciones necesarias para desarrollar estos experimentos son extremas y los costos para tan solo una investigación, son bastante altos (Valles-Sánchez, 2014).

Esta disciplina, ha permitido la aplicación y desarrollo de diferentes modelos teóricos que dan explicación a algunos comportamientos y fenómenos de la química, gracias a esta estructura conceptual, que al pasar del tiempo se ha ido desarrollando, este trabajo realiza una revisión histórica, que ayude a una investigación que más adelante, permita una reconstrucción histórica de esta disciplina. Esta revisión, tiene dos componentes, con el fin de que se considere los más relevantes en química computacional, uno referido a lo teórico y el otro a lo tecnológico.

El componente teórico lo constituyen los contenidos formulados en su desarrollo y proyección: la mecánica molecular, la química cuántica, la química

teórica y los saberes computacionales y habilidad para programar en lenguaje de computación.

Por otro lado, la química computacional en la educación, introduce otra concepción de enseñanza y aprendizaje dado que pone a disposición del sistema aula dispositivos para dar forma a la química que se imagina, los fenómenos que no se pueden observar directamente, relativos a la química intramolecular, se posibilita una aproximación a la comprensión de temas en los cuales las interacciones, propiedades y experiencias, son difíciles de demostrar y de comprender.

El tratamiento teórico en química computacional se fundamenta en modelos matemáticos y estadística con fundamentos físicos y químicos, desde los que se intenta dar cuenta del comportamiento de átomos, moléculas, partículas en general y de la energía que intervienen en las interacciones entre ellas.

Cada una de las teorías que hasta la actualidad se han propuesto, han sido elaboradas como respuesta a los diferentes fenómenos que en el transcurso de la historia de las ciencias, no ha sido posible con el paradigma adoptado en su momento (Kuhn, 1972) y los científicos no se han conformado con una explicación, sino que han incursionado en otras miradas para formular modelos que satisfagan una convocatoria de comprensión operacional mientras reelaboran, transforman, ajustan o cambian esos modelos y que no dan cuenta de preguntas pendientes con el paradigma vigente en su momento. Una parte fundamental en esta disciplina es el tratamiento matemático de la información, en la química, el que dio inicio a este tratamiento fue Proust (1794), quién de manera experimental y sin darse crédito, argumenta lo que más adelante Dalton (1808), daría el nombre a la Ley de las proporciones definidas. Aunque en esta época no se tenía la certeza de la composición de la materia, el mismo Dalton expone que “todos los cuerpos de magnitud perceptible, sean líquidos o sólidos, están constituidos de un número inmenso de partículas extremadamente pequeñas” (a lo que se llamaría átomos), “mantenidas juntas por una fuerza de atracción que es más o menos poderosa, de acuerdo con las circunstancias” que es en la actualidad el enlace. Apoyando aún más el tratamiento matemático de la química, Maxwell (1873), abre el camino a la estadística y la probabilidad, por cuanto sustenta que “la ciencia molecular, es una de esas ramas de estudio que tratan con cosas invisibles e imperceptibles por nuestro sentido, y que no pueden ser sometidas a experimentos directos”, lo que prueba a partir de los cálculos realizados para explicar fenómenos eléctricos y magnéticos en los cuerpos en ciertos estados.

En la química computacional, la mecánica molecular, acude a las leyes de la física clásica para explicar las interacciones de los núcleos de los átomos que intervienen en la molécula, sin tener en cuenta los electrones. Por otro lado, la

mecánica cuántica da respuesta primeramente, a lo que en su momento denominaban como átomo, Dalton propone una partícula indivisible que componen la materia, Thomson (1904), a partir de los experimentos de cargas eléctricas, propone el modelo del pudin de pasas en el que las cargas negativas están incrustadas en una masa positiva siendo su carga total neutra, más tarde, Rutherford (1914), gracias a las partículas alfa dirigidas sobre la lámina de oro y su comportamiento, argumenta que los átomos tienen un espacio y que los electrones o cargas negativas se encuentran alrededor del núcleo, el cual se consideraba de carga positiva, denominando a esta modelo atómico planetario, Bohr (1913), plantea un modelo más elaborado, como introducción a la cuántica, en el que los electrones se encuentran en diferentes niveles energéticos u orbitales, luego Schrödinger (1926) y otros científicos, aportan, desde la lectura cuántica, determinan la probabilidad de que los electrones se encuentran en determinadas regiones, su comportamiento magnético y su dirección.

Se acepta entonces que el inicio de la mecánica cuántica, se debe a Max Planck (1914), quien formuló la ecuación de la energía para la longitud de onda de la radiación emitida por un cuerpo negro caliente, en donde la interacción de la radiación con la materia ocurre paquetes de energía a los que se denominó “cuantum”. A partir de una constante determinada por Planck, Niels Bohr (1913) propuso el modelo de orbitales estables del hidrógeno y Einstein (1911) postuló el comportamiento dual de los fotones. El espín, presentado por George Uhlenbeck y Samuel Goudsmit (1925), y el principio de exclusión (Pauli, 1925), fundamentaron un modelo de determinación de la estructura química, Werner Heisenberg (1925) vinculó la mecánica de matrices al proceso y finalmente Erwin Schrödinger (1926) sienta las bases de la mecánica cuántica con la ecuación, conocida con su nombre, de una explicación de la probabilidad de encontrar un electrón en una región determinada.

Son muchas más las teorías con las que se intenta dar cuenta de las interacciones entre estas partículas, sobre los enlaces, del comportamiento de los electrones demás partículas subatómicas. La química computacional se destaca por sus aportes en estos fundamentos teóricos matemáticos, físicos y químicos.

La química computacional y la tecnología

Sobre lo tecnológico, en la química computacional, es fundamental y vertebral, los avances en computación, facilitan, agilizan y modelan, diferentes situaciones en las que, con lo experimental en química, faltan argumentos para formular una explicación “con la que se pueda demostrar” acerca del fenómeno

que se aborda a ese nivel subatómico, por ejemplo, la interacción de átomos, moléculas y demás partículas que conforman los materiales de la naturaleza. Con la introducción de tratamientos computacionales, se logran contrastar modelos teóricos, que sustentan teorías tales que, desde su perspectiva, se infieren explicaciones aceptables. Allinger (1946), fue el primero en desarrollar un código informático basado en modelos de mecánica molecular, para optimizar la estructura de las moléculas por medio de los ordenadores de la época, cuyos resultados solo eran numéricos. Roothaan (1951), realizó cálculos que, con la ayuda de tablas de integrales, que se calculaban con los ordenadores más avanzados de la época, lo que fue el fundamento en cuanto a los avances informáticos hacia la resolución y representación de las complicadas ecuaciones de onda. Parr, Pariser y Pople, como lo expone Duncan y Pople (1952), desarrollaron un método más eficiente para encontrar aproximaciones razonables de los orbitales moleculares, útil para predecir la naturaleza física y química de la molécula en estudio, ya que las características orbitales moleculares tienen implicaciones con respecto tanto a la estructura básica como a la reactividad de la misma. Cascales y Mayor (2013), en el escrito sobre los premio nobel en 2013, exponen que Walter Kohn, en el año de 1968, demuestra que no es necesario considerar el movimiento de cada electrón, y que es suficiente con conocer el porcentaje de electrones localizados en un punto del espacio, lo que permite realizar cálculos de manera más simple con éste método, el cual se denominó la teoría de la función de la densidad. No obstante, la realización de este sin número de cálculos y aportes matemáticos a la química, necesitan la ayuda tecnológica para el desarrollo de ecuaciones cada vez más complejas, y a su vez la producción de información en cuanto a las propiedades y demás aspectos necesarios en el tratamiento de las moléculas y sus interacciones. Jhon Pople, crea el primer programa de cálculo de datos llamado Gaussian-70, por otro lado, los nobel en química, Karplus, Levitt y Warshel, (Cascales y Mayor, 2013), desarrollaron a partir de Planck, Bohr, Broglie, Heisenberg, Schrödinger y Dirac, modelos multiescala complejos, que permiten un tratamiento de datos mas confiable a partir de los parámetros establecidos.

La química computacional y la didáctica

Los computadores se han constituido en una herramienta indispensable para el estudio de los fenómenos químicos y de su proyección en la industria, con el desarrollo de modelos matemáticos que a lápiz y papel no sería posible por lo complejo de su naturaleza. Además, el computador, permite que experimentos de laboratorio con condiciones extremas impracticables, sean posibles de abordar con simulaciones y cálculos de probabilidad de sus resultados, con ahorro de tiempo y costos y, no solo en lo práctico, sino fundamentalmente en

lo teórico. Científicos y especialistas de diferentes áreas la utilizan para predecir las propiedades moleculares de sistemas químicos, con el empleo de variedad de técnicas en constante desarrollo (Valles-Sánchez, 2014).

Cabe anotar, que los computadores, no reemplazan, en este caso a los científicos, sino que proveen de herramientas a los usuarios interesados en la química, para profundizar, desde otro punto de vista y con otros argumentos, en aproximaciones y desarrollo de modelos químicos que desde una perspectiva teórica de la mecánica molecular o de la química cuántica, se hace aceptable para la comunidad científica.

En este componente tecnológico, se considera lo relacionado con la utilización de computadores en educación. Como lo sostiene Reggini, (1988), los computadores no son por sí solos educativos. Su beneficio depende de la manera en que se les presenta al estudiante. El beneficio que en química computacional tiene el computador, es la capacidad para modelar virtualmente, sin dejar de lado la capacidad imaginativa y creativa del ser humano, las interacciones atómicas o moleculares, y qué determina las propiedades de los átomos y de los elementos, construcciones que no se podrían llevar a cabo con solo datos de laboratorio o en el trabajo de formación científica de las nuevas generaciones en el aula.

La química teórica es parte primordial de la estructura de la química computacional, los cálculos que demandan tratamientos más complejos, se realizan por medio de los computadores, y los programas permiten manipular, las variables y factores dentro de las diferentes interacciones moleculares (Cjunto, J. y Arroyo, J., 2003). El uso de los computadores en la educación, permiten que los estudiantes se acerquen de otra forma a las ciencias, utilizando las nuevas tecnologías de la información. Es necesario hacer un trabajo elaborado, bajo determinados parámetros, para poder potenciar el uso de esas nuevas tecnologías en la enseñanza y aprendizaje de las ciencias, no simplemente el uso por la respuesta que pueda generar. En este caso, para la química computacional, no es simplemente los resultados que arrojen un programa, sino el trasfondo que conlleva a esos resultados, cuál es la teoría que sustenta el hecho que de uno u otro resultado, en la simulación o modelaje, por qué puede o no dar una molécula, cuáles pueden ser las causas de su interacción, etc. (Clementi, E., 2005).

Esta disciplina, en la cual los científicos han avanzado a pasos agigantados y que hace parte fundamental de la química, hace necesario que se incorpore, de manera transversal, en los currículos en la enseñanza de las ciencias, por cuanto un químico que no domine los aspectos computacionales de la Química no responderá al perfil de un químico del siglo XXI (Cjuno y Arroyo, 2003). Y esa transversalidad, de la cual se habla, lo genera la estructura histórica que

hay detrás de la funcionalidad de la química computacional, pues como se expuso en el presente documento, las raíces de la química computacional y su estructura, se fundamenta en los cálculos matemáticos, estadísticos y probabilísticos, que son realizados al operar las diferentes ecuaciones que los modelos moleculares, mecánico moleculares, modelos atómicos, modelos estructurales, modelos cuánticos y demás modelos utilizados generen, como explicación a propiedades e interacciones que suceden a nivel atómico y molecular. Por tanto, el computador dentro de la química, no es una herramienta que nos brinde la facilidad de los cálculos; es un artefacto que junto con las teorías de la química, permiten el entendimiento de un mundo al margen de la imaginación, que lo hace tangible al realizar modelaciones o simulaciones y que posibilita la predicción de sus propiedades e interacciones a la hora de hacer el análisis de las mismas.

Se espera que esta revisión histórica en cuanto a la química computacional, contribuya a una construcción histórica dentro del discurso teórico que fundamente dicha disciplina.

Bibliografía

- Bohr, N. (1913). On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine, Series 6*, 26, 1 – 25.
- Castro, S., Guzmán, B. y Casado, D. (2007). Las TIC en los procesos de enseñanza y aprendizaje. *Laurus, Revista de Educación*. 13(23). 213 – 234.
- Cjunto, J. y Arroyo, J. (2003). La química teórica y la química cuántica computacional. *Boletín CSI*, 48, 16 – 19. Recuperado de <http://sisbib.unmsm.edu.pe/BibVirtual/Publicaciones/consejo/rconsejo.htm>
- Clementi, E. (2005). Computational chemistry: attempting to simulate large molecular systems. *Theory and applications of computational chemistry: The first forty years*, 6. 111 – 114.
- Contreras, C., Chávez, M., Fuentes, M., Olivas, R., Rodríguez, L. y Valdez, A. (2008). De la alquimia computacional a la química computacional. *Synthesis*, 45, 1-7. Recuperado de http://www.uach.mx/extension_y_difusion/synthesis/

- Cuevas, G. (2005). Química computacional. *Revista Ciencia*, 56, 2, 33 – 42. Recuperado de <http://revistaciencia.amc.edu.mx/index.php/ediciones-antteriores?id=61>
- De Broglie, L. (1951). Física y Microfísica. Buenos Aires, Espasa Calpe Argentina.
- Duncan A. y Pople, J. (1952). The structure of some simple molecules with lone pair electrons. *Transactions of the Faraday Society*, 49.
- Einstein, A. (1911). Contribution to the 1911 Solvay Conference, *The collected papers of A. Einstein*, 3(26).
- Escobar, J. (2011). *Diseño de un material educativo computacional (MEC) para la enseñanza de los fenómenos de adsorción mediante la síntesis y caracterización del material mesoporoso SBA-15* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
- Foresman, J. y Frisch, A. (1995). *Exploring chemistry with electronic structure methods*. Pittsburgh, United States: Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA
- Gallego, R. (2004). Un concepto epistemológico de modelo para la didáctica de las ciencias experimentales. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, 3(3), 301 – 309. Recuperado de <http://reec.uvigo.es>
- Hacking, I. (1996). *Representar e intervenir*. Ciudad Universitaria, México: Editorial Paidós Mexicana, S.A.
- Hanna, M. (1981). Mecánica cuántica para Químicos, México, Fondo Educativo Interamericano.
- Heisenberg, W. (1925). Über quantentheoretische umdeutung kinematischer und mechanischer beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, 33, 879-893. English translation in: B. L. van der Waerden, editor, *Sources of Quantum Mechanics* (Dover Publications, 1968) (English title: "Quantum-Theoretical Re-interpretation of Kinematic and Mechanical Relations").
- Hopfinger, A. (1985). Computer-assisted drug design. *Journal of medical chemistry*. 28(9). 1133-9
- Kuhn, T. (1972). *The structure of scientific*. United States of America: University of Chicago Press.

- Lakatos, I. (1983). *La metodología de los programas de investigación científica*. Madrid, España: Editorial Alianza.
- Lipkowitz, K, y Boyd, D, (1990). *Reviews in computational chemistry*. New York, United State: Wiley-vch.
- Mó, O y Yáñez, M. (2011). La química computacional en la nueva frontera. *ARBOR Ciencia, pensamiento y cultura*, 187. 143 – 155.
- Palomares, A. (2009). *Desarrollo de competencias científicas, mediante el diseño e implementación de material educativo computacional (MEC) de corte heurístico, enmarcado en una estrategia de aprendizaje por resolución de problemas* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.
- Pauli, W. (1925). On the conexión between the completion of electron groups in an atom with the complex structure of spectra. *Z. Physik*, 31. 765
- Pauling, L. (1961). *Química General*. Sexta Edición. Madrid, Aguilar.
- Penagos, O. (2009). *Diseño y evaluación de un juego educativo computacional con aplicaciones múltiples para evaluar el aprendizaje de relaciones estequiométricas* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia. Recuperado de <http://www.fce.unal.edu.co/cuadernos>
- Planck, M, (1914). *Vorlesungen über die Theorie der Wärmestrahlung*. Leipzig, German: J. A. Barth.
- Planck, M. (1932). *Where is science going?*. New York, United States: Norton & Company, Inc. Publishers.
- Popper, K. (1962). *La lógica de la investigación científica*. Madrid, España: Tecnos Editorial S.A.
- Pople, J. (1998). *Quantum chemical models. Nobel lectura*.
- Redman, D. (1995). La teoría de la ciencia de Karl Popper: Auge y caída de la ingeniería social. *Revista Cuadernos de Economía*. 14(23), 118 – 149.
- Reggini, H. (1988). *Computadoras: ¿Creatividad o automatismo?*. Buenos Aires, Argentina: Ediciones Galápagos.
- Ribeiro, A. y Greca, I. (2003). *Simulações computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma revisão de literatura publicada*.

Química Nova, 26 (4), 542-549. Recuperado de <http://quimicanova.sbq.org.br>

Rutherford, E. (1914). The structure of the atom. *Philosophical Magazine, Series 6*, 27, 488-498.

Sanabria, M. y Moreno, G (2005). *Una estrategia para el aprendizaje significativo de los conceptos ácidos base centrada en un software didáctico* (tesis de pregrado). Universidad Pedagógica Nacional, Bogotá, Colombia.

Schrödinger, E. (1926). An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *The physical review*, 28(6), 1049-1070.

Thomson, J. (1904). On the structure of the atom. *Philosophical Magazine, Series 6*, 7(39), 237 – 265.

Uhlenbeck, G. y Goudsmit, S. (1925). *Naturwissenschaften*, 13. 953.

Valles-Sánchez, A., Rosales-Marines, L. Serrato-Villegar, L. y Farías-Cepeda, L. (2014). Métodos y usos de la química computacional. *Revista científica de la Universidad Autónoma de Coahuila*, 6(11). 16 – 21. Recuperado de <http://www.posgradoeinvestigacion.uadec.mx/>

Young, D. (2001). *Computational chemistry. A practical guide for applying techniques to real-world problems*. New York, United States: John Wiley & Sons, Inc.